

VERIFICAÇÃO DA FORMA DE APLICAR CONDIÇÕES DE CONTORNO EM PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS COM O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Fabiana de Fátima Giacomini

fabiana@demec.ufpr.br

Universidade Federal do Paraná (UFPR)

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PG-Mec)

Curitiba, PR, Brasil

Carlos Henrique Marchi

marchi@ufpr.br

Universidade Federal do Paraná (UFPR)

Departamento de Engenharia Mecânica (DEMEC)

Curitiba, PR, Brasil

Resumo. *O objetivo deste trabalho é verificar o efeito sobre o erro de discretização e sua ordem causado pela forma de aplicar as condições de contorno, em problemas resolvidos com o método de volumes finitos. Para tanto, são considerados: equações de Poisson, advecção-difusão e Burgers; domínio unidimensional; malhas uniformes; sete variáveis de interesse com aproximações numéricas de primeira e segunda ordens de acurácia; condições de contorno de Dirichlet; solver tridiagonal; malhas com até milhões de nós; precisão quádrupla; e número de iterações suficiente para atingir o erro de arredondamento de máquina. As formas de aplicar as condições de contorno consideradas são quatro: com e sem volume fictício; meio volume; e volume de espessura zero. A principal conclusão é que a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume resulta, em geral, no menor erro numérico.*

Palavras-chave: *erro de discretização, ordem do erro, Poisson, advecção-difusão, Burgers.*

1 INTRODUÇÃO

Um método numérico aplicado a um modelo matemático fornece uma solução numérica. Essa solução numérica contém um certo nível de erro que é causado pelo emprego das aproximações numéricas ao representar o modelo matemático. Para Oberkampf e Trucano (2002), a estimativa quantitativa do erro numérico é um dever dos analistas de CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Para Marchi e Alves (2008), as duas principais metas em CFD são obter soluções numéricas acuradas e confiáveis.

Como os processos de verificação e validação (AIAA, 1998; Roache, 2004) são os principais meios para avaliar a acurácia e a confiabilidade em simulações computacionais (Marchi e Silva, 1999), foi realizado um estudo entre o processo de verificação e a forma de aplicação das condições de contorno.

O método numérico dos volumes finitos disponibiliza quatro formas pelas quais se aplicam as condições de contorno nas fronteiras dos problemas de engenharia (Patankar, 1980; Maliska, 1995): sem volume fictício; com volume fictício; com meio-volume; e com volume de espessura zero. Segundo Maliska (1995) um procedimento para aplicação das condições de contorno inconveniente, acarreta obstáculos que influenciam na veracidade da solução do problema.

Segundo Marchi (2001) somente a apresentação de resultados em gráficos visando comparar o desempenho entre modelos numéricos diferentes é insuficiente para concluir uma pesquisa, levando à divergência de opiniões e deduções equivocadas dos parâmetros empregados. Por isso, muitas revistas e sociedades profissionais têm implementado políticas projetadas para forçar padrões e contribuir para o estado-da-arte em verificação de soluções numéricas em CFD (AIAA, 2009; ASME/JFE, 2009).

A verificação das soluções numéricas é o processo que quantifica o erro numérico e seu objetivo é determinar em que medida um modelo matemático é resolvido adequadamente por meio de um método numérico. Segundo Marchi (2001) a verificação é necessária, pois a simples obtenção de uma solução numérica é incapaz de garantir sua confiabilidade em função dos erros provenientes da utilização dos métodos numéricos.

As fontes de erros numéricos provenientes dos métodos numéricos são (Marchi e Silva, 2002): erro de truncamento; erro de iteração; erro de arredondamento e erro de programação. Quando a única fonte de erro da solução numérica é o erro de truncamento, o erro passa a denominar-se erro de discretização.

As estimativas dos erros são realizadas: *a priori* estimando a ordem do erro de discretização e *a posteriori* estimando a magnitude do erro de discretização (E). *A priori* são obtidas as ordens assintótica (pL) e verdadeiras (pV) do erro e *a posteriori*, são obtidas a ordem efetiva (pE) e a ordem aparente (pU), calculada por meio de estimadores de erros.

O objetivo deste trabalho é verificar o efeito da forma de aplicar condições de contorno, empregando o método dos volumes finitos (Ferziger e Peric, 2002) em problemas unidimensionais que representam fenômenos de caráter difusivo e advectivo com equações lineares e não-lineares.

Neste trabalho foram empregados, além do método dos volumes finitos e das quatro formas de aplicar as condições de contorno, o tipo de condição de contorno de Dirichlet; o refino uniforme (RU) para gerar a malha computacional; as funções de interpolação CDS-2 (*Central Differencing Scheme*) de 2ª ordem para os termos difusivos e advectivos, DDS (*Downstream Differencing Scheme*) e DDS-2 de 1ª e 2ª ordens respectivamente, para a derivada de 1ª ordem da variável de interesse em $x = 0$; integração pelas regras do retângulo e do trapézio para obter a variável média; o *solver* TDMA (*Thomas Algorithm ou Tridiagonal Matrix Algorithm*) para resolver o sistema de equações algébricas.

Este estudo justifica-se pelo fato de que ainda não houve publicação sobre o assunto. Em geral, os trabalhos são realizados com uma única forma de aplicar condição de contorno e a verificação do processo de obtenção da solução numérica não é realizada.

2 MODELOS MATEMÁTICOS

Este trabalho considera três modelos matemáticos definidos pelas equações de Poisson, advecção-difusão e Burgers, denotados por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2\phi}{dx^2} + S = 0 \\ S = -\frac{(Pe^2 e^{xPe})}{(e^{Pe} - 1)} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(Equação de Poisson)} \\ \end{array} \quad (1)$$

onde ϕ representa a variável dependente, S o termo fonte, x a posição do centro do volume de controle e Pe uma constante.

$$Pe \frac{d\phi}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2} \quad \begin{array}{l} \text{(Equação de advecção-difusão)} \\ \end{array} \quad (2)$$

onde Pe representa o número de Peclet.

$$\left\{ \begin{array}{l} Re \frac{d\phi^2}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2} + S \\ S = Re^2 e^{xRe} \frac{(2e^{xRe} - e^{Re} - 1)}{(e^{Re} - 1)^2} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(Equação de Burgers)} \\ \end{array} \quad (3)$$

onde Re representa o número de Reynolds.

As condições de contorno são do tipo Dirichlet, denotadas por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi(x=0) = 0 \\ \phi(x=1) = 1 \end{array} \right. \quad (4)$$

As variáveis de interesse são:

- 1) Variável dependente ϕ em $x = 1/2$.
- 2) Média de ϕ , definida por

$$\bar{\phi}(x) = \int_0^1 \phi(x) dx \quad (5)$$

- 3) Média da norma l_1 do erro de discretização de ϕ .

4) Derivada de 1ª ordem de ϕ em $x=0$, definida por

$$\phi'(x) = \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=0} \quad (6)$$

A escolha dessas variáveis justifica-se pelos seguintes motivos:

- A variável obtida em $x=1/2$ é a variável principal do problema e fornece a solução no centro do domínio de cálculo.
- A média da variável ϕ fornece um valor médio calculado no domínio; em escoamentos, pode ser usada para calcular fluxos de massa.
- A média da norma fornece o valor do erro médio obtido no cálculo da variável principal.
- A derivada de 1ª ordem mostra o comportamento do fluxo de temperatura ou velocidade obtida na entrada do domínio de cálculo.

A solução analítica da variável dependente para as Eqs (1) a (3) é:

$$\phi = \frac{(e^{xPe} - 1)}{(e^{Pe} - 1)} \quad (7)$$

Para a equação de Burgers deve-se substituir o número de Peclet pelo número de Reynolds na Eq. (7).

3 MODELOS NUMÉRICOS

Para resolver numericamente as Eqs. (1), (2) e (3) foi empregado o método dos volumes finitos. A discretização foi realizada em malhas uniformes. A função de interpolação utilizada para as três equações foi o esquema de diferença central de 2ª ordem de acurácia (CDS-2), tanto para os termos difusivos quanto advectivos. Foram empregadas quatro formas de aplicar as condições de contorno: sem volume fictício, com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero.

O sistema de equações algébricas resolvido com o *solver* TDMA é:

$$a_p \phi_P = a_w \phi_W + a_e \phi_E + b_p \quad (8)$$

onde o primeiro membro refere-se ao coeficiente da propriedade no volume de controle principal, os dois primeiros termos do segundo membro referem-se aos coeficientes vizinhos da propriedade nos volumes anterior (W) e posterior (E) ao volume principal (P), e o último termo refere-se ao termo fonte.

Um esquema da malha relacionado à forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício é mostrado na Fig. 1(a). Nesta figura, Δx representa o tamanho dos volumes de controle e a distância entre nós consecutivos, $\Delta x/2$ é a metade do tamanho do volume, P é o volume de controle principal e E é o volume a leste do volume P . Um esquema da malha relacionado à forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício está na Fig. 1(b); com meio-volume, na Fig. 1(c), onde o centro do meio-volume coincide com o contorno e $\phi_c = \phi(0)$; e com volume de espessura zero, na Fig. 1(d), onde é mostrado um volume P de espessura zero sobre o contorno.

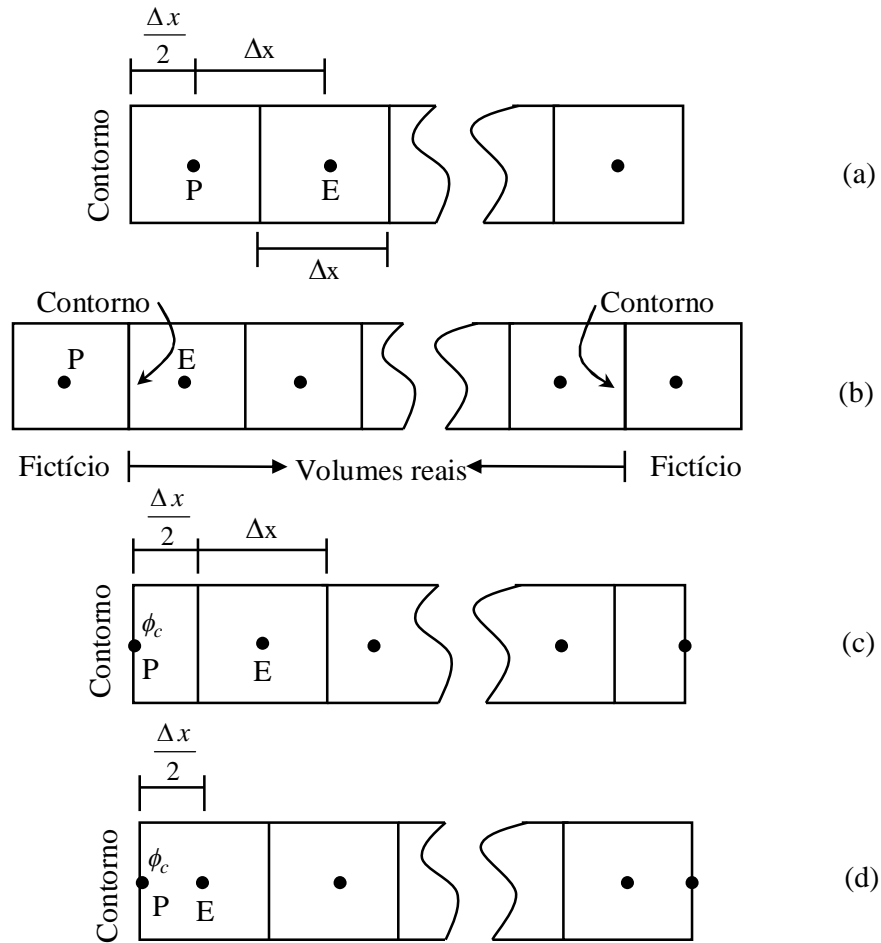


Figura 1 - Malhas relacionadas às formas de aplicar condições de contorno (adaptado de Maliska, 1995)

As soluções numéricas das variáveis de interesse, com as condições de contorno aplicadas sem volumes fictícios, são obtidas através de:

- Variável dependente ϕ obtida em $x = l/2$, utilizando número ímpar de volumes: o valor para ϕ é obtido diretamente no valor nodal, ou seja, no centro do volume.
- Variável dependente ϕ obtida em $x = l/2$, utilizando número par de volumes: o valor para ϕ é obtido pela média aritmética de dois volumes vizinhos.
- Média de ϕ obtida pela regra do retângulo (Kreyszig, 1999) ($0 \leq x \leq l$):

$$\bar{\phi} = \Delta x \sum_{P=1}^N \phi_P \quad (9)$$

- Média de ϕ obtida pela regra do trapézio (Kreyszig, 1999) ($0 \leq x \leq l$):

$$\bar{\phi} = \left\{ \frac{(\phi_{(0)} + \phi_{(l)}) \Delta x}{2} + \Delta x \sum_{P=2}^N \left[\frac{(\phi_{P-1} + \phi_P)}{2} \right] + \frac{(\phi_N + \phi_{(l)}) \Delta x}{2} \right\} \quad (10)$$

onde $\phi_{(0)}$ e $\phi_{(1)}$ são condições prescritas no contorno, ϕ_1 e ϕ_N são o primeiro e o último nós e ϕ_{P-1} e ϕ_P são as soluções numéricas nos volumes oeste e principal.

- Média da norma ($L1$) do erro de discretização da variável ϕ :

$$\bar{l}_1(E) = \frac{1}{N} \sum_{P=1}^N |\Phi_P - \phi_P| \quad (11)$$

onde E representa o erro de discretização, Φ_P e ϕ_P representam respectivamente as soluções analítica e numérica no nó P .

- Derivada de 1ª ordem de ϕ em $x = 0$ obtida com diferença à frente de 1ª ordem (DDS):

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{2(\phi_1 - \phi_{(0)})}{\Delta x} \quad (12)$$

- Derivada de 1ª ordem de ϕ em $x = 0$ obtida com diferença à frente de 2ª ordem (DDS-2):

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{9\phi_1 - \phi_2 - 8\phi_{(0)}}{3\Delta x} \quad (13)$$

A variável dependente foi obtida com volumes ímpares para verificar o valor obtido diretamente no nó, sem outro erro de aproximação, e com volumes pares utilizando uma média aritmética entre os volumes, o que gera uma nova aproximação. A variável média de ϕ foi analisada pelas regras do retângulo e do trapézio para avaliar o erro numérico resultante de uma integração usando polinômio de graus 0 e 1, respectivamente. A derivada de 1ª ordem foi analisada por meio de duas funções de interpolação, para avaliar o fluxo de entrada empregando função de interpolação de 1ª e 2ª ordens.

4 VERIFICAÇÃO EM CFD

O erro numérico é definido como a diferença entre a solução analítica exata (Φ) e a solução numérica (ϕ) de uma variável de interesse (Ferziger e Peric, 2002):

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (14)$$

Considerando-se que o erro da solução numérica é igual ao erro de discretização, ele é dado por:

$$E(\phi) = C_1 \Delta x^{pL} + C_2 \Delta x^{p2} + C_3 \Delta x^{p3} + C_4 \Delta x^{p4} + \dots \quad (15)$$

onde os coeficientes que independem de Δx são representados por C_i , as ordens verdadeiras são pL , $p2$, $p3$, $p4$, ..., onde pL representa a ordem assintótica do erro.

O erro de discretização é estimado de duas formas (Oberkampf e Trucano, 2002): *a priori* e *a posteriori*. As estimativas de erro *a priori* estimam a ordem assintótica do erro e as estimativas de erro *a posteriori* estimam a magnitude do erro, por meio de estimadores.

4.1 Estimativa de erros *a priori*

As magnitudes dos erros de truncamento e suas ordens de convergência são obtidas por aproximações numéricas realizadas nas faces dos volumes de controle (Leonard, 1995; Marchi e Silva, 2000). Para realizar uma aproximação para a incógnita utilizando uma função de interpolação é necessário a expansão de uma série de Taylor em torno das faces leste (e) e oeste (w) do volume P .

As ordens obtidas *a priori* para as variáveis de interesse constam na Tab. 1, destacando-se os valores das ordens assintótica (p_L) e verdadeiras (p_V) do erro para cada uma delas.

Tabela 1: Resultados obtidos *a priori* para as sete variáveis de interesse

VARIÁVEL DE INTERESSE	ORDENS VERDADEIRAS	ORDEM ASSINTÓTICA
1) ϕ em $x = 1/2$ (valor nodal)	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
2) ϕ em $x = 1/2$ (média arit.)	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
3) $\bar{\phi}$ com a regra do retângulo	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
4) $\bar{\phi}$ com a regra do trapézio	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
5) \bar{l}_I do erro de discretização	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
6) $d\phi/dx$ em $x = 0$ com DDS	$p_V = 1,2,3,\dots$	$p_L = 1$
7) $d\phi/dx$ em $x = 0$ com DDS-2	$p_V = 2,3,4,\dots$	$p_L = 2$

4.2 Verificação de p_L

A ordem *a priori* pode ser confirmada por meio das ordens efetiva e aparente do erro, definidas, respectivamente, por:

$$pE = \frac{\log \left[\frac{E(\phi_g)}{E(\phi_f)} \right]}{\log(q_{gf})} \quad (16)$$

onde ϕ_f e ϕ_g representam as soluções numéricas obtidas nas malhas fina e grossa.

$$pU = \frac{\log \left[\frac{(\phi_g - \phi_{sg})}{(\phi_f - \phi_g)} \right]}{\log(q_{sgg})} \quad (17)$$

onde ϕ_{sg} representa a solução numérica obtida na malha supergrossa.

As razões de refino da malha são:

$$\left\{ \begin{array}{l} q_{gf} = \frac{\Delta x_g}{\Delta x_f} \\ q_{sgg} = \frac{\Delta x_{sg}}{\Delta x_g} \end{array} \right. \quad (18)$$

Neste trabalho foi considerada a razão de refino constante, portanto $q_{gf} = q_{sgg}$.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para atingir o objetivo deste trabalho, foram implementados programas computacionais escritos com a linguagem Fortran 2003, por meio do aplicativo Intel Visual Fortran 9.1, com precisão quádrupla. Os computadores empregados nas simulações têm processadores Intel Core 2 Quad com 2,4 GHz e Xeon Quad Core com 2,66 GHz, ambos com sistema operacional Windows xp 64 bits.

Os resultados foram obtidos para $Pe = Re = 5$. A Tab. 2 mostra a simbologia atribuída às variáveis de interesse, para a equação de Poisson tem-se a temperatura (T) e para as equações de advecção-difusão e Burgers, a velocidade (u). Foram geradas 16 malhas para obter os resultados utilizando volumes ímpares e 26 malhas para volumes pares. Para a equação de Poisson foram analisadas as sete variáveis de interesse. Porém as variáveis $T_{m,ret}$, $T_{m,trap}$, E_m , I_{DDS} e I_{DDS-2} foram analisadas com volumes pares ($q = 2$). Para as equações de advecção-difusão e Burgers foram analisadas somente as variáveis T_{nod} , $T_{m,ret}$, E_m e I_{DDS-2} , todas geradas com volumes ímpares ($q = 3$).

Tabela 2: Símbolos atribuídos às variáveis de interesse

VARIÁVEL DE INTERESSE	SÍMBOLO	
1) ϕ em $x = l/2$ (valor nodal)	T_{nod}	u_{nod}
2) ϕ em $x = l/2$ (média arit.)	T_{med}	u_{med}
3) $\bar{\phi}$ com a regra do retângulo	$T_{m,ret}$	$u_{m,ret}$
4) $\bar{\phi}$ com a regra do trapézio	$T_{m,trap}$	$u_{m,trap}$
5) \bar{l}_l do erro de discretização		E_m
6) $d\phi/dx$ em $x = 0$ com DDS		I_{DDS}
7) $d\phi/dx$ em $x = 0$ com DDS-2		I_{DDS-2}

As Figs. 2, 3 e 4 mostram o módulo do erro de discretização em função dos tamanhos dos volumes de controle (Δx) para as quatro formas de aplicar as condições de contorno. A Fig. 2 mostra os resultados obtidos para a equação de Poisson. A Fig. 3 mostra os resultados obtidos para a equação de advecção-difusão, porém o módulo do erro das equações de Poisson e Burgers, para as variáveis E_m e I_{DDS-2} , são qualitativamente os mesmos. A Fig. 4 traz os resultados do módulo do erro para a equação de Burgers; para as variáveis T_{nod} e $T_{m,ret}$, a equação de advecção-difusão obteve resultados qualitativamente iguais.

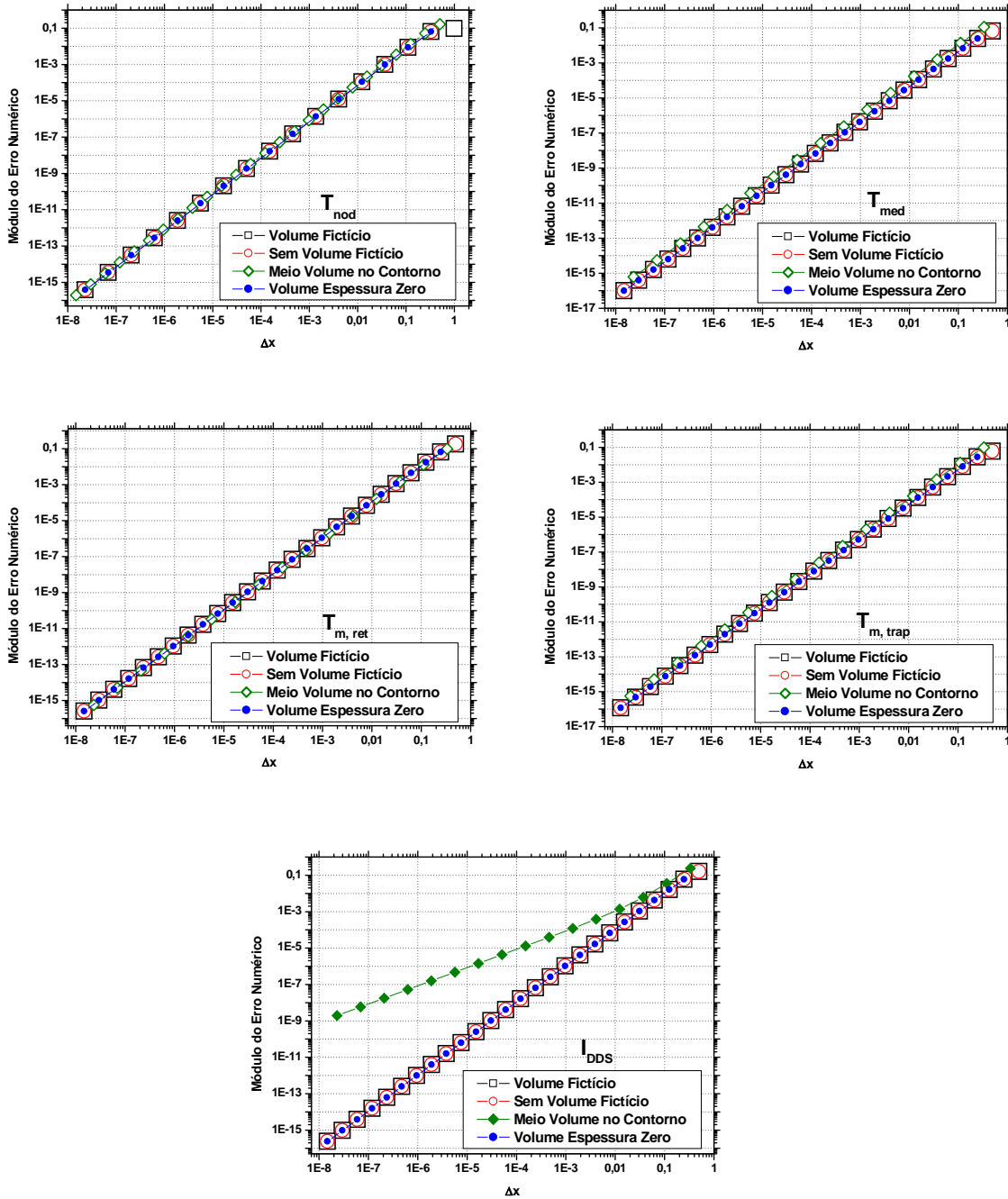


Figura 2 - Erro na solução da equação de Poisson

Considerando-se o módulo de E , percebe-se na Fig. 2 que:

- 1) Para Δx relativamente grande, tem-se $E(T_{nod})$ com valores qualitativamente iguais para as quatro formas de aplicar as condições de contorno; e para $\Delta x \rightarrow 0$ os valores seguem muito próximos entre si. Ocorre o mesmo para as variáveis T_{med} , $T_{m,ret}$ e $T_{m,trap}$.
- 2) A variável I_{DDS} apresenta, para Δx relativamente grande, os valores do erro muito próximos para as quatro formas de aplicar as condições de contorno; e para $\Delta x \rightarrow 0$ os valores do erro são muito maiores para a forma de aplicar as condições de contorno com

meio-volume em comparação com as formas sem e com volume fictício e volume de espessura zero, que apresentam valores para o erro muito próximos entre si.

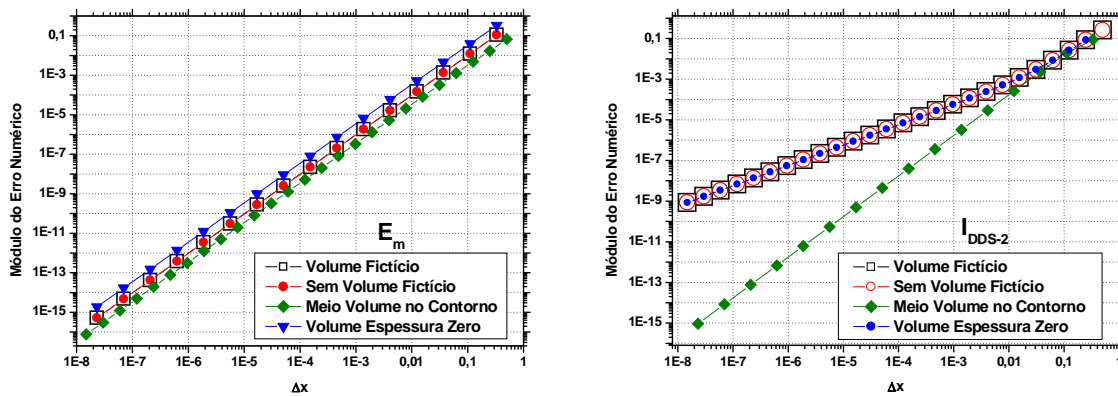


Figura 3 - Erro na solução da equação de advecção-difusão

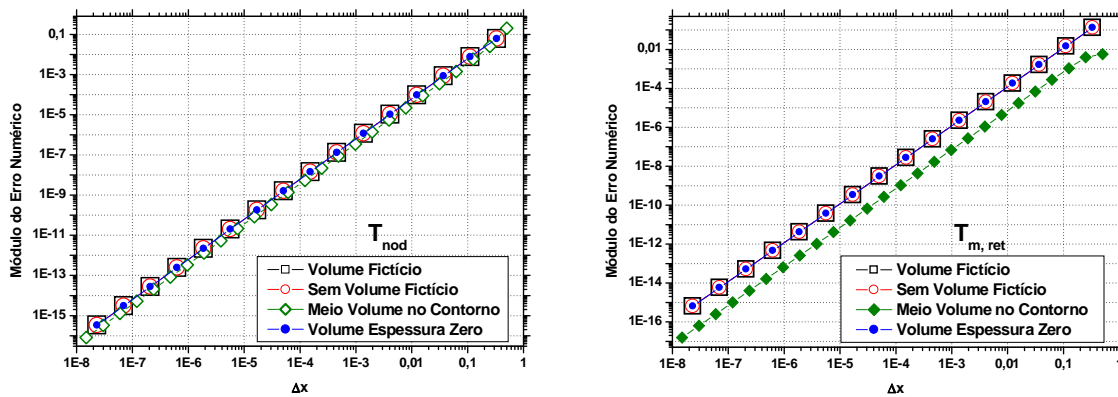


Figura 4 - Erro na solução da equação de Burgers

Na Fig. 3, percebe-se que:

- 1) Para qualquer Δx , a variável E_m apresenta valores iguais do erro para as formas de aplicar as condições de contorno com e sem volume fictício. E estas têm valores menores do que a forma com volume de espessura zero. A forma com meio-volume no contorno apresenta os menores valores para o módulo do erro em relação às outras três formas.
- 2) Para a variável I_{DDS-2} , quando Δx é relativamente grande, os valores para o erro são qualitativamente iguais entre as quatro formas. Ao se refinar a malha, percebe-se que a forma com meio-volume destaca-se, obtendo valores muito menores com relação às outras três formas.

Na Fig. 4 percebe-se que ambas as variáveis tem o mesmo comportamento. Para as formas de aplicar as condições de contorno com e sem volume fictício e volume de espessura zero os erros são iguais. A forma com meio-volume no contorno têm erros menores.

As Tabs. 3 e 4 mostram os resultados apresentados nas Figs. 2, 3 e 4, classificando as variáveis entre as formas de aplicar as condições de contorno que obtiveram o menor erro numérico. A Tab. 3 refere-se aos resultados da equação de Poisson e a Tab. 4 refere-se aos resultados das equações de advecção-difusão e Burgers.

Tabela 3 - Classificação das variáveis nas quatro formas de aplicar as condições de contorno com menor erro numérico para a equação de Poisson

VARIÁVEL DE INTERESSE	MENOR ERRO NUMÉRICO
T_{nod}	1º Sem volume fictício
T_{med}	Com volume fictício
$T_{m,ret}$	Com volume de espessura zero
$T_{m,trap}$	2º Com meio-volume
E_m	1º Com meio-volume
	2º Sem volume fictício
	Com volume fictício
I_{DDS}	3º Com volume de espessura zero
	1º Sem volume fictício
	Com volume fictício
I_{DDS-2}	Com volume de espessura zero
	2º Com meio-volume
	1º Com meio-volume
I_{DDS-2}	2º Sem volume fictício
	Com volume fictício
	Com volume de espessura zero

Tabela 4 - Classificação das variáveis nas quatro formas de aplicar as condições de contorno com menor erro numérico para as equações de advecção-difusão e Burgers

VARIÁVEL DE INTERESSE	MENOR ERRO NUMÉRICO
T_{nod}	1º Com meio-volume
	2º Sem volume fictício
	Com volume fictício
$T_{m,ret}$	Com volume de espessura zero
	1º Com meio-volume
	2º Sem volume fictício
E_m	Com volume fictício
	3º Com volume de espessura zero
	1º Com meio-volume
I_{DDS-2}	2º Sem volume fictício
	Com volume fictício
	Com volume de espessura zero

Para as quatro primeiras variáveis da Tab. 3 e I_{DDS} , as formas sem e com volume fictício e com volume de espessura zero têm o menor erro com relação à forma com meio-volume no contorno. Para as demais variáveis, meio-volume tem o menor erro.

Na Tab. 4, observa-se que para as quatro variáveis, a forma com meio-volume tem o menor erro numérico. Provavelmente, o efeito advectivo presente nas equações analisadas

influenciou para que houvesse esse resultado em relação àqueles da Tab. 3 para as variáveis T_{nod} e $T_{m,ret}$.

As ordens encontradas *a priori* do erro de discretização constam na Tab. 1. As Figs. 5, 6 e 7, trazem a ordem assintótica (pL) obtida pela análise *a priori* e as tendências das ordens efetiva (pE) e aparente (pU) do erro de discretização obtidas *a posteriori*. Os resultados foram obtidos para a equação de Poisson. Porém eles são qualitativamente iguais para as outras duas equações, pois as ordens do erro das variáveis mantiveram a mesma tendência considerando os três tipos de problemas.

A Fig. 5 mostra as tendências das ordens obtidas para a forma de aplicar condições de contorno com volume fictício. O mesmo resultado foi verificado para as outras três formas de aplicar condições de contorno com essas variáveis de interesse. Por esta figura, percebe-se, para as cinco variáveis analisadas, que à medida que $\Delta x \rightarrow 0$, tanto pE quanto pU tendem à ordem 2, como era o esperado pela análise *a priori*.

A Fig. 6 mostra as tendências das ordens do erro obtidas para a forma com volume fictício. Porém para as variáveis I_{DDS} e I_{DDS-2} , os resultados foram qualitativamente iguais às formas sem volume fictício e com volume de espessura zero. Pois a tendência das ordens não corresponde com o estudo *a priori*. Percebe-se, com isto, que:

- 1) Para a variável I_{DDS} a ordem assintótica (pL) é 1. Para Δx relativamente grande, as ordens efetiva (pE) e aparente (pU) estão próximas de 1 mas à medida que $\Delta x \rightarrow 0$ as ordens pE e pU tendem a 2.
- 2) Para a variável I_{DDS-2} a ordem assintótica (pL) é 2. Para Δx relativamente grande, as ordens efetiva (pE) e aparente (pU) estão próximas de 2 mas à medida que $\Delta x \rightarrow 0$ as ordens pE e pU tendem a 1.

A Fig. 7 mostra a tendência das ordens do erro das variáveis I_{DDS} e I_{DDS-2} para a forma com meio-volume no contorno. Neste caso, as ordens das variáveis calculadas *a posteriori* tendem às ordens *a priori*. Como se pode ver na Fig. 7, à medida que $\Delta x \rightarrow 0$, $pE \rightarrow pL$ e $pU \rightarrow pL$, como era esperado.

A tendência do erro de não corresponder aos valores esperados *a priori*, para a derivada da temperatura em $x=0$, pode estar relacionado à forma de aplicar as condições de contorno e ao erro de poluição (Marchi, 2001) inerente do erro de discretização. A derivada da temperatura é calculada em $x=0$, ou seja, no contorno, por isso sofre a influência da forma de aplicar as condições de contorno.

A equação do erro de poluição que está incorporado aos conceitos de erro de discretização é obtida com a expansão da série de Taylor em torno das faces. Realizando algumas operações aritméticas entre as expansões, chega-se aos valores da aproximação numérica, da ordem de truncamento e do erro de poluição que é dado por:

$$e = \frac{(E_j - E_{j-1})}{\Delta x} \quad (19)$$

onde j indica o número do volume de controle.

Segundo Marchi (2001) a denominação de erro de poluição foi introduzida por Babuska *et al.* (1997), porém com outra finalidade. Neste trabalho e em Marchi (2001), o erro de discretização é a soma dos erros de truncamento e poluição dado por:

$$E = \varepsilon_\tau + e \quad (20)$$

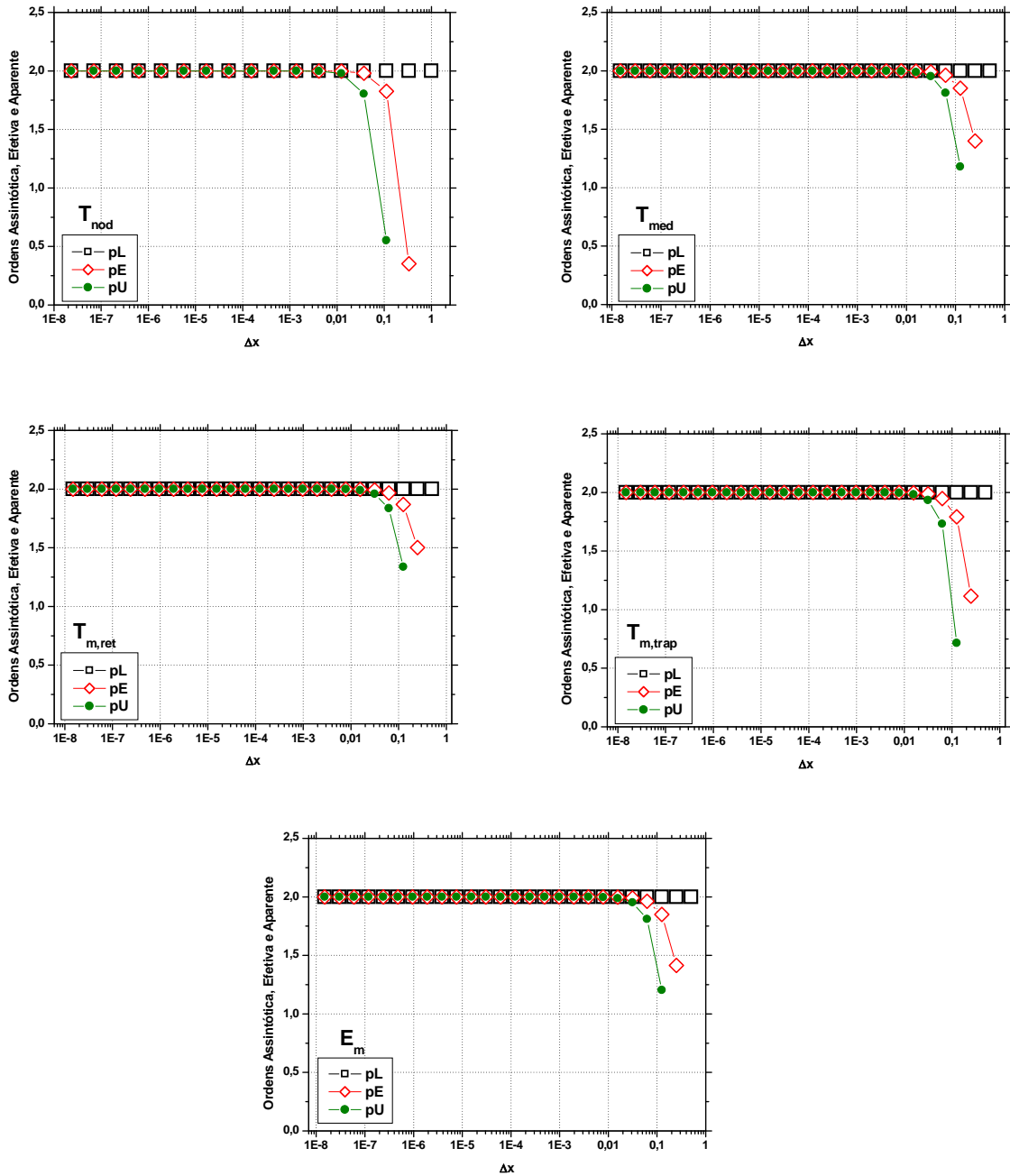


Figura 5 - Ordens do erro de discretização com volume fictício e equação de Poisson

Para mostrar que a existência do erro de poluição nas soluções numéricas influencia a tendência da ordem do erro de discretização, a Fig. 8 foi construída baseada nos valores da ordem assintótica calculada *a priori*, das ordens efetiva e aparente calculadas *a posteriori* com os valores das soluções numéricas nodais e da ordem efetiva calculada *a posteriori* com os valores das soluções analíticas nodais. O emprego dos valores das soluções analíticas nodais implica que o resultado é exato nos nós dos volumes de controle.

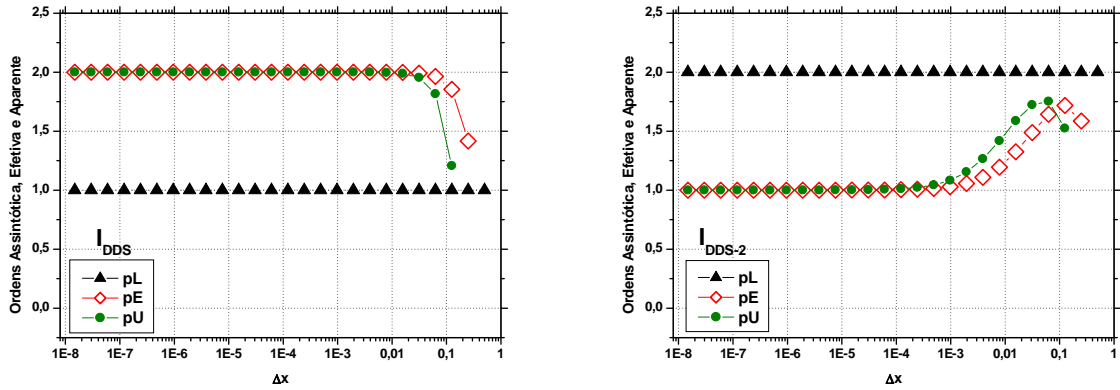


Figura 6 - Ordens do erro de discretização com volume fictício e equação de Poisson

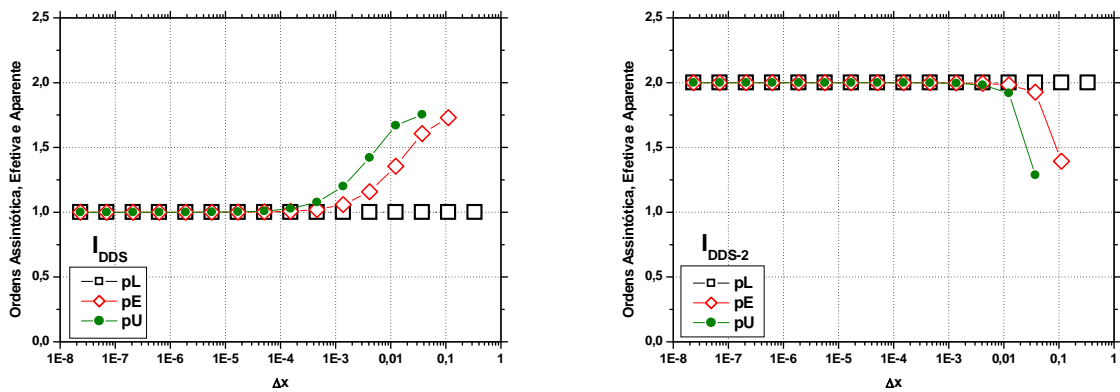


Figura 7 - Ordens do erro de discretização com meio-volume no contorno e equação de Poisson

A Fig. 8 apresenta os resultados para a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício na equação de Poisson. Porém, a ordem efetiva do erro de discretização calculada com os valores das soluções analíticas nodais confirma a teoria *a priori* do erro para as outras duas formas de aplicar as condições de contorno que não atingiram a ordem esperada, sendo qualitativamente iguais para as outras duas equações.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho foram estudadas sete variáveis de interesse empregando quatro formas de aplicar condições de contorno e três equações governantes.

O erro considerado nas soluções numéricas foi o erro de discretização e as ordens foram obtidas *a priori*, por meio das ordens assintótica e verdadeiras, e *a posteriori* com as ordens efetiva e aparente.

Com a realização deste trabalho, verificou-se que:

- 1) Para cinco variáveis de interesse estudadas, as ordens deduzidas *a priori* do erro de truncamento, confirmam a teoria existente sobre as ordens verdadeiras (pV) da estimativa do erro numérico.
- 2) As ordens assintótica, efetiva e aparente tiveram o mesmo comportamento entre as formas de aplicar as condições de contorno sem volume fictício, com volume fictício e com volume de espessura zero.
- 3) Entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno estudadas, a classificação do menor erro numérico é a mesma para as variáveis E_m e I_{DDS-2} .
- 4) As equações de advecção-difusão e Burgers tiveram os mesmos resultados com relação a tendência das ordens dos erros.
- 5) A equação de Poisson, que não tem o efeito advectivo presente na sua formulação, obteve o menor erro numérico para as quatro primeiras variáveis da Tab. 3, diferentes das equações de advecção-difusão e Burgers.
- 6) Ao erro de truncamento está implícito o conceito de erro de poluição, que degenerou a ordem do erro numérico das variáveis I_{DDS} e I_{DDS-2} , dos três problemas estudados com as formas sem e com volume fictício e com volume de espessura zero.
- 7) Em geral, a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume é a mais indicada, pois possui o menor erro numérico.

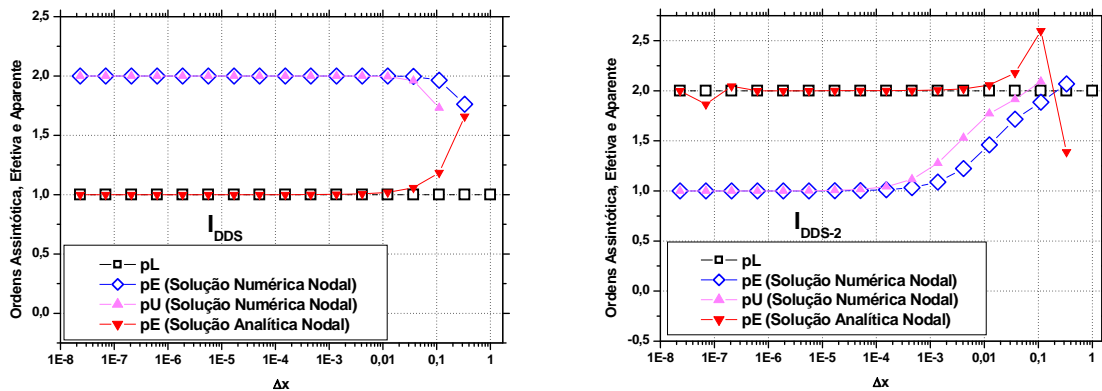


Figura 8 - Ordens do erro com volume fictício na equação de Poisson, com solução analítica e numérica

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro do Programa UNIESPAÇO, da AEB (Agência Espacial Brasileira), e da Fundação Araucária (Paraná). A autora agradece ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, do Brasil) pela bolsa de mestrado que manteve durante a realização deste trabalho; e à CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pela bolsa de doutorado que mantém atualmente. O autor é bolsista do CNPq.

REFERÊNCIAS

- AIAA, 1998. Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations. AIAA G-077-1998.
- AIAA, 2009. Editorial Policy Statement on Numerical and Experimental Accuracy. AIAA Journal, v. 47, n. 1, pp. 16-16.
- ASME/JFE, 2009. Journal of Fluids Engineering Editorial Policy Statement on the Control of Numerical Accuracy. ASME Journal of Fluid Engineering.
- Babuska, L.; Ihlenburg, F.; Strouboulis, T.; & Gangaraj, S. K., 1997. A posteriori error estimation for finite element solutions of Helmholtz' equation; part I: the quality of local indicators and estimators. International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 40, pp. 3443-3462.
- Ferziger, J. H.; & Peric, M., 2002. Computational Methods for Fluid Dynamics. 3 ed. Springer.
- Kreyszig, E., 1999. Advanced Engineering Mathematics. 8 ed. Wiley.
- Leonard, B. P., 1995. Order of accuracy of QUICK and related convection-diffusion schemes. Applied Mathematical Modelling, vol. 19, pp. 640-653.
- Maliska, C. R., 1995. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. LTC.
- Marchi, C. H., 2001. Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos. Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC. Florianópolis.
- Marchi, C. H.; & Alves, A. C., 2008. Verificação de soluções numéricas 1D obtidas com diferenças finitas em malhas uniformes. In: 29th Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia. Proceedings of XXIX CILAMCE.
- Marchi, C. H.; & Silva, A. F. C., 1999. Condições suficientes para estimar com acurácia e confiabilidade erros de discretização em CFD. In: 20th Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia. Proceedings of XX CILAMCE 16.1-16.20. São Paulo.
- Marchi, C. H.; & Silva, A. F. C., 2000. Previsão de erros de truncamento de modelos numéricos em malhas não-uniformes. In: 4th Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional. Proceedings of IV SIMMEC, pp. 481-488. Uberlândia.
- 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.
- Oberkampf, W. L.; & Trucano, T. G., 2002. Verification and validation in computational fluid dynamics. Progress in Aerospace Sciences, vol. 38, pp. 209-272.
- Patankar, S. V., 1980. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Taylor & Francis.
- Roache, P. J., 2004. Building PDE codes to be verifiable and validatable. Computing in Science & Engineering, vol. 6, pp. 30-38.