

FÁBIO ALENCAR SCHNEIDER

**VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS EM PROBLEMAS
DIFUSIVOS E ADVECTIVOS COM MALHAS NÃO-UNIFORMES**

**Tese apresentada como requisito parcial à
obtenção do grau de Doutor em Ciências, Curso
de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em
Engenharia, Setor de Tecnologia, Universidade
Federal do Paraná.**

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi

CURITIBA

2007.

TERMO DE APROVAÇÃO

FÁBIO ALENCAR SCHNEIDER

VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS EM PROBLEMAS DIFUSIVOS E ADVECTIVOS COM MALHAS NÃO-UNIFORMES

Tese aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor no programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:

Orientador: Prof. Dr. Carlos H. Marchi
Depto. de Engenharia Mecânica, UFPR

Prof. Dr. João Flávio V. de Vasconcellos
Depto de Eng. Mecânica e Energia, UERJ

Prof. Dr. Antônio Fábio C. da Silva
Depto. de Engenharia Mecânica, UFSC

Prof. Dr. Rigoberto Eleazar M. Morales
Depto. de Mecânica, UTFPR

Prof. Ph.D. Cristóvão V. S. Fernandes
Depto. Hidráulica e Saneamento, UFPR

Prof. Ph.D. Maurício Felga Gobbi
PPGMNE, UFPR

Curitiba, 27 de Abril de 2007.

À minha querida esposa, Geórgia Maria.
Aos meus queridos filhos, Fernanda, Felipe e Guilherme.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, professor Carlos Henrique Marchi, por ter aceitado orientar-me neste trabalho e por todo o conhecimento recebido ao longo destes anos.

Agradeço ao meu amigo, professor Carlos Henrique Marchi, pelas palavras de incentivo nos momentos difíceis e pelo apoio constante, mantendo-me sempre na direção dos meus objetivos, principalmente nos momentos finais da redação deste texto.

Agradeço à minha esposa, Geórgia Maria, pelo companheirismo, pela compreensão, pelo amor e pela dedicação dada a mim e aos nossos filhos.

Agradeço aos meus pais, irmãos e amigos pela ajuda e compreensão, para que eu pudesse continuar com meus estudos.

Agradeço aos membros da Banca examinadora, prof. João Flávio Vieira de Vasconcellos, prof. António Fábio Carvalho da Silva, prof. Rigoberto Eleazar Melgarejo Morales, prof. Cristóvão Vicente Scapulatempo Fernandes e prof. Maurício Felga Gobbi, pelo tempo dispendido na leitura deste manuscrito e pelas importantes sugestões apontadas.

“O que não nos mata nos torna mais fortes!”

(Nietzsche)

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo do efeito do tipo de refino de malha sobre a ordem do erro de discretização de soluções numéricas, usando malhas não-uniformes, em problemas unidimensionais e bidimensionais, da dinâmica dos fluidos. Todos os modelos matemáticos resolvidos neste trabalho possuem solução analítica, desta forma, os desenvolvimentos e conclusões ficam respaldados porque estão baseados nos valores exatos do erro numérico. Os problemas resolvidos são problemas unidimensionais e bidimensionais que apresentam os principais efeitos encontrados nos problemas de dinâmica dos fluidos. O objetivo geral deste trabalho é estimar a priori o erro de discretização e sua ordem, para os modelos matemáticos apresentados, e estimar a posteriori o erro de discretização observado nas soluções numéricas. Os métodos numéricos empregados são: o método das diferenças finitas e o método dos volumes finitos, onde as estimativas de erro são baseadas em soluções numéricas obtidas em duas ou mais malhas de tamanhos diferentes. Com relação às análises a priori, são apresentadas equações mais precisas para o erro numérico de aproximações comuns no método dos volumes finitos, em configurações de malha uniforme, não-uniforme e em progressão geométrica. Estas configurações permitem refino local de malha e são base para discretizações em malhas não-estruturadas. Com relação às análises a posteriori, são apresentadas as análises da ordem do erro para várias configurações de malha grossa e malha fina, envolvendo variáveis locais e globais. A principal conclusão é que quando se faz uso de malhas não-uniformes para a discretização de domínios, em um grande número de casos, a ordem do erro da solução numérica tende à ordem teórica, obtida a priori, quando as malhas mais finas são obtidas com o refino uniforme da malha inicial, isto é, quando os elementos da malha não-uniforme inicial são divididos em partes iguais para a obtenção das malhas mais finas. Desta forma, as estimativas baseadas na ordem do erro teórica ou na ordem do erro prática serão mais confiáveis. Neste texto são discutidos temas importantes no estudo dos erros numéricos para o método das diferenças finitas e para o método dos volumes finitos, como por exemplo, aproximações de segunda ordem aplicadas em discretizações não-uniformes, refino direcional de malhas, pós-processamento de variáveis locais e globais, entre outros. O último problema teste apresentado neste trabalho é a advecção/difusão bidimensional com termo fonte, que foi desenvolvido com o método das soluções fabricadas, e que é uma proposta de "problema teste" para estudos futuros de dinâmica dos fluidos computacional.

Palavras-chave: erro numérico, erro de discretização, malhas não-uniformes, ordem efetiva.

ABSTRACT

This work is a study concerning the effect of grid refine type about the numerical solutions discretization error order, through non-uniform grids, in fluid dynamics one-dimensional and bi-dimensional problems. All mathematical models solved in this search have analytical solution. Based in the numerical error exact value, the developments and conclusions are then well supported. The solved problems are one-dimensional and bi-dimensional showing the main effects usually found in fluid dynamic problems. The main goal of this search is pre-estimate the discretization error and its order, according to the mathematical models showed, and post-estimate the discretization error as seen in the numerical solutions. Numerical methods used are the finite difference method and finite volume method, where error estimates are based in numerical solutions obtained by two or more grids of different sizes. Concerning the previous analysis, there will be given more accurate equations to the common approximations numerical error in the finite volume method, in uniform and non-uniform grid configurations. These configurations permit grid local refine, and are the basis for non-structured grid discretizations. Concerning the posterior analysis, there will be given error order analysis for many configurations of thick and thin grid, according to local and global variables. The main conclusion is that when using non-uniform grids to domains discretization, in a great number of cases, the numerical solutions error order tend to the theory order, gained previously, when thinnest grids are obtained through uniform refine of the initial grid, i.e., when the initial non-uniform grid elements era equally divided to obtain thinnest grids. Therefore, the estimative based in the theory error order or practical error order will be more accurate. In this paper are discussed important subjects for the study of numerical errors to the finite difference method and to the finite volume method, as, for example, second order approximations applied to non-uniform discretizations, directional grid refines, pos-process of local and global variables. The last test problem showed in this search is the bi-dimensional advection/diffusion with source term, that was developed with the exact solution, which is a “test problem” to future studies of computational fluids dynamic.

Key-words: numerical error, discretization error, non-uniform grids, finite volumes, effective order.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Exemplos de malhas.....	22
Figura 1.2 – Erros envolvidos nos métodos da engenharia (adaptado de Marchi, 2001).....	25
Figura 2.1 – Exemplos de discretização para diferenças finitas.....	37
Figura 2.2 – Discretizações cartesianas e não-uniformes para volumes finitos	39
Figura 2.3 – Fontes de erro numérico	46
Figura 2.4 – Ordem assintótica (p_L) e efetiva (p_E) do erro (adaptado de Marchi, 2001).....	54
Figura 2.5 – Ordem efetiva (p_E) e assintótica (p_L) com redução de (h).....	54
Figura 2.6 – Malha unidimensional não-uniforme.....	55
Figura 2.7 – Exemplo de programação gráfica.....	56
Figura 2.8 – Interface gráfica de programas 1D.....	57
Figura 2.9 – Interface gráfica de programas 2D.....	58
Figura 3.1 – Malhas unidimensionais para diferenças finitas.....	60
Figura 3.2 – Ordem efetiva (p_E) obtida <i>a priori</i> quando se usam malhas em PG.....	71
Figura 3.3 – Refino de malha uniforme para análise da razão de refino (q).....	73
Figura 3.4 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1A para as malhas da Fig. 3.3.....	74
Figura 3.5 – Valor da razão de refino (q) que reproduz a ordem assintótica (p_L), para as malhas da Fig. 3.3 com $c = 3L/4$	75
Figura 3.6 – Refino de malha não-uniforme e malha embaralhada	76
Figura 3.7 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1B no ponto 2, para três pares de malha do tipo da Fig. 3.6 (a,b).....	76
Figura 3.8 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1B, para malhas do tipo da Fig. 3.6 (a,b).....	77
Figura 3.9 – Ordem efetiva (p_E) do problema 2A no ponto 2, para as malhas da Fig. 3.3.....	80
Figura 3.10 – Ordem efetiva (p_E) do problema 2B no ponto 2, para 7 pares de malhas do tipo da Fig. 3.6.a e 3.6.b.....	81
Figura 3.11 – Malha grossa e fina com progressão geométrica.....	83
Figura 3.12 – Ordem efetiva do problema 3A para malha grossa com PG de razão r_g e $N_g=1000$	85
Figura 3.13 – Ordem efetiva do problema 3A, para malha grossa com $N_g = 1000$ e $r=1,01$	85
Figura 3.14 – Intervalo de integração com base em $f(x)$ na malha grossa (I_g) e na malha fina (I_f).....	87

Figura 3.15 – Ordem efetiva do problema 3B, para malha grossa não-uniforme e intervalo de integração fixo $x = [0;0,5]$	88
Figura 3.16 – Ordem efetiva do problema 3B, para malha grossa não-uniforme e intervalo de integração variável em que $f(x) = [0;0,7]$	88
Figura 4.1 – Malhas unidimensionais para volumes finitos.....	99
Figura 4.2 – Face de volume de controle não-uniforme.....	100
Figura 4.3 – Refinos de malha uniformes (RU).....	107
Figura 4.4 – Refinos de malha semi-uniformes (RSU).....	107
Figura 4.5 – Refinos entre centros (RC).....	108
Figura 4.6 – Refinos entre centros com F_e constante (RCF).....	109
Figura 4.7 – Refinos aleatórios (RA).....	109
Figura 4.8 – Ordem efetiva do problema 5A para malha grossa uniforme.....	115
Figura 4.9 – Solução numérica de λ do problema 5B, para malhas uniformes.....	115
Figura 4.10 – Ordem efetiva do problema 5B para malha grossa uniforme.....	116
Figura 4.11 – Ordem efetiva do problema 6A para malha grossa não-uniforme do tipo VFC.....	119
Figura 4.12 – Ordem efetiva do problema 6B para malha grossa não-uniforme do tipo VNC.....	120
Figura 4.13 – Ordem efetiva do problema 6B para malha grossa não-uniforme aleatória.....	120
Figura 4.14 – Ordem efetiva do problema 7 para malha grossa não-uniforme do tipo VFC.....	123
Figura 4.15 – Ordem efetiva do problema 7 para malha grossa não-uniforme do tipo VNC.....	124
Figura 4.16 – Integração numérica com a regra do retângulo e a regra do trapézio.....	127
Figura 4.17 – Ordem efetiva do problema 8, no intervalo $x = [0;1]$, para malha grossa com PG.....	128
Figura 5.1 – Domínio bidimensional e discretização para diferenças finitas.....	135
Figura 5.2 – Malhas bidimensionais cartesianas para diferenças finitas.....	136
Figura 5.3 – Perfil da Eq. (5.3) em $\Lambda(x;0,5)$ e $\Lambda(0,5;y)$ e superfície gerada.....	137
Figura 5.4 – Ordem efetiva do problema 9A, no ponto P , para malha grossa uniforme.....	139
Figura 5.5 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme.....	140

Figura 5.6 – Ordem efetiva do problema 9A, no ponto P , para malha grossa com PG de razão r	141
Figura 5.7 – Malha (a) grossa uniforme por direção e (b) malha fina obtida com refino uniforme em y (refino direcional).....	143
Figura 5.8 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme com refino direcional.....	144
Figura 5.9 – Ordem aparente do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme com refino direcional.....	145
Figura 6.1 – Domínio bidimensional e discretização para volumes finitos.....	146
Figura 6.2 – Malhas bidimensionais cartesianas para volumes finitos.....	147
Figura 6.3 – Volume de controle e faces: (a) volume interno, (b) volume (N) de fronteira.....	148
Figura 6.4 – Ordem aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme VNC e com refino direcional do tipo RU	150
Figura 6.5 – Ordem aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme VFC e com refino direcional do tipo RU	151
Figura 6.6 – Superfície gerada pela Eq (6.11).....	156

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Classificação das variáveis de interesse.....	34
Tabela 3.1 – Ordem assintótica (p_L) das aproximações numéricas	63
Tabela 3.2 – Malha grossa e seus refinamentos	91
Tabela 3.3 – Resultados do problema 4A para malha grossa não-uniforme	92
Tabela 3.4 – Resultados do problema 4A para malha grossa não-uniforme, com refinamento uniforme.....	93
Tabela 3.5 – Resultados do problema 4A para malha grossa não-uniforme, com refinamento aleatório.....	93
Tabela 3.6 – Resultados do problema 4B para malha grossa e fina com PG	94
Tabela 3.7 – Resultados do problema 4B para malha grossa e fina com PG de razão r	95
Tabela 3.8 – Resultados do problema 4B para malha grossa com PG de razão r , e malha fina com PG de razão $\sqrt[q]{r}$	95
Tabela 3.9 – Algoritmos implementados no Método das Diferenças Finitas	96
Tabela 4.1 – Ordem assintótica (p_L) das aproximações numéricas para volumes finitos	106
Tabela 4.2 – Análise <i>a priori</i> dos casos de refinamento de malha em que ocorre refinamento uniforme dos tamanhos $(x_e - x_p)_j$	113
Tabela 4.3 – Resultados do problema 8, no intervalo $x = [0;1]$, para malha grossa não-uniforme <i>VFC</i>	129
Tabela 4.4 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme <i>VFC</i> , refinamento <i>RU</i>	130
Tabela 4.5 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme <i>VFC</i> , refinamento <i>RSU</i>	130
Tabela 4.6 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme <i>VFC</i> , refinamento <i>RC</i>	130
Tabela 4.7 – Resultados do problema 8, no intervalo $x = [0;1]$, para malha grossa não-uniforme <i>VNC</i>	131
Tabela 4.8 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme <i>VNC</i> , refinamento <i>RU</i>	132
Tabela 4.9 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme <i>VNC</i> , refinamento <i>RSU</i>	132

Tabela 4.10 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme VNC , refino RC	132
Tabela 4.11 – Algoritmos implementados no Método dos Volumes Finitos	133
Tabela 5.1 – Resultados do problema 9 para malha grossa não-uniforme.....	142
Tabela 5.2 – Resultados do problema 9 para malha grossa não-uniforme, com refino uniforme	142
Tabela 5.3 – Resultados do problema 9 para malha grossa não-uniforme, com refino não-uniforme ou aleatório.....	143
Tabela 6.1 – Ordem efetiva para a derivada local no ponto médio do contorno norte, para os problemas 10A e 10B, para malha grossa uniforme.....	153
Tabela 6.2 – Ordem efetiva para a derivada local no ponto médio do contorno norte, para malha grossa uniforme com $\frac{1}{2}$ volumes no contorno	154
Tabela 6.3 – Ordem efetiva para a integral no contorno norte, para os problemas 10A e 10B, para malha grossa uniforme.....	154
Tabela 6.4 – Ordem efetiva para a derivada local no ponto médio do contorno norte, para os problemas 10A e 10B, para malha grossa não-uniforme.....	155
Tabela 6.5 – Variáveis de interesse no problema 11.....	158
Tabela 6.6 – Soluções analíticas das variáveis de interesse no problema 11, para $p = 2$ e $k = 1$	159
Tabela 6.7 – Resultados do problema 11 para malha grossa uniforme	159
Tabela 6.8 – Resultados do problema 11 para Λ com malha grossa uniforme.....	160
Tabela 6.9 – Resultados do problema 11 para Λ^i com malha grossa uniforme.....	160
Tabela 6.10 – Resultados do problema 11 para $(\Lambda^i)_m$ com malha grossa uniforme	161
Tabela 6.11 – Resultados do problema 11 para malha grossa não-uniforme	161
Tabela 6.12 – Resultados do problema 11 para Λ com malha grossa não-uniforme.....	162
Tabela 6.13 – Resultados do problema 11 para Λ^i com malha grossa não-uniforme.....	162
Tabela 6.14 – Resultados do problema 11 para $(\Lambda^i)_m$ com malha grossa não-uniforme	163
Tabela 6.15 – Algoritmos bidimensionais implementados no Método dos Volumes Finitos	163
Tabela A.1 – Ordem efetiva (p_E) obtida <i>a priori</i> quando se usam malhas em PG.....	174
Tabela A.2 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1A para as malhas da Fig. 3.3	174
Tabela A.3 – Valor da razão de refino (q) que reproduz a ordem assintótica (p_L), para as malhas da Fig. 3.3 com $c = 3L/4$	174

Tabela A.4 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1B no Ponto 2, para malhas das Fig.3.6 (a,b).....	175
Tabela A.5 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1B, para malhas do tipo da Fig. 3.6 (a,c).....	175
Tabela A.6 – Ordem efetiva (p_E) do problema 2A no ponto 2, para as malhas da Fig. 3.3.....	175
Tabela A.7 – Ordem efetiva (p_E) do problema 2B no ponto 2, para 7 pares de malhas do tipo da Fig. 3.6.a e 3.6.b.	176
Tabela A.8 – Ordem efetiva do problema 3A, para malha grossa com PG de razão r_g	176
Tabela A.9 – Ordem efetiva do problema 3A, para malha grossa com $N_g = 100$ e $r=1,01$	176
Tabela A.10 – Ordem efetiva do problema 3B, para malha grossa não-uniforme e intervalo de integração fixo $x = [0;0,5]$	177
Tabela A.11 – Ordem efetiva do problema 3B, para malha grossa não-uniforme e intervalo de integração variável em que $f(x) = [0;0,7]$	177
Tabela B.1 – Ordem efetiva do problema 5A para malha grossa uniforme.....	178
Tabela B.2 – Ordem efetiva do problema 5B para malha grossa uniforme.....	178
Tabela B.3 – Ordem efetiva do problema 6A para malha grossa não-uniforme do tipo <i>VFC</i>	178
Tabela B.4 – Ordem efetiva do problema 6B para malha grossa não-uniforme do tipo <i>VNC</i>	179
Tabela B.5 – Ordem efetiva do problema 6A para malha grossa não-uniforme aleatória.....	179
Tabela B.6 – Ordem efetiva do problema 7 para malha grossa não-uniforme do tipo <i>VFC</i>	179
Tabela B.7 – Ordem efetiva do problema 7 para malha grossa não-uniforme do tipo <i>VNC</i>	180
Tabela B.8 – Ordem efetiva do problema 8, no intervalo $x = [0;0,5]$, para malha grossa não-uniforme do tipo <i>VFC</i>	180
Tabela C.1 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa uniforme.....	181
Tabela C.2 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não- uniforme.....	181
Tabela C.3 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa com PG de razão r	181

Tabela C.4 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme, com refino direcional uniforme em x	182
Tabela C.5 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme, com refino direcional não-uniforme em y	182
Tabela D.1 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme VNC e com refino direcional em x , do tipo RU	183
Tabela D.2 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme VNC e com refino direcional em y , do tipo RU	183
Tabela D.3 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme VFC e com refino direcional em x , do tipo RU	183
Tabela D.4 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme VFC e com refino direcional em y , do tipo RU	184
Tabela D.5 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme VFC e com refino direcional em y , do tipo RSU	184

LISTA DE SÍMBOLOS

<i>ADI</i>	<i>Alternating Direction Implicit</i>
<i>c</i>	coeficiente da equação geral do erro de truncamento
<i>C</i>	coeficiente da equação geral do erro de discretização
<i>CDS</i>	<i>Central Difference Scheme</i>
<i>CFD</i>	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
<i>e,w,n,s</i>	face <i>oeste</i> , <i>leste</i> , <i>norte</i> e <i>sul</i> do volume de controle
<i>E</i>	erro numérico
F_e	fator de interpolação
<i>GCI</i>	<i>Grid Convergence Index</i>
<i>h</i>	tamanho do elemento da malha
<i>j, P</i>	nó genérico da malha
<i>K</i>	coeficiente da equação da incerteza de uma solução numérica
<i>L, H</i>	dimensões do domínio de cálculo
<i>MDF</i>	Método das Diferenças Finitas
<i>MVF</i>	Método dos Volumes Finitos
<i>n</i>	face norte do volume de controle
<i>N</i>	número de elementos da malha
Pe	número de Peclet
p, k	número de Peclet nas direções coordenadas <i>x</i> e <i>y</i>
p_E	ordem efetiva
<i>PG</i>	progressão geométrica
p_L	ordem assintótica
p_U	ordem aparente
p_V	ordem verdadeira
<i>q</i>	razão de refino de malha
<i>r</i>	razão de progressão geométrica
<i>RA</i>	refino aleatório
<i>RC</i>	refino entre centros
<i>RCF</i>	refino entre centros com F_e constante
<i>Re</i>	número de Reynolds
<i>RSU</i>	refino semi-uniforme

RU	refino uniforme
s	face sul do volume de controle
S	termo fonte genérico
$TDMA$	<i>TriDiagonal Matrix Algorithm</i>
u	componente cartesiana do vetor velocidade
U	incerteza numérica
UDS	<i>Upwind Difference Scheme</i>
VNC	volume de nó centrado
VFC	volume de face centrada
w	face oeste do volume de controle
x, y	sistema coordenado cartesiano

Letras Gregas

$\Delta x, \Delta y$	dimensão do volume na direção coordenada x, y
ε_τ	erro de truncamento
ε_n	erro de iteração
ε_π	erro de arredondamento
ε_p	erro de programação
ϕ	solução numérica da variável genérica
ϕ_∞	solução numérica da variável genérica extrapolada
Φ	solução exata da variável genérica
λ	solução numérica da variável dependente
λ_m	solução numérica da média de λ
λ_{UDS}	aproximação numérica de Λ com <i>UDS</i>
λ_{CDS}	aproximação numérica de Λ com <i>CDS</i>
λ_{UDS}^i	aproximação numérica da derivada de primeira ordem de Λ com <i>UDS</i>
λ_{CDS}^i	aproximação numérica da derivada de primeira ordem de Λ com <i>CDS</i>
λ_{CDS}^{ii}	aproximação numérica da derivada de segunda ordem de Λ com <i>CDS</i>
Λ	solução exata da variável dependente
Λ_m	solução exata da média de Λ
Λ^i	derivada exata de primeira ordem de Λ
Λ^{ii}	derivada exata de segunda ordem de Λ

Sumário

1. Introdução.....	20
1.1 Motivação.....	21
1.2 Tipos de Erros nos Métodos de Solução.....	24
1.3 Revisão Bibliográfica.....	28
1.4 Objetivos e Contribuições.....	30
2. Fundamentação.....	32
2.1 Modelos Matemáticos.....	32
2.2 Métodos Numéricos.....	35
2.3 Método das Diferenças Finitas.....	35
2.3.1 Formulação do problema pelo método das diferenças finitas.....	36
2.3.2 Discretização geométrica pelo método das diferenças finitas.....	36
2.3.3 Discretização matemática pelo método das diferenças finitas.....	37
2.3.4 Obtenção da solução numérica pelo método das diferenças finitas.....	37
2.4 Método dos Volumes Finitos.....	38
2.4.1 Discretização geométrica pelo método dos volumes finitos.....	39
2.4.2 Discretização matemática pelo método dos volumes finitos.....	41
2.5 Fontes de Erro das Soluções Numéricas.....	41
2.5.1 Erro de truncamento.....	42
2.5.2 Erro de iteração.....	43
2.5.3 Erro de arredondamento.....	44
2.5.4 Erro de programação.....	44
2.5.5 Erro de discretização.....	45
2.6 Estimadores de Erro.....	46
2.6.1 Estimativas <i>a priori</i>	47
2.6.2 Estimativas <i>a posteriori</i>	48
2.6.3 Estimador de Richardson.....	49
2.6.4 Estimador <i>GCI</i>	52
2.7 Ordens verdadeira, assintótica, aparente e efetiva.....	53
2.8 Série de Taylor para discretizações não-uniformes.....	55
2.9 Programação.....	56

3. Soluções Unidimensionais pelo Método das Diferenças Finitas	59
3.1 Discretizações Unidimensionais para Diferenças Finitas	59
3.2 Aproximações Numéricas para Diferenças Finitas	61
3.3 Advecção Unidimensional com Termo Fonte – Problemas 1A e 1B	63
3.3.1 Análise <i>a priori</i> da ordem do erro de discretização nos problemas 1A e 1B	65
3.3.1.1 Refino uniforme de malhas não-uniformes para o problema 1A	67
3.3.1.2 Malhas grossa e fina com PG para o problema 1A	69
3.3.2 Razão de refino de malhas	72
3.3.2.1 Resultados para malha grossa não-uniforme no problema 1A	73
3.3.2.2 Resultados para malha com $h \rightarrow 0$ no problema 1B	75
3.4 Difusão Unidimensional com Termo Fonte – Problemas 2A e 2B	78
3.4.1 Diferença central em malhas uniformes e não-uniformes	79
3.4.1.1 Resultados para malha grossa uniforme e não-uniforme no problema 2A	79
3.4.1.2 Resultados para malha com $h \rightarrow 0$ no problema 2B	80
3.5 Integral Numérica – Problemas 3A e 3B	82
3.5.1 Malhas em progressão geométrica	83
3.5.1.1 Resultados para malhas em PG no problema 3A	84
3.5.2 Intervalo de integração variável	86
3.5.2.1 Resultados para malha grossa não-uniforme no problema 3B	87
3.6 Advecção/Difusão Unidimensional – Problemas 4A e 4B	89
3.6.1 Principais discretizações empregadas na obtenção das soluções numéricas	90
3.6.2 Resultados e estimativas de erro numérico para o problema 4A	91
3.6.3 Resultados e estimativas de erro numérico para o problema 4B	94
3.7 Outros Resultados	96
3.8 Resumo do Capítulo 3	96
4. Soluções Unidimensionais pelo Método dos Volumes Finitos	98
4.1 Discretizações Unidimensionais para Volumes Finitos	98
4.2 Aproximações Numéricas para Volumes Finitos	100
4.3 Refinos de Malha para Volumes Finitos	106
4.3.1 Refino uniforme (<i>RU</i>)	106
4.3.2 Refino semi-uniforme (<i>RSU</i>)	107
4.3.3 Refino entre centros (<i>RC</i>)	108
4.3.4 Refino entre centros com F_e constante (<i>RCF</i>)	108
4.3.5 Refino aleatório (<i>RA</i>)	109

4.4	Advecção Unidimensional com Termo Fonte – Problemas 5A e 5B.....	110
4.4.1	Análise <i>a priori</i> da ordem do erro de discretização no problema 5A.....	111
4.4.1.1	Refino de malhas no problema 5A.....	112
4.4.2	Análise <i>a posteriori</i> da ordem do erro de discretização nos problemas 5A e 5B.....	113
4.4.2.1	Resultados com malha grossa uniforme no problema 5A.....	114
4.5	Advecção Difusão Unidimensional – Problemas 6A e 6B.....	116
4.5.1	Análise <i>a posteriori</i> da ordem do erro de discretização nos problemas 6A e 6B.....	118
4.5.1.1	Resultados para malha grossa não-uniforme <i>VFC</i> no problema 6A.....	118
4.5.1.2	Resultados para malha grossa não-uniforme <i>VNC</i> no problema 6B.....	119
4.5.1.3	Resultados para malha grossa não-uniforme aleatória no problema 6A.....	120
4.6	Escoamento Não-Linear Unidimensional – Problema 7.....	121
4.6.1	Refinos sucessivos de malha.....	122
4.6.1.1	Resultados com malha grossa não-uniforme <i>VFC</i> no problema 7.....	123
4.6.1.2	Resultados com malha grossa não-uniforme <i>VNC</i> no problema 7.....	124
4.7	Integral Numérica – Problema 8.....	125
4.7.1	Regra do retângulo e volumes finitos.....	126
4.7.1.1	Resultados com malhas em progressão geométrica no problema 8.....	128
4.7.2	Resultados e estimativas de erro numérico com malha não-uniforme <i>VFC</i> para o problema 8.....	129
4.7.3	Resultados e estimativas de erro numérico com malha não-uniforme <i>VNC</i> para o problema 8.....	131
4.8	Outros Resultados.....	133
4.9	Resumo do Capítulo 4.....	133
5.	Soluções Bidimensionais pelo Método das Diferenças Finitas.....	135
5.1	Discretizações Bidimensionais para Diferenças Finitas.....	135
5.2	Aproximações Numéricas.....	136
5.3	Difusão Bidimensional – Problema 9.....	137
5.3.1	Refinos de malha bidimensional.....	138
5.3.1.1	Resultados para malha grossa uniforme no problema 9.....	139
5.3.1.2	Resultados para malha grossa não-uniforme no problema 9.....	139
5.3.1.3	Resultados para malha grossa com progressão geométrica no problema 9.....	140
5.3.1.4	Resultados e estimativas de erro numérico para o problema 9.....	141
5.3.2	Refino direcional.....	143

5.3.2.1	Resultados e estimativas de erro numérico com refino direcional para o problema 9.....	144
5.4	Resumo do Capítulo 5.....	145
6.	Soluções Bidimensionais pelo Método dos Volumes Finitos.....	146
6.1	Discretizações Bidimensionais para Volumes Finitos.....	146
6.2	Aproximações Numéricas.....	148
6.3	Difusão Bidimensional – Problemas 10A e 10B.....	148
6.3.1	Refino direcional.....	150
6.3.1.1	Resultados para malha grossa <i>VFC</i> e <i>VNC</i> no problema 10A.....	150
6.3.2	Variável secundária local e global.....	151
6.3.2.1	Resultados pós-processados com malha uniforme nos problemas 10A e 10B.....	152
6.3.2.2	Resultados pós-processados com malha não-uniforme nos problemas 10A e 10B.....	154
6.4	Advecção Difusão Bidimensional – Problema 11.....	155
6.4.1	Variáveis primária, secundária local e secundária global.....	157
6.4.1.1	Resultados e estimativas de erro numérico com malha uniforme para o problema 11.....	158
6.4.1.2	Resultados e estimativas de erro numérico com malha não-uniforme para o problema 11.....	161
6.5	Outros Resultados.....	163
6.6	Resumo do Capítulo 6.....	164
7.	Conclusão.....	165
8.	REFERÊNCIAS.....	169
APÊNDICE A	– Tabelas do Capítulo 3.....	174
APÊNDICE B	– Tabelas do Capítulo 4.....	178
APÊNDICE C	– Tabelas do Capítulo 5.....	181
APÊNDICE D	– Tabelas do Capítulo 6.....	183
APÊNDICE E	– Trabalhos Publicados.....	185
E.1	Sobre a definição da razão de refino de malhas unidimensionais não-uniformes.....	185
E.2	On the grid refinement ratio for one-dimensional advective problems with nonuniform grids.....	199
E.3	Efeito do tipo de refino de malhas não-uniformes de volumes finitos sobre a ordem efetiva do erro de discretização.....	208

1. Introdução

A simulação numérica de problemas de engenharia ocupa atualmente uma posição de destaque no cenário mundial de pesquisa e desenvolvimento de novas tecnologias. O crescente interesse, tanto no meio acadêmico como no setor industrial pela modelagem dos fenômenos físicos, associado ao crescimento exponencial da tecnologia da informática, desencadeou nas últimas décadas uma enorme procura pelas técnicas de simulação. Neste contexto surgiu a dinâmica dos fluidos computacional (*CFD*), que é uma área do conhecimento que trata da solução de problemas de dinâmica dos fluidos através de métodos numéricos. Segundo Fortuna (2000), o objetivo básico em *CFD* é reduzir o número de experimentos e explorar fenômenos que não poderiam ser estudados em laboratório. Sabe-se que, em alguns casos, a solução numérica induz a observação de características do escoamento não antes percebidas nos experimentos, como por exemplo, no estudo da turbulência e da aerodinâmica.

Neste contexto, muitos problemas em engenharia têm seus modelos matemáticos resolvidos numericamente, e a confiabilidade do resultado numérico é um dos principais desafios do analista numérico. Na literatura, poucos são os trabalhos que indicam uma metodologia segura para que, de posse de uma solução numérica, o analista garanta certa confiabilidade do resultado numérico. O presente trabalho contribui para reverter este quadro, estabelecendo parâmetros e referências para uma análise numérica confiável.

Neste capítulo é feita uma apresentação geral deste trabalho. Inicialmente é feita a motivação do tema e em seguida são apresentados alguns conceitos teóricos necessários para a continuidade do texto. Posteriormente é apresentada uma revisão bibliográfica sobre o tema e ao final são descritos os objetivos do trabalho.

1.5 Motivação

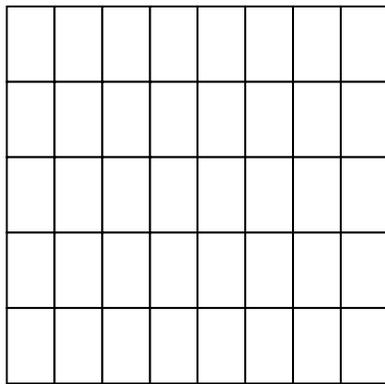
Aplicando-se um método numérico a um modelo matemático que represente um fenômeno físico real, obtém-se uma simulação ou solução numérica. Assim como no resultado experimental, a solução numérica apresenta certo nível de erro, que é causado pelo emprego de alguma aproximação numérica no modelo matemático. No caso dos métodos numéricos, este erro é de difícil determinação e muitas vezes só é possível calcular uma estimativa deste erro, chamada por Mehta (1996) de incerteza da solução numérica. Portanto, neste trabalho, o erro numérico estimado será denominado de “incerteza” da solução numérica.

Desta forma, a credibilidade do resultado numérico fica condicionada à precisão com que se calcula esta incerteza. Atualmente, existe um grande esforço da comunidade científica para melhorar a credibilidade das soluções numéricas, introduzindo nos métodos numéricos procedimentos que avaliem com mais acurácia as incertezas presentes nos resultados numéricos. Segundo diversos pesquisadores (Roache, 1994; Marvin 1995; Oberkampf e Blottner, 1998), uma das tendências em *CFD* é a busca de padrões para quantificar a incerteza de soluções numéricas. Pois, a simples apresentação de resultados em gráficos visando comparar o desempenho de modelos numéricos diferentes, sem as suas respectivas incertezas, pode levar a conclusão precipitada e equivocada do resultado (Marchi, 2001).

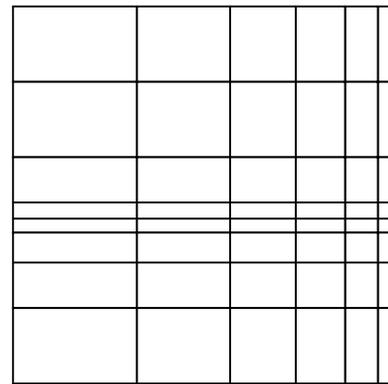
Outra tendência em *CFD* é o emprego de malhas não-estruturadas para a discretização de domínios arbitrários, cada vez mais comuns nos problemas de engenharia (Venkatakrishnan, 1996). A discretização de domínios irregulares em uma malha única e de qualidade sempre representou uma dificuldade no uso dos métodos numéricos, principalmente quando um refinamento local se faz necessário.

No caso de geometrias complexas, irregulares ou arbitrárias, a alternativa mais difundida é subdividir o domínio e resolver o problema em blocos acoplados, usando a técnica de multiblocos. Esta técnica requer uma eficiente interação entre as interfaces comuns aos blocos durante a solução do problema, o que pode representar uma dificuldade a mais para a convergência numérica. Muitos simuladores comerciais fazem uso desta técnica para mapeamento de geometrias arbitrárias, e a principal desvantagem em relação à discretização em malha única pode ser o aumento do tempo computacional usado para a obtenção da solução numérica.

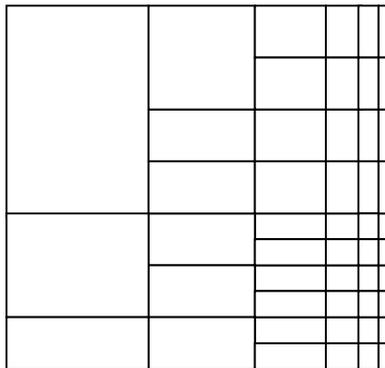
Como alternativa existe a possibilidade de mapear a geometria em uma malha única e não-estruturada. Neste caso, a malha gerada possui grande versatilidade permitindo refinamentos locais e fácil adaptação ao contorno. Muitos desenvolvimentos têm sido feitos neste sentido e várias formulações surgiram para abordar este problema (Baliga e Patankar, 1980; Schneider e Raw, 1987; Taniguchi e Kobayashi, 1991; Mathur e Murthy, 1997). Porém, a geração de uma malha única não-estruturada pode representar uma dificuldade a mais no processo de obtenção da solução numérica, razão pela qual não se recomenda o uso indiscriminado de malhas não-estruturadas, principalmente nos casos de domínios regulares. A Figura 1.1 ilustra alguns exemplos de malhas que são empregadas para a discretização de domínios regulares e irregulares.



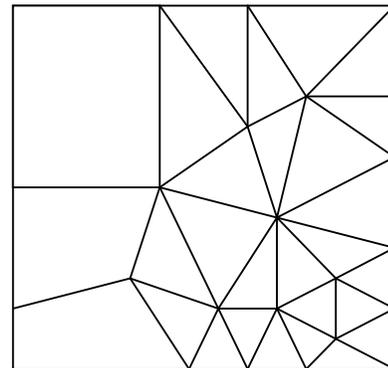
(a) estruturada e uniforme



(b) estruturada e não-uniforme



(c) estruturada por blocos e não-uniforme



(d) não-estruturada e não-uniforme

Figura 1.1 – Exemplos de malhas.

Estas malhas são: estruturadas, uniformes, não-uniformes e não-estruturadas. Define-se como uma malha não-uniforme, aquela em que os tamanhos dos elementos que a compõem variam aleatoriamente, e ainda, define-se como uma malha não-estruturada, aquela em que não existe uma lei de formação entre os elementos que compõem a malha.

Para um domínio regular, não se justifica o emprego de malhas não-estruturadas, sob pena de um aumento considerável da capacidade computacional requerida para a obtenção da solução numérica. Antes de se empregar diretamente uma malha não-estruturada, é necessário verificar se o problema pode ser bem resolvido empregando-se uma malha regular. Assim, as malhas estruturadas e uniformes, como na Figura 1.1.a, devem ter preferência sobre as malhas não-uniformes e/ou não-estruturadas, representadas nas Figuras 1.1.b, 1.1.c e 1.1.d, pois, para um mesmo método numérico, os algoritmos empregados no primeiro caso consomem menos recursos computacionais.

Ainda no caso de uma geometria regular, dependendo do estudo numérico realizado, pode ser necessário um refino local na malha. Neste caso, pode-se empregar uma malha estruturada e não-uniforme, como ilustrado na Figura 1.1.b.

Como citado anteriormente, para uma geometria complexa, nem sempre é possível mapear o domínio com uma malha estruturada e única. Neste caso, o mapeamento em malha única e coincidente com a fronteira pode ser obtido com o emprego de uma malha não-estruturada, como representado na Figura 1.1.d, que é bastante versátil e permite refinamento local.

Para se ter uma comparação inicial sobre o processamento de informações nestas malhas pode-se verificar que, no caso da malha representada na Figura 1.1.a, será suficiente para definir a malha o tamanho e o número de elementos em cada direção coordenada, ou seja, 4 valores. Já no caso da malha representada na Figura 1.1.b, pode-se definir a malha com uma PG para cada direção coordenada, ou, dois vetores que armazenem os comprimentos dos elementos da malha em cada direção coordenada. Para a malha não-estruturada representada na Figura 1.1.d, precisa-se, por exemplo, armazenar as coordenadas de todos os nós da malha e como estes nós estão conectados. Neste caso, o número de informações armazenadas e processadas durante a obtenção da solução numérica é bem maior que na malha da Figura 1.1.a.

A deficiência e a falta de padrões para a análise de erro numérico são abrangentes para todas as malhas apresentadas na Figura 1.1, mas se mostram mais intensas nos casos de soluções numéricas empregando malhas não-estruturadas. Isto acontece por dois motivos principais: i) as análises de erro numérico feitas com soluções obtidas em malhas

estruturadas e uniformes são mais simples do que as análises de erro numérico feita com soluções obtidas em malhas não-uniformes e não-estruturadas devido a sua natureza geométrica (Marchi, 2001; Suero, 2006); ii) o cálculo da incerteza das soluções numéricas obtidas em malhas não-estruturadas tem fraca credibilidade por existirem poucos estudos específicos do comportamento do erro numérico neste tipo de malha, apontando para divergentes conclusões (Ferziger e Peric, 2001; Santos *et al.*, 1996; Strauss *et al.* 1999).

Sabe-se que é crescente o uso de malhas não-estruturadas e/ou não-uniformes nos métodos numéricos de diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos, que compõem a dinâmica dos fluidos computacional, e são poucos os trabalhos da literatura que visam determinar as incertezas das soluções numéricas. Desta forma, surge a necessidade de se conhecer mais detalhadamente o comportamento do erro numérico, primeiramente em malhas não-uniformes, e posteriormente em malhas não-estruturadas.

O interesse neste texto, portanto, do ponto de vista da mecânica dos fluidos computacional, é estimar o erro numérico quando se empregam malhas não-uniformes para a discretização de domínios arbitrários, como representado na Figura 1.1.b. Assim, o presente trabalho é baseado no estudo da incerteza de soluções numéricas bidimensionais em malhas não-uniformes, nos problemas advectivo/difusivos de *CFD*.

Este texto traz inicialmente alguns conceitos sobre erros em soluções numéricas, uma revisão bibliográfica sobre como está atualmente o estudo das incertezas numéricas em *CFD* e os objetivos gerais e específicos deste trabalho. A revisão bibliográfica se estende pelo Capítulo 2, com a apresentação da fundamentação teórica e dos conceitos necessários para o entendimento do trabalho. Os Capítulos 3 e 4 apresentam os modelos matemáticos e resultados unidimensionais obtidos com o método das diferenças finitas e com o método dos volumes finitos, e os Capítulos 5 e 6 apresentam os modelos matemáticos e resultados bidimensionais também usando o método das diferenças finitas e volumes finitos. Por fim, o Capítulo 7 apresenta a conclusão do trabalho. Paralelamente ao desenvolvimento deste texto, foram publicados artigos referentes aos resultados parciais desta pesquisa. Estes trabalhos estão disponíveis nos apêndices E1, E2 e E3.

1.6 Tipos de Erros nos Métodos de Solução

Dentre alguns métodos que podem ser empregados na solução de um problema podemos destacar três: métodos experimentais, métodos analíticos e métodos numéricos.

Os métodos analíticos e numéricos também são denominados métodos teóricos (Maliska, 1995) porque ambos trabalham com modelos matemáticos. Cada um deles apresenta vantagens e desvantagens sobre os demais dependendo do problema e dos recursos disponíveis para resolvê-lo. Normalmente, os métodos experimentais demandam maior custo para serem aplicados quando comparados aos métodos teóricos, porque demanda a compra de equipamentos e espaço para instalações.

Optando-se pelo método teórico, é necessária inicialmente a definição de um modelo matemático para o problema, e posteriormente obtém-se a solução analítica ou a solução numérica. Assim sendo, observa-se que a solução de um problema pode apresentar três tipos de erros: erro experimental, erro de modelagem e erro numérico, que estão ilustrados na Figura 1.2. Para cada método de solução empregado, é maior ou menor a incidência de um tipo de erro. Ignorar a presença destes erros durante o processo de solução do problema compromete a correta interpretação dos resultados obtidos.

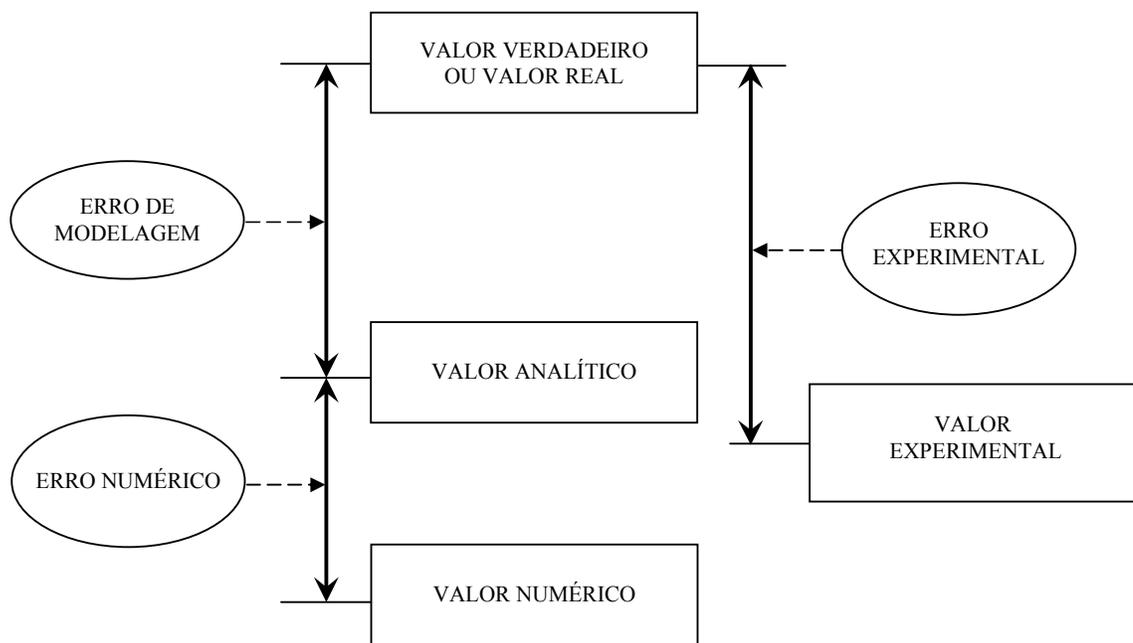


Figura 1.2 – Erros envolvidos nos métodos da engenharia (adaptado de Marchi, 2001).

O erro experimental é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e o seu resultado experimental (ABNT, 1997; ISO, 1993). Este erro é causado basicamente pelas dificuldades de controle dos parâmetros do experimento e pelo uso de

equipamentos de medição ou modelos em escala. Como exemplo, considere um experimento em que uma vibração indesejada e inevitável influencie a medição de uma grandeza, e ainda, que o sensor que mede o valor desta grandeza gere algum tipo de ruído no sinal medido. Neste caso, em geral, o valor verdadeiro é desconhecido e, portanto, consegue-se apenas estimar o valor do erro experimental. Este valor estimado é denominado incerteza, e o processo que o quantifica, análise de incerteza. Formas de quantificar a incerteza de resultados experimentais podem ser vistas nas normas ABNT (1997), AIAA (1995) e ISO (1993).

O erro de modelagem é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse, ocorrido no fenômeno real, e o valor obtido na solução analítica ou na solução numérica (Ferziger e Peric, 2001; Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998; Marchi e Silva 2005). Novamente, em geral, o valor verdadeiro é desconhecido e, portanto, consegue-se apenas estimar o valor do erro de modelagem. Isso é feito através da comparação das soluções analíticas e numéricas com os resultados experimentais. O erro de modelagem é causado pelas simplificações feitas sobre o fenômeno real, chamadas hipóteses simplificadoras, durante a concepção dos modelos matemáticos. Como exemplo considere a aplicação de um modelo matemático de queda livre que não considere a resistência do ar para objetos com diferentes relações entre volume e peso. O processo que quantifica este tipo de erro é denominado por Oberkampf e Blottner (1998), Roache (1998), AIAA (1998); Marchi (2001) e Roy *et al.* (2003) de validação. Em resumo, o objetivo da validação é determinar em que medida um modelo matemático representa um determinado fenômeno real.

O erro numérico ou erro da solução numérica (E) (Ferziger e Peric, 2001) é a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse, e a sua solução numérica (ϕ), dado por

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (1.1)$$

O erro numérico é causado por quatro fontes de erro (Marchi, 2001; Ferziger e Peric, 2001; Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998; Tannehill *et al.*, 1997; Celik e Zhang, 1995) que serão estudadas posteriormente: erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação. A solução numérica ideal é igual a solução analítica exata do problema, ou seja, é aquela em que o erro numérico é nulo.

O processo que quantifica o erro numérico é denominado por Oberkampf e Blottner (1998), Roache (1998), AIAA (1998); Marchi (2001) e Roy *et al.* (2003) de verificação. O objetivo da verificação é determinar em que medida um modelo matemático é resolvido adequadamente através de um método numérico. Note que, dentro destas definições, uma solução numérica verificada com a solução analítica, não estará obrigatoriamente validada, a menos que o modelo matemático não possua erro em relação à solução verdadeira do fenômeno.

O valor do erro numérico independe de resultados experimentais, mas só pode ser obtido quando a solução analítica de um modelo matemático é conhecida. Porém, em termos práticos, isto é, para soluções numéricas de modelos matemáticos cuja solução analítica é desconhecida, não é possível calcular o erro numérico. Nestes casos é necessário estimar qual seria o valor da solução analítica. Assim, em vez do erro numérico calcula-se o erro estimado que também é chamado incerteza (U) (Mehta, 1996; Marchi e Silva 2002). A incerteza da solução numérica de uma variável de interesse é avaliada pela diferença entre a sua solução analítica estimada (ϕ_{∞}) e a própria solução numérica (ϕ)

$$U(\phi) = \phi_{\infty} - \phi \quad (1.2)$$

A incerteza é normalmente calculada com os estimadores de erros que serão estudados posteriormente, como por exemplo: de Richardson e GCI (Roache, 1998).

A magnitude aceitável do erro numérico depende de três fatores: finalidade, tempo e recursos. Dependendo da finalidade da solução numérica, pode-se aceitar um maior ou menor erro numérico. Por exemplo, na concepção de um aerofólio, o erro numérico pode ser menor no pré-projeto do que no projeto definitivo. O tempo disponível para realização das simulações também determina a magnitude do erro numérico. No caso de previsões das condições atmosféricas, a velocidade no processamento das informações é fundamental para a divulgação em tempo hábil dos resultados, forçando eventualmente a aceitação de um maior erro numérico. Por fim, a capacidade computacional instalada determina a velocidade e a quantidade de informações que poderão ser processadas para a obtenção da solução numérica, modificando a magnitude aceitável do erro numérico. No estudo da combustão, por exemplo, quando se dispõe de um *cluster* de máquinas, pode-se simular modelos matemáticos mais complexos, que envolvem um número maior de reações químicas, diminuindo o erro numérico obtido em modelos com menos equações.

O erro numérico pode comprometer a credibilidade da solução numérica obtida, mas também pode ser um importante parâmetro de controle do processo de simulação. Segundo Marchi (2001) o erro numérico pode: i) estar acima do aceitável, comprometendo a confiabilidade do uso da solução numérica; ii) estar abaixo do aceitável, desperdiçando os recursos computacionais; iii) ser usado como parâmetro para validar e desenvolver modelos matemáticos, ou para otimizar o uso da malha através da homogeneização do erro, como no caso das malhas adaptativas.

Como pode-se observar, é significativa a importância que a análise do erro numérico tem sobre as soluções numéricas e o potencial de aplicação que ela reserva. O uso de malhas não-uniformes e não-estruturadas na discretização de domínio arbitrários reforça a necessidade de se avaliar o erro numérico com mais precisão (Roache, 1998; Schneider e Marchi, 2005).

1.7 Revisão Bibliográfica

Na área da dinâmica dos fluidos computacional (*CFD*) geralmente não se apresentam as incertezas das soluções numéricas (Celik *et al.*, 1993; Douglass e Ramshaw, 1994). Segundo Freitas (1993), Celik (1993), Mehta (1996), Rizzi e Vos (1998) não existem padrões testados e confiáveis para efetuar o processo de verificação em *CFD*, o que existe são propostas pouco estudadas (Oberkampf e Blottner, 1998; AIAA, 1998) e de nomenclatura incompatível. A principal divergência está nas definições e empregos dos termos verificação, validação e incerteza, no âmbito das soluções numéricas (Celik e Zhang, 1995; Blottner, 1990; Rudy *et al.*, 1991; Oreskes *et al.*, 1994; Mehta, 1996; Rizzi e Vos, 1998; Roache, 1998; AIAA, 1998).

Há pouco entendimento dos efeitos de multidimensionalidade, malhas não-uniformes e não-estruturadas, que é o foco deste trabalho, sobre os erros numéricos e o desempenho dos estimadores de erro nestes casos. Para malhas não-uniformes e não-estruturadas, por exemplo, conforme Ferziger e Peric (1999), Strauss *et al.* (1999) e Santos *et al.* (1996), são relatadas diferenças entre previsões teóricas e resultados práticos para os erros numéricos. Em Jones e Menzies (2000), a análise teórica usando série de Taylor mostra que o erro de truncamento não reduz com o refino da malha, indicando uma diferença da análise *a priori* com a solução numérica obtida.

Os procedimentos para avaliação de incertezas em malhas não-estruturadas são bastante confusos, admitem os autores (Hoffman, 1982; Santos *et al.*, 1996; Jones e Menzies, 2000), e são poucos os trabalhos efetivamente conclusivos sobre alguns aspectos da avaliação de incertezas (Marchi e Silva, 2005; Marchi e Silva, 2002; Mishev, 1997; Manteuffel e White Jr., 1986). Neste último, os autores destacam o comportamento atípico das aproximações de segunda ordem em malhas não-uniformes, citando a degeneração da ordem do erro de discretização em algumas situações particulares.

A definição de razão de refino de malha para malhas não-estruturadas difere entre os autores (Roache, 1998; Celik e Karatekin, 1997; Schneider e Marchi, 2004) e somente em Schneider e Marchi (2005; 2006) se tem um estudo mais detalhado do comportamento da ordem do erro de discretização para o método das diferenças finitas e dos volumes finitos, com soluções numéricas em vários tamanhos de malhas não-uniformes que sofreram diferentes tipos de refino. A estimativa de erro só é confiável se o refino da malha não-uniforme seguir um padrão de uniformidade qualquer (Marchi, 2001; Schneider e Marchi, 2005).

Muitos trabalhos apresentam uma análise relativa do erro de discretização (Li e Baldacchino, 1995), comparando a solução analítica exata com resultados numéricos usando esquemas de interpolação de ordens diferentes, outros trabalhos seguem direcionados para alguns tipos particulares de problemas físicos (Janssen e Henkes, 1993).

Normalmente, em oposição aos trabalhos de Marchi e Silva (2002) e Schneider e Marchi (2005), não se apresenta uma análise *a priori* do erro de discretização da variável dependente, obtida a partir da solução do sistema de equações discretizadas. O que se faz comumente é a análise isolada de uma equação discretizada e seu erro de truncamento (Santos *et al.*, 1996), não ficando demonstrada as interações entre as equações discretizadas e a propagação do erro de truncamento ponto a ponto da malha, em oposição a Marchi (2001), onde se verificam tais interações.

O que também se observa de modo geral é a necessidade de desenvolvimento de metodologias que tenham aplicações práticas da engenharia, isto é, quando se é forçado a usar malhas relativamente grossas (Douglass e Ramshaw, 1994), como por exemplo, em problemas tridimensionais. Marchi e Silva (2005) apresentam um discussão de vários aspectos do processo de verificação de soluções numéricas n-dimensionais em *CFD*, usando malhas uniformes. Roy *et al.* (2003), Roy (2003) e Morais *et al.* (2005) são exemplos recentes de validação e verificação de soluções numéricas de aplicação prática,

sendo que em Morais *et al.* (2005) as soluções numéricas são obtidas com *software* comercial pelo método dos volumes finitos.

Segundo diversos pesquisadores (Roache, 1994; Celik e Zhang, 1995; Marvin, 1995; Coleman e Stern, 1997; Oberkampf e Blottner, 1998), uma das tendências em *CFD* é a busca de padrões para quantificar a incerteza de soluções numéricas. Este tema tem sido abordado em conferências: *Stanford Conference on Complex Turbulent Flows* (Kline *et al.*, 1981) e *Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics* (Celik *et al.*, 1993). A política editorial de algumas das principais revistas em *CFD* tem contribuído para o desenvolvimento de metodologias para a quantificação das incertezas numéricas como é o caso do *Journal of Fluids Engineering* (Roache *et al.*, 1986; Freitas, 1993), *Journal of Heat Transfer* (ASME, 1994), *International Journal for Numerical Methods in Fluids* (Gresho e Taylor, 1994), *AIAA Journal* (AIAA, 1994; 1998).

Na busca por padrões de quantificação de erros numéricos pode-se destacar os trabalhos recentes de Khodier (2001), MacMasters *et al.* (2002), e outros que avaliam o erro numérico em problemas unidimensionais bastante simples (Bucther e Jackiewicz, 2003), até problemas complexos envolvendo efeitos de turbulência (Tseng e Ferziger, 2003).

Portando, é evidente a necessidade do estudo e do desenvolvimento de técnicas para quantificar as incertezas numéricas em *CFD*, visando maior confiabilidade dos resultados obtidos, garantindo a aplicabilidade destes resultados nos problemas de engenharia. Dentro deste contexto, são apresentados a seguir os objetivos e contribuições deste trabalho.

1.8 Objetivos e Contribuições

O presente trabalho tem como objetivo geral analisar *a priori* e *a posteriori* o erro de discretização de soluções numéricas uni e bidimensionais em malhas não-uniformes, nos problemas advectivo/difusivos de *CFD*, dando continuidade ao trabalho de Marchi (2001), empregando o método das diferenças finitas (*MDF*) (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 2001) e o método dos volumes finitos (*MVF*) (Patenkar, 1980; Maliska, 1995; Ferziger e Peric, 2001), contribuindo especificamente para:

- I. Analisar a ordem do erro numérico *a priori* para algumas aproximações numéricas empregadas no *MDF* e *MVF* em malhas não-uniformes, representadas na Figura 1.b, através da análise da série de Taylor (Kreyszig, 1999) de cada aproximação;
- II. Verificar o erro e a sua ordem *a posteriori* usando malhas não-uniformes através da diferença entre as soluções exata e numérica;
- III. Realizar estimativas de erro *a posteriori* usando malhas não-uniformes através da diferença entre as soluções exata e numérica;
- IV. Propor recomendações de uso e definição de parâmetros, como a razão de refino e tipo de refino recomendado em malhas não-uniformes, para aumentar a confiabilidade de alguns estimadores de erro existentes, como Richardson e GCI (Roache, 1998); e
- V. Propor soluções de referência para avaliar esquemas numéricos e analisar o erro numérico e sua ordem.

A seguir, é apresentada a fundamentação teórica com outras definições e conceitos necessários para o entendimento deste texto.

2. Fundamentação

A análise do erro numérico (E), consiste em verificar em que medida um modelo matemático é resolvido adequadamente através de um método numérico. Para iniciar esta análise ou verificação, precisa-se inicialmente selecionar modelos matemáticos que representem bem os problemas em *CFD* e descrever como estes modelos serão resolvidos numericamente. Definido o escopo, pode-se discorrer sobre que tipo de erro poderá estar presente na solução numérica, e como se pode estimar este erro.

Este capítulo destina-se a apresentar a fundamentação teórica na qual se baseia este trabalho, com a apresentação dos modelos matemáticos, métodos numéricos empregados e as fontes de erro numérico.

Por existir divergência na nomenclatura deste tema, é importante que sejam sempre observadas as definições de referência citadas anteriormente, como verificação e validação, e as que serão aqui apresentadas, como erro de truncamento e erro de discretização entre outras, evitando assim uma interpretação errônea ou equivocada deste texto.

2.1 Modelos Matemáticos

A concepção de padrões de análise de erro só é segura se verificada em modelos matemáticos com solução analítica, pois, somente neste caso é possível mensurar exatamente qual será o erro numérico, condição essencial para este tipo de estudo de base. Assim, todos os modelos matemáticos aqui resolvidos possuem solução analítica. Com esta premissa, os modelos matemáticos apresentam-se inicialmente simples, e suas condições de contorno e termos fonte, muitas vezes, se ajustam de forma a possibilitar a obtenção da solução analítica, método conhecido como método das soluções fabricadas (Khodier, 2001; Roy *et al.*, 2004).

Outro aspecto relevante para a definição dos modelos matemáticos é que as interações multidimensionais só podem ser observadas e corretamente descritas quando separadas de outros efeitos. Portanto, a análise deve iniciar por modelos unidimensionais simples e, gradativamente, evoluir para modelos mais complexos e com mais dimensões. Desta forma tem-se maior chance de se identificar os padrões de comportamento do erro numérico e definir uma sistemática de análise de erro.

Por fim, os modelos numéricos escolhidos devem representar os principais efeitos presentes nas equações dos problemas de engenharia em geral, particularmente dos problemas de dinâmica dos fluidos computacional (*CFD*). Estes efeitos incluem a advecção, a difusão, presença de termos fonte e de não-linearidades.

Com isto, os modelos matemáticos estudados e implementados neste trabalho são problemas unidimensionais e bidimensionais, advectivos e/ou difusivos, que trazem os principais efeitos encontrados nas equações de *CFD*. As equações governantes 1D e 2D que representam estes modelos são dadas por

$$\frac{d\Lambda}{dx} = S \quad (\text{advecção 1D}) \quad (2.1)$$

$$\frac{d^2\Lambda}{dx^2} = S \quad (\text{difusão 1D}) \quad (2.2)$$

$$Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2} \quad (\text{advecção difusão 1D}) \quad (2.3)$$

$$\Lambda Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2} + S \quad (\text{advecção difusão não-linear 1D}) \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial^2\Lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Lambda}{\partial y^2} = 0 \quad (\text{difusão 2D}) \quad (2.5)$$

$$Pe_x \frac{\partial\Lambda}{\partial x} + Pe_y \frac{\partial\Lambda}{\partial y} = \frac{\partial^2\Lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Lambda}{\partial y^2} + S \quad (\text{advecção difusão 2D}) \quad (2.6)$$

onde Λ é a variável dependente; x e y são as direções coordenadas ou variáveis independentes; S é um termo fonte constante ou função de x,y ou função de Λ ; Pe é o número de Peclet.

Como o objetivo do estudo é sobre o erro que a solução numérica apresenta em relação à solução analítica, é importante uma distinção simbólica clara entre a solução numérica e a solução analítica. As variáveis de interesse do problema são de três tipos: variável primária e local, variável secundária e local e variável secundária e global. A variável primária e local é a variável dependente, cuja solução analítica exata é representada por Λ , e a solução numérica representada por λ , denominadas aqui de soluções primitivas. A variável secundária e local é a derivada primeira da variável dependente, cuja solução analítica exata é representada por Λ^i , e a solução numérica é representada por λ^i , que é obtida através de algum esquema numérico. A variável secundária e global é a média da variável dependente sobre o domínio de cálculo, cuja solução analítica exata, obtida por integração, é representada por Λ_m e a solução numérica, obtida por um somatório, é representada por λ_m . Na Tabela 2.1, estão apresentadas as variáveis Λ , λ , Λ^i , λ^i , Λ_m , λ_m e sua classificação.

Tabela 2.1 – Classificação das variáveis de interesse.

Variável dependente		Classificação		
Analítica exata (Φ)	Numérica (ϕ)	em relação a Λ ou λ	em relação a x, y	em relação à forma de obtenção
Λ	λ	primária	local	solução primitiva
Λ^i	λ^i	secundária	local	derivada
Λ_m	λ_m	secundária	global	integral

As variáveis Λ , λ , Λ^i , λ^i são locais porque seus valores dependem de cada coordenada x ou y , enquanto que Λ_m , λ_m são globais porque são calculadas na extensão do domínio. As variáveis Λ , Λ^i e Λ_m são todas obtidas por expressões analíticas, enquanto que a variável primária λ é obtida diretamente da solução numérica, e as variáveis secundárias λ^i , λ_m são obtidas com pós-processamento da solução numérica. A seguir, são apresentadas as formas de se obter a solução numérica (λ) para os problemas em *CFD*.

2.2 Métodos Numéricos

A solução numérica (λ) é obtida através de um método numérico. Um método numérico em *CFD* tem como objetivo resolver uma ou mais equações diferenciais substituindo os termos existentes nas equações por expressões algébricas envolvendo a variável primária e local (λ) (Maliska, 1995). Isto é feito de forma discreta, ou seja, em um número finito de pontos do domínio. Espera-se que, quanto maior o número de pontos do domínio escolhido para se conhecer o valor de (λ), menor seja a diferença entre o valor de (λ), obtido numericamente, e seu valor exato (Λ), isto é, menor se apresente o erro numérico.

Em *CFD*, é extremamente importante que as equações de conservação sejam satisfeitas para que a solução do escoamento esteja correta. Um método numérico que atende a este requisito é o Método dos Volumes Finitos (*MVF*) (Maliska, 1995; Ferziger e Peric, 2001). O *MVF* é um método que teve sua origem no Método das Diferenças Finitas (*MDF*) (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 2001), que é baseado em aproximações obtidas da série de Taylor (Kreyszig, 1999).

A série de Taylor é a base para todas as aproximações numéricas usadas no *MDF* e no *MVF*. Quando se usa uma aproximação numérica extraída da série de Taylor, pode-se observar *a priori* qual é o erro desta aproximação. Na verificação de soluções numéricas que usam o *MDF* e o *MVF*, o principal desafio é estabelecer um procedimento de análise de erro correto, baseado nas aproximações numéricas empregadas em conjunto com a discretização adotada. Primeiramente, o estudo apresentado neste trabalho é baseado no *MDF* e suas aproximações oriundas da série de Taylor. Após se estabelecer alguns padrões de comportamento da ordem do erro numérico no *MDF*, é feito um estudo de análise da ordem do erro para o *MVF*. A seguir são apresentados estes dois métodos, *MDF* e *MVF*, que são empregados na obtenção das soluções numéricas (λ) deste trabalho.

2.3 Método das Diferenças Finitas

O primeiro método numérico empregado neste trabalho para a obtenção das soluções numéricas é o Método das Diferenças Finitas (*MDF*) (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 1999) que, basicamente, consiste em obter aproximações para os termos

dos modelos matemáticos usando a série de Taylor (Kreyszig, 1999). A obtenção da solução numérica pelo *MDF* pode ser separada nas seguintes tarefas:

- formulação do problema;
- discretização geométrica com nós;
- discretização matemática; e
- obtenção da solução numérica.

Os Capítulos 3 e 5 deste trabalho são destinados a obtenção das soluções numéricas unidimensionais e bidimensionais usando o *MDF*, e neles são vistos os detalhes destas implementações. A seguir, tem-se, em linhas gerais, uma noção de cada etapa que compõe a solução numérica pelo *MDF*.

2.3.1 Formulação do problema pelo método das diferenças finitas

A formulação do problema é obtida com a definição do modelo matemático e de suas condições de contorno e iniciais, das propriedades dos materiais e da geometria do domínio de cálculo.

Neste trabalho, os termos fonte dos modelos matemáticos (Eqs. 2.1 a 2.6) são definidos de modo que a solução analítica do problema é conhecida e os valores das propriedades do meio são definidas pelo número *Pe*. As geometrias unidimensionais são, na maioria, de comprimento unitário, e as bidimensionais quadradas de lado unitário. A razão para tal está na conveniência de se padronizar e adimensionalizar resultados.

2.3.2 Discretização geométrica pelo método das diferenças finitas

A discretização geométrica ou discretização do domínio de cálculo para o *MDF* é feita com a geração de uma malha sobre o domínio, que consiste em um conjunto (*N*) de nós sobre os quais a solução numérica é obtida. Na Figura 2.1, estão representados exemplos de discretizações.

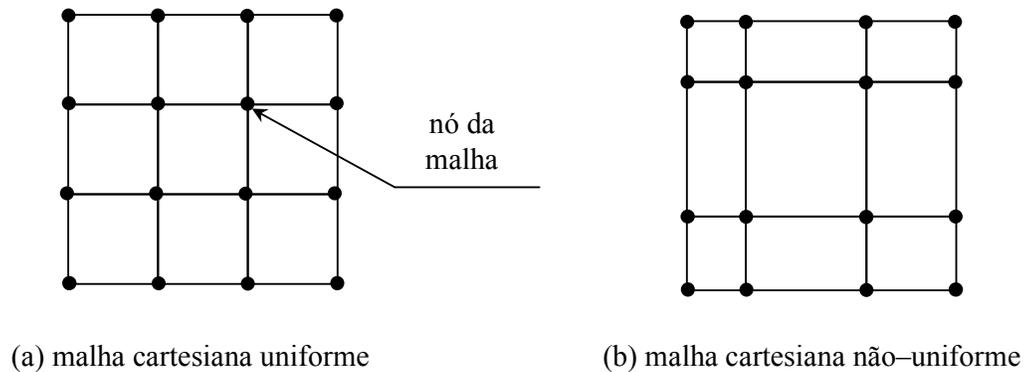


Figura 2.1 – Exemplos de discretização para diferenças finitas.

Para este trabalho, a discretização usada foi a representada pelas Figuras 2.1.a e 2.1.b, que, como citado anteriormente, estão mais bem detalhadas nos Capítulos 3 e 5.

2.3.3 Discretização matemática pelo método das diferenças finitas

A discretização matemática ou discretização do modelo matemático é obtida com a aproximação numérica dos termos das equações do modelo matemático e suas condições de contorno e iniciais em cada nó da malha, formando o conjunto de equações discretizadas denominado sistema de equações algébricas.

Na etapa de discretização do modelo matemático, o *MDF* usa expressões algébricas obtidas da série de Taylor para aproximar cada termo da equação diferencial. Os termos envolvendo derivada de primeira ou segunda ordem podem ser aproximados por diferentes aproximações numéricas extraída da serie de Taylor. Estas alternativas de aproximação numérica são chamadas também de esquemas de interpolação numérica e serão vistos mais adiante.

2.3.4 Obtenção da solução numérica pelo método das diferenças finitas

Para a obtenção da solução numérica, deve-se resolver direta ou iterativamente (Ferziger e Peric, 1999; Patankar, 1980; Maliska, 1995) o sistema de equações algébricas originado na discretização do modelo matemático.

O método direto deve ter prioridade sobre o método iterativo em duas situações: quando é necessária a solução exata do sistema de equações sem erros de iteração, e principalmente, quando o tempo de computação é menor ou igual ao executado quando usado o método iterativo.

Um método direto muito difundido na literatura para solução de matrizes tridiagonais é o *TriDiagonal Matrix Algorithm (TDMA)* (Ferziger e Peric, 2001; Maliska, 1995). Este método é bastante adequado para resolução de sistemas lineares obtidos na discretização dos problemas unidimensionais representados pelas Eqs. (2.1 a 2.4).

No caso de problemas bidimensionais em malhas cartesianas, que geram matrizes pentadiagonais, um método iterativo combinando o método *TDMA* em duas direções é o *Alternating Direction Implicit (ADI)* (Ferziger e Peric, 2001; Maliska, 1995).

Neste trabalho, a solução direta *TDMA* foi usada nos problemas unidimensionais e a solução iterativa *ADI* foi usada nos problemas bidimensionais. Nesta última, a solução foi computada até que o erro de máquina fosse atingido.

2.4 Método dos Volumes Finitos

O segundo método numérico tratado neste trabalho é o método dos volumes finitos (*MVF*) (Patankar, 1980, Maliska, 1995; Ferziger e Peric, 2001). O fundamento básico no *MVF* é obter as equações aproximadas através de balanços da variável primária local (λ) nos volumes de controle, decorrentes da discretização do domínio de cálculo. Como no *MDF*, a obtenção da solução numérica pelo *MVF* pode ser separada também nas seguintes tarefas:

- formulação do problema;
- discretização geométrica com volumes;
- discretização matemática; e
- obtenção da solução numérica.

A etapa de formulação do problema e obtenção da solução numérica em volumes finitos é idêntica à feita para diferenças finitas. A distinção entre estes dois métodos, *MDF* e *MVF*, está na discretização geométrica e na discretização matemática.

Os Capítulos 4 e 6 deste trabalho são destinados as soluções numéricas usando o *MVF*, e neles são vistos os detalhes destas implementações. A seguir, tem-se, em linhas gerais, uma noção das etapas de discretização geométrica e discretização matemática que compõem a solução numérica pelo *MVF*.

2.4.1 Discretização geométrica pelo método dos volumes finitos

No caso de volumes finitos, é gerada uma malha sobre o domínio que consiste em um conjunto (N) de volumes de controle sobre os quais a solução numérica é obtida. As Figuras 2.2.a e 2.2.b mostram que, para uma discretização em malhas cartesianas e não-uniformes, a discretização por volumes finitos permite duas situações para os volumes que contêm a fronteira: volume inteiro ou meio volume.

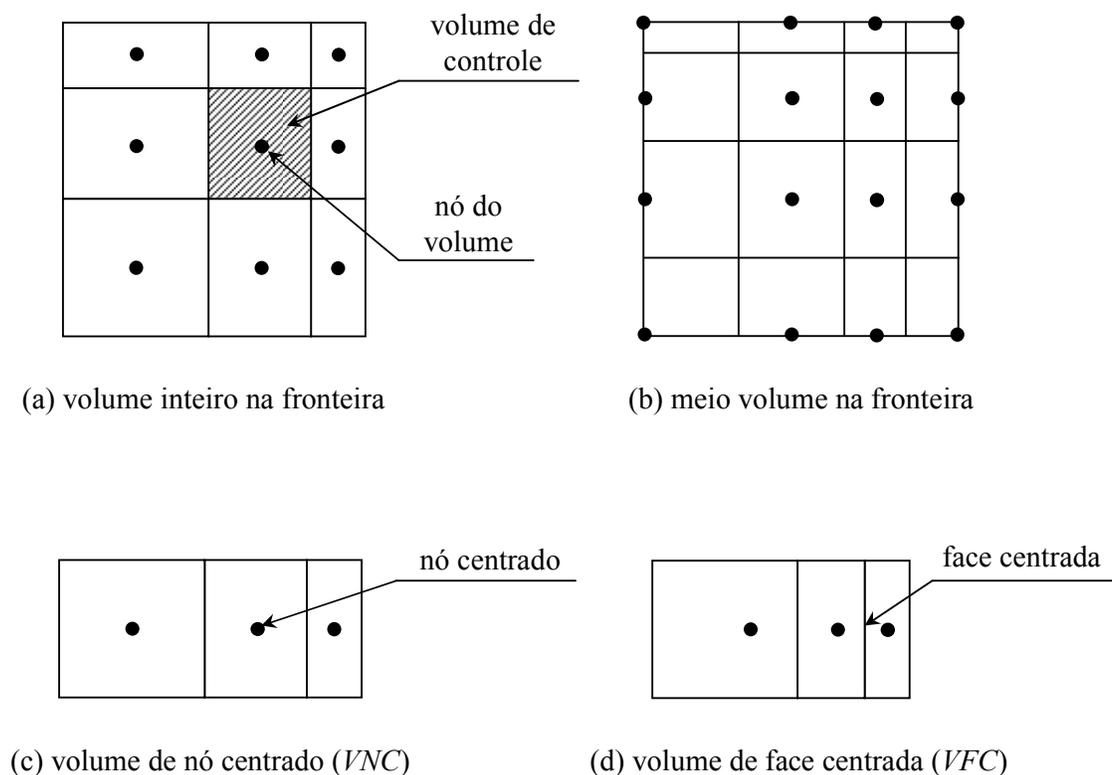


Figura 2.2 – Discretizações cartesianas e não-uniformes para volumes finitos.

Do ponto de vista da implementação das condições de contorno, o segundo caso é mais fácil de ser implementado, uma vez que os nós dos volumes estão sobre a fronteira, Fig. 2.2.b, permitindo aplicação direta de condições de contorno do tipo Dirichlet (λ prescrito) (Patankar, 1980). Este mesmo caso, Fig. 2.2.b, não é muito aceito quando equações de conservação devem ser satisfeitas, pois, não existem equações de balanço para os volumes de fronteira, o que causa um erro indesejável na solução numérica.

Quando se tem volumes inteiros sobre a fronteira, como é o caso da Fig. 2.2.a, o problema da não conservação de propriedades nestes volumes é eliminado. Porém, fica mais difícil a aplicação das condições de contorno, uma vez que as equações de balanço destes volumes deverão seguir uma lógica à parte. Neste caso, para diminuir este esforço computacional, pode-se empregar a técnica de volumes fictícios para aplicação das condições de contorno, porém, esta técnica não será empregada neste trabalho para evitar especulações.

Pelas Figuras 2.2.c e 2.2.d, observa-se que os volumes de controle podem ser construídos, em relação a sua geometria, de duas formas (Patankar, 1980): com os nós centrados entre as faces do volume (*VNC* – volume de nó centrado) ou com as faces centradas entre os nós (*VFC* – volume de face centrada). Em uma malha do tipo *VNC*, como a representada na Figura 2.2.c para o caso unidimensional, os nós dos volumes estão localizados no centro geométrico do volume. Para uma malha do tipo *VFC*, as faces dos volumes estão localizadas no ponto médio do segmento que liga dois nós consecutivos, conforme representado na Figura 2.2.d.

Comparando a construção dos volumes de nó centrado e de face centrada, o primeiro caso (*VNC*), Fig. 2.2.c, parece ser mais natural, pois, é mais fácil admitir que no centro do volume esteja armazenado o valor da variável de interesse, seja por uma questão de simetria ou simplesmente porque este valor deve ser representativo para todo o volume.

Quando observamos as posições das faces, o segundo caso (*VFC*), Fig. 2.2.d, pode ser mais atraente do ponto de vista numérico, pois, a face sempre esta no ponto médio do segmento que une dois nós vizinhos, que, como se sabe, facilita a aplicação de algumas aproximações numéricas.

Neste trabalho são implementadas as configurações de discretização geométrica presentes na Figura 2.2, tanto para os problemas unidimensionais como para bidimensionais, isto é, fronteira com meio volume e volume inteiro e volumes com nó centrado e com face centrada. Detalhes podem ser vistos nos Capítulos 4 e 6.

2.4.2 Discretização matemática pelo método dos volumes finitos

Discretização matemática para o *MVF* (Ferziger e Peric, 2001; Maliska, 1995) consiste na integração das equações diferenciais que compõe o modelo matemático sobre os volumes de controle e posterior aproximação numérica dos termos resultantes e suas condições de contorno e iniciais, formando o conjunto de equações discretizadas denominado sistema de equações algébricas.

A integração das equações no volume de controle em combinação com o teorema da divergência de Gauss (Kreyszig, 1999) resulta em integrais de superfície envolvendo as variáveis de interesse. Funções de interpolação são usadas para escrever os balanços das propriedades no contorno em função das propriedades armazenadas nos centros dos volumes.

Desta forma, para cada propriedade armazenada no centro de um volume tem-se uma equação algébrica que relaciona esta propriedade com as propriedades armazenadas no centro dos volumes vizinhos. Nos capítulos 4 e 6 são vistos os detalhes destas implementações.

2.5. Fontes de Erro das Soluções Numéricas

Como visto na seção 1.2, o erro numérico (E) é causado por diversas fontes de erro: erros de truncamento (ε_τ), erros de iteração (ε_n), erros de arredondamento (ε_π) e erros de programação (ε_p). Assim, pode-se escrever

$$E(\phi) = E(\varepsilon_\tau, \varepsilon_n, \varepsilon_\pi, \varepsilon_p) \quad (2.7)$$

Essas quatro fontes de erro podem ter magnitudes e sinais diferentes, podendo haver cancelamentos parciais ou totais entre esses erros. A descrição destas fontes de erro é apresentada a seguir.

2.5.1 Erro de truncamento

O erro de truncamento (ε_τ) de uma equação diferencial é o resíduo que resulta quando se substitui a solução analítica exata da variável dependente (Λ) na equação discretizada do modelo matemático. Formalmente, ele é igual ao valor negativo do operador numérico aplicado à solução analítica exata da variável dependente (Λ) (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 1999; Roache, 1998).

Conhecendo-se a solução analítica exata da variável dependente (Λ), o valor do erro de truncamento pode ser obtido substituindo a variável dependente (Λ) em termos da série de Taylor (Kreyszig, 1999) para os nós que estão envolvidos na equação discretizada, exceto para o próprio nó j . Com isso, a equação geral do erro de truncamento unidimensional de uma equação diferencial ou de uma aproximação numérica qualquer, admitindo inicialmente um espaçamento uniforme (h) entre os nós, pode ser representada por (Ferziger e Peric, 1999; Marchi, 2001)

$$\varepsilon_\tau(\phi) = c_1 h^{p_L} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + c_4 h^{p_4} + \dots \quad (2.8)$$

onde os coeficientes c_i podem ser positivos ou negativos e podem ser função da variável dependente (Λ) e de suas derivadas, isto é, podem variar com a coordenada x , mas independem do tamanho (h) dos elementos da malha. Isto fica claramente posto quando se observa a série de Taylor, que possui termos com coeficientes semelhantes a c_i .

Por definição, as ordens verdadeiras (p_i) são os expoentes de h dos termos não-nulos na equação do erro de truncamento. No caso da Eq. (2.8) são dados por p_L , p_2 , p_3 e p_4 . As ordens verdadeiras seguem a relação $p_L < p_2 < p_3 < p_4 < \dots$. São números inteiros positivos que geralmente constituem uma série aritmética, isto é, a diferença entre ordens subsequentes é constante. Para um caso geral, o número de ordens verdadeiras é infinito pois o erro de truncamento (ε) é constituído por uma quantidade infinita de termos não-nulos.

E ainda, o menor expoente de h na equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.8), é chamado de ordem assintótica (p_L). É um número inteiro positivo e satisfaz a condição $p_L \geq 1$. Quando o tamanho (h) dos elementos da malha tende a zero, ou seja, $h \rightarrow 0$, o primeiro termo do erro de truncamento é o principal componente, isto é, ele domina o valor

total de ε . Conhecer a ordem do erro numérico permite a avaliação da redução do erro em função do tamanho h dos elementos da malha.

2.5.2 Erro de iteração

O erro de iteração (ε_n) é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica (λ) em uma determinada iteração (Ferziger e Peric, 1999). As equações discretizadas resultam da aplicação de um modelo numérico sobre um modelo matemático, conforme visto nos itens 2.3 e 2.4. Matematicamente, tem-se

$$\varepsilon_n(\lambda_j) = \lambda_{j,k \rightarrow \infty} - \lambda_{j,k} \quad (2.9)$$

onde k representa o número da iteração corrente no processo de solução do sistema de equações algébricas, gerado pelas equações discretizadas do modelo matemático. O símbolo ' $k \rightarrow \infty$ ' é usado para representar a solução exata das equações discretizadas. O processo iterativo surge no modelo numérico devido:

- ao emprego de métodos iterativos para resolver o sistema de equações algébricas, como o método Jacobi (Ferziger e Peric, 1999), que resolve as equações explicitamente;
- ao uso de métodos segregados na obtenção da solução de modelos matemáticos com mais de uma equação diferencial, como *SIMPLE* (Ferziger e Peric, 1999; Maliska, 1995);
- a existência de não-linearidades no modelo matemático, como é o caso de grande parte dos problemas em *CFD* (Ferziger e Peric, 1999; Maliska, 1995, Suero, 2006); e
- a utilização de métodos *multigrid* incorporados ao modelo numérico (Pinto *et.al.*, 2005).

2.5.3 Erro de arredondamento

Os erros de arredondamento (ε_r) são os erros que ocorrem principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações, ou seja, também são erros de truncamento, porém oriundos da necessidade de se limitar o número de dígitos usados para armazenar os valores das variáveis. Eles dependem do compilador (*software*) usado para gerar o código computacional e do computador (*hardware*) empregado em sua execução.

Estão relacionados ao número de bits usados para representar as variáveis nos computadores e ao número de termos empregados no cálculo de séries infinitas de funções pré-definidas da linguagem de programação. Na linguagem C, por exemplo, pode-se usar para uma variável do tipo real, precisão de 32 bits (float), precisão de 64 bits (double) ou precisão de 80 bits (long double). Outras linguagens de programação seguem padrões semelhantes. Quanto maior é a precisão usada para representar as variáveis, menores são os erros de arredondamento; entretanto, maior é a memória computacional necessária para o armazenamento destas variáveis.

2.5.4 Erro de programação

Os erros de programação (ε_p) tem origem na falha humana. Assim, para modelos matemáticos bastante simples estes erros são desprezíveis, ou não existem, devido a simplicidade dos algoritmos empregados. Nesta categoria incluem-se basicamente os seguintes erros (Roache, 1998; Marchi 2001):

- os erros resultantes do uso incorreto de um modelo numérico na aproximação de um modelo matemático. Esta situação ocorre devido a inexperiência do analista numérico, que, por desconhecer as técnicas numéricas, incorre em erro ao utilizá-las;
- os erros gerados na implementação do modelo numérico num programa computacional. Em programas de grande porte, estes erros, quando vêm à tona, são chamados de “bugs” e na maioria das vezes um grande esforço é necessário para corrigi-los;

- os erros cometidos no uso do programa computacional durante a obtenção da solução numérica. Situação que ocorre também devido a inexperiência do analista numérico, como por exemplo, a finalização do processo iterativo de uma simulação antes que o resíduo recomendado seja atingido.

2.5.5 Erro de discretização

Quando o erro (E) da solução numérica é gerado apenas por erros de truncamento presentes em N pontos da malha e que se propagam na solução numérica, ele é denominado de erro de discretização (Ferziger e Peric, 1999). Neste caso, a equação geral do erro de discretização unidimensional, admitindo por simplicidade um espaçamento uniforme (h) entre os nós, é dada genericamente por (Richardson, 1910; Roache, 1998; Ferziger e Peric, 1999; Marchi, 2001)

$$E(\phi) = C_1 h^{p_1} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + C_4 h^{p_4} + \dots \quad (2.10)$$

onde os coeficientes C_i podem ser iguais ou diferentes dos coeficientes c_i da Eq. (2.8), podem ser positivos ou negativos e ser função da variável dependente (Λ) e de suas derivadas, isto é, podem variar com a coordenada x , mas se admite que sejam independentes do tamanho (h) dos elementos da malha.

Para que o erro numérico seja gerado apenas pelo erro de discretização, é necessário que se atenda aos seguintes requisitos:

- os modelos matemáticos abordados sejam simples o suficiente para evitar erros de programação;
- a precisão computacional adotada para armazenamento das variáveis seja adequada para minimizar erros de arredondamento;
- no caso de soluções iterativas, o número de iterações seja suficiente para se atingir o erro de máquina ou para reduzir ao máximo os erros de iteração.

Neste trabalho, o uso de modelos matemáticos de baixa complexidade, o uso de dupla precisão para armazenamento dos valores das variáveis e a aplicação de processos iterativos até o erro de máquina, garantem que todos os requisitos acima são atendidos e todas as análises feitas ficam restritas ao estudo dos erros de discretização. A Figura 2.3 apresenta as fontes de erro numérico e suas interações. O erro de discretização (E) pode ser estimado *a priori* e *a posteriori* de diferentes formas, que serão apresentadas a seguir.

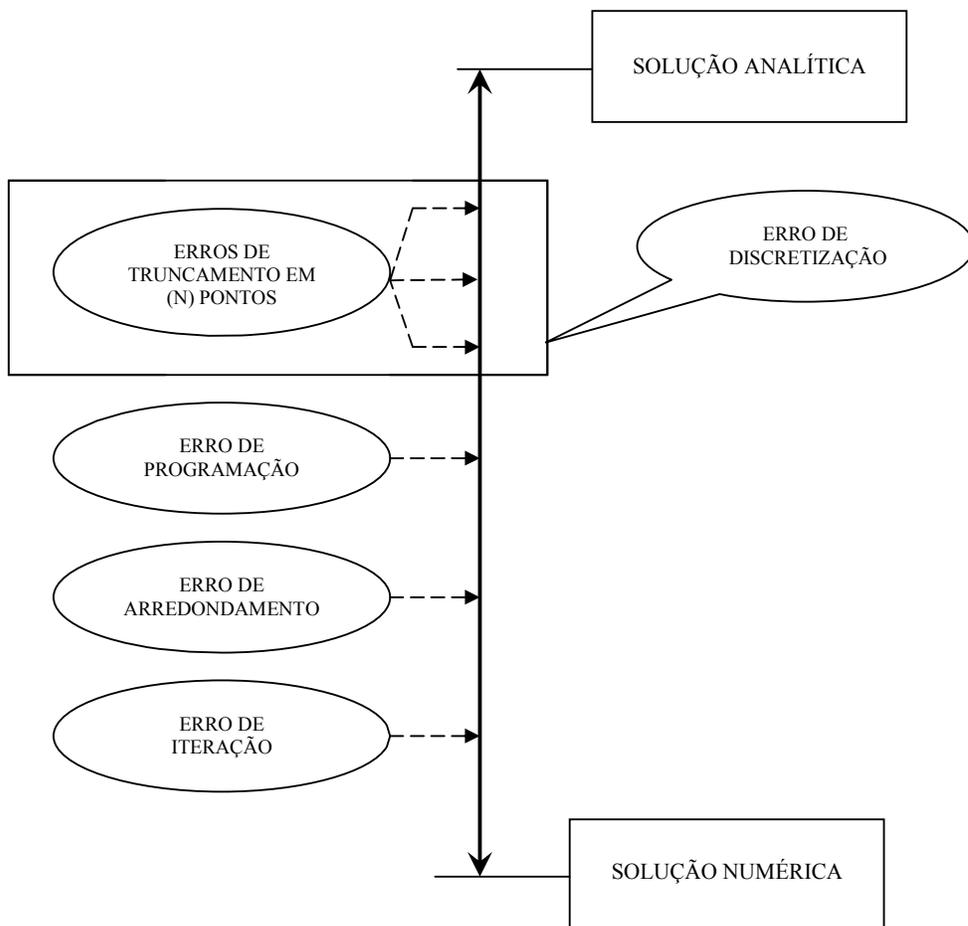


Figura 2.3 – Fontes de erro numérico.

2.6 Estimadores de Erro

Conforme visto na seção 1.2, três tipos de métodos podem ser empregados na solução de um problema: experimentais, analíticos e numéricos, e estes métodos estão

suscetíveis a três tipos de erro: erro experimental, erro de modelagem e erro numérico. O erro numérico (E), já definido na Eq. (1.1), é a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ). Na prática, a solução analítica exata (Φ) é desconhecida e, portanto, consegue-se apenas estimar o valor do erro numérico. Este valor estimado é denominado de incerteza (U) e foi definido na Eq. (1.2). A mesma situação ocorre em relação ao erro experimental e ao erro de modelagem, eles também precisam ser estimados. Relembrando, os processos usados para estimar cada tipo de erro da Figura 1.2 são:

- análise de incerteza (ABNT, 1997), para erros experimentais;
- validação (AIAA, 1998), para erros de modelagem; e
- verificação (AIAA, 1998), para erros numéricos.

Esta seção é dedicada ao processo de verificação de soluções numéricas em que o erro numérico é formado apenas por erros de discretização (Eq. 2.10). Em outras palavras, como estimar o erro numérico ou calcular a incerteza numérica usando os chamados estimadores de erro.

Há dois tipos de estimativas do erro de discretização: *a priori* e *a posteriori* das soluções numéricas, como descritas a seguir.

2.6.1 Estimativas *a priori*

A equação do erro de discretização é dada pela Eq.(2.10). Reduzindo-se o tamanho dos elementos da malha até $h \rightarrow 0$, a Eq. (2.10) se reduz a

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} \quad (2.11)$$

Assim, antes de se obter qualquer solução numérica, é possível prever o comportamento assintótico do erro de discretização com relação ao tamanho (h) dos elementos da malha de da ordem assintótica (p_L) definida na seção 2.5.1. Note que, da Eq. (2.11), $E(\phi) \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow 0$. Tanto C_1 quanto p_L dependem das aproximações numéricas empregadas, mas não é possível obter o valor de $E(\phi)$ porque C_1 é

desconhecido. Porém, conhecendo-se p_L , e duas soluções numéricas em malhas diferentes (h_f = malha fina e h_g = malha grossa) faz-se a seguinte análise

$$E(\phi_f) = C_1 h_f^{p_L} \quad (2.12)$$

$$E(\phi_g) = C_1 h_g^{p_L} \quad (2.13)$$

Portanto,

$$\frac{E(\phi_f)}{E(\phi_g)} = \frac{C_1 h_f^{p_L}}{C_1 h_g^{p_L}} = \left(\frac{h_f}{h_g} \right)^{p_L} \quad (2.14)$$

Isto é, quanto maior é p_L , maior é a redução do erro com h . Para o caso de $h_f = \frac{h_g}{2}$ e $p_L = 2$, temos

$$\frac{E(\phi_f)}{E(\phi_g)} = \left(\frac{\frac{h_g}{2}}{h_g} \right)^2 = \left(\frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{4} \quad (2.15)$$

Ou seja, a redução do tamanho dos elementos da malha à metade reduziu em $\frac{1}{4}$ o erro. Quanto maior o valor de p_L , mais rapidamente o erro cai com a redução de h . Conhecendo-se p_L *a priori*, é possível realizar estimativas *a posteriori* do erro.

2.6.2 Estimativas *a posteriori*

As estimativas de erro *a posteriori* são usadas para estimar efetivamente a magnitude de erro de discretização. Existem vários métodos que podem ser empregados, porém, eles são divididos em dois grupos, conforme a aplicação:

- $E(\phi)$ é baseado na solução numérica obtida numa única malha. Em geral o método de elementos finitos (Zhu & Zienkiewicz, 1990) se enquadra neste conjunto, estando portanto, fora do escopo deste trabalho.
- $E(\phi)$ é baseado nas soluções numéricas obtidas em duas ou mais malhas diferentes. Em geral os métodos de diferenças finitas e de volumes finitos se enquadram neste conjunto. Alguns estimadores deste tipo são: de Richardson e GCI (Roache, 1998).

2.6.3 Estimador de Richardson

A incerteza (U) de uma solução numérica (ϕ), Eq.(1.2), segundo o estimador de erro de Richardson (Richardson e Gaunt, 1927; Roache, 1994) é obtida admitindo-se que

$$U_{Ri}(\phi) = K_U h^{p_L} \quad (2.16)$$

onde K_U é um coeficiente independente do tamanho h dos elementos da malha uniforme. Com a Eq. (1.2) em (2.16),

$$\phi_\infty - \phi = K_U h^{p_L} \quad (2.17)$$

Aplicando-se esta equação a duas malhas diferentes (h_f e h_g) cujas soluções numéricas são ϕ_f e ϕ_g , obtém-se

$$\phi_\infty - \phi_f = K_U h_f^{p_L} \quad (2.18)$$

$$\phi_\infty - \phi_g = K_U h_g^{p_L} \quad (2.19)$$

Nestas duas equações são conhecidos os valores de ϕ_f, ϕ_g, h_f, h_g e p_L , e as incógnitas são ϕ_∞ e K_U . A solução para ϕ_∞ é

$$\phi_{\infty}(p_L) = \phi_f + \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (2.20)$$

onde a razão de refino (q) de malha uniforme, ou seja, entre malhas com h constante, é dada por (Roache, 1994)

$$q = \frac{h_g}{h_f} \quad (2.21)$$

A Eq. (2.20) representa a extrapolação de Richardson (Roache, 1994). Com sua substituição na Eq. (1.2), a incerteza ou a estimativa do erro de discretização, segundo o estimador de Richardson, para a solução numérica ϕ_f na malha fina (h_f) é

$$U_{Ri}(p_L) = \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (2.22)$$

A Eq.(2.17) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\phi_{\infty} - \phi = K_U h^{p_U} \quad (2.23)$$

onde (p_U) é a ordem aparente da incerteza (Marchi, 2001, Marchi e Silva, 2002). Para malhas grossas, ou práticas, $p_U \neq p_L$, mas para $h \rightarrow 0$, $p_U \rightarrow p_L$. Aplicando-se a Eq. (2.23) a três malhas diferentes (h_f = fina, h_g = grossa e h_{sg} = supergrossa) cujas soluções numéricas são ϕ_f , ϕ_g e ϕ_{sg} , obtém-se

$$\phi_{\infty} - \phi_f = K_U h_f^{p_U} \quad (2.24)$$

$$\phi_{\infty} - \phi_g = K_U h_g^{p_U} \quad (2.25)$$

$$\phi_{\infty} - \phi_{sg} = K_U h_{sg}^{p_U} \quad (2.26)$$

Nestas três equações são conhecidos os valores de ϕ_f , ϕ_g , ϕ_{sg} , h_f , h_g e h_{sg} , e as incógnitas são ϕ_∞ , K_U e p_U . No caso de razão de refino de malha uniforme (q) constante entre as malhas h_f , h_g e h_{sg} , isto é,

$$q = \frac{h_{sg}}{h_g} = \frac{h_g}{h_f} \quad (2.27)$$

A solução das Eqs. (2.24) a (2.26) resulta em

$$\phi_\infty(p_U) = \phi_f + \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^{p_U} - 1)} \quad (2.28)$$

com

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_g - \phi_{sg}}{\phi_f - \phi_g}\right)}{\log(q)} \quad (2.29)$$

A Eq. (2.28) representa a extrapolação de Richardson com base na ordem aparente (p_U) (Marchi, 2001). Com sua substituição na Eq. (1.2), tem-se

$$U_{Ri}(p_U) = \left(\frac{\phi_f - \phi_g}{q^{p_U} - 1} \right) \quad (2.30)$$

que é a incerteza da solução numérica (ϕ_f) na malha fina (h_f). O estimador de Richardson só fornece o valor correto do erro de discretização: se $h \rightarrow 0$, ou se a Eq. (2.10) for composta apenas pelo primeiro termo. Em geral, estas situações não ocorrem na prática, e

$$U_{Ri}(p_L) \neq U_{Ri}(p_U) \neq E(\phi_1) \quad (2.31)$$

Apesar disto, pode-se demonstrar (Marchi e Silva, 2002) que

$$\frac{U_{Ri}(p_L)}{E} < 1 < \frac{U_{Ri}(p_U)}{E} \quad (2.32)$$

quando $p_U \rightarrow p_L$ monotonicamente com valores inferiores a p_L , ou

$$\frac{U_{Ri}(p_U)}{E} < 1 < \frac{U_{Ri}(p_L)}{E} \quad (2.33)$$

quando $p_U \rightarrow p_L$ monotonicamente com valores superiores a p_L . Além disso, só faz sentido empregar U_{Ri} quando $p_U > 0$ (Marchi e Silva, 2002).

2.6.4 Estimador *GCI*

De acordo com o estimador *GCI* (*Grid Convergence Index*) de Roache (1994), a incerteza de uma solução numérica (ϕ_1) é calculada através de

$$U_{GCI}(p_L) = F_s \frac{|\phi_f - \phi_g|}{(q^{p_L} - 1)} \quad (2.34)$$

onde F_s é um fator de segurança com valor igual a três para aplicações em geral. Este estimador também pode ser empregado com a ordem aparente (p_U). Neste caso,

$$U_{GCI}(p_U) = F_s \frac{|\phi_f - \phi_g|}{(q^{p_U} - 1)} \quad (2.35)$$

Pode-se demonstrar (Marchi, 2001) que, para $h \rightarrow 0$

$$\frac{U_{GCI}}{|E(\phi_1)|} \rightarrow F_s \quad (2.36)$$

A representação correta da solução numérica (ϕ) e sua respectiva incerteza (U_{GCI}) obtida com o estimador *GCI* é

$$\phi = \phi_f \pm U_{GCI} \quad (2.37)$$

2.7 Ordens verdadeira, assintótica, aparente e efetiva

A ordem do erro numérico (E) permite a avaliação da redução do erro em função do tamanho (h) dos elementos da malha. Como visto neste texto, as ordens verdadeiras (p_V) e assintótica (p_L) são definidas nas equações gerais dos erros (Eq. 2.8 e 2.10) como sendo os expoentes de h nestas expressões. A ordem assintótica é atingida quando $h \rightarrow 0$.

A ordem aparente (p_U) é baseada em três soluções numéricas (ϕ) em malhas diferentes, Eq.(2.29), e é um valor estimado, pois não se conhece efetivamente o seu valor. Porém, para problemas relativamente simples ou problemas com solução fabricada (ver seção 2.1) em que se conhece a solução analítica (Φ), pode-se calcular a ordem efetiva do erro baseada em duas soluções numéricas, dada por

$$p_E = \frac{\log\left[\frac{E(\phi_g)}{E(\phi_f)}\right]}{\log(q)} \quad (2.42)$$

ou

$$p_E = \frac{\log\left(\frac{\Phi - \phi_g}{\Phi - \phi_f}\right)}{\log(q)} \quad (2.43)$$

onde ϕ_f e ϕ_g são as soluções numéricas obtidas com as malhas fina e grossa, e q é a razão de refino de malha, dada pela Eq.(2.21).

As correlações existentes entre as ordens do erro estão ilustradas nas Figuras 2.4 e 2.5. A Figura 2.4 apresenta a curva do erro de discretização (E) da solução numérica (ϕ) *versus* o tamanho (h) dos elementos da malha num gráfico logarítmico. A ordem efetiva (p_E) é definida como a inclinação local da curva enquanto que a ordem assintótica (p_L) é definida como a inclinação da curva quando $h \rightarrow 0$.

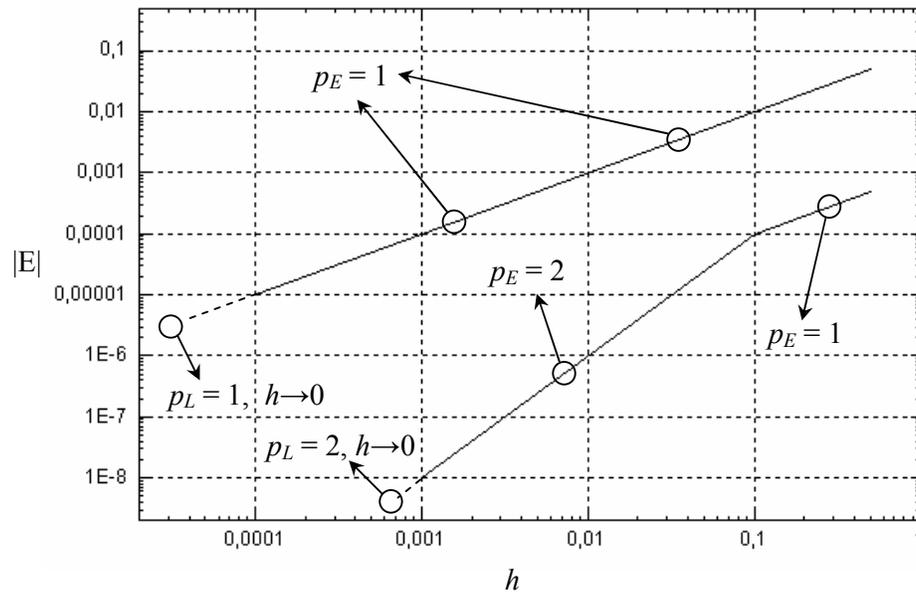


Figura 2.4 – Ordem assintótica (p_L) e efetiva (p_E) do erro (adaptado de Marchi, 2001).

A Figura 2.5 apresenta o valor das ordens assintótica (p_L) e efetiva (p_E) versus o tamanho (h) dos elementos da malha. Quando não é possível obter o valor de (p_E) pode-se estimar o seu valor através de (p_U). As ordens verdadeiras (p_V) não aparecem explícitas, pois são suprimidas pelas ordens de maior erro (p_L e p_E). Note que a ordem efetiva tende ao valor da ordem assintótica quando $h \rightarrow 0$.

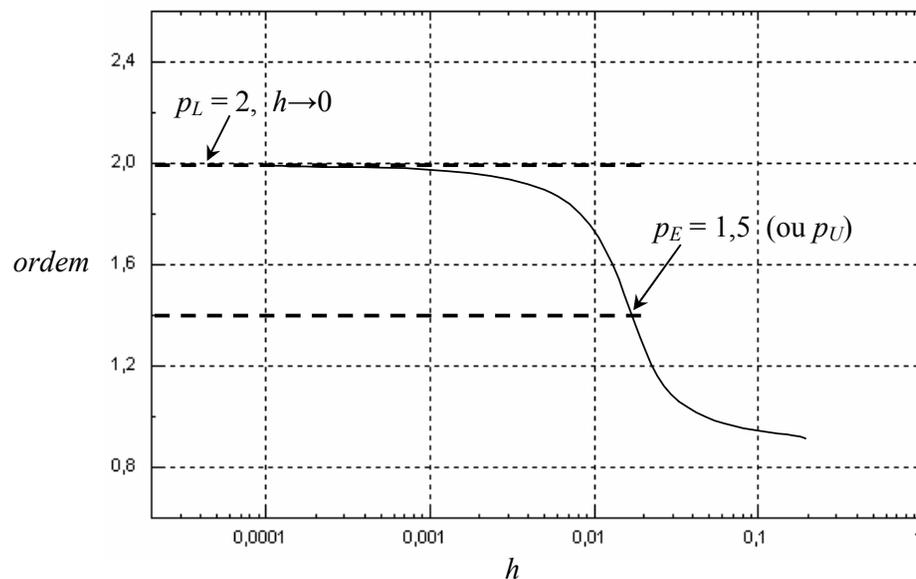


Figura 2.5 – Ordem efetiva (p_E) e assintótica (p_L) com redução de (h).

2.8 Série de Taylor para discretizações não-uniformes

Tanto as aproximações numéricas quanto seus erros de truncamento podem ser obtidos a partir da série de Taylor (Kreyszig, 1999), que é uma série infinita e definida genericamente por

$$\Lambda_x = \Lambda_j + \Lambda_j^i(x-x_j) + \Lambda_j^{ii}\frac{(x-x_j)^2}{2!} + \dots + \Lambda_j^M\frac{(x-x_j)^M}{M!} + \dots \quad (2.44)$$

onde Λ é a variável dependente nos modelos matemáticos, Λ_x é o valor analítico exato obtido em qualquer coordenada x com a expansão da série de Taylor a partir do nó j , onde são conhecidos os valores analíticos exatos de Λ_j e suas derivadas ($\Lambda_j^i, \Lambda_j^{ii}, \dots, \Lambda_j^M$).

Escrevendo-se a série de Taylor, Eq. (2.44), a partir do nó j , para dois nós consecutivos da malha não-uniforme mostrada na Fig. 2.6, generalizados por $j-1$ e $j+1$ obtém-se (Marchi, 2001)

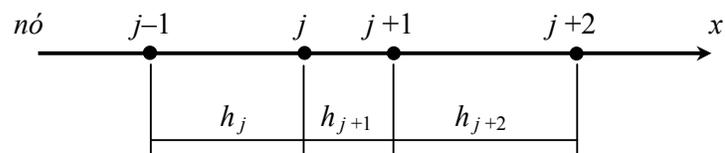


Figura 2.6 – Malha unidimensional não-uniforme.

$$\Lambda_{j-1} = \Lambda_j - \Lambda_j^i h_j + \Lambda_j^{ii} \frac{h_j^2}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h_j^3}{6} + \dots \quad (2.45)$$

$$\Lambda_{j+1} = \Lambda_j + \Lambda_j^i h_{j+1} + \Lambda_j^{ii} \frac{h_{j+1}^2}{2} + \Lambda_j^{iii} \frac{h_{j+1}^3}{6} + \dots \quad (2.46)$$

onde j é o nó genérico sobre o qual se realizam as aproximações numéricas; e os tamanhos (h) dos elementos da malha não-uniforme são dados por

$$h_j = x_j - x_{j-1} \quad (2.47)$$

$$h_{j+1} = x_{j+1} - x_j \quad (2.48)$$

Usando combinações lineares entre as Eqs. (2.45) a (2.46), é possível obter aproximações numéricas para as variáveis de interesse e seus respectivos erros de truncamento, conforme é apresentado adiante.

2.9 Programação

Os códigos computacionais empregados neste trabalho são construídos através de programação gráfica. Neste tipo de programação, os códigos são implementados a partir de elementos gráficos que realizam as operações computacionais, conforme ilustra a Figura 2.7. A principal vantagem deste tipo de programação é a facilidade que o programador tem para visualizar o código como um todo e a facilidade de construção de interfaces gráficas para o usuário, além de uma compilação em tempo real.

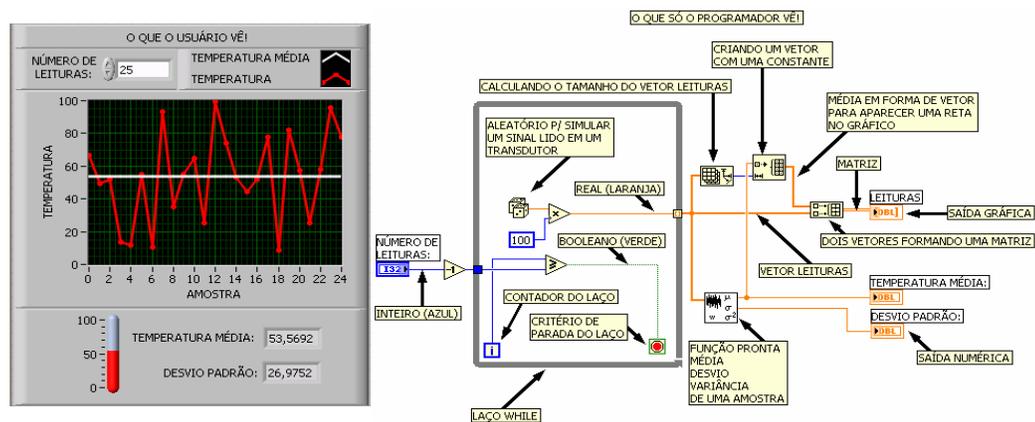


Figura 2.7 – Exemplo de programação gráfica.

O *software* utilizado neste trabalho para a construção dos códigos computacionais é o LabVIEW da National Instruments, fabricante também de outros *softwares* para aplicação na engenharia. A Figura 2.8 apresenta exemplos de programas 1D e a Figura 2.9 exemplos de programas 2D usados neste trabalho, que foram construídos com o LabVIEW.

Os códigos foram programados com precisão dupla (**DBL**) nas variáveis de interesse.

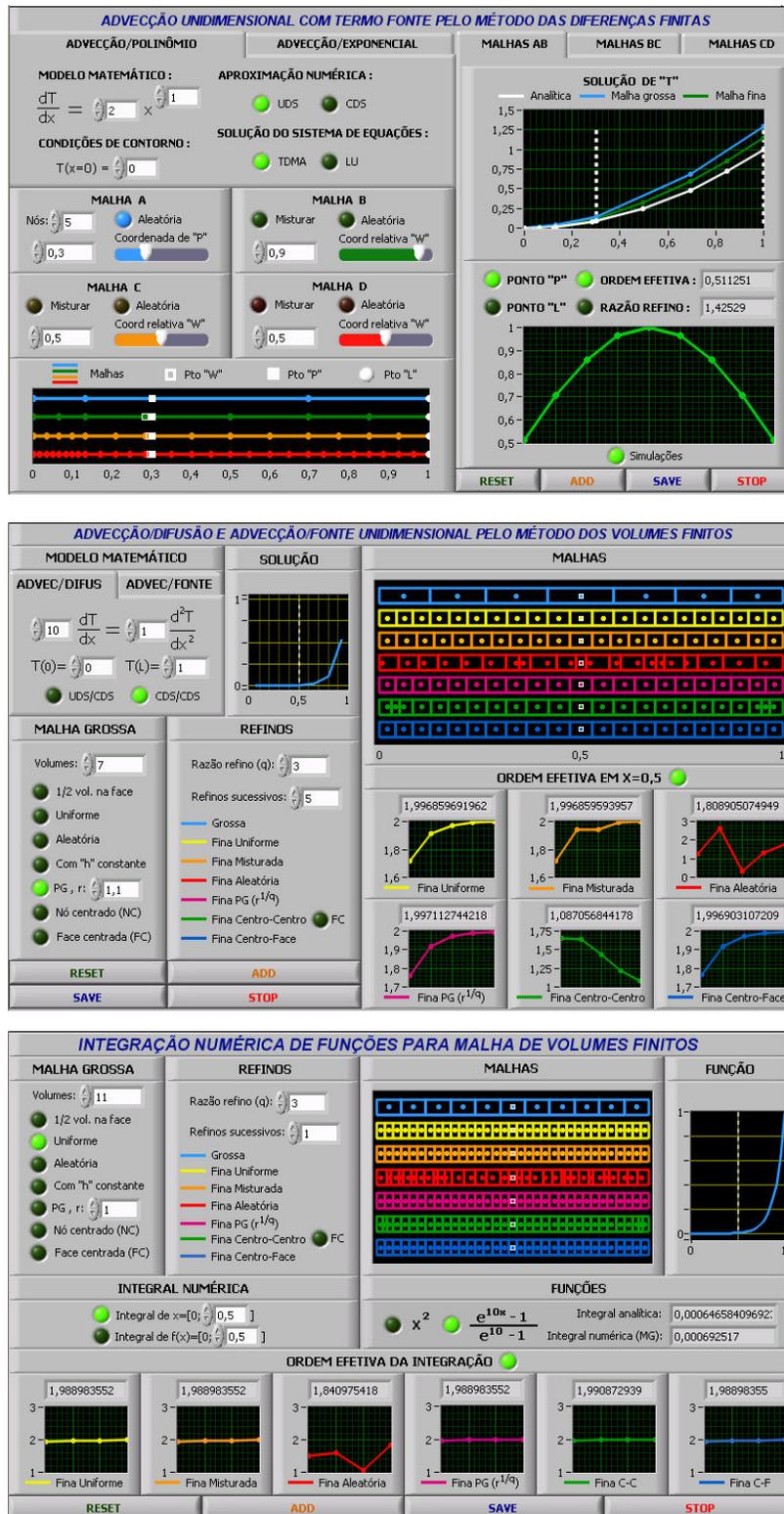


Figura 2.8 – Interface gráfica de programas 1D.

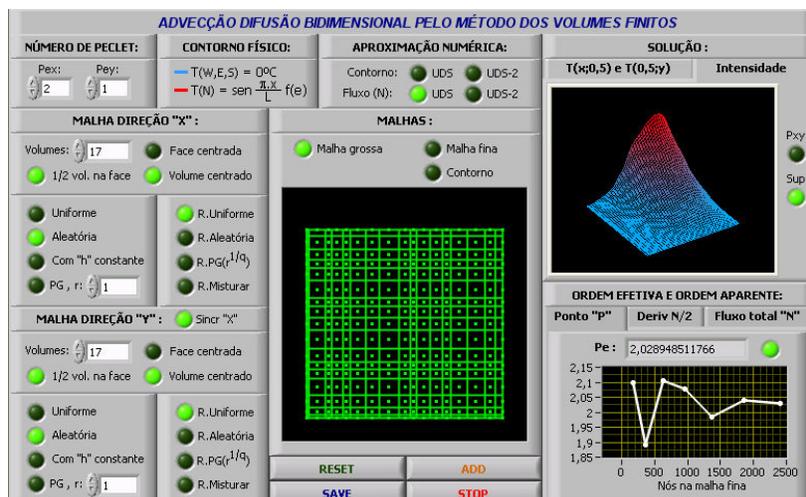
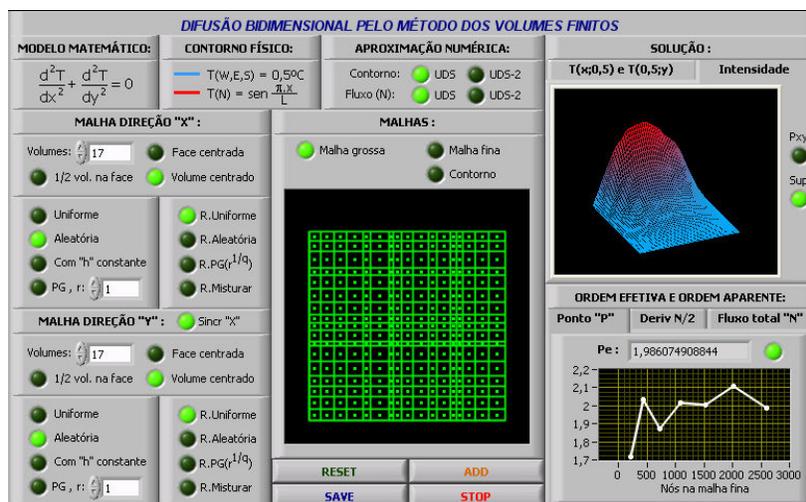
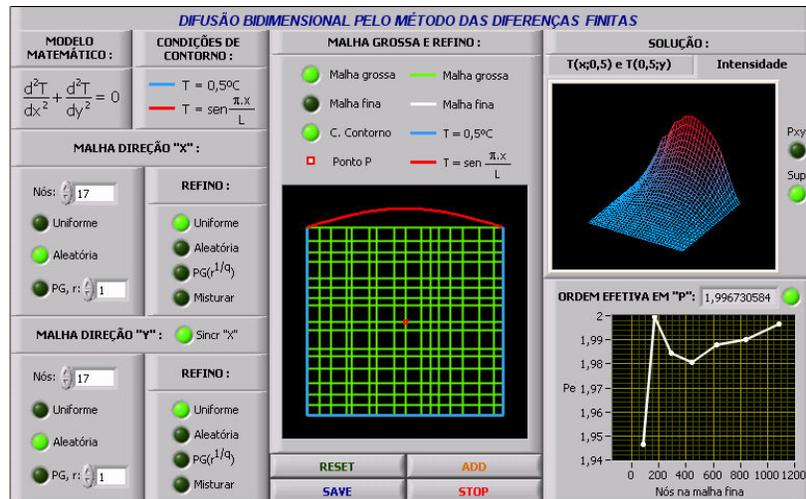


Figura 2.9 – Interface gráfica de programas 2D.

Exposta a fundamentação teórica deste trabalho, o Capítulo seguinte apresenta os resultados obtidos pelo *MDF*, para malhas unidimensionais não-uniformes.

3. Soluções Unidimensionais pelo Método das Diferenças Finitas

A busca por padrões de verificação de soluções numéricas leva à adoção de modelos matemáticos cuja solução analítica seja conhecida, pois, somente neste caso é possível mensurar exatamente qual será o erro numérico. Diante dessa condição, os modelos matemáticos abordados neste texto apresentam-se inicialmente simples e unidimensionais. Como já citado, outro aspecto relevante para a definição dos modelos matemáticos é que as interações multidimensionais só podem ser observadas e corretamente descritas quando separadas de outros efeitos.

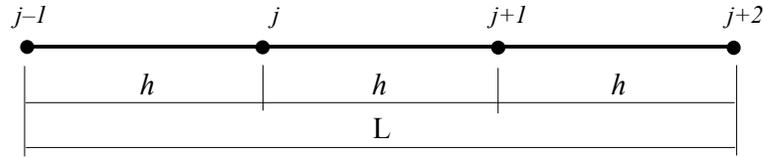
Neste Capítulo são apresentadas soluções numéricas de modelos matemáticos 1D, obtidas pelo método das diferenças finitas (*MDF*), descrito na seção 2.3. As equações governantes destes problemas são as Eqs.(2.1 a 2.3) que serão reescritas de acordo com as particularidades de cada problema. Como citado no Capítulo 2, todas as soluções numéricas foram obtidas com por método direto *TDMA*. Resultados deste capítulo também são encontrados nas tabelas do apêndice A.

3.1 Discretizações Unidimensionais para Diferenças Finitas

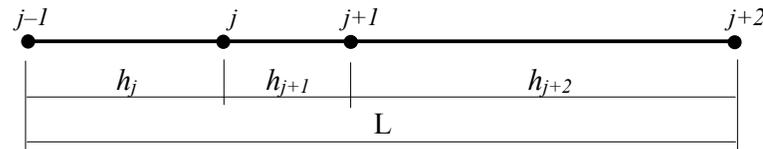
As malhas unidimensionais empregadas para a obtenção das soluções numéricas pelo *MDF* têm suas configurações representadas na Figura 3.1. O comprimento L é unitário e o número de nós (N) é particular de cada solução, sendo indicado oportunamente. Estas malhas foram escolhidas pelo fato de que, quando combinadas em mais dimensões, representam as principais configurações de malhas cartesianas bidimensionais e tridimensionais.

A malha uniforme, representada na Figura 3.1.a, é a malha que ocupa menor espaço de memória computacional, pois, para definir a malha, é suficiente armazenar o número de elementos (N) e o seu tamanho (h), que é constante. Em aplicações, esta discretização deve

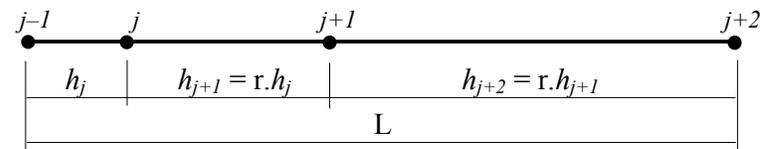
ter preferência de escolha sobre as demais. Para se obter um refino local, pode-se usar uma malha com progressão geométrica (PG), como mostrado na Figura 3.1.c, ou refinar a malha de forma arbitrária localmente.



(a) uniforme com 3 elementos e 4 nós.



(b) não-uniforme aleatória com 3 elementos e 4 nós.



(c) não-uniforme em progressão geométrica (PG) com 3 elementos e 4 nós.

Figura 3.1 – Malhas unidimensionais para diferenças finitas.

A malha não-uniforme aleatória, representada na Figura 3.1.b é uma malha em que todos os tamanhos (h_j) da malha devem ser conhecidos de alguma forma, seja por armazenamento direto ou por diferenças das coordenadas (x_j) da malha.

Quando combinada em mais direções, a malha da Figura 3.1.b oferece versatilidade para discretizações em malha única e são bastante utilizadas na discretização de geometrias complexas (Venkatakrishnan, 1996). A análise de erro, neste caso, muitas vezes é baseada em um tamanho médio dos elementos da malha (\bar{h}) (Santos *et al.*, 1996), o que pode induzir o analista numérico ao erro. Para as malhas não-uniformes da Fig. 3.1, que tem comprimento L e número de elementos N , o tamanho médio da malha é dado por

$$\bar{h} = \frac{L}{N} \quad (3.1)$$

3.2 Aproximações Numéricas para Diferenças Finitas

Para aplicação do *MDF* nos modelos matemáticos unidimensionais representados pelas Eqs.(2.1) a (2.4), são necessárias aproximações numéricas para a derivada de primeira ordem e para a derivada de segunda ordem.

No caso da derivada de primeira ordem, duas aproximações são empregadas: i) derivada de primeira ordem com um ponto a montante (λ^i_{UDS}), e ii) derivada de primeira ordem com diferença central (λ^i_{CDS}). Para a derivada de segunda ordem, a aproximação empregada é: derivada de segunda ordem com diferença central (λ^{ii}_{CDS}). Estas são as aproximações mais empregadas no *MDF* para os termos matemáticos de derivada primeira e derivada segunda.

Para a aproximação da derivada de primeira ordem com um ponto a montante (λ^i_{UDS}), pode-se isolar Λ^i_j da Eq.(2.45) e obter (Marchi, 2001)

$$\Lambda^i_j = \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h_j} + \Lambda^{ii}_j \frac{h_j}{2} - \Lambda^{iii}_j \frac{h_j^2}{6} + \Lambda^{iv}_j \frac{h_j^3}{24} - \dots \quad (3.2)$$

Da Eq.(3.2) pode-se extrair a aproximação (λ^i_{UDS}), dada por

$$(\lambda^i_{UDS})_j = \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h_j} \quad (3.3)$$

cujo erro de truncamento é dado por

$$\mathcal{E}(\lambda^i_{UDS})_j = \Lambda^{ii}_j \frac{h_j}{2} - \Lambda^{iii}_j \frac{h_j^2}{6} + \Lambda^{iv}_j \frac{h_j^3}{24} - \dots \quad (3.4)$$

Para a aproximação da derivada de primeira ordem com diferença central (λ^i_{CDS}), pode-se subtrair a Eq.(2.45) da Eq.(2.46) e isolar Λ^i_j , obtendo (Marchi, 2001)

$$\Lambda^i_j = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} + \frac{\Lambda^{ii}_j}{2}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda^{iii}_j}{6} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (3.5)$$

Da Eq.(3.5) pode-se extrair a aproximação (λ_{CDS}^i), dada por

$$(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} \quad (3.6)$$

cujo erro de truncamento é dado por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (3.7)$$

Por fim, para a aproximação da derivada de segunda ordem com diferença central (λ_{CDS}^{ii}), combina-se lineamente a Eq.(2.45) com a Eq.(2.46), multiplicando a primeira por h_{j+1} e a segunda por h_j e somando, e isola-se o termo Λ_j^{ii} obtendo (Marchi, 2001)

$$\Lambda_j^{ii} = 2 \frac{[h_{j+1}\Lambda_{j-1} + h_j\Lambda_{j+1} - (h_j + h_{j+1})\Lambda_j]}{(h_j + h_{j+1})h_j h_{j+1}} + \frac{\Lambda_j^{iii}}{3}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (3.8)$$

Da Eq.(3.8) pode-se extrair a aproximação (λ_{CDS}^{ii}), dada por

$$(\lambda_{CDS}^{ii})_j = 2 \frac{[h_{j+1}\Lambda_{j-1} + h_j\Lambda_{j+1} - (h_j + h_{j+1})\Lambda_j]}{(h_j + h_{j+1})h_j h_{j+1}} \quad (3.9)$$

cujo erro de truncamento é dado por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})_j = \frac{\Lambda_j^{iii}}{3}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (3.10)$$

Pelas equações dos erros de truncamento das aproximações λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i e λ_{CDS}^{ii} , Eqs. (3.4), (3.7) e (3.10) respectivamente, pode-se observar a ordem assintótica (p_L), definida na seção 2.7, de cada uma das aproximações. Para o caso de malha uniforme, como representado na Fig. 3.1.a, temos que $h_j = h_{j+1}$, Nesta condição, ocorrem cancelamentos de termos nas Eqs. (3.7) e (3.10) e uma nova ordem assintótica passa a

dominar. A Tabela 3.1 apresenta os valores das ordens assintóticas nos casos de malhas não-uniformes e uniformes.

Tabela 3.1 – Ordem assintótica (p_L) das aproximações numéricas.

aproximação	ordem assintótica (p_L)	
	malha não-uniforme	malha uniforme
λ^i_{UDS}	1	1
λ^i_{CDS}	1	2
λ^{ii}_{CDS}	1	2

A Tabela 3.1 está relacionada a uma questão divergente na literatura (Ferziger e Peric, 2001; Santos *et al.*, 1996; Strauss *et al.* 1999), em que por vezes chega-se a afirmar que para malhas não-uniformes a análise do erro baseada na série de Taylor é incorreta ou incoerente, o que não é confirmado neste texto.

Feita esta análise *a priori* da ordem assintótica (p_L) do erro de truncamento das aproximações, a questão agora é entender de que forma relacionar esta análise com a análise *a priori* e *a posteriori* da ordem do erro de discretização, ao se empregar um tipo de refino de malha. Isto pode ser feito através do cálculo da ordem efetiva (p_E), Eq. (2.42), desde que se conheça, seja *a priori* ou *a posteriori*, o erro numérico (E) de duas soluções numéricas obtidas em malhas diferentes.

O que se espera é identificar qual o valor da ordem (p_L) da Tabela 3.1 que está sendo verificada efetivamente (p_E) nas soluções numéricas e que pode ser empregada nos estimadores de erro da seção 2.6, para que as estimativas sejam confiáveis. Pois, como apresentado adiante, a determinação *a priori* ou *a posteriori* de qual valor de p_L da aproximação está ocorrendo na prática depende da combinação: configuração da malha grossa e configuração da malha fina.

3.3 Advecção Unidimensional com Termo Fonte – Problemas 1A e 1B

Para o problema da advecção unidimensional de um escalar com termo fonte, são analisados dois casos, representados pelas seguintes equações

$$\frac{d\Lambda^{1A}}{dx} = 2x \quad (3.11)$$

$$\frac{d\Lambda^{1B}}{dx} = \frac{e^x}{e-1} \quad (3.12)$$

Nas Eqs. (3.11) e (3.12), os superíndices representam os problemas 1A e 1B; a condição de contorno dos problemas é $\Lambda(0) = 0$. As soluções analíticas exatas dos problemas 1A e 1B são

$$\Lambda^{1A} = x^2 \quad (3.13)$$

$$\Lambda^{1B} = \frac{e^x - 1}{e - 1} \quad (3.14)$$

Aplicando-se a aproximação numérica λ_{UDS}^i , dada na Eq.(3.3), aos problemas 1A e 1B obtém-se

$$\Lambda_j^{1A} = 2x_j h_j + \Lambda_{j-1}^{1A} \quad (3.15)$$

$$\Lambda_j^{1B} = \frac{e^{x_j} h_j}{e - 1} + \Lambda_{j-1}^{1B} \quad (3.16)$$

As Eqs.(3.15) e (3.16) são as equações discretizadas dos problemas 1A e 1B, representados pelas Eqs.(3.11) e (3.12). Aplicada a condição de contorno de Dirichlet (Patankar, 1980) para o primeiro nó da malha, $\Lambda(0) = 0$, e as Eqs.(3.15) e (3.16) para os demais nós, têm-se os sistemas de equações algébricas que fornecem as soluções numéricas dos problemas 1A e 1B. É importante destacar que, como a discretização tem um número finito de pontos, o resultado obtido no sistema de equações não é mais Λ (analítico), e sim λ (numérico). A seguir é apresentada a análise *a priori* da ordem do erro de discretização dos problemas 1A e 1B.

3.3.1 Análise *a priori* da ordem do erro de discretização nos problemas 1A e 1B

Conhecendo-se *a priori* o erro de truncamento de uma aproximação numérica e sua ordem (Tabela 3.1), pode-se estimar, também *a priori*, qual será a ordem do erro quando um determinado tipo de refino é empregado. Isto implica em avaliar, *a priori*, qual é o tipo de refino que reproduz a ordem assintótica (p_L) da aproximação numérica usada.

Para tal, deve-se lembrar que a Tabela 3.1 apresenta a ordem do erro da aproximação numérica local, observado nas equações do erro de discretização local (Marchi, 2001) ou erro de truncamento local (LeVeque, 1992), que são as equações do erro de truncamento já apresentadas, Eqs. (3.4), (3.7) e (3.10).

Quando as aproximações numéricas são empregadas nos diversos pontos da malha, que estão interligados entre si, somam-se ao erro local de cada nó as interações de erro local de nós vizinhos, Eqs. (3.15) e (3.16). Desta forma, diz-se que a equação do erro é global e esta passa a ser denominada equação do erro de poluição (Marchi, 2001) ou equação do erro de discretização global (LeVeque, 1992).

Empregando as equações de erro de discretização global escritas em sua forma geral na equação que fornece o valor da ordem efetiva (p_E), Eq. (2.42), pode-se, *a priori*, verificar em quais casos de refino $p_E \rightarrow p_L$. Porém, esta análise apresenta dificuldades. A principal delas é o fato de que as interações entre os nós dependerão dos termos presentes no modelo matemático e das aproximações que serão usadas na aplicação do método numérico. Com isso, este tipo de análise fica limitada a um estudo de caso, que, especula-se neste texto, possa ser generalizado para outro qualquer, pois, quando $h \rightarrow 0$ apenas um termo domina a equação do erro de discretização.

Desta forma, procurou-se analisar um caso bastante simples em que o erro de discretização global seja facilmente determinado. Assim, para a análise *a priori* da ordem do erro de discretização, foi escolhido o problema da advecção unidimensional com termo fonte, cujo modelo matemático é dado pela Eq. (3.11) ou pela Eq. (3.12). Para estes problemas, 1A e 1B, o erro de discretização global ou erro numérico (E) do último nó da malha, isto é, em $x = L$, é dado por

$$E(\phi)|_{x=L} = \int_0^L \varepsilon_j dx \quad (3.17)$$

onde L é o comprimento do domínio. Fazendo $h \rightarrow 0$ e introduzindo a Eq. (2.8) na Eq. (3.17), o primeiro termo da equação do erro de truncamento (ε) passa a dominar o erro numérico, fornecendo

$$E(\phi)|_{x=L} = \int_0^L c_{1,j} h_j^{p_L} dx \quad (3.18)$$

Aplicando-se na Eq. (3.18) o teorema generalizado do valor médio, tem-se

$$E(\phi)|_{x=L} = C_m \int_0^L h_j^{p_L} dx \quad (3.19)$$

A integral da Eq. (3.19) discretizada para N elementos h_j de malha resulta

$$E(\phi)|_{x=L} = C_m \sum_{j=1}^N h_j^{p_L+1} \quad (3.20)$$

Na Eq. (3.20) o coeficiente médio (C_m) é função das derivadas de Λ . A Eq. (3.20) também é a equação do erro numérico, por exemplo, para o problema da integração numérica pela regra do trapézio ao longo do comprimento (L) do domínio, e que será apresentada posteriormente, o que justifica especular que esta análise possa ser aplicada também a outros modelos matemáticos.

Admitindo a aproximação numérica de derivada primeira λ_{UDS}^i , dada pela Eq. (3.3), observa-se que o primeiro termo da equação do erro de truncamento desta aproximação, Eq. (3.4), é função de h e da derivada segunda de Λ .

No problema 1A, Eq. (3.11), existem derivadas não nulas até a derivada segunda, e, portanto, não é necessário que $h \rightarrow 0$ para que o primeiro termo da equação do erro de truncamento (ε) seja predominante, pois, só existe um termo. Para o problema 1A, a equação de ε tem um termo e a solução analítica de Λ e suas derivadas são dadas por

$$\Lambda = x^2, \quad \Lambda^i = 2x, \quad \Lambda^{ii} = 2, \quad \Lambda^{iii}, \Lambda^{iv}, \Lambda^v, \dots = 0 \quad (3.21)$$

No problema 1B, Eq. (3.12), existem infinitos termos de derivada, e, portanto, somente quando $h \rightarrow 0$ ocorre na equação do erro de truncamento (ε) predominância do primeiro termo. Para o problema 1B, a equação de ε tem infinitos termos e a solução analítica de Λ e suas derivadas são dadas por

$$\Lambda = \frac{e^x - 1}{e - 1}, \quad \Lambda^i, \Lambda^{ii}, \Lambda^{iii} \dots = \frac{e^x}{e - 1} \quad (3.22)$$

O erro numérico (E) da Eq. (3.20) juntamente com a Eq. (3.4), para os dois casos apresentados, será dado por

$$E^{1A}(\phi) = C_m \sum_{j=1}^N h_j^{p_L+1} \quad (3.23)$$

$$E^{1B}(\phi) = C_m \sum_{j=1}^N h_j^{p_L+1} \quad p/h \rightarrow 0 \quad (3.24)$$

Com as Eq. (3.23) e (3.24), pode-se analisar, *a priori*, a ordem do erro de discretização ou erro numérico (E), quando diferentes refinamentos de malha são empregados. Devido a semelhança das Eq. (3.23) e (3.24), quando $h \rightarrow 0$, a análise feita no problema 1A é aplicada ao problema 1B.

3.3.1.1 Refino uniforme de malhas não-uniformes para o problema 1A

No refino uniforme os elementos da malha grossa ($h_{j,g}$) são divididos em partes iguais para originar a malha fina ($h_{j,f}$). A relação entre os elementos da malha grossa e da malha fina é definida por

$$h_{j,g} = \sum_{i=1}^q h_{j,i,f} = qh_{j,f} \quad (3.25)$$

onde q é a razão de refino de malhas, definida na Eq. (2.21).

A análise *a priori* do problema 1A, fornece para o valor da ordem efetiva (p_E), dada pela Eq. (2.42), a seguinte equação

$$p_E = \frac{\log \left[\frac{C_m \sum_{j=1}^{N_g} [h_{j,g}^{p_L+1}]}{C_m \sum_{j=1}^{N_f} [h_{j,f}^{p_L+1}]} \right]}{\log(q)} \quad (3.26)$$

mas

$$\sum_{j=1}^{N_f} [h_{j,f}^{p_L+1}] = \sum_{j=1}^{N_g} \sum_{i=1}^q [h_{j,f}^{p_L+1}] = q \sum_{j=1}^{N_g} [h_{j,f}^{p_L+1}] \quad (3.27)$$

Com a Eq. (3.25) e a Eq. (3.27) na Eq. (3.26), tem-se

$$p_E = \frac{\log \left[\frac{q^{p_L+1} \sum_{j=1}^{N_g} [h_{j,f}^{p_L+1}]}{q \sum_{j=1}^{N_g} [h_{j,f}^{p_L+1}]} \right]}{\log(q)} \quad (3.28)$$

que pode ser simplificada para

$$p_E = \frac{\log(q^{p_L})}{\log(q)} = p_L \quad (3.29)$$

Desta forma, fica demonstrado para o problema da advecção com termo fonte unidimensional usando malha grossa não-uniforme e aproximação numérica λ_{UDS}^i , que: (i) caso a equação do erro de truncamento (ε) tenha apenas um termo, problema 1A, $p_E = p_L$ para qualquer tamanho de malha, desde que a malha fina seja obtida com refino uniforme; e (ii) caso a equação do erro de truncamento (ε) tenha dois ou mais termos, problema 1B, $p_E \rightarrow p_L$ quando $h_j \rightarrow 0$ desde que se empregue o refino uniforme. Eventualmente, em

algun tipo qualquer de refino que não o uniforme, o valor de p_E poderá ser muito próximo do valor de p_L , mas apenas por coincidência. Especula-se que a análise aqui apresentada seja válida para outros problemas que usam o refino uniforme.

3.3.1.2 Malhas grossa e fina com PG para o problema 1A

No caso de malhas em progressão geométrica, a literatura recomenda que a relação entre a razão da progressão geométrica da malha fina (r_f) em relação a razão da progressão geométrica da malha grossa (r_g) (Ferziger e Peric, 2001) seja

$$r_f = r_g^{\left(\frac{1}{q}\right)} \quad (3.30)$$

onde q é a razão de refino de malhas, definida na Eq. (2.21). O tamanho dos elementos das malhas grossa ($h_{j,g}$) e da malha fina ($h_{j,f}$), em PG, são dados por

$$h_{j,g} = h_{1,g} \cdot r_g^{j-1} \quad (3.31)$$

$$h_{j,f} = h_{1,f} \cdot r_f^{j-1} \quad (3.32)$$

Considerando que cada elemento ($h_{j,g}$) da malha grossa divide-se em q partes para formar os elementos ($h_{j,f}$) da malha fina, e que os tamanhos dos elementos da malha fina também formam uma PG, a relação entre $h_{j,g}$ e $h_{j,f}$ é

$$h_{j,g} = \sum_{i=1}^q h_{j,i,f} = h_{j,1,f} \frac{(1 - r_f^q)}{(1 - r_f)} \quad (3.33)$$

Desta forma, a relação entre o primeiro elemento da malha grossa ($h_{1,g}$) e o primeiro elemento da malha fina ($h_{1,f}$) é dada por

$$\frac{h_{1,g}}{h_{1,f}} = \frac{(1 - r_f^q)}{(1 - r_f)} \quad (3.34)$$

Substituindo-se na Eq. (3.23) as Eqs. (3.31) e (3.32), tem-se para o erro numérico (E), na coordenada $x = L$, para as malhas grossa e fina em PG

$$E_g(\phi) = C_m \sum_{j=1}^{N_g} (h_{1,g} \cdot r_g^{j-1})^{p_L+1} \quad (3.35)$$

$$E_f(\phi) = C_m \sum_{j=1}^{N_f} (h_{1,f} \cdot r_f^{j-1})^{p_L+1} \quad (3.36)$$

Usando as Eqs. (3.34) a (3.36), a análise *a priori* do problema 1A fornece para o valor da ordem efetiva (p_E), dada pela Eq. (2.42), a seguinte equação

$$p_E = \frac{\log \left[\frac{\left(\frac{(1-r_f^q)}{(1-r_f)} \right)^{p_L+1} \sum_{j=1}^{N_g} (r_f^{q(j-1)})^{p_L+1}}{\sum_{j=1}^{qN_g} (r_f^{j-1})^{p_L+1}} \right]}{\log(q)} \quad (3.37)$$

Tomando o limite quando $r_f \rightarrow 1$, temos, para o valor da ordem efetiva

$$p_E = \frac{\log \left[\lim_{r_f \rightarrow 1} \left[\frac{(1-r_f^q)}{(1-r_f)} \right]^{p_L+1} \frac{1}{q} \right]}{\log(q)} \quad (3.38)$$

Aplicando a regra de L'Hospital (Kreyszig, 1999) para a indeterminação, vem

$$p_E = \frac{\log \left[(q)^{p_L+1} \frac{1}{q} \right]}{\log(q)} = p_L \quad (3.39)$$

Pela Eq. (3.39) pode-se observar *a priori* que para o problema da advecção com termo fonte unidimensional usando malhas grossa e fina em PG, problema 1A, verifica-se que a ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) quando a razão da PG

tende a unidade, isto é, a malha grossa é uniforme com N elementos e a malha fina é uniforme com qN elementos, isto é, a malha grossa sofre refino uniforme.

A Figura 3.2 e a Tabela A.1 apresentam os valores da ordem efetiva (p_E) obtida na Eq. (3.37), em função da razão da PG da malha fina (r_f), para o problema da advecção unidimensional com termo fonte, Eq. (3.11), problema 1A. Os parâmetros fixados para gerar as curvas da Fig. 3.2 são: $N_g = 10000$ e $p_L = 2$. Estes resultados confirmam a Eq. (3.39) e mostram que para $h \rightarrow 0$, o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) quando se usam malhas com razão da PG (r) próxima da unidade.

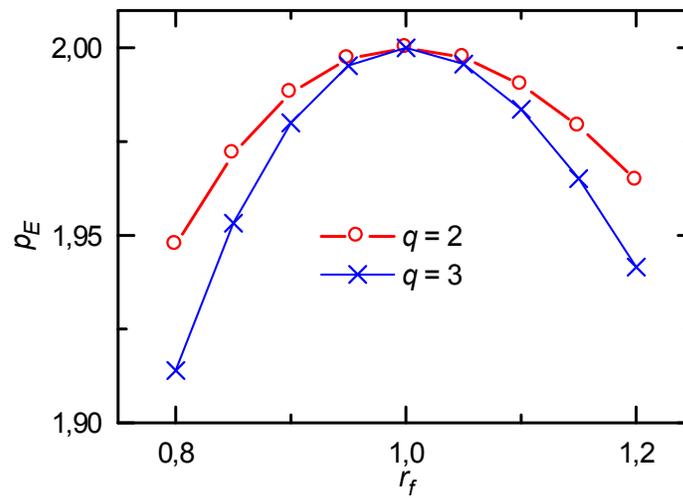


Figura 3.2 – Ordem efetiva (p_E) obtida *a priori* quando se usam malhas em PG.

Pode-se destacar que $p_E \rightarrow p_L$ quando, simultaneamente, $h \rightarrow 0$ e $r_f \rightarrow 1$, o que implica relacionar a razão da PG da malha com a relação entre o maior e o menor tamanho (h_j) dos elementos da malha. Desta forma, para que $p_E \rightarrow p_L$, deve ser satisfeita a relação

$$r_f \rightarrow \left(\frac{h_{f \text{ maior}}}{h_{f \text{ menor}}} \right)^{\frac{1}{N_f}} \rightarrow 1 \quad (3.40)$$

É importante destacar que para a obtenção das Eqs. (3.39) e (3.40) não foi necessária a Eq. (3.30), isto é, no limite $r_f \rightarrow 1$ a malha fina é uniforme e, conseqüentemente, também a malha grossa, independente da relação dada pela Eq. (3.30).

As próximas seções buscam observar se estas análises estão em conformidade com análises *a posteriori*, obtidas em malhas com diferentes configurações e tamanhos.

3.3.2 Razão de refino de malhas

Como exposto na seção 2.7, a ordem efetiva (p_E) da solução numérica de um modelo matemático que possui solução analítica é dada pela Eq.(2.43), e a razão de refino de malha (q), para refino uniforme, é dada pela Eq.(2.21). No caso de refino em malhas irregulares (não-uniformes, não-ortogonais e não-estruturadas), recomenda-se para o cálculo da razão de refino a seguinte expressão (Roache, 1994; Celik, 2004)

$$q = \left(\frac{N_f}{N_g} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (3.41)$$

onde N_f e N_g representam, respectivamente, o número de elementos das malhas fina e grossa, D é a dimensão espacial do problema, sendo igual a 1, 2 ou 3, respectivamente, para os casos uni, bi e tridimensional. Essa definição é uma extrapolação direta daquela usada em malhas uniformes, Eq.(2.21), pois, para malhas uniformes $N_f = L/h_f$ e $N_g = L/h_g$ e a Eq.(2.21) é recuperada.

Pela Tabela 3.1 e conforme a análise apresentada na seção 3.3.1, a ordem assintótica para os problemas 1A e 1B, representados pelas Eqs.(3.11) e (3.12), que usam a aproximação λ_{UDS}^i , é $p_L = 1$, sejam as malhas uniformes (h constante) ou não-uniformes (h variável), e não há dúvida na literatura sobre esta afirmação. Para o problema 1A, a equação do erro de discretização, Eq. (3.4), possui apenas um termo. No problema 1B, a equação do erro de discretização apresenta infinitos termos de erro. Conseqüentemente, para o problema 1A, $p_E = 1$ para qualquer que seja o valor de h , isto é, para qualquer tamanho da malha. Já para o problema 1B, $p_E \rightarrow 1$ para $h \rightarrow 0$, quando passa a dominar a ordem assintótica (p_L), como exposto na seção 2.6.1 e 3.3.1.

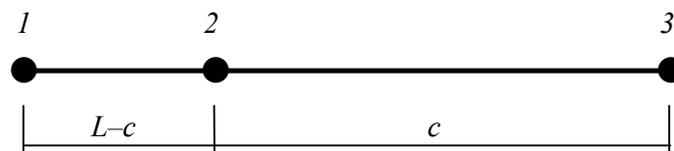
Como para o problema 1A, em qualquer tamanho de malha a ordem observada deve ser unitária, o que se verifica é que existem combinações de configuração de malha fina e de malha grossa que esta análise falha, indicando que o valor da razão de refino

unidimensional (q), dada pela Eq.(3.41), não foi calculada adequadamente, confirmando que a Eq.(3.41) não pode ser aplicada indiscriminadamente.

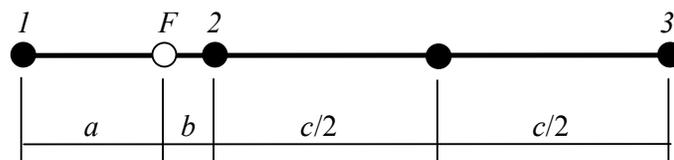
Os resultados apresentados foram obtidos para os modelos matemáticos definidos pelas Eqs. (3.11) e (3.12), problemas 1A e 1B, usando malha grossa não-uniforme e malha fina uniforme e não-uniforme. Com estes resultados pôde-se analisar que tipo de refino, uniforme ou não-uniforme, reproduz a ordem teórica das aproximações, dada pela Tabela 3.1 e obtida na análise *a priori*, apresentada na seção 3.3.1.

3.3.2.1 Resultados para malha grossa não-uniforme no problema 1A

Inicialmente, os resultados do problema 1A foram obtidos partindo-se de uma malha grossa não-uniforme de comprimento unitário, com dois elementos, que pode ser vista na Fig. 3.3.a. Para entender o efeito do refino de malha na ordem do erro de discretização, manteve-se a coordenada do ponto 2 fixa nas malhas grossa e fina e variou-se apenas a posição do ponto flutuante (F) da malha fina.



(a) malha grossa não-uniforme.



(b) malha fina não-uniforme.

Figura 3.3 – Refino de malha não-uniforme para análise da razão de refino (q).

Desta forma, a malha grossa é não-uniforme e sofre refino uniforme e não-uniforme, conforme os valores de c , a e b .

A Figura 3.4 e a Tabela A.2 apresentam os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) no problema 1A, com $c = 3L/4$. Na Fig. 3.4, para $a/(L-c) = 0,5$ o valor da ordem efetiva nos pontos 2 e 3 é $p_E = 1$ e coincide com a ordem assintótica (p_L).

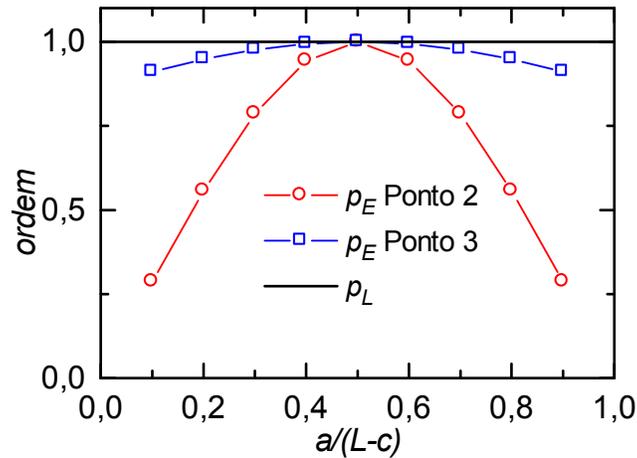


Figura 3.4 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1A para as malhas da Fig. 3.3.

Como no caso de malha grossa uniforme, o ponto 2 possui a montante menos pontos do que o ponto 3, desta forma, apresenta ordem efetiva menor para cada malha fina.

Observando que as curvas da ordem efetiva (p_E) apresentam valores distintos do valor da ordem assintótica (p_L), definida *a priori*, investigou-se a possibilidade de existir uma expressão para o cálculo da razão de refino (q) que reproduzisse sempre $p_E = p_L$.

Através da Eq. (2.43), isolando o termo da razão de refino (q), chega-se a

$$q = 10^\alpha, \quad \alpha = \left[\frac{\log\left(\frac{\Phi - \phi_g}{\Phi - \phi_f}\right)}{p_E} \right] \quad (3.42)$$

Com a Eq.(3.42), extraiu-se para cada problema qual seria o valor correto da razão de refino (q) que resultaria para a ordem efetiva o valor da ordem assintótica (p_L), isto é, $p_E = p_L$. Verifica-se que existe uma curva distinta para o valor de (q), particular deste problema, para os pontos 2 e 3, e portanto, não existe uma regra única para o seu cálculo. Porém, no caso do refino ser uniforme, isto é, $a = (L-c)/2$, a curva passa pelo ponto onde $q = 2$. Outros problemas testados apontam para esta mesma conclusão. A Figura 3.5 e a Tabela A.3 e a apresentam os resultados.

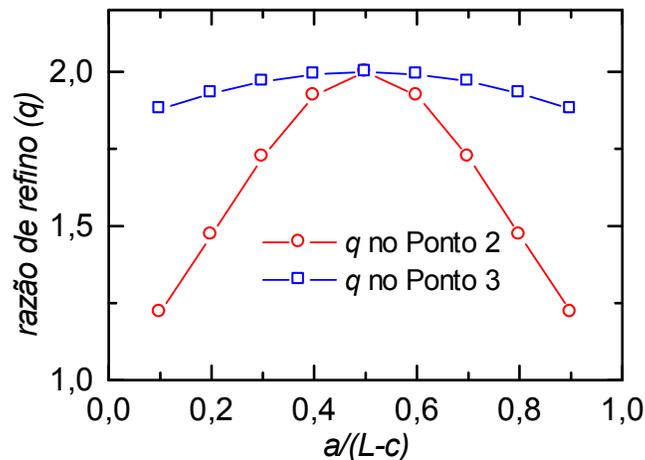


Figura 3.5 – Valor da razão de refino (q) que reproduz a ordem assintótica (p_L), para as malhas da Fig. 3.3 com $c = 3L/4$.

3.3.2.2 Resultados para malha com $h \rightarrow 0$ no problema 1B

Para equações do erro de discretização com mais de um termo, a ordem assintótica (p_L) domina a equação somente quando $h \rightarrow 0$ (seção 2.6.1). Os próximos resultados analisam o comportamento da ordem efetiva (p_E) do erro de discretização nestas situações.

O modelo matemático representado pela Eq.(3.12), problema 1B, tem solução analítica dada pela Eq.(3.14). A solução numérica do problema 1B, é dada através da Eq.(3.16) em que se usou a aproximação (λ_{UDS}^i). A equação do erro de discretização, neste caso, tem infinitos termos porque o erro de truncamento da aproximação λ_{UDS}^i é dado pela Eq.(3.4). Assim, a ordem assintótica (p_L) domina a equação do erro somente quando o tamanho (h) dos elementos da malha tender a zero, isto é, $p_E \rightarrow p_L = 1$ quando $h \rightarrow 0$.

Para a obtenção da solução numérica do problema 1B, a malha utilizada está representada na Fig. 3.6, e difere da malha da Fig. 3.3 apenas no número de nós, que neste caso é maior. A malha fina não-uniforme representada na Fig. 3.6.b foi construída da mesma forma que a malha fina não-uniforme da Figura 3.3.b.

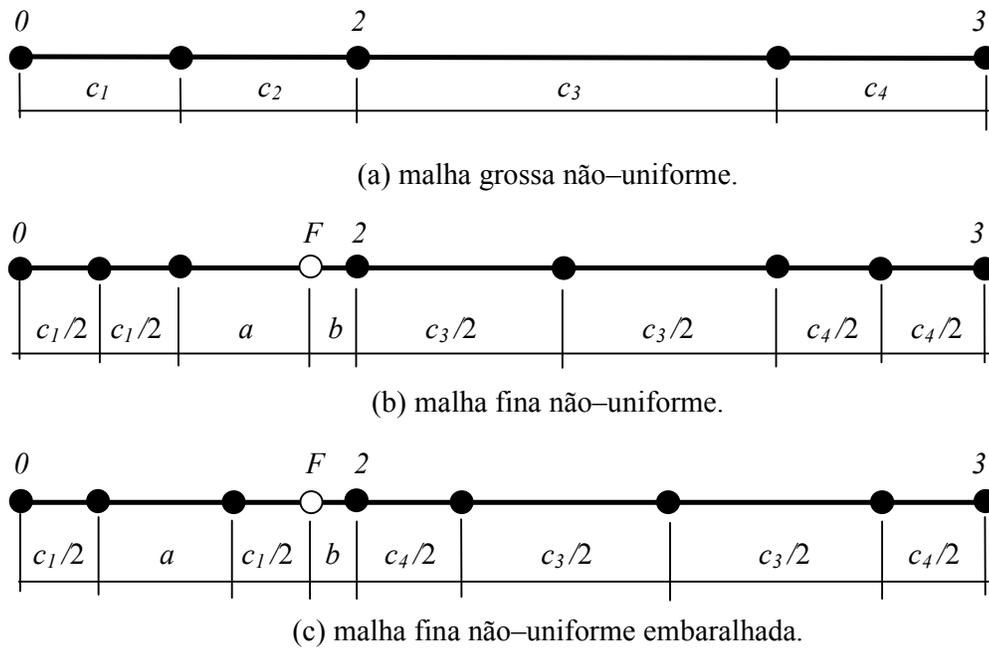


Figura 3.6 – Refino de malha não-uniforme e malha embaralhada.

A Figura 3.7 e a Tabela A.4 e a apresentam os resultados obtidos, onde três pares de malha do tipo (a) e (b) da Fig. 3.6 foram usados: i) malhas de tamanho 250 e 500 elementos, ii) malhas de tamanho 2500 e 5000 elementos, iii) malhas de tamanho 25000 e 50000 elementos. A coordenada do Ponto 2 é $x = 0,5$. O ponto flutuante F é sempre o ponto a esquerda do ponto 2 e a distância entre eles é (b) . O ponto a esquerda de F está a uma distância (a) . Note que quando $h \rightarrow 0$, $p_E \rightarrow p_L = 1$ para qualquer valor da relação $a/(a+b)$.

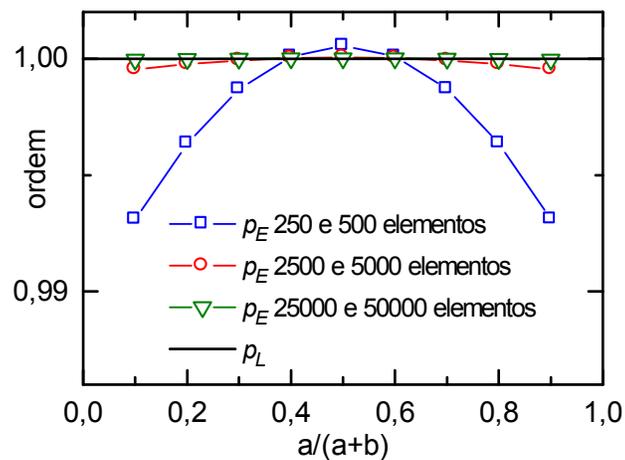


Figura 3.7 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1B no ponto 2, para três pares de malha do tipo da Fig. 3.6 (a,b).

Observou-se ainda que, quando $h \rightarrow 0$ na malha fina representada na Fig. 3.6.b, pode-se trocar a posição dos elementos da malha de forma aleatória tanto à esquerda quanto à direita do Ponto 2, conforme mostra a Fig. 3.6.c, sem que se altere a tendência da curva de p_E , que é $p_E \rightarrow p_L=1$. Isso significa que, ao se refinar uma malha não-uniforme de modo uniforme, isto é, dividindo-se cada elemento da malha em partes iguais, pode-se reagrupar os elementos da malha fina sem que a ordem efetiva seja alterada.

Os resultados estão mostrados na Figura 3.8 e na Tabela A.5, para os pontos 2 e 3, com \bar{h} definido pela Eq. 3.1, obtido para 7 pares de malhas com malha fina de tamanho (N_f) 50, 100, ...50000 elementos, usando os refinamentos da Fig. 3.6.c, com $a/(a+b) = 0,5$.

Da Figura 3.8 e da Tabela A.5, pode-se verificar que, quando $h \rightarrow 0$, não importa a ordem com que os elementos da malha fina estejam dispostos, importa apenas se eles foram obtidos com refino uniforme. Em qualquer caso, para o maior valor de h da malha grossa e da malha fina, ou, para o menor valor de h da malha grossa e da malha fina, a relação h_g/h_f é igual a dois, isto é, igual a razão de refino de malhas (q).

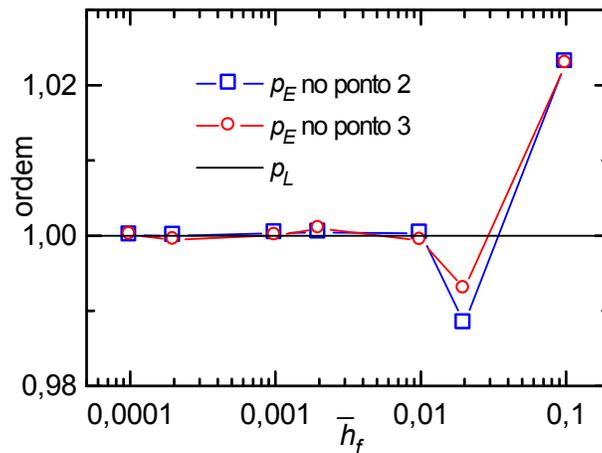


Figura 3.8 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1B, para malhas do tipo da Fig. 3.6 (a,c).

Com os resultados apresentados na Figura 3.8 e na Tabela A.5 pode-se afirmar que a definição usual de razão de refino empregada com malhas irregulares, Eq. (3.41), só é correta quando uma malha não-uniforme é refinada de modo uniforme, ou seja, quando cada elemento da malha grossa é dividido em um número inteiro de segmentos de igual tamanho para gerar a malha fina, sendo este número constante ao longo da malha e igual à própria razão de refino (q).

3.4 Difusão Unidimensional com Termo Fonte – Problemas 2A e 2B

Para o problema da difusão unidimensional de um escalar com termo fonte, são analisados dois casos, representados pelas seguintes equações

$$\frac{d^2 \Lambda^{2A}}{dx^2} = 12x^2 \quad (3.43)$$

$$\frac{d^2 \Lambda^{2B}}{dx^2} = \frac{e^x}{e-1} \quad (3.44)$$

Nas Eqs. (3.43) e (3.44), os superíndices representam os casos 2A e 2B; as condições de contorno dos problemas são $\Lambda(0) = 0$ e $\Lambda(1) = 1$. As soluções analíticas exatas dos casos 2A e 2B são

$$\Lambda^{2A} = x^4 \quad (3.45)$$

$$\Lambda^{2B} = \frac{e^x - 1}{e - 1} \quad (3.46)$$

Aplicando-se a aproximação numérica λ^{ii}_{CDS} , dada na Eq.(3.8), aos casos 2A e 2B, Eqs. (3.43) e (3.44), obtém-se

$$\Lambda_j^{2A} = \frac{h_{j+1}\Lambda_{j-1}^{2A} + h_j\Lambda_{j+1}^{2A}}{h_j + h_{j+1}} - 6x_j^2(h_j h_{j+1}) \quad (3.47)$$

$$\Lambda_j^{2B} = \frac{h_{j+1}\Lambda_{j-1}^{2B} + h_j\Lambda_{j+1}^{2B}}{h_j + h_{j+1}} - \frac{e^{x_j}}{e-1} \frac{(h_j h_{j+1})}{2} \quad (3.48)$$

As Eqs.(3.47) e (3.48) são as equações discretizadas dos problemas 2A e 2B. Aplicadas as condições de contorno de Dirichlet (Patankar, 1980) para o primeiro e para o último nó da malha, $\Lambda(0) = 0$ e $\Lambda(1) = 1$, e as Eqs.(3.47) e (3.48) para os demais nós, tem-se os sistemas de equações algébricas que fornecem as soluções numéricas dos problemas 2A e 2B. Como a discretização tem um número finito de pontos, o resultado obtido no sistema de equações não é mais Λ (analítico), e sim λ (numérico).

3.4.1 Diferença central em malhas uniformes e não-uniformes

Pela Tabela 3.1, a ordem assintótica para os problemas representados pelas Eqs.(3.47) e (3.48), que usam a aproximação λ_{CDS}^i , é $p_L = 1$ para aproximação em malha não-uniforme e $p_L = 2$ para aproximação em malha uniforme.

Existe dúvida na literatura (Ferziger e Peric, 2001; Santos *et al.*, 1996; Strauss *et al.* 1999) sobre qual é o valor de p_L a ser adotado, 1 ou 2, para realização de estimativas de erro confiáveis, para este caso. Chega-se a afirmar que existe uma incoerência (Santos *et al.*, 1996) na análise *a priori* da ordem do erro pela série de Taylor com a análise *a posteriori*, decorrente dos resultados numéricos. O que se busca nesta seção é estabelecer quais as combinações de configuração de malha fina e de malha grossa em que é possível afirmar com certeza o valor de p_L que efetivamente se observa na análise *a posteriori*, feita com os resultados numéricos através de p_E .

Para o problema 2A, a equação do erro de discretização, Eq.(3.4), possui apenas um termo. No problema 2B, a equação do erro de discretização apresenta infinitos termos de erro, e consequentemente, $p_E \rightarrow p_L$ para $h \rightarrow 0$, quando passa a dominar a ordem assintótica (p_L). A seguir são apresentados os resultados para malha grossa uniforme e não-uniforme.

3.4.1.1 Resultados para malha grossa uniforme e não-uniforme no problema 2A

Os resultados foram obtidos primeiramente com o refino apresentado na Fig. 3.3, em que na malha grossa mantém-se fixa a coordenada do ponto 2 e na malha fina varia-se a posição do ponto flutuante (F). Quando $c = L/2$ a malha grossa é uniforme, do contrário é não-uniforme. Quando $a/(L-c) = 0,5$ a malha fina sofre refino uniforme, do contrário o refino é não-uniforme. Como a solução analítica exata é conhecida para cada caso, aplicou-se a Eq.(2.43) para calcular a ordem efetiva (p_E) no ponto 2. Para o cálculo da razão de refino (q), utilizou-se a Eq. (3.41).

A Figura 3.9 e a Tabela A.6 apresentam os resultados de λ e p_E no ponto 2 para o modelo matemático representado pela Eq.(3.43), problema 2A, usando os refinamentos apresentados na Fig. 3.3. No caso da malha grossa uniforme ($c = L/2$), a ordem efetiva (p_E) se iguala à ordem assintótica (p_L) da aproximação para malha uniforme, $p_E = p_L = 2$ (ver

Tabela 3.1), somente quando $a/(L-c) = 0,5$ ou $a = L/4$, isto é, quando o refino é uniforme. Nos valores $a/(L-c) \leq 0,3$ e $a/(L-c) \geq 0,8$ não foi possível o cálculo de (p_E) devido a argumento negativo na função logarítmica. Para que a malha grossa da Fig. 3.3 seja não-uniforme, foi adotado $c = L/4$. Neste caso, a ordem efetiva (p_E) se iguala à ordem assintótica (p_L) da aproximação para malha uniforme, $p_E = p_L = 2$, também quando $a/(L-c) = 0,5$, isto é, quando o refino é uniforme.

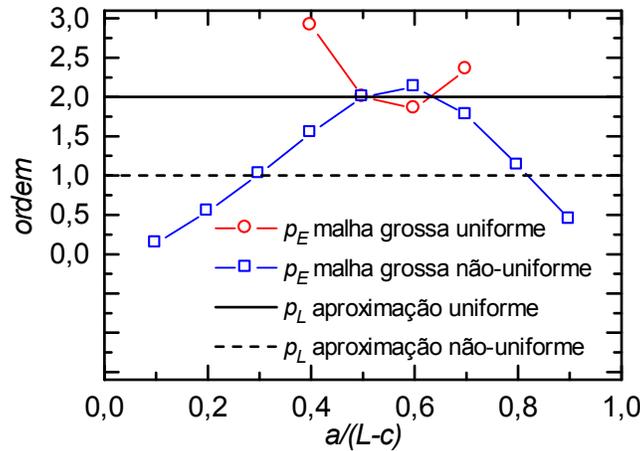


Figura 3.9 – Ordem efetiva (p_E) do problema 2A no ponto 2, para as malhas da Fig. 3.3.

Da Figura 3.9, pode-se concluir que, para este problema, só existe uma situação em que a ordem efetiva (p_E) coincide com a ordem assintótica da aproximação numérica (p_L) . Somente partindo-se de uma malha grossa uniforme ou não-uniforme e refinando esta malha de modo uniforme, isto é, dividindo-se os elementos da malha em partes iguais, verifica-se que a ordem efetiva (p_E) das soluções numéricas é igual a ordem assintótica (p_L) da aproximação λ^i_{CDS} em malha uniforme. Desta forma, para o problema 2A, é correto assumir o valor de p_E igual ao valor de p_L da aproximação numérica somente na configuração de refino uniforme.

3.4.1.2 Resultados para malha com $h \rightarrow 0$ no problema 2B

Para se verificar o comportamento da ordem efetiva no caso da equação do erro de discretização apresentar mais de um termo em modelos difusivos, utilizou-se o modelo matemático representado pela Eq.(3.44), problema 2B, cuja solução analítica é dada pela

Eq.(3.46). As soluções numéricas foram obtidas usando as malhas representadas na Fig. 3.3. A solução numérica do problema 2B, é dada através da Eq.(3.48) em que se usou a aproximação (λ_{CDS}^{ii}).

A equação do erro de discretização, neste caso, tem infinitos termos porque o erro de truncamento da aproximação (λ_{CDS}^{ii}) é dado pela Eq.(3.10). Assim, a ordem assintótica (p_L) domina a equação do erro somente quando o tamanho (h) dos elementos da malha tender a zero, isto é, $p_E \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$.

A Figura 3.10 e a Tabela A.7 apresentam os resultados obtidos para o problema 2B no ponto 2 na coordenada $x = L/2$, com \bar{h} definido pela Eq. 3.1, para 7 pares de malhas com malha fina de tamanho (N_f) 50, 100, 500,..., 50000 elementos. A malha grossa é não-uniforme, conforme Fig. 3.6.a, e a malha fina é obtida com refino: i) uniforme, conforme a Fig. 3.6.b, com $a/(a+b) = 0,5$; ou ii) não-uniforme, conforme a Fig. 3.6.b, com $a/(a+b)$ igual a um valor aleatório entre 0 e 1, malha que está também representada na Fig. 3.1.b.

Para o problema 2B, a Figura 3.10 e a Tabela A.7 mostram que, quando $h \rightarrow 0$, o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) somente quando o refino é uniforme.

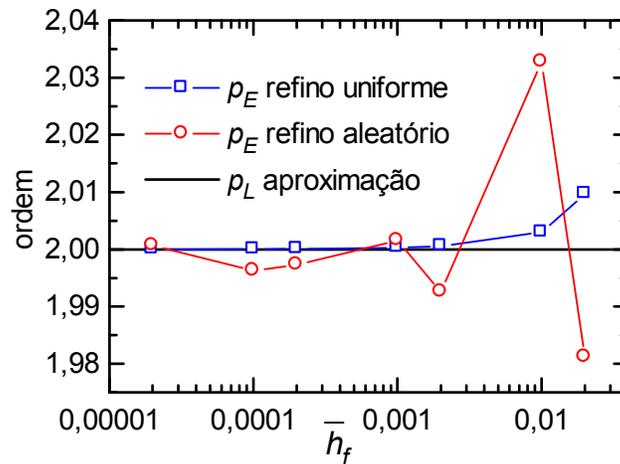


Figura 3.10 – Ordem efetiva (p_E) do problema 2B no ponto 2, para 7 pares de malhas do tipo da Fig. 3.6.a e 3.6.b.

Com os resultados obtidos para os problemas 2A e 2B, pode-se verificar que na análise *a posteriori*, o uso da aproximação de diferença central (λ_{CDS}^{ii}) em malhas uniformes e não uniformes têm ordem assintótica (p_L) igual a dois, somente quando o refino de malha é feito de modo uniforme, ou seja, quando cada elemento da malha grossa

é dividido em um número inteiro de segmentos de igual tamanho para gerar a malha fina, sendo este número constante ao longo da malha e igual à própria razão de refino (q).

Assim, o que se recomenda para uma análise de erro de discretização que utilize o esquema de interpolação de diferença central (λ_{CDS}^{ii}) em malhas uniformes ou não-uniformes, é assumir o valor da ordem assintótica igual a dois e refinar a malha de modo uniforme, garantindo com isso, uma análise mais confiável do erro de discretização.

3.5 Integral Numérica – Problemas 3A e 3B

Para entender o efeito do pós-processamento dos resultados numéricos na obtenção de valores globais, utilizou-se o problema da integração de funções espaciais dadas por

$$\Lambda_m^{3A} = \int_a^b x^2 dx \quad (3.49)$$

$$\Lambda_m^{3B} = \int_a^b \frac{(e^{10x} - 1)}{(e^{10} - 1)} dx \quad (3.50)$$

Nas Eqs. (3.49) e (3.50), os superíndices representam os problemas 3A e 3B. O comprimento do domínio é $L = 1$, e os limites de integração são a e b . As soluções analíticas exatas dos casos 3A e 3B são

$$\Lambda_m^{3A} = \frac{x^3}{3} \Big|_a^b \quad (3.51)$$

$$\Lambda_m^{3B} = \frac{(e^{10x} - 10x)}{10(e^{10} - 1)} \Big|_a^b \quad (3.52)$$

Os problemas 3A e 3B foram resolvidos usando a regra do trapézio, que, aplicada nas Eqs.(3.49) e (3.50) fornece

$$\lambda_m^{3A} = \frac{1}{2} \sum_j^N [(x_j^2 + x_{j-1}^2) h_j] \quad (3.53)$$

$$\lambda_m^{3B} = \frac{1}{2(e^{10} - 1)} \sum_j^N \left[(e^{10x_j} + e^{10x_{j-1}} - 2) h_j \right] \quad (3.54)$$

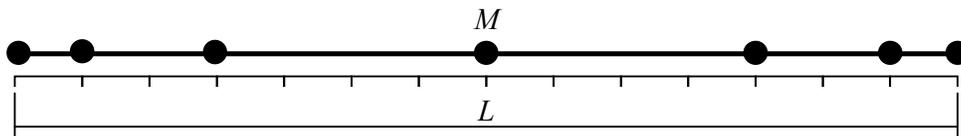
onde N é o número de elementos da malha. Para os problemas 3A e 3B, os valores de λ_m não dependem da variável dependente primária (λ), mas sim da variável independente (x). Isto afasta a possibilidade da análise numérica conter o erro de discretização que estaria presente na solução de λ , chamado erro de propagação ou poluição (Marchi, 2001).

Desta forma, na variável secundária (λ_m) estará presente somente o erro de discretização decorrente do processo de integração numérica, onde é possível analisar a condição de pós-processamento de resultados numéricos para a obtenção de valores globais. Segundo Spiegel (1992), o erro de discretização para a regra do trapézio em malha uniforme, no intervalo de integração $x = [0;a]$, é dado por

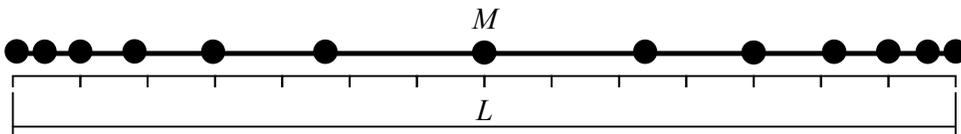
$$\varepsilon(\text{trapézio})_L \leq \frac{\text{máx} |\Lambda_x^i|}{12} (ah^2) \quad (3.55)$$

3.5.1 Malhas em progressão geométrica

Para se obter uma discretização com refino local pode-se usar malhas em progressão geométrica, Figura 3.11. Esta técnica permite gerar uma malha sobre o domínio, concentrando maior número de pontos em regiões específicas.



(a) malha grossa com progressão geométrica à esquerda e à direita do Ponto M .



(b) malha fina com refino em progressão geométrica à esquerda e à direita do Ponto M .

Figura 3.11 – Malha grossa e fina com progressão geométrica.

A Figura 3.11.a mostra uma malha grossa que usa progressão geométrica, com razão (r) igual a dois, à esquerda do ponto médio (M) da malha, e razão (r) igual a 0,5 à direita do ponto médio (M).

O efeito obtido é a concentração de pontos nas extremidades do domínio. Na Figura 3.11.b está representado o refino da malha da Figura 3.11.a, que é uma malha também construída com progressão geométrica. Para as malhas das Figuras 3.11.a. e 3.11.b a razão de refino de malha (q), dada pela Eq. (3.41), é dois.

Como visto na seção 3.3.1.2, a literatura recomenda que uma malha em progressão geométrica de razão r_g seja refinada usando a razão r_f dada pela Eq.(3.30) (Ferziger e Peric, 2001). Usando a Eq. (3.30), espera-se que (Ferziger e Peric, 2001): i) para o problema 3A, $p_E = p_L$ para qualquer tamanho de malha devido a equação do erro de truncamento (ε) possuir um termo; e ii) para o problema 3B, $p_E \rightarrow p_L$ somente quando $h \rightarrow 0$ devido a equação do erro de truncamento (ε) possuir infinitos termos. Porém, pela análise apresentada na seção 3.3.1.2, para o problema 3A, $p_E \rightarrow p_L$ se $r_{gf} \rightarrow 1$, seja qual for o tamanho da malha grossa. A seguir são apresentados os resultados obtidos para os problemas 3A e 3B usando malhas construídas com progressão geométrica.

3.5.1.1 Resultados para malhas em PG no problema 3A

Para estudo do comportamento do refino de malha em PG, o problema 3A, que é um problema de variável global, foi resolvido no domínio $L = 1$ usando a malha grossa e fina com progressão geométrica, como representada na Figura 3.11.

A Figura 3.12 e a Tabela A.8 mostram os resultados obtidos para o problema 3A, usando malha grossa com progressão geométrica de razão (r_g) à esquerda do ponto central da malha, e o inverso de r_g à direita do ponto central, com tamanhos 100 e 1000 elementos (h_j). A razão de refino de malhas (q) entre a malha grossa e fina, dada pela Eq. (3.41), é dois. Estes resultados mostram que mesmo que a equação do erro de discretização (ε) possua um termo, como é o caso do problema 3A, o valor de $p_E \rightarrow p_L$ somente quando o valor de $r_{gf} \rightarrow 1$, isto é, as malhas grossa e fina passam a ser uniformes. Estes resultados estão em conformidade com a análise *a priori* apresentada na seção 3.3.1.2.

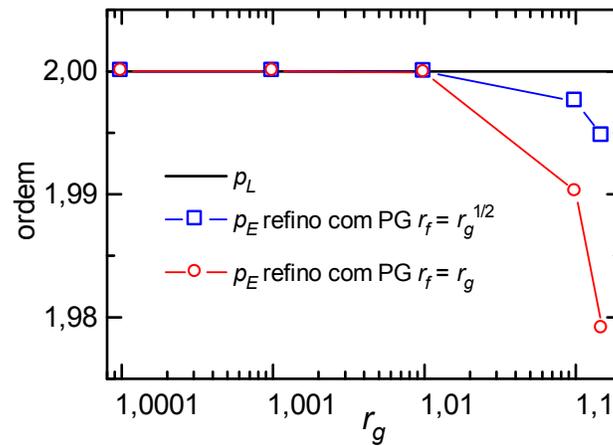


Figura 3.12 – Ordem efetiva do problema 3A, para malha grossa com PG de razão r_g e $N_g=1000$.

Outra forma de verificar a tendência do valor da ordem efetiva (p_E) para o caso de malha grossa com PG, é variar a razão de refinamento de malha (q).

Os resultados são mostrados na Figura 3.13 e na Tabela A.9, para o problema 3A, com configuração de malhas representada na Figura 3.11, e com a malha grossa de tamanho 100 elementos (h_j) e $r_g = 1,01$. Os valores de q são 2, 4, 6, ..., 128, o que implica em malha fina de tamanho 200, 400, 600, ..., 12800 elementos.

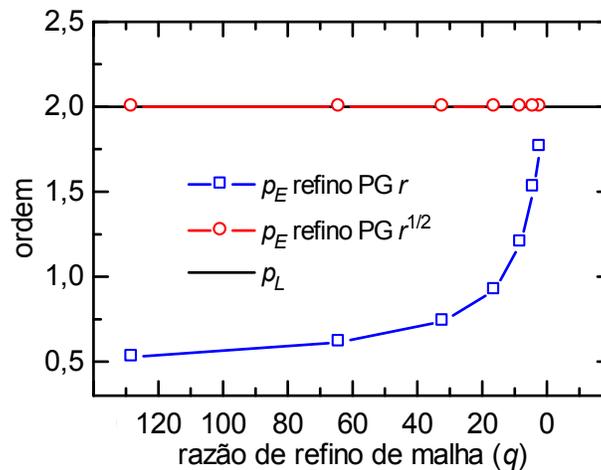


Figura 3.13 – Ordem efetiva do problema 3A, para malha grossa com $N_g = 1000$ e $r=1,01$.

Pode-se verificar pela Figura 3.13 que, para o problema 3A, a ordem efetiva (p_E) se afasta do valor da ordem assintótica (p_L) para o refino com PG de razão $r_f = r_g$. Isto se deve ao fato de que o refino com razão da PG constante, dependendo da forma como a malha é construída, pode levar a redução do tamanho h dos elementos da malha apenas localmente, o que não garante que todos os elementos da malha sofreram redução de tamanho igual ao valor da razão de refino de malha (q). Quando o erro numérico deixa de ser reduzido devido à não homogeneidade na redução do tamanho (h) dos elementos da malha, o valor da ordem efetiva (p_E), conforme a Eq. (2.42), decresce à medida que a razão de refino (q) é aumentada, isto é, quando $h \rightarrow 0$ localmente.

Pela Figura 3.13 também se pode verificar que o valor da ordem efetiva (p_E) se aproxima do valor de p_L para o refino com PG de razão $r_f = \sqrt[q]{r}$. Isto se deve ao fato de que o aumento do valor de q implica em $h \rightarrow 0$ e, portanto, $p_E \rightarrow p_L$ caso $r_{g,f} \rightarrow 1$.

3.5.2 Intervalo de integração variável

Da literatura (Fortuna, 2000; Spiegel, 1992), sabe-se *a priori* que a ordem da integração numérica usando a regra do trapézio é dois, o que pode ser confirmado pela Eq.(3.55). Porém, sabe-se que o erro numérico de variáveis secundárias obtidas por integração numérica, como por exemplo, o fluxo de massa, pode apresentar um comportamento particular quando os limites de integração forem definidos em função de valores máximos ou mínimos da variável de interesse (λ) Suero (2006).

A definição dos intervalos de integração pode seguir dois critérios: i) intervalo de integração fixado pela variável independente, isto é, integrar $f(x)$ no intervalo $x = [0; a]$; ou ii) intervalo de integração fixado pela variável dependente, isto é, integrar $f(x)$ no intervalo de x onde $f(x) = [0; b]$.

O primeiro critério é mais natural, pois, normalmente deseja-se conhecer o valor da variável global dentro de uma região do espaço já definida. O segundo critério chama a atenção por sua peculiaridade. Quando se deseja calcular, por exemplo, uma integral num intervalo à esquerda do ponto de máximo de uma função, a região de integração pode mudar de acordo com o refino da malha, pois, no refino da malha, o perfil da solução numérica pode ser deslocado, levando o ponto de referência limite de integração para outra posição espacial, alterando o tamanho do intervalo de integração.

A Figura 3.14 ilustra um exemplo onde se deseja calcular a integral à esquerda do ponto de máximo da função, que se desloca quando se obtém a solução numérica em malha fina, modificando a posição e tamanho do intervalo de integração, que passa do tamanho I_g para o tamanho I_f .

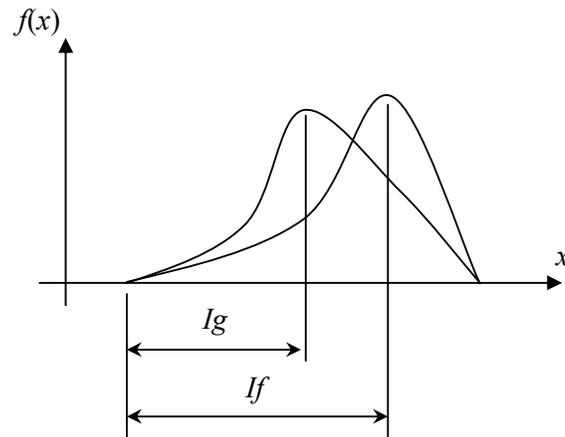


Figura 3.14 – Intervalo de integração com base em $f(x)$ na malha grossa (I_g) e na malha fina (I_f).

Ao se definir um intervalo de integração com base em x ou $f(x)$ poderão ocorrer situações em que as extremidades do intervalo de integração não coincidem com os pontos da discretização. Isto implica em adicionar ou suprimir parte do intervalo, ou considerar uma fração desta discretização no processo de integração numérica. Para a regra do trapézio, por exemplo, no caso da extremidade não coincidir com a discretização, frações de trapézios farão parte da integração numérica.

O problema 3B foi resolvido para malha grossa não-uniforme. Os resultados são mostrados a seguir.

3.5.2.1 Resultados para malha grossa não-uniforme no problema 3B

As Figuras 3.15 e 3.16 e as Tabelas A.10 e A.11 mostram os resultados obtidos para o problema 3B, cuja solução numérica é obtida com a Eq.(3.54), em que a regra do trapézio foi empregada para uma malha grossa não-uniforme para dois intervalos de integração: intervalo $x = [0;0,5]$ e intervalo de x onde $f(x) = [0;0,7]$. Os refinamentos adotados na obtenção da malha fina são: i) uniforme e ii) não-uniforme ou aleatório. As malhas finas

têm tamanho 50, 100, 500,..., 50000 elementos (h_j). O algoritmo implementado neste trabalho considera frações de trapézios para totalizar a integração no caso dos intervalos baseados em x ou $f(x)$ não coincidirem com a discretização.

Para o problema 3B, a ordem efetiva (p_E) tende à ordem assintótica (p_L) quando $h \rightarrow 0$, pois, a função $f(x)$ a ser integrada na Eq.(3.50) é uma exponencial e possui infinitos termos de derivada não nula. Pela Figura 3.15, verifica-se que esta tendência no valor de p_E é verificada para o refino uniforme. No caso do refino aleatório, observa-se que o valor de p_E não possui tendência definida, o que confirma as análises anteriores, isto é, refinamentos aleatórios não garantem que $p_E \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$.

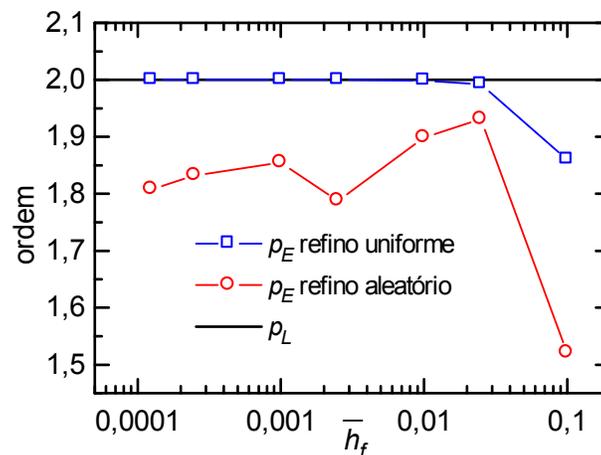


Figura 3.15 – Ordem efetiva do problema 3B, para malha grossa não-uniforme e intervalo de integração fixo $x = [0; 0,5]$.

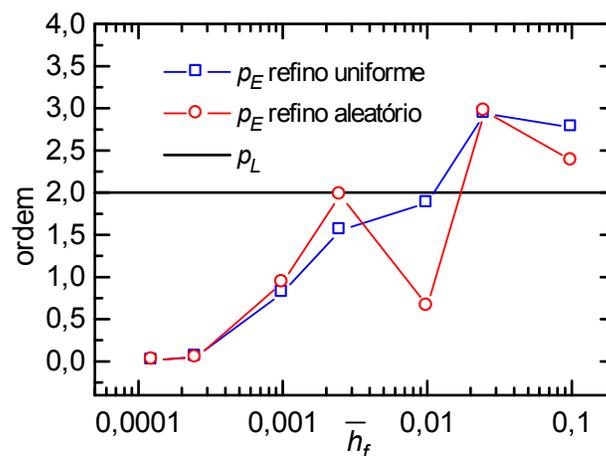


Figura 3.16 – Ordem efetiva do problema 3B, para malha grossa não-uniforme e intervalo de integração variável em que $f(x) = [0; 0,7]$.

Conforme a Figura 3.16, pode-se afirmar para o problema 3B que, considerando um intervalo de integração variável, não há confirmação de que $p_E \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$. A tendência da ordem efetiva para valor nulo, observada na Figura 3.16, se deve ao fato do erro, ao ser reduzido, oscilar muito pela presença das frações de trapézios na integração.

Com os resultados apresentados até aqui para o problema 3B, pode-se afirmar que o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L), quando o intervalo de integração é fixo em x , com extremidades coincidentes com a discretização e, quando a discretização segue um refino uniforme. Desta forma, para que sejam confiáveis as estimativas de erro baseadas na ordem assintótica (p_L), de variáveis globais que usam a regra do trapézio como aqui apresentado, os intervalos de integração devem ser fixos e discretos, e os refinamentos de malha devem ser do tipo uniforme.

As próximas seções apresentam as soluções numéricas e estimativas de erro numérico para o problema da advecção/difusão unidimensional.

3.6 Advecção/Difusão Unidimensional – Problemas 4A e 4B

Os efeitos advectivos/difusivos estão presentes em grande parte dos problemas de engenharia e *CFD*, daí a importância na análise das soluções numéricas envolvendo estes efeitos. O problema da advecção/difusão unidimensional de um escalar é representado pela seguinte equação

$$Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2} \quad (3.56)$$

onde Pe é o número de Peclet, e as condições de contorno do problema são $\Lambda(0) = 0$ e $\Lambda(1) = 1$. O domínio de cálculo é unitário e a solução analítica exata é dada por (Ferziger e Peric, 2001)

$$\Lambda = \frac{e^{xPe} - 1}{e^{Pe} - 1} \quad (3.57)$$

O termo de derivada primeira da Eq. (3.56) foi aproximado usando dois esquemas de interpolação diferentes, λ_{UDS}^i e λ_{CDS}^i , dados pelas Eqs. (3.3) e (3.6). Para o termo de derivada segunda da Eq. (3.56) foi usado o esquema de interpolação λ_{CDS}^{ii} , dado pela Eq.

(3.9). Desta forma, têm-se duas combinações diferentes de interpolação para o problema representado pela Eq. (3.56), cujas equações discretizadas são dadas por

$$\Lambda_j^{4A} = \frac{[2h_{j+1} + Pe(h_j + h_{j+1})h_{j+1}]\Lambda_{j-1}^{3A} + 2h_j\Lambda_{j+1}^{3A}}{(h_j + h_{j+1})(2 + Pe h_{j+1})} \quad (3.58)$$

$$\Lambda_j^{4B} = \frac{(2 + Pe h_j)h_{j+1}\Lambda_{j-1}^{3A} + (2 - Pe h_{j+1})h_j\Lambda_{j+1}^{3A}}{2(h_j + h_{j+1})} \quad (3.59)$$

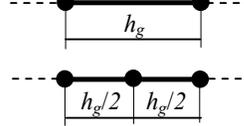
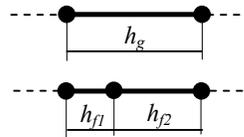
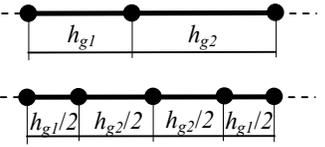
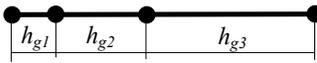
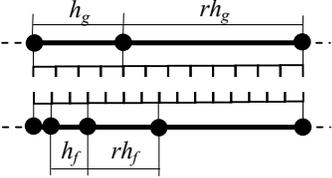
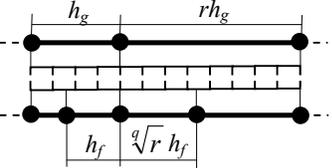
As Eqs.(3.58) e (3.59) são as equações discretizadas da Eq.(3.56), onde os superíndices $4A$ e $4B$ representam as combinações de esquemas de interpolação UDS/CDS e CDS/CDS, que serão chamados nesta seção de problemas $4A$ e $4B$. Aplicadas as condições de contorno de Dirichlet (Patankar, 1980) para o primeiro e para o último nó da malha, $\Lambda(0) = 0$ e $\Lambda(1) = 1$, e as Eqs (3.58) e (3.59) para os demais nós, tem-se os sistemas de equações algébricas que fornecem as soluções numéricas (λ) para os problemas $4A$ e $4B$.

3.6.1 Principais discretizações empregadas na obtenção das soluções numéricas

Na Tabela 3.2 é apresentado um resumo das discretizações para malha grossa e malha fina, empregadas nas soluções numéricas dos problemas deste capítulo. As discretizações apresentadas são as principais discretizações usadas na obtenção de soluções numéricas unidimensionais em diferenças finitas.

Pelas análises apresentadas até aqui, algumas combinações de configuração de malha grossa e malha fina garantem concordância entre o valor da ordem efetiva (p_E) com o valor da ordem assintótica (p_L), isto é, $p_E = p_L$ ou $p_E \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$. Dentro do escopo deste texto, o próximo passo é estimar o erro numérico para as soluções obtidas destas discretizações.

Tabela 3.2 – Malha grossa e seus refinamentos.

Malha grossa		Tipo de refino (razão $q=2$ constante)	
uniforme		uniforme	
		não-uniforme (aleatório)	
não-uniforme		uniforme embaralhado (ver também Fig.3.8.c)	
com PG de razão r		com PG de razão r	
		com PG de razão $\sqrt[q]{r}$	

A seguir são apresentados os resultados numéricos e as estimativas de erro para os problemas 4A e 4B.

3.6.2 Resultados e estimativas de erro numérico para o problema 4A

Para uma estimativa de erro confiável, as Eqs. (2.33) e (2.36) (Marchi 2001; Marchi e Silva, 2002) precisam ser confirmadas. Assim, neste e em outros capítulos deste trabalho, para cada conjunto com 3 malhas foram observados: i) a ordem assintótica (p_L)

das aproximações empregadas; ii) a ordem efetiva (p_E), calculada pela Eq. (2.43); iii) a ordem aparente (p_U), calculada pela Eq. (2.29); iv) o erro numérico E , calculado pela Eq. (1.1); v) a relação entre a incerteza numérica de Richardson ($U_{Ri}(p_L)$) e o erro numérico (E), com $U_{Ri}(p_L)$ calculado pela Eq. (2.22); vi) a relação entre a incerteza numérica de Richardson ($U_{Ri}(p_U)$) e o erro numérico (E), com $U_{Ri}(p_U)$ calculado pela Eq. (2.30); e vii) a relação entre a incerteza numérica ($GCI(p)$) e o erro numérico (E), com $GCI(p)$ baseado no menor valor entre p_L e p_U , calculada pela Eq. (2.35).

As Tabelas 3.3 a 3.5 mostram os resultados obtidos para a malha não-uniforme com refino uniforme e não-uniforme ou aleatório, representados na Tabela 3.2, para o problema 4A. A solução numérica é obtida empregando a Eq.(3.58), em que a aproximação λ^i_{UDS} foi empregada no termo advectivo e a aproximação λ^{ii}_{CDS} foi usada no termo difusivo. A ordem assintótica (p_L) neste caso é unitária, pois, a ordem da aproximação λ^i_{UDS} domina a equação do erro quando $h \rightarrow 0$. As malhas tem tamanho indicado na Tabela 3.3, o número de Peclet é 10 e a solução analítica para $x = 0,5$ é $\Lambda = 0,006692850924285$.

Tabela 3.3 – Resultados do problema 4A para malha grossa não-uniforme.

análise	N_{sg} N_g N_f	Tipo de refino e λ em $x = 0,5$	
		uniforme	aleatório
1	16	0,02002470141246906130	0,02015261987826550560
	32	0,01267814982366715850	0,01328038408568823700
	64	0,00948764226728411077	0,00970913562328969311
2	80	0,00892354648337364935	0,00891273507827376049
	160	0,00777402890219552022	0,00788831544549611734
	320	0,00722465624392775157	0,00727814638947440335
3	400	0,00711358450458947963	0,00711420245539818534
	800	0,00690200675319672247	0,00692662284130325830
	1600	0,00679712382358716762	0,00680897006784677780
4	2000	0,00677634604275345783	0,00677618675765893561
	4000	0,00673457832753490259	0,00673907238761270716
	8000	0,00671370955575271728	0,00671590959382709508
5	10000	0,00670948048545578612	0,00670948048545578612
	20000	0,00670116334907754508	0,00670201649032688054
	40000	0,00669700649998273331	0,00669744956349745732

Na Tabela 3.3 são apresentados os resultados de λ do problema 4A, no ponto $x = 0,5$, usando malha grossa não-uniforme com refino uniforme e não uniforme ou aleatório, em 5 conjuntos de malhas.

Tabela 3.4 – Resultados do problema 4A para malha grossa não-uniforme, com refino uniforme.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ em $x = 0,5$						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda - \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $Fs=3$
1		1,15538184	1,20328126	0,0027947913	1,14159061	0,87637509	3,42477183
2		1,04488959	1,06517151	0,0005318053	1,03303340	0,94563876	3,09910020
3	1	1,00832876	1,01240803	0,0001042729	1,00585032	0,98876896	3,01755097
4		1,00069671	1,00104253	0,0000208586	1,00048614	0,99904175	3,00145843
5		1,00040881	1,00059651	0,0000041555	1,00030643	0,99947974	3,00091929

Com os resultados da Tabela 3.4, pode-se verificar que para o refino de malha uniforme, quando $h \rightarrow 0$, temos: i) $p_E \rightarrow p_L$, $p_U \rightarrow p_L$ e $E \rightarrow 0$, o que caracteriza diminuição do erro com a redução do tamanho dos elementos da malha, com ordem assintótica (p_L) conhecida *a priori*; ii) $U_{Ri}(p_L)/E > 1 > U_{Ri}(p_U)/E$, o que confirma a Eq. (2.33) (Marchi e Silva, 2002), que implica em garantir que se está em um intervalo convergente onde certamente $p_U \rightarrow p_L$; e iii) $GCI(p)/|E| \rightarrow Fs$, o que confirma a Eq. (2.36), que significa garantir que o estimador é confiável.

Tabela 3.5 – Resultados do problema 4A para malha grossa não-uniforme, com refino aleatório.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ em $x = L/2$						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda - \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $Fs=3$
1		1,03084342	0,94435102	0,0030162847	1,18398918	1,28092571	3,84277714
2		0,89291307	0,74752588	0,0005852954	1,04249749	1,53554333	4,60663000
3	1	0,84992273	0,67296771	0,0001161191	1,01320738	1,70473394	5,11420182
4		0,85037403	0,68016860	0,0000230586	1,00451562	1,66772469	5,00317407
5		0,85945421	0,70872436	0,0000045986	0,99310396	1,56552509	4,69657529

Pelos resultados da Tabela 3.5, pode-se verificar que a estimativa de erro não é confiável para o refino aleatório, pois, quando $h \rightarrow 0$ não se tem $p_U \rightarrow p_L$. Isto reflete na

inacurácia da estimativa de erro U , que, apresenta a tendência $U \rightarrow E$ oscilatória ao se diminuir o tamanho dos elementos da malha.

3.6.3 Resultados e estimativas de erro numérico para o problema 4B

As Tabelas 3.6 a 3.8 mostram os resultados obtidos para a malha grossa e fina em PG, representadas na Tabela 3.2, para o problema 4B, cuja solução numérica é obtida empregando a Eq.(3.59), em que a aproximação λ^i_{CDS} foi empregada no termo advectivo e a aproximação λ^{ii}_{CDS} foi usada no termo difusivo. A ordem assintótica (p_L) neste caso é dois, pois, a ordem das aproximações λ^i_{CDS} e λ^{ii}_{CDS} domina a equação do erro quando $h \rightarrow 0$. O número de Peclet é 10 e as malhas têm tamanho indicado na Tabela 3.6. A construção das malhas com progressão geométrica (PG) é a mesma da seção 3.5.1, em que a razão da PG é r à esquerda do ponto M e o inverso de r à direita de M .

Tabela 3.6 – Resultados do problema 4B para malha grossa e fina com PG.

análise	r_{sg}	N_{sg} N_g N_f	Tipo de refino e λ em $x = L/2$	
			com PG de razão r	com PG de razão $\sqrt[r]{r}$
1	1,1	16	0,00547327938001944056	0,00547327938001944056
		32	0,00625979988431425109	0,00638392355525669100
		64	0,00644977189640985258	0,00658453142993300003
2	1,01	80	0,00664788698133019982	0,00664788698133019982
		160	0,00668030072807321036	0,00668160312293313626
		320	0,00668836600634051867	0,00668971299559275278
3	1,001	400	0,00669110241112674288	0,00669110241112674288
		800	0,00669240076945161640	0,00669241378543865631
		1600	0,00669272524421077320	0,00669273838551209290
4	1,0001	2000	0,00669278150056379535	0,00669278150056379535
		4000	0,00669283343833217484	0,00669283356843501827
		8000	0,00669284642251649024	0,00669284655293948729
5	1,00001	10000	0,00669284815251660996	0,00669284815251660996
		20000	0,00669285022983632898	0,00669285023112922185
		40000	0,00669285074916413088	0,00669285075035882821

Na Tabela 3.6 são apresentados os resultados de λ do problema 4B, no ponto $x = 0,5$, usando malha grossa e fina com PG, em 5 conjuntos de malhas.

Tabela 3.7 – Resultados do problema 4B para malha grossa e fina com PG de razão r .

análise	Estimativa do erro numérico para Λ em $x = L/2$						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda - \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $Fs=3$
1		1,49376541	2,04969748	0,0002430790	0,26050788	0,24887770	0,78152366
2		1,84105863	2,00680957	0,0000044849	0,59943707	0,59567937	1,79831122
3	2	1,95763543	2,00051043	0,0000001256	0,86058393	0,86017808	2,58175181
4		1,98923229	2,00002864	0,0000000045	0,96141362	0,96138817	2,88424087
5		1,99686696	2,00000591	0,0000000001	0,98851388	0,98850848	2,96554166

Tabela 3.8 – Resultados do problema 4B para malha grossa com PG de razão r , e malha fina com PG de razão $\sqrt[4]{r}$.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ em $x = L/2$						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda - \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $Fs=3$
1		1,98103479	2,18250920	0,0001083194	0,61733385	0,52324944	1,85200157
2		1,99912553	2,05568828	0,0000031379	0,86148894	0,81853771	2,58446684
3	2	1,99996515	2,01434430	0,0000001125	0,96144663	0,94880562	2,88433990
4		2,00000668	2,00360246	0,0000000043	0,99012267	0,98683301	2,97036801
5		1,99955541	2,00117635	0,0000000002	0,99511579	0,99403465	2,98534737

Comparando os resultados da Tabela 3.7 e 3.8, pode-se perceber que no caso da malha grossa e fina em PG apresentar a mesma razão (r), é menor a taxa com que o valor de $GCI(p)/|E|$ tende ao valor de Fs . Note que, pela análise *a priori*, não ficou estabelecido que a relação entre a razão da PG da malha fina e da malha grossa deva ser dada pela Eq. (3.30), porém, nesta condição, é maior a taxa com que o valor de $GCI(p)/|E|$ tende ao valor de Fs , o que reflete em uma melhor estimativa do erro.

Com os resultados da Tabela 3.8, pode-se verificar que para o refinamento de malha uniforme, quando $h \rightarrow 0$, temos: i) $p_E \rightarrow p_L$, $p_U \rightarrow p_L$ e $E \rightarrow 0$, o que caracteriza diminuição do erro com a redução do tamanho dos elementos da malha, com ordem assintótica (p_L) conhecida *a priori*; ii) $U_{Ri}(p_L)/E < 1 > U_{Ri}(p_U)/E$, o que não confirma a Eq. (2.33) (Marchi e Silva, 2002), portanto, não se garante um intervalo convergente onde certamente p_U tenderia à p_L ; e iii) $GCI(p)/|E| \rightarrow Fs$, o que confirma a Eq. (2.36), que significa garantir que o estimador é confiável.

3.7 Outros Resultados

Neste trabalho, foram implementados outros algoritmos empregando o *MDF*. Soluções numéricas foram obtidas para os problemas 1D da seção 2.1, com diferentes aproximações e configurações de malha grossa e fina conforme a Tabela 3.9.

Tabela 3.9 – Algoritmos implementados no Método das Diferenças Finitas.

modelo matemático	discretização	
	malha grossa	malha fina
advecção 1D difusão 1D advecção difusão 1D advecção difusão não-linear 1D integral	uniforme não-uniforme com PG	uniforme não-uniforme uniforme embaralhada com PG

Cada modelo matemático da Tabela 3.9 foi resolvido combinando-se discretização na fronteira, malha grossa e malha fina. Todas as simulações foram analisadas, sendo que as soluções numéricas apresentadas neste capítulo fazem parte dos resultados mais significativos encontrados.

3.8 Resumo do Capítulo 3

Na seção 3.1, Figura 3.1, estão apresentadas diferentes discretizações para o *MDF*. Estas discretizações foram escolhidas pelo fato de que, quando combinadas em mais dimensões, representam as principais configurações de malhas cartesianas bidimensionais e tridimensionais.

A seção 3.2 apresentou as principais aproximações numéricas empregadas no *MDF*, que são λ^i_{UDS} , λ^i_{CDS} , λ^{ii}_{CDS} , juntamente com seu erro de truncamento. Na Tabela 3.1 pode-se observar a ordem assintótica de cada uma destas aproximações em malha uniforme e não-uniforme.

Análises *a priori* e *a posteriori* foram apresentadas nas demais seções. Na seção 3.3, para o problema da advecção com termo fonte, a análise *a priori* mostra que o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) somente quando o refino uniforme é empregado ou quando os elementos (h_j) das malhas grossa e fina estão em progressão geométrica com razão de refino (r) tendendo a unidade. Isto se confirma na seção 3.3.2, onde a razão de refino de malhas (q) é obtida a posteriori. Pode-se dizer que, a Eq. (3.41) para o cálculo de q não pode ser aplicada para qualquer tipo de malha grossa e refino, como recomenda a literatura (Roache, 1994; Celik, 2004).

Na seção 3.4 a análise *a posteriori* mostra que somente em refinamentos uniformes pode-se garantir que o valor da ordem efetiva (p_E) da aproximação de diferença central, λ^{ii}_{CDS} , tende ao valor da ordem assintótica (p_L), em concordância com a análise *a priori*, da Tabela 3.1. Isso mostra que a série de Taylor avalia corretamente o valor da ordem assintótica, diferentemente do que se afirma na literatura (Ferziger e Peric, 2001; Santos *et al.*, 1996; Strauss *et al.* 1999).

No caso de variáveis globais, a seção 3.5 mostra a análise *a posteriori* do problema da Integração Numérica. Pelos resultados apresentados, pode-se afirmar que a avaliação de parâmetros globais deve ser realizada em um tamanho fixo do domínio e de extremidades coincidentes com nós da discretização. A não observância destas restrições não garante que em situações práticas, $p_E \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$.

Estimativas (U) do erro numérico (E) são apresentadas na seção 3.6. Pode-se observar pelos resultados apresentados nas Tabelas 3.4 e 3.5 que as estimativas são mais confiáveis no caso do refino uniforme, pois, se aproximam do valor do erro numérico, isto é, $U_{Rf}/E \rightarrow 1$, ou $GCI/|E| \rightarrow Fs$. O refino uniforme é aquele em que os elementos da malha grossa são divididos em partes iguais para se obter a malha fina.

No caso de malhas com progressão geométrica de razão r , deve-se observar que $p_E \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$ e $r \rightarrow 1$. Pelas Tabelas 3.7 e 3.8, pode-se afirmar que quando a relação entre a razão da PG da malha grossa e da malha fina é dada pela Eq. (3.30), as estimativas de erro são mais confiáveis, pois, $GCI/|E|$ tende mais rapidamente para Fs .

No próximo capítulo são apresentados os resultados e análises empregando modelos matemáticos unidimensionais para o Método dos Volumes Finitos.

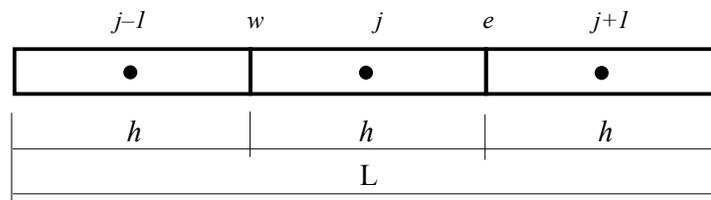
4. Soluções Unidimensionais pelo Método dos Volumes Finitos

Dando continuidade às análises numéricas unidimensionais, este capítulo apresenta as soluções numéricas dos modelos matemáticos 1D, obtidas pelo método dos volumes finitos (*MVF*), descrito na seção 2.4. As equações governantes destes problemas estão apresentadas na seção 2.1 e são reescritas de acordo com as particularidades de cada problema. Como citado no Capítulo 2, todas as soluções numéricas foram obtidas com por método direto *TDMA*. Resultados deste capítulo também são encontrados nas tabelas do apêndice B.

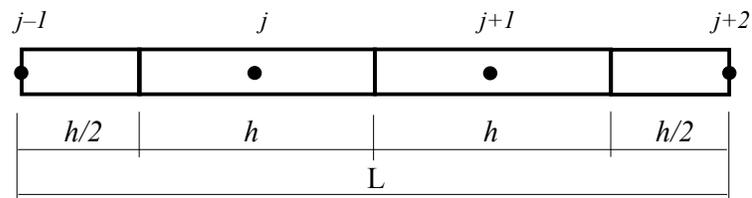
4.1 Discretizações Unidimensionais para Volumes Finitos

As malhas unidimensionais empregadas para a obtenção das soluções numéricas pelo *MVF* têm suas configurações representadas na Figura 4.1. O comprimento L é unitário e o número de volumes (N) é particular de cada solução, sendo indicado oportunamente. De acordo com a seção 2.4.1, as discretizações para volumes finitos podem ser classificadas quanto ao tipo de discretização presente na fronteira ou contorno do domínio e quanto à posição relativa das faces e volumes. Em relação à fronteira têm-se: i) malha com volume inteiro no contorno, como na Fig. 4.1.a; ou ii) malha com meio volume no contorno, como na Fig. 4.1.b. Em relação à posição relativa de centros e faces de volumes tem-se: i) volumes de nós centrados (*VNC*), como nas Figs. 4.1.c e 4.1.e; ii) volumes de faces centradas (*VFC*), como na Fig. 4.1.d; e iii) volumes de nós e faces centradas, como na Fig. 4.1.a, ou seja, uma malha uniforme.

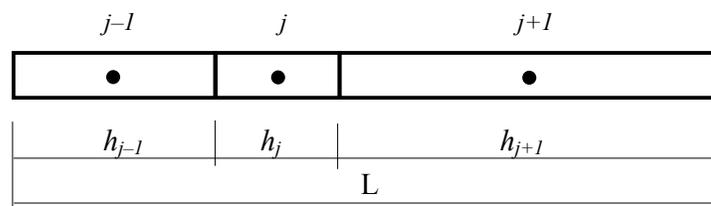
Estas malhas, da mesma forma como as malhas para diferenças finitas, foram escolhidas pelo fato de que, quando combinadas em mais dimensões, representam as principais configurações de malhas cartesianas bidimensionais e tridimensionais para volumes finitos.



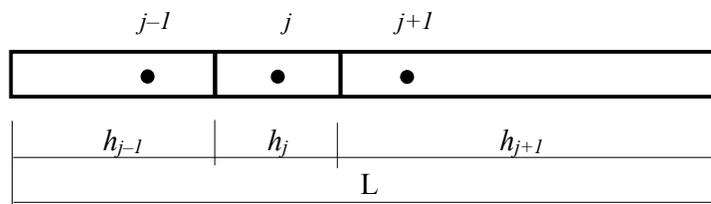
(a) uniforme com volume inteiro na fronteira.



(b) uniforme com meio volume na fronteira.



(c) não-uniforme de nó centrado (VNC).



(d) não-uniforme de face centrada (VFC).

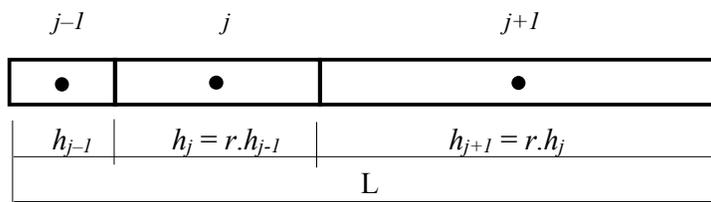
(e) não-uniforme de nó centrado em progressão geométrica de razão r .

Figura 4.1 – Malhas unidimensionais para volumes finitos.

As malhas da Figura 4.1 podem ser combinadas entre si e formar outras configurações envolvendo meio volumes ou volumes inteiros na fronteira, com nós ou faces centradas, conforme convier. No decorrer deste capítulo, quando necessário, outras discretizações serão apresentadas.

Para as malhas não-uniformes da Fig. 4.1, que têm comprimento L e número de volumes N , o tamanho médio da malha (\bar{h}) é dado pela Eq. (3.1).

4.2 Aproximações Numéricas para Volumes Finitos

As equações apresentadas nesta seção foram extraídas de Marchi e Silva (2000). A contribuição desta seção está na generalização das expressões de Marchi e Silva (2000) escrevendo-as em forma de somatórios, o que permite obter o erro numérico (ε) com qualquer número de termos.

Para aplicação do *MVF* nos modelos matemáticos unidimensionais representados na seção 2.1, são necessárias aproximações numéricas para a variável de interesse λ e sua derivada de primeira ordem λ^i nas faces do volume de controle. No caso do valor λ na face do volume de controle, duas aproximações são empregadas neste trabalho: i) aproximação à montante (λ_{UDS}), e ii) aproximação de diferença central (λ_{CDS}). Para a derivada de primeira ordem, a aproximação empregada é a diferença central (λ^i_{CDS}). Estas são aproximações empregadas no *MVF* na solução dos modelos matemáticos unidimensionais apresentados na seção 2.1.

Para obtenção das aproximações, considere inicialmente a Figura 4.2 onde uma face de volume de controle (e) é representada entre os nós P e E .

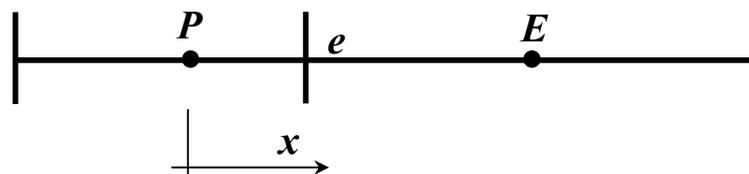


Figura 4.2 – Face de volume de controle não-uniforme.

A posição relativa da face (e) entre os volumes define um fator de interpolação F_e dado por

$$F_e = \frac{x_e - x_P}{\Delta x_e} \quad (4.1)$$

com

$$\Delta x_e = x_E - x_P \quad (4.2)$$

Escrevendo-se a série de Taylor, Eq. (2.44), a partir da face (e) dos volumes, para os nós P e E da Figura 4.2, obtém-se

$$\Lambda_P = \Lambda_e - \Lambda_e^i F_e \Delta x_e + \Lambda_e^{ii} F_e^2 \frac{\Delta x_e^2}{2} - \Lambda_e^{iii} F_e^3 \frac{\Delta x_e^3}{6} + \dots \quad (4.3)$$

$$\Lambda_E = \Lambda_e + \Lambda_e^i (1 - F_e) \Delta x_e + \Lambda_e^{ii} (1 - F_e)^2 \frac{\Delta x_e^2}{2} + \Lambda_e^{iii} (1 - F_e)^3 \frac{\Delta x_e^3}{6} + \dots \quad (4.4)$$

As Eqs. (4.3) e (4.4) são as expansões em série de Taylor para o valor de Λ armazenado nos nós P e E em torno de Λ armazenado na face e . A forma geral das Eqs. (4.3) e (4.4), é dada por

$$\Lambda_P = \sum_{n=0}^{\infty} \left[(-1)^n \cdot \Lambda_e^{(n)} F_e^n \frac{\Delta x_e^n}{n!} \right] \quad (4.5)$$

$$\Lambda_E = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\Lambda_e^{(n)} (1 - F_e)^n \frac{\Delta x_e^n}{n!} \right] \quad (4.6)$$

Multiplicando a Eq. (4.4) por (F_e) e a Eq. (4.3) por $(1 - F_e)$ e somando-as obtém-se

$$\begin{aligned} \Lambda_e = & (1 - F_e) \Lambda_P + F_e \Lambda_E + \Lambda_e^{ii} F_e (F_e - 1) \frac{\Delta x_e^2}{2} - \Lambda_e^{iii} F_e (F_e - 1) (2F_e - 1) \frac{\Delta x_e^3}{6} \\ & + \Lambda_e^{iv} F_e (F_e - 1) (3F_e^2 - 3F_e + 1) \frac{\Delta x_e^4}{24} - \Lambda_e^{v} F_e (F_e - 1) (2F_e - 1) (2F_e^2 - 2F_e + 1) \frac{\Delta x_e^5}{120} + \dots \end{aligned} \quad (4.7)$$

A forma geral da Eq. (4.7) é dada por

$$\Lambda_e = (1 - F_e)\Lambda_P + F_e\Lambda_E + \sum_{n=2}^{\infty} \left[(-1)^{n-1} \Lambda_e^{(n)} \left[F_e (F_e - 1)^n - F_e^n (F_e - 1) \right] \frac{\Delta x_e^n}{n!} \right] \quad (4.8)$$

Com a Eq. (4.7) pode-se obter uma aproximação para λ na face (e) dada por uma interpolação linear entre Λ_P e Λ_E

$$(\lambda_{CDS})_e = (1 - F_e)\Lambda_P + F_e\Lambda_E \quad (4.9)$$

cujos erro de truncamento é dado por

$$\begin{aligned} \varepsilon(\lambda_{CDS})_e = & \Lambda_e^{ii} F_e (F_e - 1) \frac{\Delta x_e^2}{2} - \Lambda_e^{iii} F_e (F_e - 1) (2F_e - 1) \frac{\Delta x_e^3}{6} \\ & + \Lambda_e^{iv} F_e (F_e - 1) (3F_e^2 - 3F_e + 1) \frac{\Delta x_e^4}{24} - \Lambda_e^v F_e (F_e - 1) (2F_e - 1) (2F_e^2 - 2F_e + 1) \frac{\Delta x_e^5}{120} + \dots \end{aligned} \quad (4.10)$$

com sua equação geral dada por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS})_e = \sum_{n=2}^{\infty} \left[(-1)^{n-1} \Lambda_e^{(n)} \left[F_e (F_e - 1)^n - F_e^n (F_e - 1) \right] \frac{\Delta x_e^n}{n!} \right] \quad (4.11)$$

Quando $F_e=1/2$, diz-se que a face (e) está centrada entre os nós P e E . Neste caso, a Eq. (4.8) assume a forma geral

$$\Lambda_e [F_e = 1/2] = \frac{\Lambda_P + \Lambda_E}{2} + \sum_{n=2}^{\infty} \left[\Lambda_e^{(n)} \frac{[(-1)^{n-1} - 1] \Delta x_e^n}{2^{n+1} n!} \right] \quad (4.12)$$

ou

$$\Lambda_e [F_e = 1/2] = \frac{\Lambda_P + \Lambda_E}{2} - \sum_{n=1}^{\infty} \left[\Lambda_e^{(2n)} \frac{\Delta x_e^{2n}}{2^{2n} (2n)!} \right] \quad (4.13)$$

No caso de face centrada ($F_e=1/2$), uma aproximação para λ na face (e) é dada por

$$(\lambda_{CDS})_e [F_e = 1/2] = \frac{\Lambda_P + \Lambda_E}{2} \quad (4.14)$$

cujos erros de truncamento são dados por

$$\mathcal{E}(\lambda_{CDS})_e [F_e = 1/2] = -\sum_{n=1}^{\infty} \left[\Lambda_e^{(2n)} \frac{\Delta x_e^{2n}}{2^{2n} (2n)!} \right] \quad (4.15)$$

Note que, para as aproximações de λ na face (e), dadas pelas Eqs. (4.9) e (4.14), o erro de truncamento dado pelas Eqs. (4.11) e (4.15) é de segunda ordem para qualquer valor de $F_e \neq 0$. Isto significa dizer que a ordem das aproximações dadas pelas Eqs. (4.9) e (4.14) é dois, tanto para o volume de face centrada (*VFC*) como para o volume de nó centrado (*VNC*), e isto envolve malha uniforme ou não-uniforme (ver Figura 4.1).

Quando o valor de $F_e = 0$, não se pode dizer que a aproximação é de diferença central CDS. Usando apenas a série de Taylor escrita à montante da face e , Eq. (4.3), obtém-se a aproximação do valor de λ na face (e) como

$$(\lambda_{UDS})_e = \Lambda_P \quad (4.16)$$

cujos erros de truncamento são dados por

$$\mathcal{E}(\lambda_{UDS})_e = \Lambda_e^i (x_e - x_P) - \Lambda_e^{ii} \frac{(x_e - x_P)^2}{2} + \Lambda_e^{iii} \frac{(x_e - x_P)^3}{6} + \dots \quad (4.17)$$

Observando a Eq.(4.17), pode-se perceber que para qualquer tipo de malha a aproximação é de primeira ordem. Assim, para a aproximação λ_{UDS} não há dúvidas que ela sempre apresenta ordem unitária para qualquer tipo de malha: uniforme ou não-uniforme, de face centrada ou nó centrado.

Para a obtenção da aproximação para a derivada primeira de λ , inicialmente subtrai-se da Eq. (4.3) a Eq. (4.4), obtendo-se

$$\begin{aligned}\Lambda_e^i &= \frac{(\Lambda_E - \Lambda_P)}{\Delta x_e} + \Lambda_e^{ii}(2F_e - 1) \frac{\Delta x_e}{2} - \Lambda_e^{iii} [3F_e^2 - 3F_e + 1] \frac{\Delta x_e^2}{6} \\ &+ \Lambda_e^{iv} [(2F_e - 1)(2F_e^2 - 2F_e + 1)] \frac{\Delta x_e^3}{24} - \Lambda_e^v [5F_e^4 - 10F_e^3 + 10F_e^2 - 5F_e + 1] \frac{\Delta x_e^4}{120} + \dots\end{aligned}\quad (4.18)$$

cuja forma geral é dada por

$$\Lambda_e^i = \frac{(\Lambda_E - \Lambda_P)}{\Delta x_e} + \sum_{n=2}^{\infty} \left[(-1)^{n-1} \Lambda_e^{(n)} [(F_e - 1)^n - F_e^n] \frac{\Delta x_e^{n-1}}{n!} \right] \quad (4.19)$$

Da Eq. (4.18), obtém-se uma aproximação para a derivada primeira (λ_{CDS}^i), dada por

$$(\lambda_{CDS}^i)_e = \frac{(\Lambda_E - \Lambda_P)}{\Delta x_e} \quad (4.20)$$

cujos erro de truncamento é dado por

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\lambda_{CDS}^i)_e &= \Lambda_e^{ii}(2F_e - 1) \frac{\Delta x_e}{2} - \Lambda_e^{iii} [3F_e^2 - 3F_e + 1] \frac{\Delta x_e^2}{6} \\ &+ \Lambda_e^{iv} [(2F_e - 1)(2F_e^2 - 2F_e + 1)] \frac{\Delta x_e^3}{24} - \Lambda_e^v [5F_e^4 - 10F_e^3 + 10F_e^2 - 5F_e + 1] \frac{\Delta x_e^4}{120} + \dots\end{aligned}\quad (4.21)$$

que tem forma geral dada por

$$\mathcal{E}(\lambda_{CDS}^i)_e = \sum_{n=2}^{\infty} \left[(-1)^{n-1} \Lambda_e^{(n)} [(F_e - 1)^n - F_e^n] \frac{\Delta x_e^{n-1}}{n!} \right] \quad (4.22)$$

Para $F_e=1/2$, face (e) centrada entre os nós P e E , a Eq. (4.18) assume a forma geral

$$\Lambda_e^i [F_e = 1/2] = \frac{(\Lambda_E - \Lambda_P)}{\Delta x_e} + \sum_{n=2}^{\infty} \left[\Lambda_e^{(n)} \frac{[(-1)^n - 1]}{2^n} \frac{\Delta x_e^{n-1}}{n!} \right] \quad (4.23)$$

ou

$$\Lambda_e^i [F_e = 1/2] = \frac{(\Lambda_E - \Lambda_P)}{\Delta x_e} - \sum_{n=1}^{\infty} \left[\Lambda_e^{(2n+1)} \frac{\Delta x_e^{2n}}{2^{2n} (2n+1)!} \right] \quad (4.24)$$

No caso de face centrada ($F_e=1/2$), a aproximação para λ^i na face (e) é dada também pela Eq.(4.20). Porém, o erro de truncamento da aproximação passa a ser dado na forma geral por

$$\mathcal{E}(\lambda_{CDS}^i)_e [F_e = 1/2] = - \sum_{n=1}^{\infty} \left[\Lambda_e^{(2n+1)} \frac{\Delta x_e^{2n}}{2^{2n} (2n+1)!} \right] \quad (4.25)$$

Observando as Eqs. (4.21) e (4.25), pode-se perceber que em uma malha uniforme ou não-uniforme com $F_e = 1/2$, ou seja, quando o volume é de face centrada (*VFC*), a ordem da aproximação é dois, e quando $F_e \neq 1/2$, correspondendo a volume de nó centrado (*VNC*), ou qualquer construção que não seja de face centrada, a ordem da aproximação é unitária, o que eventualmente pode passar despercebido *a priori*.

Pelas equações dos erros de truncamento das aproximações λ_{UDS} , λ_{CDS} e λ_{CDS}^i , Eqs. (4.10), (4.15), (4.17), (4.21) e (4.25), pode-se observar a ordem assintótica (p_L), definida na seção 2.5, de cada uma das aproximações. Para o caso de malha com face centrada, como representado na Fig. 4.1.a, 4.1.b e 4.1.d, ocorre cancelamento de termos na Eq.(4.21) e nova ordem assintótica passa a dominar.

A Tabela 4.1 apresenta os valores das ordens assintóticas nos casos de malhas não-uniformes e uniformes, com volumes de faces centradas (*VFC*) ou de nós centrados (*VNC*).

Feita esta análise *a priori* da ordem assintótica (p_L) do erro de truncamento das aproximações, a questão novamente é entender de que forma relacionar esta análise com a análise *a posteriori* da ordem do erro de discretização, ao se empregar um tipo de refino de malha. Isto pode ser feito através do cálculo da ordem efetiva (p_E), Eq. (2.42), desde que se conheça, seja *a priori* ou *a posteriori*, o erro numérico (E) de duas soluções numéricas obtidas em malhas diferentes.

Tabela 4.1 – Ordem assintótica (p_L) das aproximações numéricas para volumes finitos.

aproximação	ordem assintótica (p_L)	
	volume de nó centrado ($VNC, F_e \neq \frac{1}{2}$)	volume de face centrada ($VFC, F_e = \frac{1}{2}$)
λ_{UDS}	1	1
λ_{CDS}	2	2
λ_{CDS}^t	1	2

O que se espera, como no capítulo 3, é identificar qual o valor da ordem (p_L) da Tabela 4.1 que está sendo verificada efetivamente (p_E) nas soluções numéricas e que pode ser empregada nos estimadores de erro da seção 2.6, para que as estimativas sejam confiáveis. Como no capítulo 3, os resultados apresentados mostram que a determinação *a priori* ou *a posteriori* de qual valor de p_L está ocorrendo na prática depende da combinação: configuração da malha grossa e configuração da malha fina.

4.3 Refinos de Malha para Volumes Finitos

Para o *MVF* existem diversas formas de se realizar o refino de malha. Nesta seção são apresentados cinco tipos de refinamentos de malha. Cada refino é acompanhado de uma figura que apresenta em detalhes como estes refinamentos são feitos para uma malha não-uniforme, com razão de refino (q) igual a dois e três, em todos os cinco casos. Estes refinamentos de malha foram empregados em Schneider e Marchi (2006) para estudo do comportamento da ordem efetiva do erro de discretização no *MVF*.

4.3.1 Refino uniforme (*RU*)

Este refino consiste em dividir cada volume de controle, de malha uniforme ou não-uniforme, em (q) volumes de igual tamanho independentemente da posição que se encontra o centro do volume. A razão de refino de malhas (q) é dada pela Eq.(3.41), onde (N_f) é o número de volumes na malha fina e (N_g) é o número de volumes na malha grossa, conforme a Fig. 4.3.

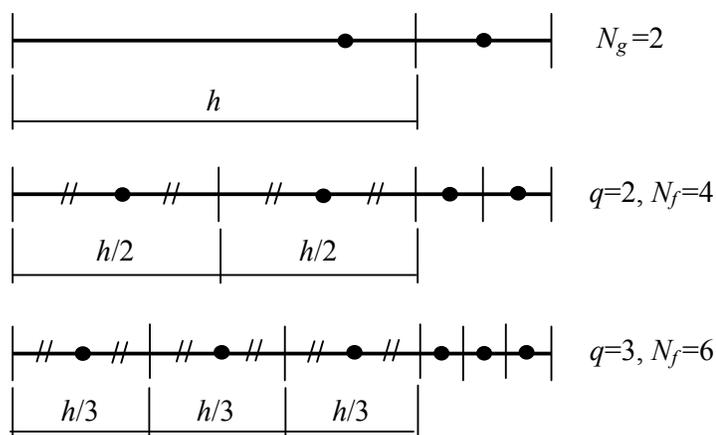


Figura 4.3 – Refinos uniformes (*RU*) de malha.

4.3.2 Refino semi-uniforme (*RSU*)

Este refino consiste em dividir a primeira e a segunda metade de cada volume de controle, em (q) partes, sendo a primeira metade a distância da face esquerda ao centro e a segunda metade a distância do centro a face direita. A razão de refino continua sendo dada pela Eq.(3.41), conforme a Fig. 4.4. No caso de malha *VNC*, o refino *RSU* é idêntico ao *RU*, e no caso de malha *VFC*, o refino *RSU* é idêntico ao refino *RC* nos volumes internos. Este refino é uma proposta deste trabalho e será estudado mais adiante em comparação com os demais tipos de refino.

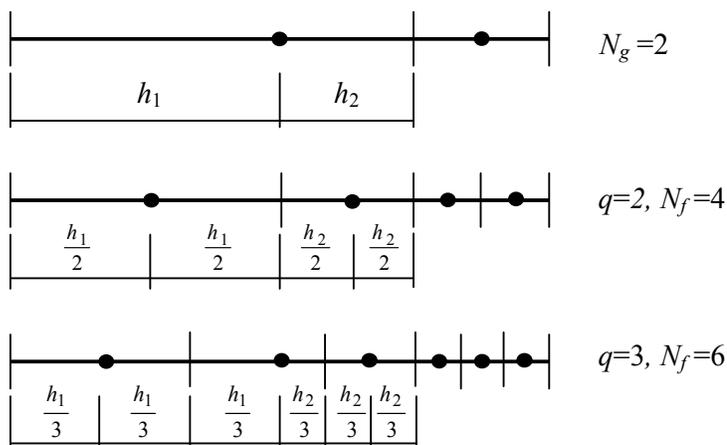


Figura 4.4 – Refinos semi-uniformes (*RSU*) de malha.

4.3.3 Refino entre centros (RC)

Este refino consiste em dividir as distâncias entre os centros dos volumes em (q) partes iguais de modo que surgirão $q-1$ novos volumes entre dois volumes consecutivos, conforme a Fig. 4.5. Este tipo de refino divide as distâncias usadas nas aproximações numéricas por (q) e assemelha-se ao refino uniforme de malha usado no *MDF*. Neste caso a razão de refino é dada por

$$q = \frac{N_f + 1}{N_g + 1} \quad (4.26)$$

Quando $h \rightarrow 0$ o valor de (q) dado pela Eq. (4.26) tende ao valor de (q) dado pela Eq. (3.41).

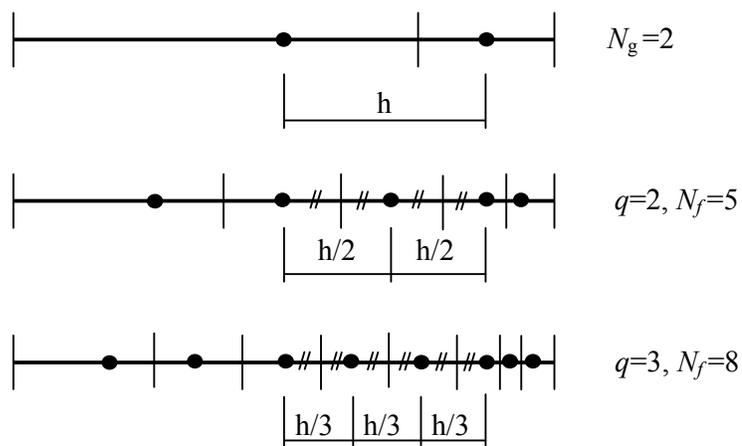


Figura 4.5 – Refinos entre centros (RC).

4.3.4 Refino entre centros com F_e constante (RCF)

Este refino é semelhante ao anterior, porém, é mantida para as faces dos volumes da malha fina, a relação F_e definida na malha grossa por (a/b). Assim, se mantém na malha grossa e fina a relação $F_e = a/b = c/d = e/f$, conforme a Fig. 4.6. Neste caso também a razão de

refino é dada pela Eq. (4.26). Quando $h \rightarrow 0$ o valor de (q) dado pela Eq. (4.26) tende ao valor de (q) dado pela Eq. (3.41). No caso de malha *VFC*, o refino *RCF* é idêntico ao *RC*.

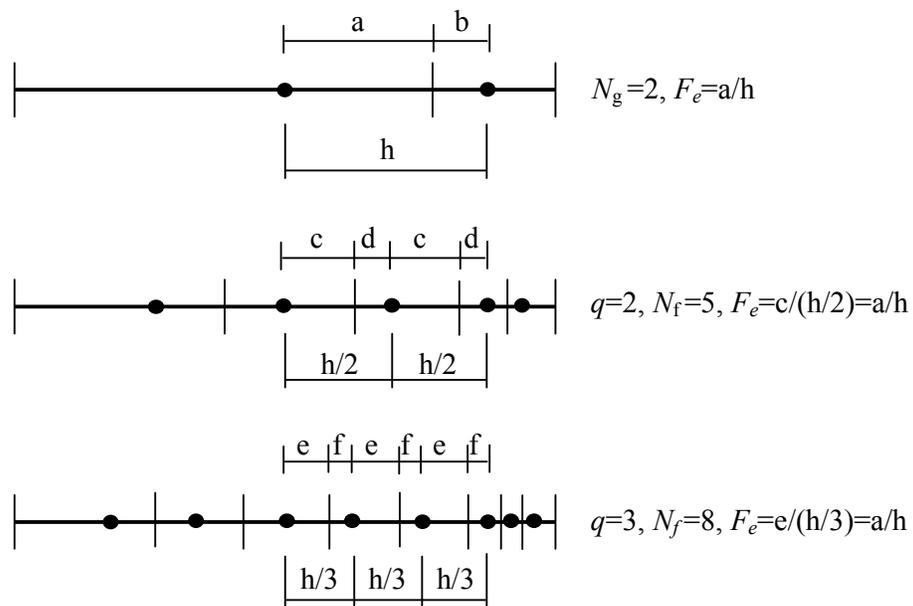


Figura 4.6 – Refinos entre centros com F_e constante (*RCF*).

4.3.5 Refino aleatório (*RA*)

Este refino consiste em obter uma malha fina com um número de volumes (q) vezes maior que o número de volumes da malha grossa, sem que haja uma regra de construção dos volumes, conforme a Figura 4.7. A razão de refino é dada pela Eq. (3.41).

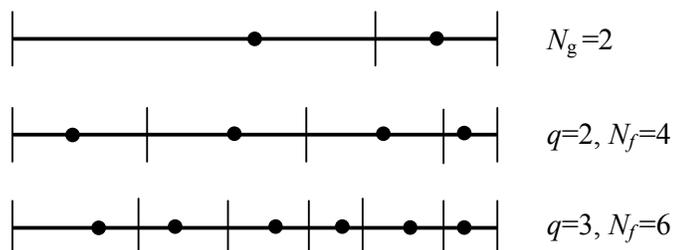


Figura 4.7 – Refinos aleatórios (*RA*).

4.4 Advecção Unidimensional com Termo Fonte – Problemas 5A e 5B

Para o problema da advecção unidimensional de um escalar com termo fonte, o caso analisado pelo método dos volumes finitos (*MVF*) é representado por

$$\frac{d\Lambda}{dx} = a x^b \quad (4.27)$$

A condição de contorno do problema de domínio unitário é $\Lambda(0) = 0$. A solução analítica exata do problema é dada por

$$\Lambda = \frac{a}{b+1} x^{b+1} \quad (4.28)$$

Integrando-se a Eq. (4.27) sobre o volume de controle j da Figura 4.1 e usando o teorema da divergência de Gauss no primeiro termo (Kreyszig, 1999) obtém-se

$$(\Lambda_e - \Lambda_w) = a \int_{\text{volume}} (x^b) dx \quad (4.29)$$

onde Λ_e e Λ_w representam a incógnita Λ avaliada nas faces leste (e) e oeste (w) do volume de controle j da Figura 4.1.a. Para se obter a equação aproximada de Λ para cada volume de controle é necessário introduzir na Eq.(4.29) aproximações de Λ nas faces do volume de controle e resolver numericamente a integral de volume.

Os termos Λ_e e Λ_w da Eq. (4.29) foram aproximados usando dois esquemas de interpolação diferentes, λ_{UDS} e λ_{CDS} , dados pelas Eqs. (4.16) e (4.9), respectivamente. A integral do termo fonte, presente na Eq. (4.29), foi calculada numericamente através da regra do trapézio (Spiegel, 1992). Desta forma, tem-se duas combinações diferentes de interpolação para o termo advectivo da Eq. (4.29): (i) esquema de interpolação UDS; e (ii) esquema de interpolação CDS. Estes esquemas foram chamados de problemas 5A e 5B, respectivamente. Nesta seção, os resultados apresentados usam malhas com $\frac{1}{2}$ volume e volume inteiro na fronteira.

A seguir são apresentadas análises *a priori* do erro de discretização no problema 5A, para diferentes tipos de refino de malha.

4.4.1 Análise *a priori* da ordem do erro de discretização no problema 5A

Como visto na seção 3.3.1, ao se empregar aproximações nos diversos pontos da malha, que estão interligados entre si, somam-se ao erro local de cada nó, dado pela equação do erro de truncamento local (LeVeque, 1992), as interações de erro local de nós vizinhos. Assim, a equação do erro passa a ser global e é chamada equação do erro de discretização global (LeVeque, 1992).

Empregando as equações de erro de discretização global, escritas em sua forma geral, na equação que fornece o valor da ordem efetiva (p_E), Eq. (2.42), pode-se, *a priori*, verificar em quais casos de refino $p_E \rightarrow p_L$, onde p_L é a ordem assintótica, apresentada na Tabela 4.1 para algumas aproximações empregadas no *MVF*.

Para que esta análise seja realizada, é necessário determinar *a priori* o erro numérico da solução, e isto só pode ser feito para problemas bastante simples, como é o caso do problema 5A, dado pela Eq. (4.27) com a aproximação da Eq. (4.16), idêntico ao problema 1A da seção 3.3.1, exceto por suas constantes. Mesmo que esta análise esteja limitada a um estudo de caso, especula-se que seja possível generalizá-la para outros modelos matemáticos, pois, quando $h \rightarrow 0$ apenas um termo domina a equação do erro.

Para o problema 5A, na Eq. (4.29) são introduzidas duas aproximações: λ_{UDS} para os termos Λ_e e Λ_w ; e regra do trapézio para o termo com integral. A aproximação λ_{UDS} , dada pela Eq. (4.16), é de primeira ordem; e a regra do trapézio, dada pela Eq. (3.55), é de segunda ordem. Assim, no problema 5A, o erro de discretização global ou erro numérico (E) do último volume da malha, discretizada com $\frac{1}{2}$ volume na fronteira, isto é, em $x = L$, é

$$E^{5A}(\phi)\Big|_{x=L} = \int_0^L [\mathcal{E}_{UDS}^{(\Lambda_w)}]_j dx + \int_0^L [\mathcal{E}_{UDS}^{(\Lambda_e)}]_j dx + \int_0^L [\mathcal{E}_{TRAP}^{(integral)}]_j dx \quad (4.30)$$

ou

$$E^{5A}(\phi)\Big|_{x=L} = \int_0^L [\mathcal{E}_{UDS}^{(pL=1)}]_{wj} dx + \int_0^L [\mathcal{E}_{UDS}^{(pL=2)}]_{je} dx + \int_0^L [\mathcal{E}_{TRAP}^{pL=2}]_{wje} dx \quad (4.31)$$

onde L é o comprimento do domínio, \mathcal{E} é o erro de truncamento local decorrente das aproximações empregadas no volume j .

No problema 5A, Eq. (4.27), sendo os valores de a e b do modelo matemático maiores que zero, existe ao menos dois termos na equação do erro de discretização da aproximação λ_{UDS} , Eq. (4.17), e um termo na equação do erro de discretização da regra do trapézio, Eq. (3.55). Fazendo o tamanho h_j dos volumes de controle tender a zero, isto é $h \rightarrow 0$, a dimensão $(x_e - x_p)_j$, presente nas equações do erro de truncamento das aproximações λ_{UDS} , também tende a zero, e o termo de menor expoente da equação do erro de truncamento de λ_{UDS} passa a dominar o erro numérico global, fornecendo

$$E^{5A}(\phi) \Big|_{x=L} = \int_0^L c_{1,j} (x_e - x_p)_j^{p_L} dx \quad p/h \rightarrow 0 \quad (4.32)$$

que é semelhante à Eq. (3.18). Na Eq. (4.32) p_L é a ordem da aproximação λ_{UDS} . Depois de aplicado o teorema generalizado do valor médio e discretizada a integral para N volumes h_j da malha, resulta

$$E^{5A}(\phi) = C_m \sum_{j=1}^N (x_e - x_p)_j^{p_L+1} \quad p/h \rightarrow 0 \quad (4.33)$$

Na Eq. (4.33), semelhante à Eq. (3.24), o coeficiente médio (C_m) é função das derivadas de Λ . Com a Eq. (4.33), pode-se analisar, *a priori*, a ordem do erro de discretização ou erro numérico (E), quando diferentes refinamentos de malha são empregados.

4.4.1.1 Refino de malhas no problema 5A

Comparando a Eq. (4.33) com a Eq. (3.24), obtida na seção 3.3.1, pode-se observar que a única diferença está no parâmetro geométrico, que para a Eq. (4.33) é o tamanho $(x_e - x_p)$, e para a Eq. (3.24) é o tamanho (h) dos elementos da malha. Assim, as análises feitas na seção 3.3.1 para o *MDF* podem ser aplicadas para o problema 5A.

Desta forma, pode-se dizer que, para o problema 5A, o valor da ordem efetiva (p_E) obtida com soluções numéricas em malhas de tamanhos diferentes, tenderá ao valor da ordem assintótica (p_L) das aproximações numéricas quando $h \rightarrow 0$, caso o refino uniforme seja empregado. Para que se caracterize o refino uniforme, os tamanhos $(x_e - x_p)$ da malha grossa não-uniforme devem ser divididos em q partes iguais para gerar a malha fina, onde

q é a razão de refino de malhas, dada pela Eq. (2.21). Ou ainda, caso as malhas estejam construídas com progressão geométrica (PG), ou seja, os comprimentos $(x_e - x_P)$ e $(x_E - x_e)$ representados na Fig. (4.2) formam uma PG, $p_E \rightarrow p_L$ no problema 5A quando a razão da PG da malha grossa (r_g) e da malha fina (r_f) obedecem a relação dada pela Eq. (3.30) e $r_f \rightarrow 1$, conforme visto também na seção 3.3.1.2. Resta saber em quais tipos de refino de malhas apresentados na seção 4.3, as condições acima ficam estabelecidas.

A Tabela 4.2 apresenta, para o problema 5A, em quais combinações de malha grossa e malha fina garante-se que os tamanhos $(x_e - x_P)$ da malha grossa foram divididos igualmente em q partes para se obter a malha fina, e, com isso, garantir que $p_E \rightarrow p_L$. Para a análise apresentada na Tabela 4.2, considerou-se discretizações com $\frac{1}{2}$ volume na fronteira e os refinamentos apresentados na seção 4.3. Note que, o refino RSU proposto neste trabalho garante a redução do tamanho (h_j) dos elementos da malha em partes iguais, em qualquer caso de malha grossa. No caso de malha VNC, o refino RSU é idêntico ao RU, e no caso de malha VFC, o refino RSU é idêntico ao refino RC nos volumes internos. Especula-se que a Tabela 4.2 possa ser aplicada a outros modelos matemáticos.

Tabela 4.2 – Análise *a priori* dos casos de refino de malha em que ocorre refino uniforme dos tamanhos $(x_e - x_P)_j$.

tipo da malha grossa	tipo de refino de malha				
	<i>RU</i>	<i>RSU</i>	<i>RC</i>	<i>RCF</i>	<i>RA</i>
uniforme	●	●	●	●	
não-uniforme <i>VFC</i>		●	●	●	
não-uniforme <i>VNC</i>	●	●			
aleatória		●			

● Combinações de malha grossa e refino onde $p_E \rightarrow p_L$ porque houve redução uniforme de h

4.4.2 Análise *a posteriori* da ordem do erro de discretização nos problemas 5A e 5B

Considerando inicialmente a análise *a priori* da ordem assintótica (p_L) das aproximações, apresentada na seção 4.2 e resumida na Tabela 4.1, no caso do problema

5A, os valores de Λ são avaliados nas faces dos volumes usando esquema UDS, e portanto, tem ordem assintótica da aproximação (p_L) unitária. Para o problema 5B, em que Λ é avaliado com esquema CDS, p_L é igual a dois. O modelo matemático que representa os problemas 5A e 5B, Eq. (4.27), possui também um termo fonte que é integrado no volume de controle pela regra do trapézio. *A priori*, a ordem assintótica (p_L) desta integração é dois, como visto na seção 3.5.

De acordo com a análise *a priori* da ordem do erro de discretização, apresentada na seção anterior e resumida na Tabela 4.2, fazendo o tamanho (h_j) dos volumes de controle tender a zero, $p_E \rightarrow p_L$ para todos os tipos de refino de malha apresentados na seção 4.3, exceto para o refino aleatório. Neste caso, espera-se que, para uma malha uniforme que sofre refino do tipo *RU*, *RSU*, *RC* e *RCF*, a ordem efetiva (p_E) do problema 5A seja unitária quando $h \rightarrow 0$, isto é, a menor ordem usada nas aproximações, e no problema 5B, p_E seja igual dois quando $h \rightarrow 0$.

Da literatura (Ferziger e Peric, 2001, Maliska 1995), sabe-se que soluções numéricas de problemas puramente advectivos, obtidas pelo método dos volumes finitos, apresentam oscilações quando aproximações numéricas de diferença central (λ_{CDS}) são empregadas. Estas oscilações têm amplitude reduzida com a redução do tamanho (h) dos elementos da malha. Nestes casos, freqüentemente, as soluções numéricas obtidas apresentam pequena amplitude de oscilação que não permite o cálculo correto da ordem do erro de discretização.

Na seção subsequente, são apresentados resultados obtidos em malha uniforme de tamanhos diferentes que mostram em que tipos de refinamentos de malha o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) para os problemas 5A e 5B.

4.4.2.1 Resultados com malha grossa uniforme no problema 5A

Os resultados do problema 5A foram obtidos partindo-se de uma malha grossa uniforme de comprimento unitário, conforme a malha representada na Figura 4.1.a. A malha grossa é refinada com razão de refino (q) igual a 3. Nestes resultados, os valores de a e b na Eq. (4.27) são iguais a 3,0 e 2,0, respectivamente.

A Figura 4.8 e a Tabela B.1 apresentam os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) do problema 5A, no ponto $x = 0,5$, cuja solução numérica não apresenta oscilação e

tem ordem assintótica (p_L) unitária. Com estes resultados, pode-se confirmar a análise *a priori* da ordem do erro de discretização apresentada na Tabela 4.2 para o problema 5A.

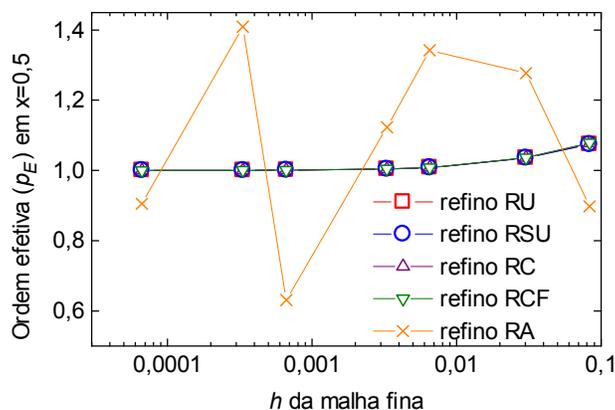


Figura 4.8 – Ordem efetiva do problema 5A para malha grossa uniforme.

Para os resultados da Figura 4.8 e Tabela B.1, referentes à malha grossa uniforme, deve-se observar que os refinamentos *RU*, *RSU*, *RC* e *RCF*, neste caso, geram malhas finas idênticas, exceto na região do domínio entre a face e o centro do volume de fronteira, que difere nos refinamentos *RC* e *RCF* em relação aos refinamentos *RU* e *RSU*, conforme pode ser visto na apresentação destes refinamentos, seção 4.3. Daí o fato dos valores das ordens efetivas da Tabela B.1 apresentarem-se iguais para os refinamentos *RU* e *RSU* e iguais para os refinamentos *RC* e *RCF*.

A Figura 4.9 mostra os resultados do problema 5B para vários tamanhos de malha grossa uniforme, em que são observadas oscilações numéricas. A malha grossa é refinada com razão de refinamento (q) igual a 3. Nestes resultados, os valores de a e b na Eq. (4.27) são iguais a 4,0 e 3,0, respectivamente.

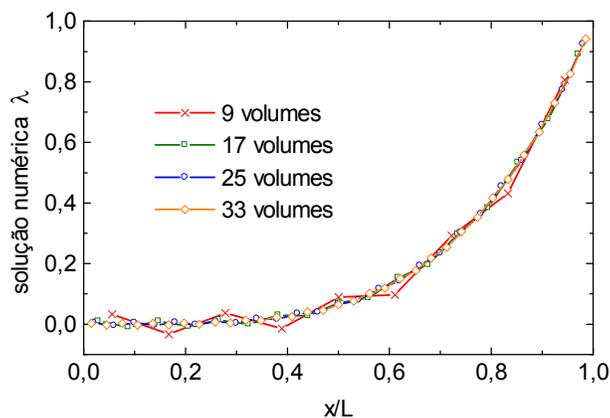


Figura 4.9 – Solução numérica de λ do problema 5B, para malhas uniformes.

A Figura 4.10 e a Tabela B.2 apresentam os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) do problema 5B, em que estão presentes oscilações numéricas, e que foi possível o cálculo da ordem p_E somente para o refinamento do tipo RC, representado na Figura 4.5. Neste caso, o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L), quando $h \rightarrow 0$.

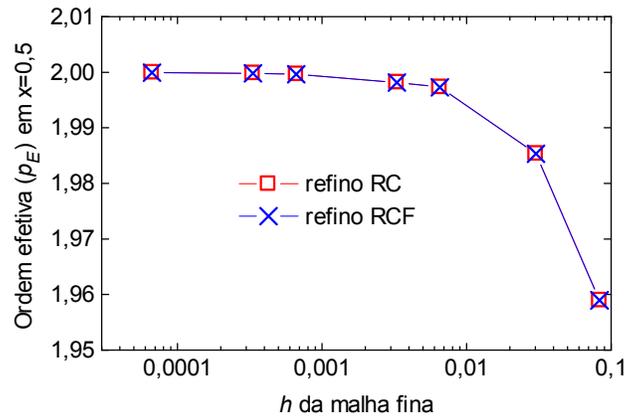


Figura 4.10 – Ordem efetiva do problema 5B para malha grossa uniforme.

Como nestes resultados não foi possível obter a ordem efetiva em alguns tipos de refinamento, recomenda-se que, em casos práticos de estimativa de erro numérico que exista a possibilidade da solução numérica conter oscilações, diferentes tipos de malha e refinamento sejam empregados, a fim de se conhecer melhor em quais combinações de malha grossa e fina é possível realizar uma estimativa de erro confiável.

4.5 Advecção Difusão Unidimensional – Problemas 6A e 6B

Como visto na seção 3.5, o problema da advecção/difusão unidimensional de um escalar é representado pela seguinte equação

$$Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2} \quad (4.34)$$

A Eq. (4.34) é idêntica a Eq. (3.56), onde Pe é o número de Peclet, e as condições de contorno do problema de domínio unitário são $\Lambda(0) = 0$ e $\Lambda(1) = 1$. A solução analítica exata é dada na Eq. (3.57).

O princípio do método dos volumes finitos (*MVF*) (Ferziger e Peric, 2001) é integrar a equação governante sobre o volume de controle e aproximar os termos resultantes da integração através de funções de interpolação, dadas, por exemplo, pelas aproximações λ_{UDS} , λ_{CDS} e λ^i_{CDS} .

Integrando-se a Eq.(4.34) sobre o volume de controle j da Figura 4.1 e usando o teorema da divergência de Gauss (Kreyszig, 1999) obtém-se

$$Pe(\Lambda_e - \Lambda_w) = (\Lambda^i_e - \Lambda^i_w) \quad (4.35)$$

onde Λ_e e Λ_w representam a incógnita Λ avaliada nas faces leste (e) e oeste (w) do volume de controle j da Figura 4.1.a, e Λ^i_e e Λ^i_w a derivada de primeira ordem de Λ nas faces leste (e) e oeste (w). Para se obter a equação aproximada de Λ para cada volume de controle é necessário introduzir na Eq.(4.35) aproximações de Λ e sua derivada primeira Λ^i nas faces do volume de controle.

Os termos Λ_e e Λ_w da Eq. (4.35) foram aproximados usando dois esquemas de interpolação diferentes, λ_{UDS} e λ_{CDS} , dados pelas Eqs. (4.16) e (4.9), respectivamente. Para o termo de derivada primeira da Eq. (4.35) foi usado o esquema de interpolação λ^i_{CDS} , dado pela Eq. (4.20). Desta forma, têm-se duas combinações diferentes de interpolação para o problema representado pela Eq. (4.34): (i) esquema de interpolação UDS/CDS; e (ii) esquema de interpolação CDS/CDS.

Em cada contorno pode-se ter volume de controle inteiro (1V) ou $\frac{1}{2}$ volume de controle ($\frac{1}{2}V$). No caso de volume inteiro no contorno é feito o balanço de Λ considerando-se a condição de contorno na face do volume. Caso contrário ($\frac{1}{2}$ volume na fronteira), a aplicação da condição de contorno se resume a atribuir como equação do volume a própria condição de contorno, ou seja, $\Lambda = 0$ para o primeiro volume e $\Lambda = 1$ para o último volume. Nesta seção, os resultados apresentados usam malhas com $\frac{1}{2}$ volume na fronteira.

Substituídas as aproximações numéricas dadas pelas Eqs.(4.9) e (4.20), ou Eqs.(4.16) e (4.20), na Eq.(4.35), e aplicadas as condições de contorno de $\frac{1}{2}$ volume na face, obtém-se um sistema de equações algébricas que quando resolvido fornece o valor de λ em cada nó dos volumes de controle, em duas combinações de interpolação: (i) CDS/CDS; (ii) UDS/CDS, e nesta seção, estes problemas foram chamados de problemas 6A e 6B, respectivamente.

4.5.1 Análise *a posteriori* da ordem do erro de discretização nos problemas 6A e 6B

Pela Tabela 4.1, o problema 6A, que usa os esquemas de interpolação λ_{CDS} e λ_{CDS}^i , tem ordem assintótica (p_L) igual a dois. Pela Tabela 4.2, para uma malha grossa não-uniforme do tipo *VFC*, a ordem efetiva (p_E) do problema 6A tenderá ao valor da ordem assintótica (p_L), quando $h \rightarrow 0$, caso a malha grossa seja refinada de acordo com os refinamentos *RSU*, *RC*, *RCF*. É importante lembrar que, no caso da malha do tipo *VFC*, os refinamentos *RC* e *RCF* são idênticos por possuírem todas as faces centradas na malha fina. Também pela Tabela 4.2, caso a malha seja não-uniforme aleatória, isto é, não se tem faces centradas nem volumes centrados, $p_E \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$, ao se empregar o refinamento *RSU*.

Para o problema 6B, cuja aproximação de menor ordem é λ_{UDS} , a Tabela 4.1 mostra que para este problema a ordem assintótica é unitária. Para malha grossa não-uniforme do tipo *VNC*, a Tabela 4.2 mostra que a ordem efetiva (p_E) tenderá à ordem assintótica (p_L), quando $h \rightarrow 0$, caso os refinamentos empregados sejam *RU* e *RSU*.

Nas seções subseqüentes, são apresentados resultados obtidos em malhas não-uniformes de tamanhos diferentes que mostram em que tipos de refinamentos de malha o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) para os problemas 6A e 6B.

4.5.1.1 Resultados para malha grossa não-uniforme *VFC* no problema 6A

Os resultados do problema 6A foram obtidos partindo-se de uma malha grossa não-uniforme de face centrada (*VFC*), de comprimento unitário, conforme a malha representada na Figura 4.1.d. A malha grossa é refinada com razão de refinamento (q) igual a 3.

A Figura 4.11 e a Tabela B.3 apresentam os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) do problema 6A, no ponto $x = 0,5$, cuja ordem assintótica (p_L) é igual a dois. Com estes resultados, pode-se confirmar a análise *a priori* da ordem do erro de discretização apresentada na Tabela 4.2 para o problema 6A, pois, quando $h \rightarrow 0$, $p_E \rightarrow p_L$ ao se empregar os refinamentos *RSU*, *RC*, *RCF*, que são os refinamentos onde se garante divisão em q partes iguais das distâncias centro-face dos elementos da malha *VFC*.

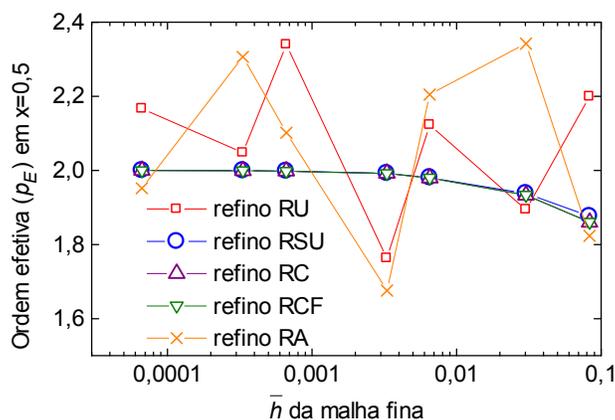


Figura 4.11 – Ordem efetiva do problema 6A para malha grossa não-uniforme do tipo *VFC*.

O problema 6A também foi resolvido usando malha grossa não-uniforme do tipo *VNC*. Neste caso, $p_E \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$, empregando os refinamentos *RSU*, *RC* e *RCF*.

4.5.1.2 Resultados para malha grossa não-uniforme *VNC* no problema 6B

Os resultados do problema 6B foram obtidos partindo-se de uma malha grossa não-uniforme de nó centrado (*VNC*), de comprimento unitário, conforme a malha representada na Figura 4.1.c. A malha grossa é refinada com razão de refinamento (q) igual a 3.

A Figura 4.12 e a Tabela B.4 apresentam os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) do problema 6B, no ponto $x = 0,5$, cuja solução numérica tem ordem assintótica (p_L) unitária. Com estes resultados, pode-se confirmar a análise *a priori* da ordem do erro de discretização apresentada na Tabela 4.2 para o problema 6B, pois, quando $h \rightarrow 0$, $p_E \rightarrow p_L$ quando se empregam os refinamentos *RU* e *RSU*. Nas soluções obtidas com os refinamentos *RC* e *RCF* aparentemente também $p_E \rightarrow p_L$. Para as malhas usadas, o valor de F_e é diferente e aleatório em cada face.

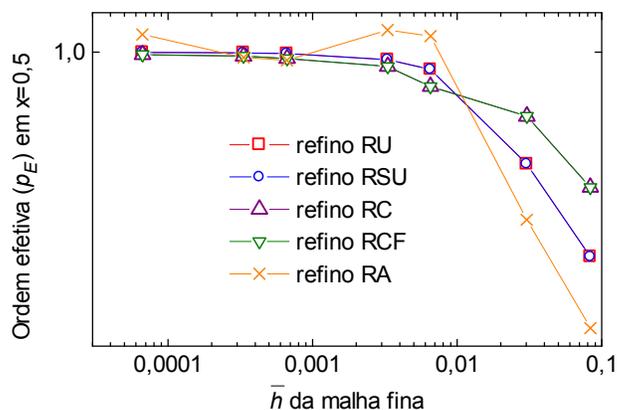


Figura 4.12 – Ordem efetiva do problema 6B para malha grossa não-uniforme do tipo *VNC*.

O problema 6B também foi resolvido usando malha grossa não-uniforme do tipo *VFC*. Neste caso, $p_E \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$, empregando os refinamentos *RU*, *RSU*.

4.5.1.3 Resultados para malha grossa não-uniforme aleatória no problema 6A

Para uma malha não-uniforme aleatória, onde não se tem faces ou volumes centrados, os resultados da ordem efetiva (p_E) do problema 6A, no ponto $x = 0,5$, estão apresentados na Figura 4.13 e na Tabela B.5. O domínio tem comprimento unitário e a malha grossa é refinada com razão de refinamento (q) igual a 3. A ordem assintótica (p_L) do problema 6A é dois. Para as malhas usadas, o valor F_e é diferente e aleatório em cada face.

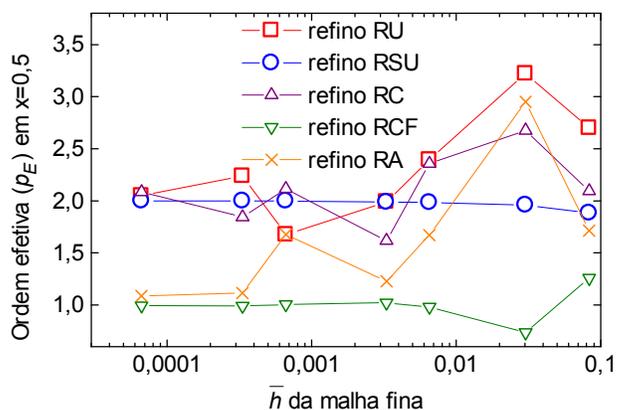


Figura 4.13 – Ordem efetiva do problema 6B para malha grossa não-uniforme aleatória.

Os resultados apresentados na Figura 4.13 e Tabela B.5 confirmam a análise *a priori* do refino de malha aleatória, mostrada na Tabela 4.2. Para este tipo de malha, somente quando se emprega o refino do tipo *RSU*, $p_E \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$. Pela Figura 4.13 pode-se também verificar que, no caso do refino RCF, aparentemente ocorre degeneração de ordem de dois para um.

4.6 Escoamento Não-Linear Unidimensional – Problema 7

As não-linearidades estão presentes em grande parte dos problemas de mecânica dos fluidos computacional. Neste caso, faz-se necessária a linearização das equações para a obtenção das soluções numéricas. Para o problema advectivo difusivo não-linear, Eq. (2.4), a variável de interesse (Λ) pode ser o próprio vetor velocidade (u). Neste caso o problema é chamado escoamento não-linear unidimensional de um fluido incompressível, conhecido como equação de Burgers (Tannehill *et al.*, 1997), que é representado por

$$Re \frac{d(u.u)}{dx} = \frac{d^2 u}{dx^2} + S \quad (4.36)$$

Este problema foi chamado de problema 7. As condições de contorno do problema de domínio unitário são $u(0) = 0$ e $u(1) = 1$ e Re é o número de Reynolds. Quando o termo fonte S assume a forma

$$S = Re^2 e^{xRe} \frac{(2e^{xRe} - e^{Re} - 1)}{(e^{Re} - 1)^2} \quad (4.37)$$

a solução analítica da Eq. (4.36) é dada por

$$u = \frac{e^{xRe} - 1}{e^{Re} - 1} \quad (4.38)$$

Integrando-se a Eq. (4.36) sobre o volume de controle j da Figura 4.1, usando o teorema da divergência de Gauss (Kreyszig, 1999) e linearizando o primeiro termo, tem-se

$$Re(u_e^* u_e - u_w^* u_w) = (u_e^i - u_w^i) + \int_{\text{volume}} S(x) dx \quad (4.39)$$

onde u^* é a incógnita u na iteração anterior, u_e e u_w representam a incógnita u na iteração atual, avaliada nas faces leste (e) e oeste (w) do volume de controle, e u_e^i e u_w^i a derivada de primeira ordem de u na iteração atual, nas faces leste (e) e oeste (w) do volume. Para se obter a equação aproximada de u para cada volume de controle é necessário introduzir na Eq.(4.39) aproximações de u nas faces do volume de controle e resolver numericamente a integral de volume.

Os termos u_e e u_w da Eq. (4.39) foram aproximados usando o esquema de interpolação λ_{CDS} , dado pela Eq. (4.9), onde, no lugar de Λ ou λ lê-se u_{exato} ou $u_{numérico}$, respectivamente. Para o termo de derivada primeira da Eq. (4.39) foi usado o esquema de interpolação λ^i_{CDS} , dado pela Eq. (4.20), onde no lugar de Λ ou λ lê-se u_{exato} ou $u_{numérico}$, respectivamente. A integral do termo fonte S , presente na Eq. (4.39) foi calculada numericamente através da regra do trapézio (Spiegel, 1992).

Como existem volumes inteiros nos contornos, para u^i nas faces destes volumes, aproximações λ^i_{UDS} foram empregadas. Da literatura (Suero, 2006), sabe-se que aproximações do tipo λ^i_{UDS} aplicadas em contornos onde se tem valores de λ prescritos, possuem ordem assintótica igual a dois por serem idênticas a esquemas CDS empregando volumes fictícios. Assim, a ordem assintótica *a priori* do problema 7 deverá ser dois.

4.6.1 Refinos sucessivos de malha

A análise *a posteriori* de problemas em que *a priori* o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L), quando se faz $h \rightarrow 0$, pode ser feita de duas formas: (i) primeiramente obtendo soluções numéricas em malhas com valores de h cada vez mais reduzidos, como, por exemplo, pares de malhas de tamanho 5 e 15, 11 e 33, 51 e 153, 101 e 303 e assim por diante, sem que haja qualquer relação geométrica entre um par de malha e outro; ou (ii) partindo de uma malha base, refinar sucessivamente esta malha usando a mesma regra de refino, reduzindo assim o valor de h , como, por exemplo, obter soluções numéricas em malhas de tamanho 5, 15, 45, 135, 405, e assim por diante, e calcular a ordem efetiva de duas em duas malhas, isto é, 5 e 15, 15 e 45,... , procedimento denominado neste texto como “refinos sucessivos” de malha. As duas formas são

comumente empregadas na literatura. A primeira é mais próxima de uma situação prática na qual se espera uma análise mais acurada e correta com o uso de malhas mais finas. A segunda análise também é importante, pois o refinamento sucessivo em diversos níveis, embora não muito prático, garante que nas malhas mais finas o valor de qualquer tamanho h da malha sempre foi diminuído em referência a uma mesma malha base, o que caracteriza bem o comportamento da ordem com a diminuição de h .

Nas seções anteriores, somente a primeira forma foi empregada para o estudo do comportamento e tendência de (p_E) . Nesta seção, o procedimento de refinamento sucessivo é empregado. A seguir são apresentados os resultados obtidos.

4.6.1.1 Resultados com malha grossa não-uniforme *VFC* no problema 7

O problema 7, representado pela Eq.(4.36), foi resolvido com $Re = 5$. Os resultados foram obtidos partindo-se de uma malha grossa não-uniforme de face centrada (*VFC*), de comprimento unitário, conforme a malha representada na Figura 4.1.d. As iterações entre u^* e u foram realizadas até que o erro de máquina fosse atingido. Uma seqüência de refinamentos sucessivos foi feita para uma malha grossa de tamanho 15, refinada sucessivamente com razão de refinamento (q) igual a 3, usando os cinco tipos de refinamento apresentados na seção 4.3.

A Figura 4.14 e a Tabela B.6 apresentam os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) do problema 7, no ponto $x = 0,5$, cuja solução numérica, *a priori*, tem ordem assintótica (p_L) igual a dois quando se empregam os refinamentos *RU*, *RSU*, *RC*, *RCF* e *RA*. Vale lembrar que, para uma malha do tipo *VFC*, os refinamentos *RC* e *RCF* são idênticos.

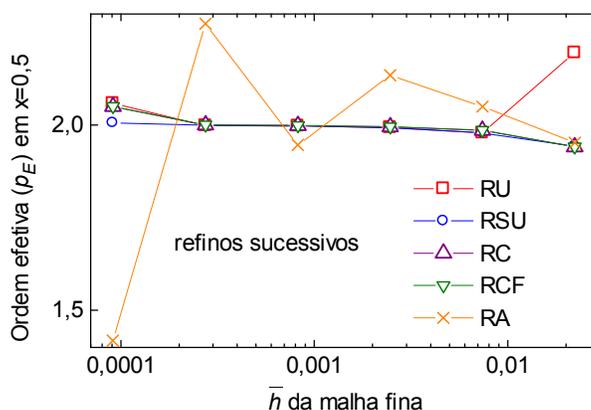


Figura 4.14 – Ordem efetiva do problema 7 para malha grossa não-uniforme do tipo *VFC*.

Pela Figura 4.14 e Tabela B.6, pode-se observar que o erro de arredondamento já afeta os resultados na última malha fina, ocasionando valores de p_E ligeiramente distintos de p_L . A análise *a priori* da ordem do erro de discretização, apresentada na Tabela 4.2, é confirmada para os refinamentos RSU , RC , RCF . O refinamento RU também apresenta $p_E \rightarrow p_L$, mas acredita-se que isto se deva ao fato do refinamento sucessivo da malha grossa estar gerando localmente uma malha fina uniforme, que, pela Tabela 4.2, tem ordem assintótica (p_L) igual a dois quando o refinamento RU é usado.

4.6.1.2 Resultados com malha grossa não-uniforme VNC no problema 7

Os resultados seguintes foram obtidos para o problema 7, com $Re = 5$, partindo-se de uma malha grossa não-uniforme de nó centrado (VNC), de comprimento unitário, conforme a malha representada na Figura 4.1.c. As iterações entre u^* e u foram realizadas até que o erro de máquina fosse atingido. Uma seqüência de refinamentos sucessivos foi feita para uma malha base de tamanho 15, refinada sucessivamente com razão de refinamento (q) igual a 3, usando os cinco tipos de refinamento apresentados na seção 4.3. Para a malha grossa usada, o valor de F_e é diferente e aleatório em cada face.

A Figura 4.15 e a Tabela B.7 apresentam os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) do problema 7, no ponto $x = 0,5$, cuja solução numérica, *a priori*, tem ordem assintótica (p_L) igual a dois quando se empregam os refinamentos RU , RSU .

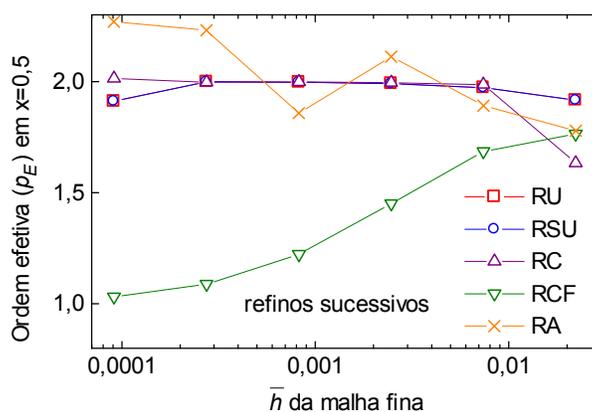


Figura 4.15 – Ordem efetiva do problema 7 para malha grossa não-uniforme do tipo VNC .

Pela Figura 4.15 e Tabela B.7, pode-se observar que o erro de arredondamento já afeta os resultados na última malha fina, ocasionando valores de p_E ligeiramente distintos de p_L . A análise *a priori* da ordem do erro de discretização, apresentada na Tabela 4.2, é confirmada para os refinamentos RU , RSU . O refinamento RC também apresenta $p_E \rightarrow p_L$, mas acredita-se, como no caso anterior, que isto se deva ao fato do refinamento sucessivo da malha grossa estar gerando localmente uma malha fina uniforme, que, pela Tabela 4.2, tem ordem assintótica (p_L) igual a dois quando o refinamento RC é usado.

Pode-se destacar ainda que ocorre degeneração da ordem quando o refinamento RCF é usado. Pela Tabela 4.1, pode-se observar *a priori* que aproximações numéricas do tipo λ_{CDS}^i em malhas VNC que possuem $F_e \neq 1/2$ têm ordem assintótica da aproximação igual à unidade.

4.7 Integral Numérica – Problema 8

Como na seção 3.5, analisou-se pelo método dos volumes finitos o problema da integração de uma função espacial dada por

$$\Lambda_m = \int_a^b \frac{(e^{10x} - 1)}{(e^{10} - 1)} dx \quad (4.40)$$

A Eq. (4.40) representa o problema 8. O comprimento do domínio é unitário, e os limites de integração são a e b . A solução analítica exata do problema 8 é

$$\Lambda_m = \frac{(e^{10x} - 10x)}{10(e^{10} - 1)} \Big|_a^b \quad (4.41)$$

O problema 8 foi resolvido usando a regra do retângulo, que, aplicada na Eq. (4.40) fornece

$$\lambda_m = \frac{1}{(e^{10} - 1)} \sum_n \left[(e^{10x_p} - 1)(x_e - x_w) \right] \quad (4.42)$$

onde n é o número de volumes, e e w são as faces leste e oeste do volume P , e a discretização na fronteira é de volumes inteiros. Da mesma forma como na seção 3.5, os valores de λ_m não dependem da variável dependente primária (λ), mas sim da variável independente (x). Desta forma, na variável secundária (λ_m) estará presente somente o erro de discretização decorrente do processo de integração numérica.

4.7.1 Regra do retângulo e volumes finitos

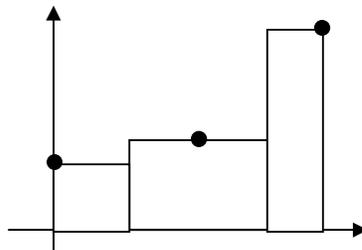
O erro de discretização para a regra do retângulo, que usa um polinômio de interpolação de grau zero, em malha uniforme, no intervalo de integração $x = [0;a]$, é dado por (Pina, 1995)

$$\varepsilon(\text{retângulo})_L \leq \frac{\text{máx}|\Lambda_x^i|}{2}(ah) \quad (4.43)$$

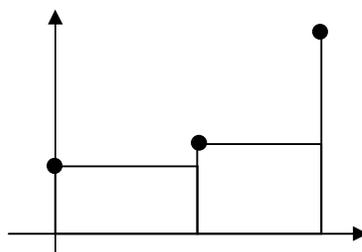
A Eq. (4.43) mostra que a regra do retângulo é uma aproximação de primeira ordem, enquanto que a regra do trapézio, dada na Eq. (3.55), é uma aproximação de ordem dois, pois, usa um polinômio de interpolação de primeiro grau.

No método dos volumes finitos, pode-se supor que o valor da variável de interesse armazenada no nó ou centro do volume seja válido para todo o volume de controle. Desta forma, é fácil aproximar a integral de volume pelo produto do valor da variável de interesse, armazenado no nó do volume, pelas dimensões do volume, conforme ilustra a Figura 4.16.a. Este procedimento é conhecido como regra do retângulo aplicada ao volume, e tem ordem assintótica (p_L) igual a dois para discretizações do tipo *VFC* (Kreyszig, 1999). Para uma discretização não-uniforme de face centrada (*VFC*), o produto do valor da variável de interesse, armazenado no nó do volume, pelas dimensões do volume, equivale a aplicar a regra do trapézio, que, conforme a Eq. (3.55), é uma aproximação de ordem dois. Portanto, *a priori*, pode-se afirmar que a ordem assintótica (p_L) da aproximação da integral no volume, da forma como exemplificado na Figura 4.16.a, representada na Eq. (4.42), é dois quando a discretização é do tipo *VFC* ($Fe = 1/2$). No caso da discretização *VNC* ($Fe \neq 1/2$), espera-se que a ordem assintótica (p_L) seja dois pelo fato do esquema numérico empregado possuir semelhança com a regra do trapézio, isto é, a regra do retângulo aplicada ao volume equivale a usar polinômios de grau um

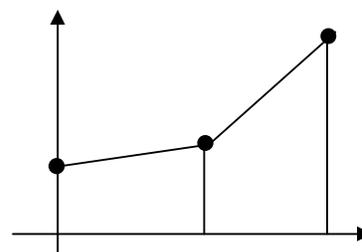
entre os nós da malha, mesmo sendo estes polinômios distintos daqueles usados quando a regra do trapézio é empregada.



(a) integral do retângulo aplicado ao volume.



(b) integral retângulo.



(c) integral trapézio.



(d) discretização *VFC* com $\frac{1}{2}$ volume na fronteira.

Figura 4.16 – Integração numérica com a regra do retângulo e a regra do trapézio.

A seguir são apresentados os resultados obtidos para o problema 8, com malha grossa em PG, para o problema 8, nas discretizações *VFC* e *VNC*.

4.7.1.1 Resultados com malhas em progressão geométrica no problema 8

Os resultados seguintes foram obtidos para o problema 8, no intervalo $x = [0;1]$, partindo de duas malhas grossas, de comprimento unitário, a primeira com comprimentos entre nós em PG e faces centradas (*VFC*), e a segunda com comprimento entre faces em PG e nós centrados (*VNC*), ambas com razão inicial (r_g) da PG igual a 1,5. Uma seqüência de refinamentos sucessivos foi feita para uma malha base de tamanho 15, refinada sucessivamente com razão de refino (q) igual a 3, usando o refino também em PG de razão r_f dada pela Eq. (3.30).

Para malhas em PG, como visto nas seções 3.3.1.2 e 4.4.1.1, $p_E \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$ se a razão da PG da malha grossa (r_g) e a razão da PG da malha fina (r_f) obedecem a relação dada pela Eq. (3.30) e ainda, se $r_f \rightarrow 1$. No caso de refinamentos sucessivos de malha, é fácil observar que $r_f \rightarrow 1$ na medida em que $h \rightarrow 0$, o que garante que $p_E \rightarrow p_L$. Porém, o fato de $h \rightarrow 0$ impor $r_f \rightarrow 1$ é uma conveniência, e pode passar despercebida *a priori*, induzindo a um erro de análise, isto é, considerar que basta $h \rightarrow 0$ para que $p_E \rightarrow p_L$ quando se tratar de malhas em PG.

A Figura 4.17 e a Tabela B.8 apresentam os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E), cuja solução numérica confirma a análise *a priori* da seção anterior, em que a ordem assintótica (p_L) é igual a dois. Pela Figura 4.17, pode-se observar que $p_E \rightarrow p_L$ na medida que $h \rightarrow 0$ e $r_f \rightarrow 1$, confirmando a análise *a priori*, isto é, a regra do retângulo aplicada ao volume tem ordem assintótica igual a dois.

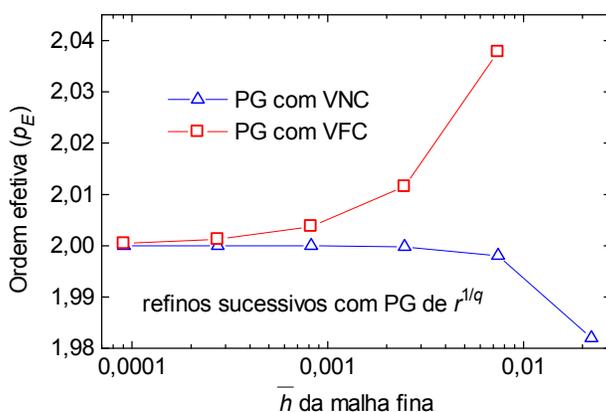


Figura 4.17 – Ordem efetiva do problema 8, no intervalo $x = [0;0,5]$, para malha grossa não-uniforme do tipo *VFC*.

4.7.2 Resultados e estimativas de erro numérico com malha não-uniforme *VFC* para o problema 8

As Tabelas 4.3 a 4.6 mostram os resultados obtidos para a malha não-uniforme *VFC* com refinamentos *RU*, *RSU* e *RC*, para o problema 8, no intervalo $x = [0;1]$, cuja solução numérica é obtida empregando a Eq. (4.41), em que a regra do retângulo aplicada ao volume foi usada. Pela Tabela 4.2, $p_E \rightarrow p_L$ para os refinamentos *RSU* e *RC*. Da seção 4.7.1, para malhas *VFC* a regra do trapézio aplicada ao volume tem ordem assintótica (p_L) igual a dois. As malhas têm tamanho indicado na Tabela 4.3, e a solução analítica é $\Lambda_m = 0,09995459800899$. Na Tabela 4.3 são apresentados os resultados de λ_m , usando malha grossa não-uniforme *VFC*, com refinamentos *RU*, *RSU* e *RC*, em 5 conjuntos de malhas.

Tabela 4.3– Resultados do problema 8, no intervalo $x = [0;1]$, para malha grossa não-uniforme *VFC*.

análise	N_{sg} N_g N_f	Tipo de refino e λ_m no intervalo $[0;1]$		
		<i>RU</i>	<i>RSU</i>	<i>RC</i>
1	27	0,0988950669358419	0,0982754128157183	0,1006065467494632
	81	0,0998750584980785	0,0997668243108279	0,1000252246218639
	243	0,0999457557856901	0,0999337193766564	0,0999623674139211
2	87	0,0997244664364463	0,0999716573348534	0,0997495908504383
	261	0,0999457418123216	0,0999564958198218	0,0999307975730537
	783	0,0999536139213178	0,0999548089056535	0,0999519146316763
3	267	0,0999500665768856	0,0999375321122720	0,0999340372572297
	801	0,0999539007912890	0,0999527016863970	0,0999522792236140
	2403	0,0999545205399806	0,0999543873050990	0,0999543390861262
4	807	0,0999554207077520	0,0999559331326304	0,0999553954175460
	2421	0,0999545214105312	0,0999547463566280	0,0999546865044287
	7263	0,0999545894980457	0,0999546144920672	0,0999546078378896
5	2427	0,0999543879651669	0,0999544698084502	0,0999541779811689
	7281	0,0999545895515471	0,0999545837644780	0,0999545512620057
	21843	0,0999545970692743	0,0999545964262666	0,0999545928120175

Para uma estimativa de erro confiável, as Eqs. (2.33) e (2.36) (Marchi 2001; Marchi e Silva, 2002) precisam ser confirmadas. No caso do refino *RU*, Tabela 4.4, os valores de p_E e p_U não convergiram para o valor de p_L ou não puderam ser calculados em alguns conjuntos de malhas, o que está de acordo com a análise apresentada na Tabela 4.2.

Com os resultados da Tabela 4.5 e 4.6, pode-se verificar que para o refino RSU e RC , quando $h \rightarrow 0$, temos $p_E \rightarrow p_L$, $p_U \rightarrow p_L$ e $E \rightarrow 0$, o que caracteriza diminuição do erro com a redução do tamanho dos elementos da malha. Com $U_{Ri}(p_L)/E < 1 < U_{Ri}(p_U)/E$ ou $U_{Ri}(p_L)/E > 1 > U_{Ri}(p_U)/E$, confirma-se a Eq. (2.33) (Marchi e Silva, 2002), que implica em garantir que se está em um intervalo convergente onde certamente $p_U \rightarrow p_L$. E ainda, $GCI(p)/|E| \rightarrow Fs$, confirmando a Eq. (2.36), que significa que o estimador é confiável.

Tabela 4.4 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme VFC , refino RU .

análise	Estimativa do erro numérico para Λ_m no intervalo [0;1]						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda-\lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ $Fs=3$
1		2,35690774	2,39314340	-0,0000088422	0,99942748	0,62164088	2,99828244
2		2,96513504	3,03663266	-0,0000009841	0,99992475	0,29508514	2,99977426
3	2	1,70369075	1,65882523	-0,0000000775	0,99999453	1,54239083	4,62717249
4		-	-	-0,0000000085	0,99999938	-	2,99999816
5		2,92393351	2,99373505	-0,0000000009	0,99999992	0,30989967	2,99999977

Tabela 4.5 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme VFC , refino RSU .

análise	Estimativa do erro numérico para Λ_m no intervalo [0;1]						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda-\lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ $Fs=3$
1		1,99417617	1,99352675	-0,0000208786	0,99919778	1,00722755	3,02168266
2		1,99888169	1,99875735	0,0000002109	0,99984640	1,00138332	3,00414996
3	2	1,99994631	1,99994034	-0,0000002107	0,99999262	1,00006635	3,00019907
4		1,99999652	1,99999613	0,0000000165	0,99999958	1,00000436	3,00001309
5		1,99999949	1,99999944	-0,0000000016	0,99999992	1,00000061	3,00000184

Tabela 4.6 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme VFC , refino RC .

análise	Estimativa do erro numérico para Λ_m no intervalo [0;1]						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda-\lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ $Fs=3$
1		2,02306030	2,02477202	0,0000077694	1,01129379	0,98085099	3,03388138
2		1,96005544	1,95661138	-0,0000026834	0,98369778	1,03805846	3,11417539
3	2	1,98645192	1,98530962	-0,0000002589	0,99443830	1,01267731	3,03803194
4		2,00108462	2,00117466	0,0000000098	1,00044949	0,99899820	3,00134849
5		1,99849503	1,99836946	-0,0000000052	0,99938015	1,00139641	3,00418923

A seguir são apresentados os resultados e estimativas de erro para o problema 8 usando malhas não-uniformes *VNC*.

4.7.3 Resultados e estimativas de erro numérico com malha não-uniforme *VNC* para o problema 8

As Tabelas 4.7 a 4.10 mostram os resultados obtidos para a malha não-uniforme *VNC* com refinamentos *RU*, *RSU* e *RC*, representados na seção 4.3, para o problema 8, no intervalo $x = [0;1]$, cuja solução numérica é obtida empregando a Eq. (4.41), em que a regra do retângulo aplicada ao volume foi usada. Pela Tabela 4.2, $p_E \rightarrow p_L$ para os refinamentos *RU* e *RSU*. Da seção 4.7.1, para malhas *VNC* a regra do trapézio aplicada ao volume tem ordem assintótica (p_L) igual a dois. As malhas têm tamanho indicado na Tabela 4.7, e a solução analítica é $\Lambda_m = 0,09995459800899$. Na Tabela 4.7 são apresentados os resultados de λ_m , usando malha grossa não-uniforme *VNC*, com refinamentos *RU*, *RSU* e *RC*, em 5 conjuntos de malhas.

Tabela 4.7 – Resultados do problema 8, no intervalo $x = [0;1]$, para malha grossa não-uniforme *VNC*.

análise	N_{sg} N_g N_f	Tipo de refino e λ_m no intervalo $[0;1]$		
		<i>RU</i>	<i>RSU</i>	<i>RC</i>
1	27	0,0987311623081708	0,0992006463059505	0,0991228098924446
	81	0,0998174380513581	0,0998703800785845	0,0997214626340004
	243	0,0999393427771067	0,0999452349282128	0,0999275032672680
2	87	0,0998769103597930	0,0998863127299676	0,0998921939218786
	261	0,0999459607045476	0,0999470068741024	0,0999446114346131
	783	0,0999536382424801	0,0999537545016071	0,0999534722537475
3	267	0,0999474159719439	0,0999463675174914	0,0999468352974294
	801	0,0999537999614711	0,0999536834547373	0,0999525182977624
	2403	0,0999545093365078	0,0999544963911695	0,0999543657988030
4	807	0,0999538380282721	0,0999538103791377	0,0999538291045246
	2421	0,0999545135661836	0,0999545104940368	0,0999546006146651
	7263	0,0999545886264499	0,0999545882850996	0,0999545982888051
5	2427	0,0999545092571449	0,0999545073376295	0,0999545103518803
	7281	0,0999545881476674	0,0999545879343876	0,0999545702424212
	21843	0,0999545969132876	0,0999545968895899	0,0999545949222139

Semelhante aos resultados da seção anterior, da Tabela 4.8 e 4.9, pode-se verificar que para o refino RU e RSU , quando $h \rightarrow 0$, temos $p_E \rightarrow p_L$, $p_U \rightarrow p_L$ e $E \rightarrow 0$, o que caracteriza diminuição do erro com a redução do tamanho dos elementos da malha. Como $U_{Ri}(p_L)/E < 1 < U_{Ri}(p_U)/E$ ou $U_{Ri}(p_L)/E > 1 > U_{Ri}(p_U)/E$, pode-se garantir que se está em um intervalo convergente onde $p_U \rightarrow p_L$. E ainda, $GCI(p)/|E| \rightarrow Fs$, confirmando a Eq. (2.36).

Tabela 4.8 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme VNC , refino RU .

análise	Estimativa do erro numérico para Λ_m no intervalo $[0;1]$						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda-\lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ $Fs=3$
1		1,99184965	1,99093947	-0,0000152552	0,99887637	1,01013197	3,03039593
2		1,99943671	1,99937410	-0,0000009598	0,99992261	1,00069646	3,00208938
3	2	1,99995049	1,99994499	-0,0000000887	0,99999320	1,00006118	3,00018356
4		1,99999456	1,99999395	-0,0000000094	0,99999923	1,00000670	3,00002012
5		1,99999938	1,99999931	-0,0000000011	0,99999990	1,00000075	3,00000227

Tabela 4.9 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme VNC , refino RSU .

análise	Estimativa do erro numérico para Λ_m no intervalo $[0;1]$						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda-\lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ $Fs=3$
1		1,99517198	1,99463395	-0,0000093631	0,99933520	1,00598737	3,01796213
2		1,99953443	1,99948269	-0,0000008435	0,99993604	1,00057559	3,00172677
3	2	1,99994506	1,99993895	-0,0000001016	0,99999245	1,00006790	3,00020371
4		1,99999453	1,99999393	-0,0000000097	0,99999920	1,00000669	3,00002009
5		1,99999936	1,99999929	-0,0000000011	0,99999990	1,00000076	3,00000230

Tabela 4.10 – Resultados do problema 8 para malha grossa não-uniforme VNC , refino RC .

análise	Estimativa do erro numérico para Λ_m no intervalo $[0;1]$						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda-\lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ $Fs=3$
1		1,15778647	0,97086871	-0,0000270947	0,95055636	3,99077320	11,9723196
2		1,66791247	1,61804264	-0,0000011258	0,98387495	1,60121209	4,80363627
3	2	1,19887849	1,02278610	-0,0000002322	0,99451980	3,83235919	11,4970775
4		-	-	0,0000000003	1,03901742	-	3,11705228
5		1,04641099	0,80695782	-0,0000000031	0,99941611	5,60405754	16,8121726

Apesar dos refinamentos RU e RSU serem idênticos, os resultados da Tabela 4.7 não foram obtidos com a mesma malha base não-uniforme, portanto, não resultaram valores de Λ idênticos. No caso do refinamento RC , Tabela 4.10, os valores de p_E e p_U não convergiram para o valor de p_L ou não puderam ser calculados em alguns conjuntos de malhas, o que está de acordo com a análise *a priori*, apresentada na Tabela 4.2.

4.8 Outros Resultados

Neste capítulo, como no anterior, foram implementados outros algoritmos usando o *MVF*. Soluções numéricas foram obtidas para os problemas 1D da seção 2.1, com diferentes aproximações e configurações de malha grossa e fina conforme a Tabela 4.11.

Tabela 4.11 – Algoritmos implementados no Método dos Volumes Finitos.

modelo matemático	discretização			
	fronteira	volumes internos	malha grossa	refinamentos
advecção 1D	½ volume volume inteiro	VFC VNC	uniforme não-uniforme com PG	RU
difusão 1D				RSU
advecção/difusão 1D				RC
advecção/difusão não-linear 1D				RCF
integral				RA

Para cada modelo matemático da Tabela 4.11 as diversas combinações de discretização foram implementadas. Todas as simulações foram analisadas, sendo que as soluções numéricas apresentadas neste capítulo fazem parte dos resultados mais significativos.

4.9 Resumo do Capítulo 4

Na seção 4.1, Figura 4.1, estão apresentadas diferentes discretizações para o *MVF*, que, da mesma forma como as malhas para diferenças finitas, foram escolhidas pelo fato

representam as principais configurações de malhas cartesianas bidimensionais e tridimensionais para volumes finitos.

As principais aproximações usadas no MVF e seus erros de truncamento estão apresentados na seção 4.2. Foram desenvolvidas expressões mais gerais do que aquelas encontradas em Marchi e Silva (2000), para obtenção do erro de truncamento com qualquer número de termos. A Tabela 4.1 apresenta um resumo da ordem assintótica de cada aproximação.

Diferentes tipos de refino de malha são apresentados na seção 4.3, denominados de Refino Uniforme (*RU*), refino semi-uniforme (*RSU*), refino entre centros (*RC*), refino entre centros com F_e constante (*RCF*), refino aleatório (*RA*).

Na seção 4.4, é apresentada uma análise *a priori* da ordem do erro de discretização para o problema da advecção com fonte. A Tabela 4.2 apresenta um resumo desta análise. Pode-se verificar que, o refino *RSU* proposto neste trabalho, quando empregado em malhas uniformes, não-uniformes com nós ou faces centradas, garante que todos os tamanhos ou comprimentos elementares (h) do domínio envolvidos nas aproximações numéricas sejam reduzidos em igual número de partes para obtenção da malha fina, o que garante que $p_E \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$, melhorando a acurácia da estimativa do erro numérico.

As análises *a posteriori* apresentadas nas seções 4.4 a 4.7 confirmam as análises *a priori*, resumidas nas Tabelas 4.1 e 4.2. Na seção 4.7, foi analisada a questão da regra do trapézio aplicada ao volume, que, por engano, pode ser considerada erroneamente uma aproximação de ordem unitária. Mostrou-se que esta aproximação é de ordem dois tanto para malhas não-uniformes de nó centrado (*VNC*) como de face centrada (*VFC*).

No próximo capítulo são apresentados os resultados e análises empregando modelos matemáticos bidimensionais para o Método das Diferenças Finitas.

5. Soluções Bidimensionais pelo Método das Diferenças Finitas

Neste capítulo são apresentadas soluções numéricas para o modelo matemático da difusão 2D, obtidas pelo método das diferenças finitas (*MDF*). Esta equação é bastante empregada em *CFD* para modelar os problemas de condução do calor. A equação governante deste problema é a Eq. (2.5) que será reescrita oportunamente. As soluções dos sistemas lineares de equações foram obtidas com método iterativo *ADI*, conforme citado na seção 2.3.4. Resultados deste capítulo também são encontrados nas tabelas do apêndice C.

5.1 Discretizações Bidimensionais para Diferenças Finitas

As malhas bidimensionais empregadas para a obtenção das soluções numéricas pelo *MDF* têm suas configurações representadas nas Figuras 5.1 e 5.2, que são combinações das discretizações unidimensionais mostradas na Figura 3.1. O comprimento L e altura H são unitários e o número de nós em cada direção coordenada (N_x e N_y) é particular de cada solução, sendo indicado oportunamente.

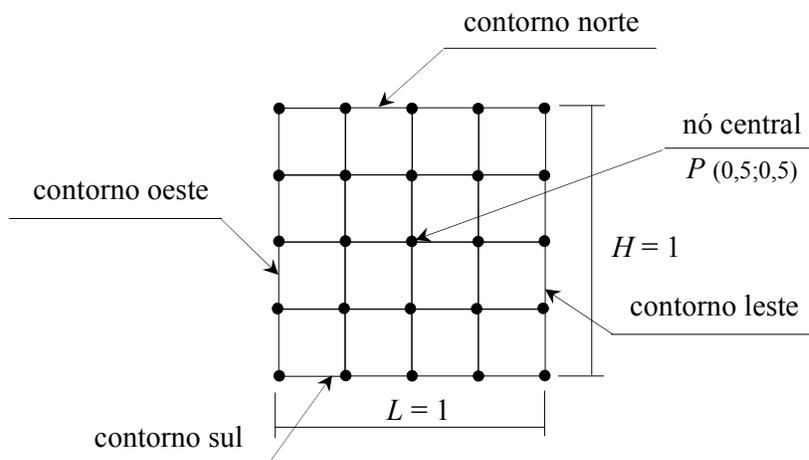


Figura 5.1 – Domínio bidimensional e discretização para diferenças finitas.

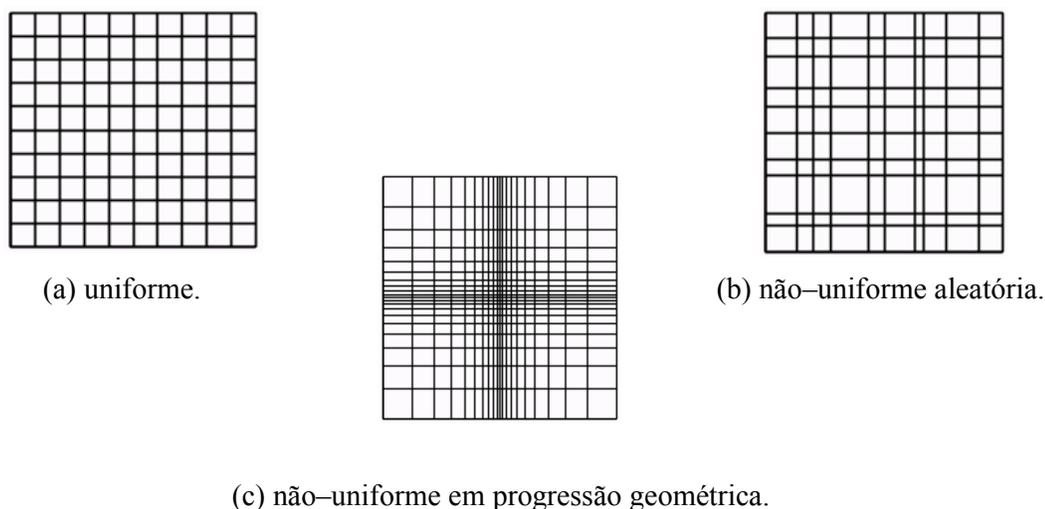


Figura 5.2 – Malhas bidimensionais cartesianas para diferenças finitas.

O comprimento médio característico de uma malha n -dimensional é definido como (Morais, 2004; Moraes *et al.*, 2005)

$$\bar{h} = \left(\frac{S}{N} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (5.1)$$

onde N é o número total de volumes da malha e S é o comprimento, área ou volume da malha, de acordo com a dimensão D do problema. Na malha da Figura 5.1, S é o produto $L.H$, o número total de elementos (N) é o produto $N_x.N_y$ e a dimensão (D) é dois.

Nas análises numéricas apresentadas neste capítulo, a ordem efetiva (p_E) e aparente (p_L) do erro de discretização são calculadas no nó central P , mostrado na Figura 5.1, com tamanho médio da malha dado pela Eq. (5.1).

5.2 Aproximações Numéricas

As aproximações numéricas para a derivada de primeira ordem e para a derivada de segunda ordem a serem usadas no modelo matemático 2D empregando o método das diferenças finitas (*MDF*) estão apresentadas na seção 3.2. A Tabela 3.1 apresenta os valores das ordens assintóticas nos casos de malhas não-uniformes e uniformes, válida também neste capítulo 5.

5.3 Difusão Bidimensional – Problema 9

A equação governante do problema da difusão bidimensional é dada por

$$\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} = 0 \quad (5.2)$$

Admitindo as condições de contorno do domínio, representado na Figura 5.1, como

$$\begin{aligned} \Lambda(0, y) &= 0,5 && \text{(contorno oeste)} \\ \Lambda(x, 0) &= 0,5 && \text{(contorno sul)} \\ \Lambda(L, y) &= 0,5 && \text{(contorno leste)} \\ \Lambda(x, H) &= 0,5 + 0,5 \operatorname{sen}(\pi x) && \text{(contorno norte)} \end{aligned} \quad (5.3)$$

a solução analítica da Eq. (5.2) é dada por

$$\Lambda = 0,5 + 0,5 \frac{\operatorname{senh}(\pi y) \operatorname{sen}(\pi x)}{\operatorname{senh}(\pi)} \quad (5.4)$$

O perfil da Eq. (5.4) em $\Lambda(x;0,5)$ e $\Lambda(0,5;y)$ e a superfície gerada estão representadas na Figura 5.3.

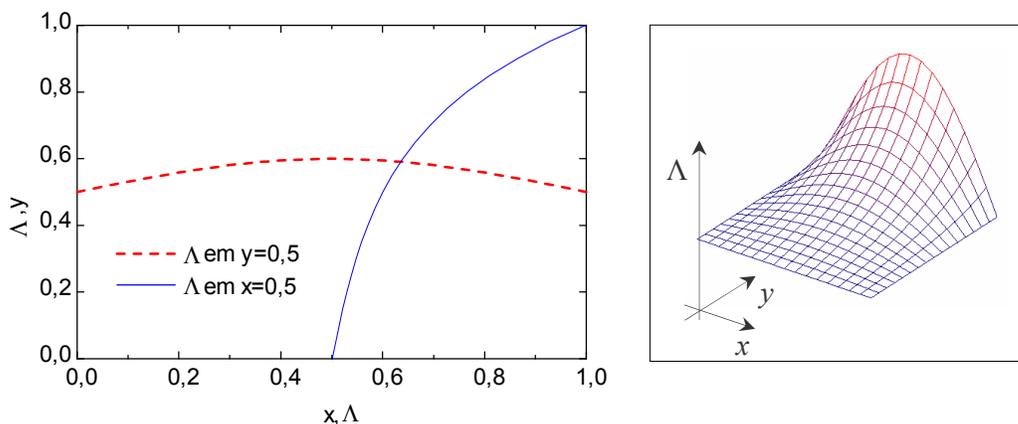


Figura 5.3 – Perfil da Eq. (5.4) em $\Lambda(x;0,5)$ e $\Lambda(0,5;y)$ e superfície gerada.

Aplicando-se o método das diferenças finitas ao problema representado pela Eq. (5.1), substituem-se os termos de derivada segunda da Eq. (5.1) por aproximações numéricas do tipo λ_{CDS}^i , dada na Eq.(3.8), escritas para as direções coordenadas x e y . De acordo com a Tabela 3.1, a ordem assintótica (p_L) para este problema é dois.

Aplicando as condições de contorno de Dirichlet (Patankar, 1980) para as faces do domínio e a equação discretizada para os nós internos, tem-se o sistema de equações algébricas que fornece a solução numérica do problema. Seguindo a numeração dos problemas resolvidos neste trabalho, este problema será referenciado por 9.

5.3.1 Refinos de malha bidimensional

Como dito na seção 3.2, o primeiro passo para uma estimativa confiável do erro de discretização é identificar qual o valor da ordem assintótica (p_L) da Tabela 3.1 que está sendo verificada efetivamente (p_E) nas soluções numéricas e que pode ser empregada nos estimadores de erro da seção 2.6. Pois, a determinação *a priori* de qual valor de p_L da aproximação está ocorrendo na prática depende da combinação: configuração da malha grossa e configuração da malha fina.

Pela Figura 5.2, as malhas bidimensionais cartesianas podem ser do tipo uniforme, não-uniforme ou com progressão geométrica. Conforme visto na seção 3.6.1, Tabela 3.2, os refinamentos mais comuns são: o refino uniforme, o refino não-uniforme ou aleatório, e o refino com progressão geométrica.

Pela análise *a priori* da seção 3.3.1.1, $p_E \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$, desde que se empregue o refino uniforme. Assim, numa análise *a priori*, baseada nas análises e resultados unidimensionais apresentados no capítulo 3, espera-se que, para qualquer tipo de malha grossa, uniforme ou não-uniforme, o valor da ordem assintótica (p_L) seja verificado efetivamente (p_E) quando o refino uniforme for empregado. O refino uniforme é aquele em que cada elemento da malha grossa é dividido em partes iguais para a obtenção da malha fina.

A seguir são apresentados os resultados obtidos para o problema 9, em diferentes configurações de malha grossa e malha fina.

5.3.1.1 Resultados para malha grossa uniforme no problema 9

O problema 9 foi resolvido para o domínio mostrado na Figura 5.1 e condições de contorno dadas pelas Eqs. (5.3). A ordem assintótica (p_L) do problema 9 é dois. A Figura 5.4 e a Tabela C.1 mostram os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) no ponto central P do domínio. Os refinamentos empregados na obtenção da malha fina são: o refinamento uniforme e o refinamento não-uniforme ou aleatório, em cada direção. As malhas têm tamanho indicado na Tabela C.1, onde o número de elementos (h_j) em cada direção coordenada (x,y) é igual. A malha fina foi obtida com razão de refinamento (q) igual a dois em cada direção (x,y).

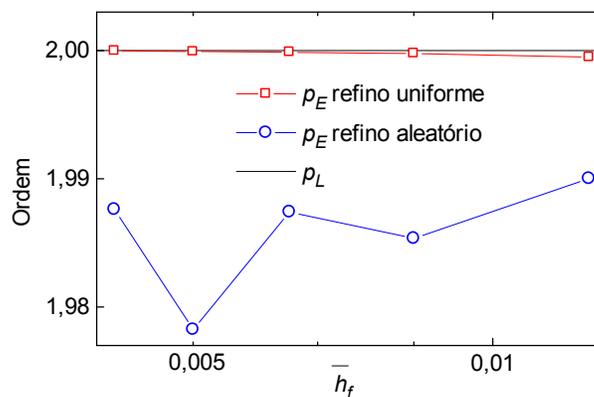


Figura 5.4 – Ordem efetiva do problema 9A, no ponto P , para malha grossa uniforme.

Pela Figura 5.4 pode-se verificar que, para o refinamento uniforme, o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) quando $h \rightarrow 0$, enquanto que para o refinamento aleatório, não se observa tendência no valor de p_E . Estes resultados confirmam as análises *a priori* unidimensionais, feitas no capítulo 3, mostrando que estas análises podem ser aplicadas a problemas bidimensionais.

5.3.1.2 Resultados para malha grossa não-uniforme no problema 9

A Figura 5.5 e a Tabela C.2 e a mostram os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) no ponto central P do domínio. Os refinamentos empregados na obtenção da malha fina são: o refinamento uniforme e o refinamento não-uniforme ou aleatório, em cada direção. As malhas têm tamanho indicado na Tabela C.2, onde o número de elementos (h_j) em cada direção

coordenada (x,y) é igual. A malha fina foi obtida com razão de refino (q) igual a dois em cada direção (x,y) .

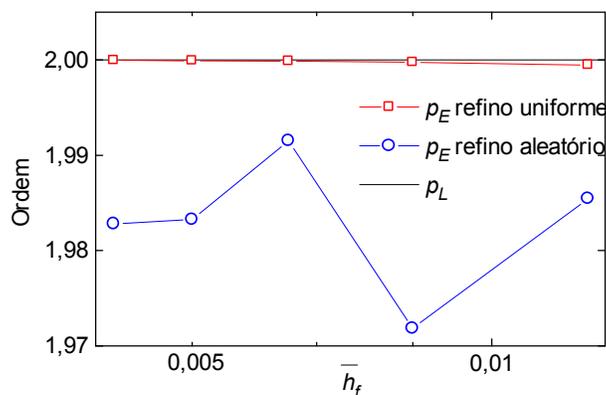


Figura 5.5 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme.

Novamente, pela Figura 5.5 pode-se verificar que, para o refino uniforme, o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) quando $h \rightarrow 0$, enquanto que para o refino aleatório, não se observa tendência no valor de p_E , confirmando as análises unidimensionais do capítulo 3.

5.3.1.3 Resultados para malha grossa com progressão geométrica no problema 9

A Figura 5.6 e a Tabela C.3 mostram os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E), para o problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme com progressão geométrica de razão (r_g) à direita e acima do ponto P e razão igual a $1/r$ à esquerda e abaixo de P , o que tem como efeito um refino central da malha, conforme representado na Figura 5.2.c. Os tamanhos da malha grossa e fina estão representados na Tabela C.3. A malha fina foi obtida com razão de refino (q) igual a dois em cada direção (x,y) . Os refinamentos empregados na obtenção da malha fina são: o refino uniforme, o refino não-uniforme ou aleatório, e o refino com PG de razão $\sqrt[q]{r}$, em cada direção.

Pela Figura 5.6 pode-se verificar que, tanto para o refino uniforme como para o refino com PG, o valor da ordem efetiva (p_E) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) quando $h \rightarrow 0$, enquanto que para o refino aleatório, não se observa tendência no valor de

p_E . Assim, para se obter estimativas do erro de discretização confiáveis, não se recomenda, para qualquer tipo de malha grossa da Figura 5.2, o refino de malha do tipo aleatório.

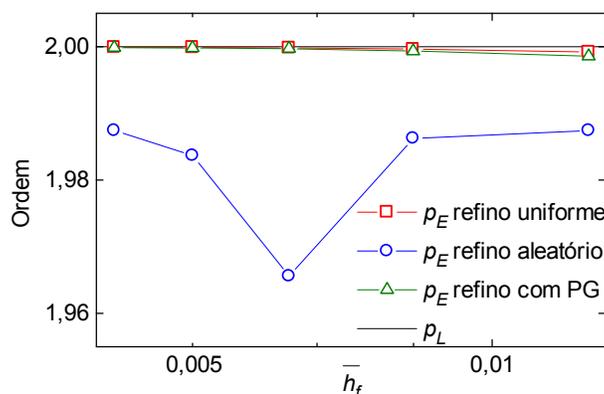


Figura 5.6 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa com PG de razão r .

5.3.1.4 Resultados e estimativas de erro numérico para o problema 9

Da mesma forma como nas seções 3.6 e 4.7, nos resultados do problema 9, foram calculadas para conjuntos de três malhas: i) a ordem assintótica (p_L) das aproximações empregadas; ii) a ordem efetiva (p_E), calculada pela Eq. (2.43); iii) a ordem aparente (p_U), calculada pela Eq. (2.29); iv) o erro numérico E , calculado pela Eq. (1.1); v) a relação entre a incerteza numérica de Richardson ($U_{Ri}(p_L)$) e o erro numérico (E), com $U_{Ri}(p_L)$ calculado pela Eq. (2.22); vi) a relação entre a incerteza numérica de Richardson ($U_{Ri}(p_U)$) e o erro numérico (E), com $U_{Ri}(p_U)$ calculado pela Eq. (2.30); e vii) a relação entre a incerteza numérica ($GCI(p)$) e o erro numérico (E), com $GCI(p)$ baseado no menor valor entre p_L e p_U , calculada pela Eq. (2.35).

As Tabelas 5.1 a 5.3 mostram os resultados obtidos para a malha não-uniforme com refino uniforme e não-uniforme ou aleatório, nas duas direções coordenadas (x,y), para o problema 9, em que foi empregada a aproximação λ_{CDS}^{ii} , de ordem assintótica (p_L) igual a dois. As malhas têm tamanho indicado na Tabela 5.1 e a solução analítica no ponto central P da Figura 5.1 é $\Lambda = 0,599634203834596646$. Na Tabela 5.1 são apresentados os resultados de λ do problema 9, no ponto central P da Figura 5.1, usando malha grossa não-uniforme com refino uniforme e não-uniforme ou aleatório, com razão de refino de malha (q) igual a dois nas duas direções coordenadas (x,y), em 5 conjuntos de malhas.

Tabela 5.1 – Resultados do problema 9 para malha grossa não-uniforme.

análise	$N_{xsg} \times N_{ysg}$ $N_{xg} \times N_{yg}$ $N_{xf} \times N_{yf}$	Tipo de refino e λ em P (0,5;0,5)	
		uniforme	aleatório
1	20x20	0,599932573891991949	0,599933292459438161
	40x40	0,599708906979343093	0,599710110177566924
	80x80	0,599652886552796027	0,599653372782314120
2	30x30	0,599766055042507240	0,599765514715785208
	60x60	0,599667187820897451	0,599667373138252135
	120x120	0,599642451151962241	0,599642601240891859
3	40x40	0,599708428726934972	0,599708541334156853
	80x80	0,599652766782658553	0,599653020272050474
	160x160	0,599638844989025088	0,599638935655568250
4	50x50	0,599681686676707959	0,599681615255165501
	100x100	0,599646077270903799	0,599646177941206559
	200x200	0,599637172361946469	0,599637932327704272
5	60x60	0,599667193141531274	0,599667143321534035
	120x120	0,599642452475430021	0,599642524577606806
	240x240	0,599636266075471380	0,599636308982486765

Tabela 5.2 – Resultados do problema 9 para malha grossa não-uniforme, com refino uniforme.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ em P (0,5;0,5)						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda - \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $Fs=3$
1		1,99786188	1,99732697	-0,0000186827	0,99950528	1,00197827	3,00593481
2		1,99907311	1,99884105	-0,0000082473	0,99978646	1,00085805	3,00257416
3	2	1,99947724	1,99934620	-0,0000046411	0,99988008	1,00048447	3,00145341
4		1,99966876	1,99958559	-0,0000029685	0,99992441	1,00030747	3,00092241
5		1,99977014	1,99971232	-0,0000020622	0,99994784	1,00021373	3,00064121

Com os resultados da Tabela 5.2, pode-se verificar que para o refino de malha uniforme, quando $h \rightarrow 0$, temos: i) $p_E \rightarrow p_L$, $p_U \rightarrow p_L$ e $E \rightarrow 0$, o que caracteriza diminuição do erro com a redução do tamanho dos elementos da malha, com ordem assintótica (p_L) conhecida *a priori*; ii) $U_{Ri}(p_L)/E < 1 < U_{Ri}(p_U)/E$, o que confirma a Eq. (2.33) (Marchi e Silva, 2002), que implica em garantir que se está em um intervalo convergente onde $p_U \rightarrow p_L$; e iii) $GCI(p)/|E| \rightarrow Fs$, o que confirma a Eq. (2.36), que significa garantir que o estimador é confiável.

Tabela 5.3 – Resultados do problema 9 para malha grossa não-uniforme, com refino não-uniforme ou aleatório.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ em P (0,5;0,5)						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda \cdot \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ Fs=3
1		1,97828068	1,97585067	-0,0000191689	1,00895095	0,98661988	3,02685287
2		1,98506584	1,98616008	-0,0000083974	0,99599406	0,98331542	2,98798220
3	2	1,98209665	1,97891488	-0,0000047318	1,01176406	0,99219141	3,03529220
4		1,98531660	2,10357051	-0,0000037284	0,67061959	0,73717122	2,21151367
5		1,98503381	1,98579272	-0,0000021051	0,99721932	0,98418978	2,99165796

Pelos resultados da Tabela 5.3, pode-se verificar que a estimativa de erro não é confiável para o refino aleatório, pois, quando $h \rightarrow 0$ não se tem $p_U \rightarrow p_L$. Isto reflete na inacurácia da estimativa de erro U , que, apresenta a tendência $U \rightarrow E$ oscilatória ao se diminuir o tamanho dos elementos da malha.

5.3.2 Refino direcional

A Figura 5.7.a mostra que, uma malha grossa pode ter número de elementos (N_x, N_y) diferentes em cada direção coordenada (x, y). Esta malha será aqui denominada de malha grossa uniforme por direção. Para se obter a malha fina, pode-se refinar a malha grossa somente em uma direção, isto é, um refino direcional, conforme a Figura 5.7.b. Nas discretizações apresentadas na Figura 5.7, a direção x não recebeu refino.

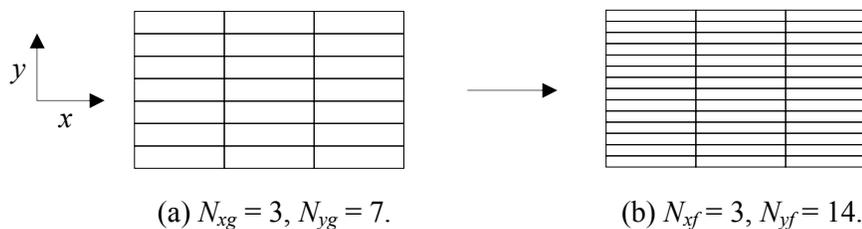


Figura 5.7 – Malha (a) grossa uniforme por direção e (b) malha fina obtida com refino uniforme em y (refino direcional).

5.3.2.1 Malha grossa com refino direcional uniforme e não-uniforme para o problema 9

O problema 9 foi resolvido para o domínio mostrado na Figura 5.7 e condições de contorno dadas pelas Eqs. (5.3). Numa primeira configuração, a malha grossa tem refino direcional uniforme com razão de refino (q) igual a dois na direção y . Numa segunda configuração, a malha grossa tem refino direcional não-uniforme com razão de refino (q) igual a dois na direção x . As Figuras 5.8 e 5.9 e as Tabelas C.4 e C.5 mostram os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) e para a ordem aparente (p_U) no ponto central P do domínio.

Da Figura 5.8, pode-se destacar que $p_E \rightarrow 0$ quando $h \rightarrow 0$ direcionalmente. Neste caso, o cálculo da ordem efetiva (p_E) não se aplica nos casos de refino direcional (Marchi e Silva, 2005). Os resultados da Tabela C.4 foram obtidos com malha grossa não-uniforme e refino direcional uniforme em x . Neste caso, quando $h \rightarrow 0$ direcionalmente, $p_U \rightarrow p_L = 2$, conforme a Figura 5.9. Isto implica que, para problemas práticos, refinamentos unidirecionais uniformes são úteis para se verificar a ordem assintótica (p_L) direcionalmente. Pode-se usar a ordem aparente p_U em cada direção coordenada (x,y) e verificar se $p_{Ux} \rightarrow p_L$ e $p_{Uy} \rightarrow p_L$ (Marchi e Silva, 2005). Os resultados da Tabela C.5 foram obtidos com malha grossa não-uniforme e refino direcional aleatório em y . Neste caso, quando $h \rightarrow 0$ direcionalmente, o valor de p_U não tende ao valor de p_L , conforme a Figura 5.9. Desta forma, em refinamentos unidirecionais não-uniformes ou aleatórios não se pode verificar se $p_{Ux} \rightarrow p_L$ e $p_{Uy} \rightarrow p_L$, o que leva a estimativas de erro menos confiáveis.

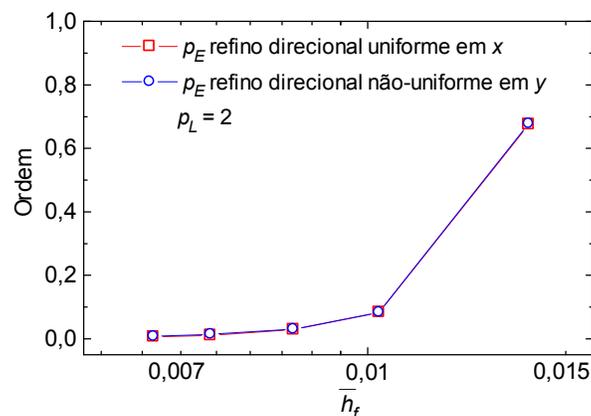


Figura 5.8 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme com refino direcional.

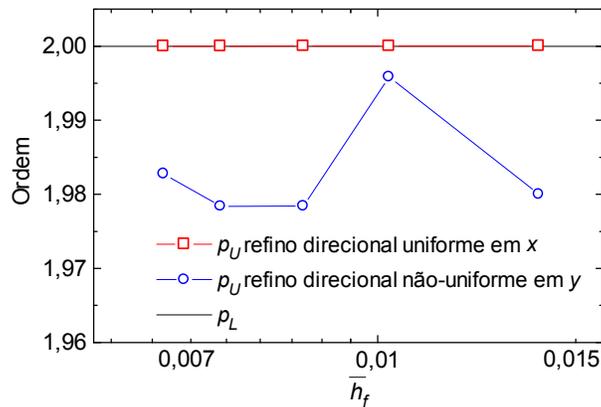


Figura 5.9 – Ordem aparente do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme com refino direcional.

5.4 Resumo do Capítulo 5

Na seção 5.1, Figura 5.1 e 5.2 estão representadas as discretizações em malha grossa, empregadas nas soluções numéricas do problema da difusão 2D, problema 9, apresentado na seção 5.3. As malhas finas foram obtidas com refino uniforme, refino aleatório e refino com PG. O problema 9, representado pela Eq. (5.2), foi resolvido empregando a aproximação λ_{CDS}^{ii} , dada na Eq.(3.8), que tem ordem assintótica (p_L) igual a dois.

A seção 5.3.1 apresenta os resultados para o problema 9, onde se observa que quando $h \rightarrow 0$, $p_E \rightarrow p_L$ nos refinamentos uniforme e com PG, o que não ocorre no caso do refino aleatório. Assim, as estimativas de erro usando refino aleatório, mostradas na Tabela 5.3, não apresentam confiabilidade.

Na seção 5.3.2, o refino direcional é aplicado nas direções coordenadas (x,y) para a obtenção das soluções numéricas do problema 9. Neste caso, pode-se verificar que a ordem efetiva (p_E) tende a um valor nulo, enquanto que a ordem aparente (p_U) tende ao valor da ordem assintótica (p_L) do problema, desde que o refino direcional seja do tipo uniforme. Desta forma, em problemas práticos, pode-se usar a ordem aparente (p_U) em cada direção coordenada (x,y) e verificar se $p_{Ux} \rightarrow p_L$ e $p_{Uy} \rightarrow p_L$ (Marchi e Silva, 2005).

O próximo capítulo trata da análise do erro de discretização para o Método dos Volumes Finitos em modelos matemáticos bidimensionais.

6. Soluções Bidimensionais pelo Método dos Volumes Finitos

Os problemas advectivo/difusivos são de grande relevância no estudo da mecânica dos fluidos e estão presentes em vários modelos matemáticos empregados em *CFD*. Neste capítulo são relatados modelos matemáticos discretizados pelo método dos volumes finitos (*MVF*), e resultados obtidos. Estes modelos são: a difusão bidimensional, dada pela Eq. (2.5) ou Eq. (5.2), e a advecção/difusão bidimensional, dada pela Eq. (2.6). Como no capítulo anterior, as soluções dos sistemas lineares de equações foram obtidas com o método iterativo *ADI* que combina o método direto *TDMA* em duas direções. Resultados deste capítulo também são encontrados nas tabelas do apêndice D.

6.1 Discretizações Bidimensionais para Volumes Finitos

As malhas bidimensionais empregadas no *MVF* têm suas configurações representadas nas Figuras 6.1 e 6.2, que são combinações das discretizações unidimensionais mostradas na Figura 4.1. O comprimento L e a altura H são unitários, o número de volumes em cada direção coordenada (N_x e N_y) é particular de cada solução, sendo indicado oportunamente, e o tamanho médio (\bar{h}) dos volumes de controle da malha é definido pela Eq. (5.1).

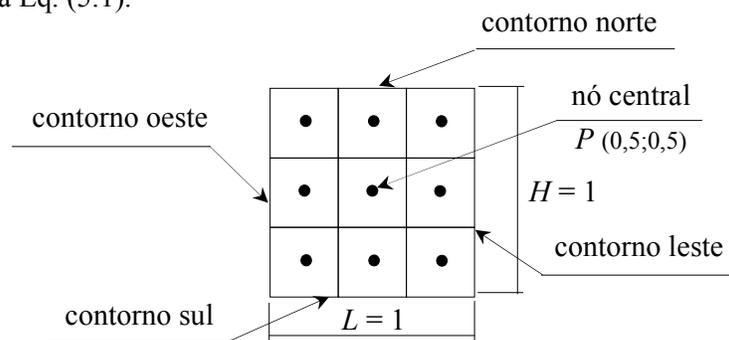
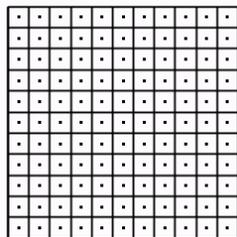
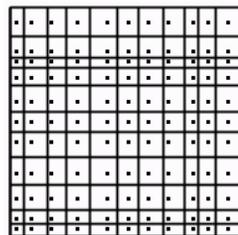


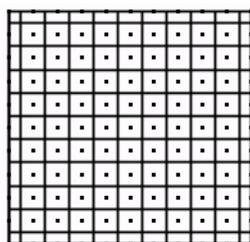
Figura 6.1 – Domínio bidimensional e discretização para volumes finitos.



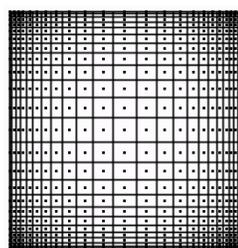
(a) uniforme com volume inteiro na fronteira.



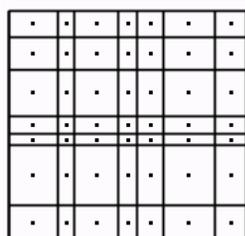
(b) não-uniforme aleatória.



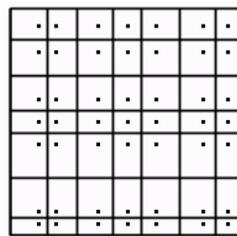
(c) uniforme com meio volume na fronteira



(d) não-uniforme em progressão geométrica.



(e) não-uniforme de nó centrado.



(f) não-uniforme de face centrada.

Figura 6.2 – Malhas bidimensionais cartesianas para volumes finitos.

As malhas das Figs. 6.2.(b,e,f) não possuem aplicação prática em geometrias cartesianas. Porém, acredita-se que o comportamento do erro numérico usando tais discretizações se assemelha ao obtido quando se utilizam discretizações aleatórias com triangulação de Delaunay, configuração típica em malhas não-estruturadas (Baliga e Patankar, 1980).

6.2 Aproximações Numéricas

As aproximações numéricas para a variável de interesse e sua derivada de primeira ordem, usadas nos modelos matemáticos 2D com o *MVF*, estão apresentadas na seção 4.2. A Tabela 4.1, aplicável também neste capítulo, apresenta os valores das ordens assintóticas destas aproximações, nos casos de malhas não-uniformes e uniformes.

6.3 Difusão Bidimensional – Problemas 10A e 10B

A Equação governante do problema da difusão bidimensional é dada pela Eq. (5.2). Admitindo as condições de contorno, dadas pela Eq. (5.3), a solução analítica da Eq. (5.2) é dada pela Eq. (5.4). Para um volume qualquer do domínio quadrado unitário representado na Figura 6.1, a aplicação do método dos volumes finitos ao problema representado pela Eq. (5.2) fornece

$$(\Lambda_e^i - \Lambda_w^i)\Delta y + (\Lambda_n^i - \Lambda_s^i)\Delta x = 0 \quad (6.1)$$

onde e, w, n, s são as faces do volume de controle, e Δx e Δy são os comprimentos das faces, representadas na Figura 6.3.a.

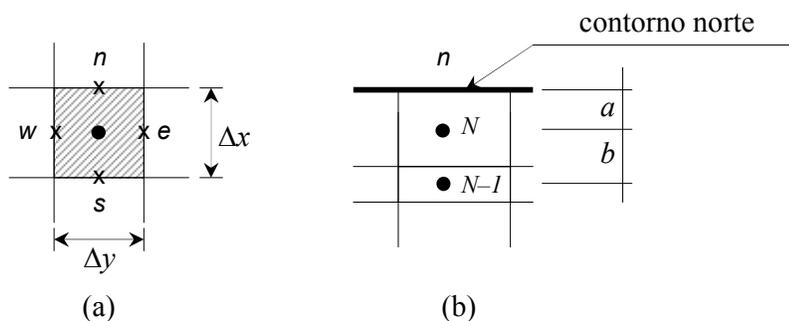


Figura 6.3 – Volume de controle e faces: (a) volume interno, (b) volume (N) de fronteira.

Para a obtenção da equação aproximada de Λ , aproximações numéricas devem ser introduzidas na Eq. (6.1). As derivadas Λ^i nas faces do volume são substituídas por aproximações numéricas do tipo λ_{CDS}^i , dada na Eq.(4.20), escritas para as faces e, w, n, s . Aplicando a equação discretizada para os volumes de controle e as condições de contorno

de Dirichlet (Patankar, 1980) nas faces dos volumes de fronteira, têm-se o sistema de equações algébricas que fornece a solução numérica do problema.

No caso de existir $\frac{1}{2}$ volume na fronteira, a aplicação da condição de contorno se resume a atribuir como equação do volume a própria condição de contorno. Caso contrário, isto é, volume inteiro no contorno, é feito o balanço de Λ considerando-se a condição de contorno na face do volume. Este balanço pode ser feito considerando configurações diferentes para a derivada de Λ na face dos volumes que estão sobre a fronteira.

Neste trabalho foram empregados dois esquemas de aproximação das derivadas nos contornos: (i) UDS e (ii) UDS-2. Estes esquemas fornecem aproximações de derivada primeira para, por exemplo, o contorno norte, representado na Figura 6.3.b, dadas por

$$(\lambda_{UDS}^i)_n = \frac{(\Lambda_n - \Lambda_N)}{a} \quad (6.2)$$

$$(\lambda_{UDS-2}^i)_n = \frac{[d(d+2)\Lambda_n - (d+1)^2\Lambda_N + \Lambda_{N-1}]}{d(d+1)a} \quad (6.3)$$

$$d = \frac{b}{a} \quad (6.4)$$

A ordem assintótica (p_L) das aproximações dadas pelas Eqs. (6.2) e (6.3) é (Marchi, 2001): 1 (um) para UDS e 2 (dois) para UDS-2, tanto para volumes de nó centrado (*VNC*) como para volumes de face centrada (*VFC*). Porém, as aproximações do tipo λ_{UDS}^i aplicadas em contornos onde se tem valores de λ prescritos, possuem ordem assintótica igual a dois por serem idênticas a esquemas CDS empregando volumes fictícios (Suero, 2006).

Seguindo a numeração dos problemas resolvidos neste trabalho, o problema que usa como condição de contorno norte a Eq. (6.2) e suas equivalentes nas demais faces, será referenciado por 10A, e o problema que usa como condição de contorno norte a Eq. (6.3) e suas equivalentes nas demais faces, será referenciado por 10B. Ambos usam a Eq.(6.1) para os volumes internos, com aproximações numéricas dadas pela Eq.(4.20), escritas para as faces e, w, n, s , nas suas respectivas direções coordenadas x e y .

6.3.1 Refino direcional

Em aplicações onde não se conhece a solução exata do problema, a ordem efetiva (p_E) não pode ser calculada. Neste caso, pode-se verificar a ordem assintótica (p_L) direcionalmente através da ordem aparente (p_U), procedendo com o refino direcional da malha (Marchi e Silva, 2005). De acordo com o capítulo anterior, para que a estimativa do erro seja confiável, os refinamentos indicados na Tabela 4.2 devem ser empregados. Nesta seção, para avaliar este procedimento, verifica-se direcionalmente a ordem assintótica (p_L) do problema 10A, através da ordem aparente (p_U). Pelas aproximações numéricas empregadas, a ordem assintótica *a priori* do problema 10A deverá ser dois.

6.3.1.1 Resultados para malha grossa *VFC* e *VNC* no problema 10A

O problema 10A foi resolvido para o domínio mostrado nas Figuras 6.2.e e 6.2.f, isto é, malha grossa não-uniforme de nó centrado (*VNC*) e de face centrada (*VFC*), calculando o valor da ordem aparente (p_U), dada pela Eq. (2.29), no ponto central P do domínio, que está representado na Figura 6.1.

A Figura 6.4 e as Tabelas D.1 e D.2 mostram os resultados obtidos, para a malha grossa não-uniforme *VNC* e malha fina obtida com refino *RU*, conforme recomendado na Tabela 4.2. Os tamanhos das malhas estão apresentados na Tabela D.1, onde a malha fina foi obtida com razão de refino (q) igual a três na direção x ou y . Com os resultados da Figura 6.4, pode-se verificar que $p_{Ux} \rightarrow p_L$ e $p_{Uy} \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$, direcionalmente.

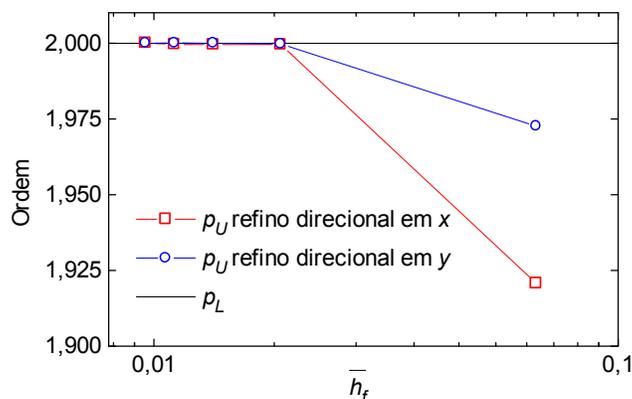


Figura 6.4 – Ordem aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme *VNC* e com refino direcional do tipo *RU*.

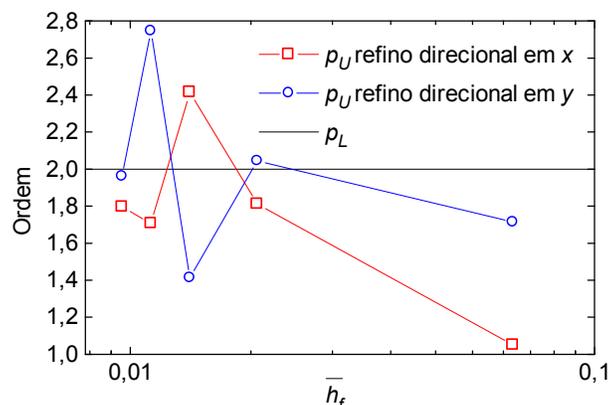


Figura 6.5 – Ordem aparente do problema 10A, no ponto P , para malha grossa não-uniforme VFC e com refino direcional do tipo RU .

A Figura 6.5 e as Tabelas D.3 e D.4 mostram os resultados obtidos, para a malha grossa não-uniforme VFC e malha fina obtida com refino RU . Pela análise *a priori*, apresentada na Tabela 4.2, usando este tipo de refino, não é possível verificar que $p_{Ux} \rightarrow p_L$ ou que $p_{Uy} \rightarrow p_L$. Os resultados obtidos na Figura 6.5 confirmam este comportamento.

Pela Tabela 4.2, malhas do tipo não-uniforme VFC devem usar refinamentos RSU , RC ou RCF para que $p_U \rightarrow p_L$ na medida que $h \rightarrow 0$. A Tabela D.5 apresenta os resultados obtidos, para a malha grossa não-uniforme VFC e malha fina obtida com refino direcional em y , do tipo RSU , confirmando a análise *a priori*, isto é, $p_U \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$.

6.3.2 Variável secundária local e global

Em muitas aplicações é comum a necessidade de se obter informações de fluxo ao longo da fronteira do domínio ou em regiões internas, como por exemplo, fluxo de calor através de uma parede ou fluxo de massa através de uma superfície permeável interna ao escoamento. O fluxo, quando calculado através de uma derivada, é uma variável secundária, pois, depende da solução primitiva do problema. Como visto na seção 2.1, a obtenção das variáveis secundárias é feita através do pós-processamento da solução numérica e pode envolver integração e/ou derivação.

No estudo do pós-processamento dos problemas 10A e 10B, dois parâmetros foram avaliados envolvendo derivada e integral. O primeiro é o cálculo da derivada de Λ no ponto médio do contorno norte da Figura 6.1, cuja solução analítica é dada por

$$\left. \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right|_{x,y} = 0,5 \frac{\cosh(\pi y) \pi \operatorname{sen}(\pi x)}{\operatorname{senh}(\pi)} \quad (6.5)$$

que, para as coordenadas (0,5;1,0) resulta

$$\left. \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right|_{0,5;1,0} = 0,5 \pi \operatorname{cotanh}(\pi) \quad (6.6)$$

O segundo é o cálculo da integral da derivada de Λ no contorno norte da Figura 6.1, cuja solução analítica é dada por

$$\int_0^1 \left[\left. \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right|_{y=1} \right] dx = \operatorname{cotanh}(\pi) \quad (6.7)$$

A derivada de Λ no contorno norte foi calculada seguindo dois esquemas de interpolação, (i) UDS e (ii) UDS-2, que usam as Eq. (6.2) e Eq. (6.3), e que tem, *a priori*, ordem assintótica (p_L) igual a 1 (um) e 2 (dois), respectivamente. A integral no contorno norte da derivada de Λ foi calculada usando a regra do trapézio aplicada ao volume, como na seção 4.7.1, que tem ordem assintótica (p_L) igual a 2 (dois). Combinando a ordem assintótica da variável primária com a secundária global, resulta ordem dois para a integral.

De acordo com Suero (2006), a ordem efetiva (p_U) pode não tender a ordem assintótica (p_L) em alguns casos de pós-processamento envolvendo derivação, possivelmente (Suero, 2006) em decorrência do esquema numérico aplicado no contorno. A seguir são apresentados os resultados obtidos.

6.3.2.1 Resultados pós-processados com malha uniforme nos problemas 10A e 10B

A Tabela 6.1 mostra os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) da derivada de Λ , no ponto médio do contorno norte, representada na Figura 6.1. A ordem efetiva foi calculada para os problemas 10A e 10B, usando malha grossa uniforme e malha fina obtida com refino uniforme RU , com razão de refino (q) igual a três. A derivada de Λ tem solução

analítica dada pela Eq. (6.6). A diferença entre os problemas 10A e 10B está na forma da aplicação da condição de contorno norte, que usa aproximação UDS no problema 10A e UDS-2 no problema 10B.

Tabela 6.1 – Ordem efetiva para a derivada local no ponto médio do contorno norte, para os problemas 10A e 10B, para malha grossa uniforme.

$N_{xg} \times N_{yg}$	$N_{xf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	problema 10A (contorno com UDS)		problema 10B (contorno com UDS-2)	
			derivada UDS	derivada UDS-2	derivada UDS	derivada UDS-2
41x41	123x123	0,00813008	1,9988608988	0,9507710219	0,9849724913	2,0541072380
51x51	153x153	0,00653594	1,9992633034	0,9608792854	0,9877796416	2,0444695286
61x61	183x183	0,00546448	1,9994845588	0,9675463182	0,9897042358	2,0377374482
71x71	213x213	0,00469483	1,9996189154	0,9722729801	0,9911055867	2,0327726097
81x81	243x243	0,00411522	1,9997064569	0,9757984285	0,9921714034	2,0289617664

Os resultados da Tabela 6.1 mostram que, quando a aproximação numérica usada na discretização das equações dos volumes de contorno coincide com a aproximação numérica usada no pós-processamento da solução, a ordem efetiva tende ao valor dois.

Pela Tabela 6.1 pode-se também observar que quando são diferentes as aproximações numéricas usadas na aplicação das condições de contorno e no pós-processamento da solução, a ordem efetiva tende à unidade. Não se conhece a razão pela qual no problema 10A o valor da ordem efetiva tende a um valor acima da ordem assintótica. Os valores da ordem efetiva de variáveis pós-processadas, em comparação com variáveis primárias, têm uma menor taxa de variação com a redução de h .

Note que, de acordo com a análise *a priori*, o valor da ordem assintótica da aproximação UDS é unitária, o que não se verifica na prática. Especula-se que isto se deva ao fato da análise estar sendo realizada sobre uma face do domínio e não sobre um nó de volume. Os problemas 10A e 10B são idênticos quando se usam $\frac{1}{2}$ s volumes na fronteira, e neste caso, o valor de $p_E \rightarrow p_L = 1$, quando $h \rightarrow 0$, conforme os resultados da Tabela 6.2.

O valor da ordem efetiva no cálculo numérico da integral da Eq. (6.5) ao longo da face norte do domínio, que tem solução analítica dada pela Eq. (6.7), está apresentado na Tabela 6.3 para malha uniforme, com volumes inteiros na fronteira. O comportamento do valor da ordem efetiva é semelhante ao apresentado na Tabela 6.1.

Tabela 6.2 – Ordem efetiva para a derivada local no ponto médio do contorno norte, para malha grossa uniforme com $\frac{1}{2}$ volumes no contorno.

$N_{xg} \times N_{yg}$	$N_{yf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	$\frac{1}{2}$ volume no contorno	
			derivada UDS	derivada UDS-2
41x41	123x123	0,00813008	0,9913633112	1,9707850230
51x51	153x153	0,00653594	0,9931652756	1,9767193117
61x61	183x183	0,00546448	0,9943462337	1,9806510165
71x71	213x213	0,00469483	0,9951796878	1,9834471767
81x81	243x243	0,00411522	0,9957992166	1,9855375778

Tabela 6.3 – Ordem efetiva para a integral no contorno norte, para os problemas 10A e 10B, para malha grossa uniforme.

$N_{xg} \times N_{yg}$	$N_{yf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	problema 10A (UDS)		problema 10B (UDS-2)	
			integral com derivada UDS	integral com derivada UDS-2	integral com derivada UDS	integral com derivada UDS-2
41x41	123x123	0,00813008	1,9986928552	0,9574100840	0,9747069022	2,4697751363
51x51	153x153	0,00653594	1,9991546072	0,9660830259	0,9798210802	2,4652735674
61x61	183x183	0,00546448	1,9994084438	0,9718235253	0,9832274023	2,4578986362
71x71	213x213	0,00469483	1,9995625322	0,9759030853	0,9856563395	2,4492613598
81x81	243x243	0,00411522	1,9996628983	0,9789511920	0,9874745294	2,4401242896

6.3.2.2 Resultados pós-processados com malha não-uniforme nos problemas 10A e 10B

No caso do pós-processamento de resultados obtidos com malha não-uniforme *VNC* ou *VFC*, o uso de esquemas de interpolação envolvendo mais de um ponto à jusante ou à montante, como no esquema UDS-2, chama a atenção por um detalhe. Somente no refino uniforme embaralhado, garante-se que as distâncias envolvidas no cálculo da variável pós-processada sejam divididas igualmente em q partes. Caso isto não ocorra, haverá degeneração da ordem da aproximação do esquema UDS-2.

A Tabela 6.4 mostra os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) da derivada de Λ , no ponto médio do contorno norte, calculada para os problemas 10A e 10B, usando malha grossa não-uniforme *VNC* e malha fina obtida com refino uniforme *RU*, com razão de refino (q) igual a três.

Tabela 6.4 – Ordem efetiva para a derivada local no ponto médio do contorno norte, para os problemas 10A e 10B, para malha grossa não-uniforme.

$N_{xg} \times N_{yg}$	$N_{xf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	problema 10A (UDS)		problema 10B (UDS-2)	
			derivada UDS	derivada UDS-2	derivada UDS	derivada UDS-2
41x41	123x123	0,00813008	1,9985880906	0,9519713720	0,9759284555	0,1874877871
51x51	153x153	0,00653594	1,9990122045	0,9662255930	0,1091953350	1,0894204889
61x61	183x183	0,00546448	1,9993850139	0,9692888218	0,0424746846	0,2209084324
71x71	213x213	0,00469483	1,9996309854	0,9886882956	0,0437172386	0,7081363428
81x81	243x243	0,00411522	1,9997608869	0,9977107885	0,0589438362	0,7849487376

6.4 Advecção Difusão Bidimensional – Problema 11

Como exposto na seção 2.1, a concepção de padrões de análise de erro só é segura se verificada em modelos matemáticos com solução analítica, pois, somente neste caso é possível mensurar exatamente qual será o erro numérico. Com esta premissa, propõe-se nesta seção um problema teste bidimensional, cujo modelo matemático tem condições de contorno e termos fonte que se ajustam de forma a possibilitar a obtenção da solução analítica, método conhecido como método das soluções fabricadas (Khodier, 2001; Roy *et al.*, 2004). O problema proposto é a advecção/difusão de um escalar com termo fonte dada por

$$p \frac{\partial \Lambda}{\partial x} + k \frac{\partial \Lambda}{\partial y} = \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} + S \quad (6.8)$$

onde p e k são os números de Peclet nas direções x e y , respectivamente. Admitindo o termo fonte S como

$$S = \frac{\pi \left[(\sin(\pi x) \pi - p \cos(\pi x)) (e^{px} - 1) - 2p \cos(\pi x) \right] (e^{ky} - 1)}{(e^p - 1)(e^k - 1)} \quad (6.9)$$

e admitindo para o domínio quadrado unitário, representado na Figura 6.1, as condições de contorno dadas por

$$\begin{aligned}
 \Lambda(0, y) &= 0 && \text{(contorno oeste)} \\
 \Lambda(x, 0) &= 0 && \text{(contorno sul)} \\
 \Lambda(L, y) &= 0 && \text{(contorno leste)} \\
 \Lambda(x, H) &= \text{sen}(\pi x) \frac{(e^{px} - 1)}{(e^p - 1)} && \text{(contorno norte)}
 \end{aligned} \tag{6.10}$$

a solução analítica da Eq. (6.8) é dada por

$$\Lambda(x, y) = \text{sen}(\pi x) \frac{(e^{px} - 1)}{(e^p - 1)} \frac{(e^{ky} - 1)}{(e^k - 1)} \tag{6.11}$$

A superfície gerada pela Eq. (6.11) sobre um domínio quadrado unitário, está representada na Figura 6.6 para os valores $p = 2$ e $k = 2$.

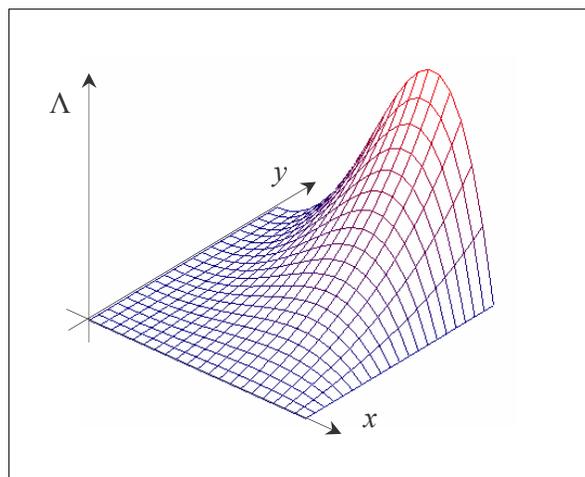


Figura 6.6 – Superfície gerada pela Eq (6.11).

Para o volume representado na Figura 6.3.a, a aplicação do método dos volumes finitos ao problema representado pela Eq. (6.8) fornece

$$p(\Lambda_e - \Lambda_w)\Delta y + k(\Lambda_n - \Lambda_s)\Delta x = (\Lambda_e^i - \Lambda_w^i)\Delta y + (\Lambda_n^i - \Lambda_s^i)\Delta x + \int_{\text{volume}} (S) dx dy \tag{6.12}$$

onde e, w, n, s são as faces do volume de controle, e Δx e Δy são os comprimentos das faces, representadas na Figura 6.3.a.

Para a obtenção da equação aproximada de Λ , aproximações numéricas devem ser introduzidas na Eq. (6.12). Os termos de Λ nas faces do volume são substituídos por aproximações do tipo λ_{CDS} , dada na Eq. (4.9), escritas para as faces e,w,n,s . As derivadas Λ^i nas faces do volume são substituídos por aproximações numéricas do tipo λ^i_{CDS} , dada na Eq. (4.20), escritas também para as faces e,w,n,s . A integral de S é aproximada pela regra do retângulo nas direções x e y , isto é, faz-se o produto $S(x).\Delta x.\Delta y$.

Aplicando a equação discretizada para os volumes de controle e as condições de contorno de Dirichlet (Patankar, 1980) nas faces dos volumes de fronteira, com o esquema UDS, tem-se o sistema de equações algébricas que fornece a solução numérica do problema. Seguindo a numeração dos problemas resolvidos neste trabalho, este problema será referenciado por 11.

6.4.1 Variáveis primária, secundária local e secundária global

Na dinâmica dos fluidos computacional, as aplicações normalmente requerem a análise de um conjunto de variáveis primárias e secundárias, locais e globais, como, por exemplo, em Morais (2004) e Suero (2006). O que se observa em alguns casos é que a ordem do erro de discretização tem comportamento distinto para um mesmo conjunto de soluções, quando se analisa variáveis primárias e secundárias.

No problema 11, foram avaliadas três variáveis: i) primária local: Λ no centro do domínio, ii) secundária local: a derivada de Λ no ponto médio do contorno norte e; iii) secundária global: a integral da derivada de Λ no contorno norte. O cálculo da derivada de Λ no ponto médio do contorno norte da Figura 6.1, tem solução analítica dada por

$$\left. \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right|_{x,y} = \text{sen}(\pi x) \frac{(e^{px} - 1)}{(e^p - 1)} \frac{k e^{ky}}{(e^k - 1)} \quad (6.13)$$

que, para as coordenadas (0,5;1,0) resulta

$$\left. \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right|_{0,5,1,0} = \frac{(e^{p/2} - 1)}{(e^p - 1)} \frac{k e^k}{(e^k - 1)} \quad (6.14)$$

A integral analítica da derivada de Λ no contorno norte, é dada por

$$\int_0^1 \left[\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \Big|_{y=1} \right] dx = \frac{k e^k [2p^2 + \pi^2 (1 - e^p)]}{\pi (p^2 + \pi^2) (e^p + e^k - e^{(p+k)} - 1)} \quad (6.15)$$

A derivada de Λ no contorno norte foi calculada com o esquema de interpolação UDS, que usa a Eq. (6.2). A integral no contorno norte da derivada de Λ foi calculada usando a regra do trapézio aplicada ao volume.

A variável primária, Λ , é obtida da solução da Eq. (6.8) sobre o domínio, resultado do sistema linear de equações, construído com a Eq. (6.12), que é discretizada com esquemas de interpolação CDS. Portanto, tem ordem assintótica (p_L) igual a dois.

A variável secundária, derivada de Λ , é calculada com pós-processamento da solução primitiva, empregando o esquema UDS, que tem ordem assintótica unitária.

A variável secundária, integral da derivada de Λ , é calculada pela regra do trapézio aplicada ao volume, que tem ordem dois. Combinando a ordem assintótica da variável secundária local com a secundária global, resulta ordem um para a integral. A Tabela 6.5 apresenta as variáveis de interesse do problema 11 e as respectivas ordens assintóticas.

Tabela 6.5 – Variáveis de interesse no problema 11.

variável	solução analítica	solução numérica	ordem assintótica (p_L)	classificação		
				primária	solução primitiva	local
lambda	Λ	λ	dois	primária	solução primitiva	local
derivada	Λ^i	λ^i	um	secundária	derivada	local
integral da derivada	$(\Lambda^i)_m$	$(\lambda^i)_m$	um	secundária	integral	global

6.4.1.1 Resultados e estimativas de erro numérico com malha uniforme para o problema 11

Como em seções anteriores, a estimativa do erro numérico do problema 11 foi calculada para conjuntos de três malhas. As soluções analíticas das variáveis de interesse estão apresentadas na Tabela 6.6 e as Tabelas 6.7 a 6.10 mostram os resultados obtidos

para a malha uniforme, com $\frac{1}{2}$ s volumes nos contornos, com refinamento do tipo *RU*. A ordem assintótica das variáveis de interesse é dada pela Tabela 6.5.

Tabela 6.6 – Soluções analíticas das variáveis de interesse no problema 11, para $p = 4$ e $k = 2$.

variável	solução
Λ	0,0320586032800849
Λ^i	0,2757205647717832
$(\Lambda^i)_m$	0,2639019901846629

Na Tabela 6.7 são apresentados os resultados de λ , λ^i e $(\lambda^i)_m$ do problema 11, com $p = 4$ e $k = 2$, usando malha grossa uniforme com refinamento *RU*, com razão de refinamento de malha (q) igual a três, em 5 conjuntos de malhas. Na Tabela 6.8 a 6.10, são calculados os parâmetros para a estimativa do erro, semelhante aos capítulos anteriores.

Tabela 6.7 – Resultados do problema 11 para malha grossa uniforme.

análise	$N_{xsg} \times N_{ysg}$ $N_{xg} \times N_{yg}$ $N_{xf} \times N_{yf}$	Variável de interesse		
		λ	λ^i	$(\lambda^i)_m$
1	11x11	0,0319803167334613	0,2510665614127083	0,2311185767187257
	33x33	0,0320498338869087	0,2669300816853274	0,2541743969164935
	99x99	0,0320576282263162	0,2727049539965056	0,2608557125882839
2	15x15	0,0320184648894589	0,2576496049348341	0,2414038734570581
	45x45	0,0320541273779006	0,2693666415221246	0,2571236275792447
	135x135	0,0320581057777965	0,2735570390203351	0,2617485140972566
3	19x19	0,0320342804630192	0,2614357971660259	0,2468864838413990
	57x57	0,0320558952153240	0,2707444960419768	0,2587084293001021
	171x171	0,0320583023108878	0,2740336386734196	0,2622369794295679
4	23x23	0,0320423080641505	0,2639025736248160	0,2502625836605055
	69x69	0,0320567903010341	0,2716309212991827	0,2596952198270579
	207x207	0,0320584018075175	0,2743381522453940	0,2625449393917712
5	27x27	0,0320469311746561	0,2656396829396903	0,2525395406989762
	81x81	0,0320573051704199	0,2722491532447243	0,2603679682722289
	243x243	0,0320584590318037	0,2745495336850259	0,2627568072470279

Tabela 6.8 – Resultados do problema 11 para Λ com malha grossa uniforme.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ em P (0,5;0,5)						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda-\lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ Fs=3
1		1,99936801	1,99176343	0,0000009750	0,99921917	1,00944891	3,02834673
2		1,99967093	1,99635459	0,0000004975	0,99959336	1,00410832	3,01232498
3	2	1,99977885	1,99793432	0,0000003009	0,99972671	1,00228268	3,00684806
4		1,99986241	1,99866088	0,0000002014	0,99982996	1,00148627	3,00445881
5		1,99991244	1,99905667	0,0000001442	0,99989179	1,00105832	3,00317496

Com os resultados da Tabela 6.8, pode-se verificar que para o refino de malha uniforme RU , quando $h \rightarrow 0$, temos: i) $p_E \rightarrow p_L$, $p_U \rightarrow p_L$ e $E \rightarrow 0$, o que caracteriza diminuição do erro com a redução do tamanho dos elementos da malha, com ordem assintótica (p_L) conhecida *a priori*, dada pela Tabela 6.5; ii) $U_{Ri}(p_L)/E < 1 < U_{Ri}(p_U)/E$, estando p_U em um intervalo convergente onde $p_U \rightarrow p_L$ (Marchi e Silva, 2002); e iii) $GCI(p)/|E| \rightarrow Fs$, garantindo uma estimativa confiável.

Nas Tabelas 6.9 e 6.10, que apresenta a estimativa do erro para as variáveis Λ^i e $(\Lambda^i)_m$, a taxa de convergência de p_U e p_E para p_L é reduzida em função do tamanho da malha, e, possivelmente, por se tratarem também de variáveis pós-processadas. Porém, se está em um intervalo convergente de p_U , pois, $U_{Ri}(p_L)/E < 1 < U_{Ri}(p_U)/E$ para Λ^i e $U_{Ri}(p_L)/E > 1 > U_{Ri}(p_U)/E$ para $(\Lambda^i)_m$.

Tabela 6.9 – Resultados do problema 11 para Λ^i com malha grossa uniforme.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ^i no ponto médio do contorno norte						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda-\lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p=\min(p_L,p_U)$ Fs=3
1		0,97383516	0,91980220	0,00301561	0,95749629	1,09616648	3,28849944
2		0,98063100	0,93595194	0,00216352	0,96841867	1,07831906	3,23495719
3	1	0,98463505	0,94694225	0,00168692	0,97489233	1,06538083	3,19614250
4		0,98727060	0,95481251	0,00138241	0,97916898	1,05587530	3,16762592
5		0,98913572	0,96069287	0,00117103	0,98220297	1,04868572	3,14605717

Tabela 6.10 – Resultados do problema 11 para $(\Lambda^i)_m$ com malha grossa uniforme.

análise	Estimativa do erro numérico para $(\Lambda^i)_m$ no contorno norte						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda \cdot \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $Fs=3$
1	1	1,05682973	1,12742532	0,00304627	1,09663605	0,89492437	3,28990815
2		1,04372785	1,11364702	0,00215347	1,07381887	0,89524104	3,22145661
3		1,03547720	1,10054342	0,00166501	1,05961781	0,90166076	3,17885345
4		1,02982773	1,08951540	0,00135705	1,04996790	0,90905422	3,14990372
5		1,02572326	1,08041227	0,00114518	1,04299448	0,91607879	3,12898345

6.4.1.2 Resultados e estimativas de erro numérico com malha não-uniforme para o problema 11

As Tabelas 6.11 a 6.14 mostram os resultados obtidos para o problema 11, com $p = 4$ e $k = 2$, usando malha não-uniforme, do tipo *VNC*, com $\frac{1}{2}$ s volumes nos contornos, com refino do tipo *RU*, com razão de refino de malha (q) igual a três.

Tabela 6.11 – Resultados do problema 11 para malha grossa não-uniforme.

análise	$N_{xsg} \times N_{ysg}$ $N_{xg} \times N_{yg}$ $N_{xf} \times N_{yf}$	Variável de interesse		
		λ	λ^i	$(\lambda^i)_m$
		1	11x11 33x33 99x99	0,0319627380214463 0,0320478467407705 0,0320574068927609
2	15x15 45x45 135x135	0,0320357640327390 0,0320560452248768 0,0320583189057282	0,2579067730166423 0,2695455428218219 0,2736235122839737	0,2412418440889127 0,2572361484545418 0,2618058285885490
3	19x19 57x57 171x171	0,0320294639638900 0,0320553597865426 0,0320582427142718	0,2612726702511247 0,2706278496173983 0,2740013952887624	0,2469583865909632 0,2588890252864147 0,2623013847115270
4	23x23 69x69 207x207	0,0320441291196094 0,0320569919059515 0,0320584241641374	0,2637535716309284 0,2715392984166531 0,2743006001725299	0,2497426889990313 0,2595371936212161 0,2625001941494073
5	27x27 81x81 243x243	0,0320474277459677 0,0320573608430278 0,0320584652073984	0,2656829851715469 0,2722774068491637 0,2745571263788335	0,2524203760314002 0,2603736500366875 0,2627617377056594

A ordem assintótica das variáveis de interesse é dada pela Tabela 6.5 e as soluções analíticas das variáveis de interesse estão apresentadas na Tabela 6.6. Na Tabela 6.11 são apresentados os resultados de λ , λ^i e $(\lambda^i)_m$, em 5 conjuntos de malhas. Os resultados das Tabelas 6.12 a 6.14, obtidos com malha grossa não-uniforme VNC , são semelhantes aos resultados obtidos para malha grossa uniforme, apresentados na seção anterior. Novamente, pode-se verificar que para o refino de malha uniforme RU , quando $h \rightarrow 0$, temos: i) $p_E \rightarrow p_L$, $p_U \rightarrow p_L$ e $E \rightarrow 0$, o que caracteriza diminuição do erro com a redução do tamanho dos elementos da malha, com ordem assintótica (p_L) conhecida *a priori*, dada pela Tabela 6.5.

Tabela 6.12 – Resultados do problema 11 para Λ com malha grossa não-uniforme.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ em P (0,5;0,5)						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda - \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $F_s=3$
1		1,99907414	1,99007956	0,0000011963	0,99885628	1,01118718	3,03356156
2		1,99953255	1,99187096	0,0000002843	0,99942241	1,00951989	3,02855967
3	2	1,99955143	1,99822570	0,0000003605	0,99944574	1,00164011	3,00492034
4		1,99962194	1,99805339	0,0000001791	0,99953284	1,00194082	3,00582248
5		1,99984094	1,99943365	0,0000001380	0,99980343	1,00050354	3,00151062

Para as variáveis Λ^i e $(\Lambda^i)_m$, pós-processadas, apresentam pequena taxa de convergência do valor de p_U para p_L . Porém, como na seção anterior, se está em um intervalo convergente de p_U , pois, $U_{Ri}(p_L)/E < 1 < U_{Ri}(p_U)/E$ para Λ^i e $U_{Ri}(p_L)/E > 1 > U_{Ri}(p_U)/E$ para $(\Lambda^i)_m$.

Tabela 6.13 – Resultados do problema 11 para Λ^i com malha grossa não-uniforme.

análise	Estimativa do erro numérico para Λ^i no ponto médio do contorno norte						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda - \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $F_s=3$
1		0,97296903	0,87870978	0,00314214	0,95611009	1,17621790	3,52865370
2		0,98303984	0,95460662	0,00209705	0,97230982	1,04884392	3,14653178
3	1	0,98849231	0,92841289	0,00171916	0,98115564	1,10671215	3,32013647
4		0,98304217	0,94354482	0,00141996	0,97231359	1,06871978	3,20615936
5		0,98761802	0,96683031	0,00116343	0,97973366	1,03530575	3,10591725

Tabela 6.14 – Resultados do problema 11 para $(\Lambda^i)_m$ com malha grossa não-uniforme.

análise	Estimativa do erro numérico para $(\Lambda^i)_m$ no contorno norte						
	p_L	p_E	p_U	$E = \Lambda - \lambda$	$U_{Ri}(p_L)/E$	$U_{Ri}(p_U)/E$	$GCI(p)/ E $ $p = \min(p_L, p_U)$ $Fs=3$
1		1,05349610	1,09872017	0,00316906	1,09079929	0,93084918	3,27239788
2		1,05304518	1,14033811	0,00209616	1,09001141	0,87197677	3,27003424
3	1	1,03917056	1,13935172	0,00160060	1,06595893	0,85403047	3,19787681
4		1,03386544	1,08829934	0,00140179	1,05685864	0,91677401	3,17057594
5		1,02818605	1,09510040	0,00114025	1,04717495	0,89871046	3,14152485

6.5 Outros Resultados

Neste trabalho, como nos capítulos anteriores, foram implementados outros algoritmos empregando o *MVF*. Soluções numéricas foram obtidas para os problemas 10 e 11, difusão e advecção/difusão, com diferentes aproximações e configurações de malha grossa e fina conforme a Tabela 6.15.

Tabela 6.15 – Algoritmos bidimensionais implementados no Método dos Volumes Finitos.

modelo matemático	variáveis de interesse	discretização			
		fronteira	volumes internos	malha grossa	refinos
difusão 2D advecção/difusão 2D	primária local secundária local secundária global	½ volume volume inteiro	<i>VFC</i> <i>VNC</i>	uniforme não-uniforme com PG	<i>RU</i> <i>RSU</i> <i>RC</i> <i>RCF</i> <i>RA</i>

Para cada modelo matemático da Tabela 6.15 as diversas combinações de discretização foram implementadas. Todas as simulações foram analisadas, sendo que as soluções numéricas apresentadas neste capítulo fazem parte dos resultados mais expressivos.

6.6 Resumo do Capítulo 6

Na seção 6.1 foram apresentadas diferentes discretizações para o *MVF*, que foram escolhidas pelo fato de representarem as principais configurações de malhas cartesianas bidimensionais e tridimensionais para volumes finitos.

As análises *a posteriori* apresentadas nas seções 6.3 e 6.4 confirmam as análises *a priori*, resumidas nas Tabelas 4.1 e 4.2 do capítulo 4, para o caso unidimensional. Na seção 6.3, o refino direcional foi empregado e verificou-se que $p_U \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$ direcionalmente, conforme afirma a literatura (Marchi e Silva, 2005).

No pós-processamento de variáveis, ficou mostrado que a ordem obtida *a posteriori* de aproximações UDS em discretizações de volumes inteiros no contorno é dois, diferente da ordem obtida *a priori* para esta aproximação, que é 1 (um). No caso de discretizações com $\frac{1}{2}$ s volumes no contorno, isto não ocorre, e a ordem assintótica da aproximação UDS empregada no pós-processamento apresenta a tendência $p_E \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$. Especula-se que isto se deva ao fato da análise estar sendo realizada sobre uma face do domínio e não sobre um nó de volume.

Na seção 6.4 foi apresentado o problema da advecção/difusão com termo fonte, Eq. (6.8), com termo fonte dado pela Eq. (6.9). A Eq. (6.8) representa um “problema teste” proposto neste trabalho, em que se aplicou o método das soluções fabricadas. A solução analítica deste problema é dada pela Eq. (6.11).

O próximo capítulo apresenta a conclusão deste trabalho.

7. Conclusão

No método das diferenças finitas (*MDF*) e no método dos volumes finitos (*MVF*), a estimativa do erro numérico é feita baseada em soluções numéricas obtidas em duas ou mais malhas de tamanhos diferentes. Nestes casos, um parâmetro que afeta a estimativa do erro é a ordem da solução numérica. As aproximações empregadas na obtenção das soluções numéricas possuem erros de truncamento, e, observando as suas expressões, pode-se conhecer *a priori* sua ordem assintótica (p_L). Com as soluções numéricas, pode-se calcular *a posteriori* a ordem efetiva (p_E), obtida caso a solução analítica do problema seja conhecida, ou a ordem aparente (p_U), quando não se conhece a solução analítica do problema, condição da maioria dos casos práticos.

Para que a estimativa seja confiável, é necessário concordância entre a análise *a priori* e a análise *a posteriori*, isto é, $p_E \rightarrow p_L$ ou $p_U \rightarrow p_L$ quando o tamanho (h) dos elementos da malha tender a zero. O que se observa é que, para malhas uniformes ou não-uniformes, dependendo da combinação entre configuração da malha grossa e configuração da malha fina, pode ou não haver concordância entre a análise *a priori* e a análise *a posteriori*, que, no segundo caso, compromete a confiabilidade da estimativa do erro numérico.

Para o estudo do comportamento da ordem do erro de discretização sobre as estimativas de erro numérico, foram resolvidos numericamente 6 modelos matemáticos, em 11 problemas base, com variação de um ou mais casos em cada problema, todos com solução analítica conhecida. Foram empregados diversos tipos de malhas, uniformes e não-uniformes, tanto para a obtenção das soluções pelo *MDF* como pelo *MVF*. Do estudo realizado aqui, sempre buscando verificar as tendências $p_E \rightarrow p_L$ ou $p_U \rightarrow p_L$, quando $h \rightarrow 0$, pode-se destacar as seguintes contribuições principais:

- A literatura recomenda a Eq. (3.41) (Roache, 1994; Celik, 2004) para a definição da razão de refino de malhas não-uniformes. Neste trabalho, demonstra-se *a priori* e *a posteriori* que esta equação só é correta para o caso do refino de malha ser uniforme, isto é, se a malha fina for obtida dividindo-se os elementos da malha grossa em partes iguais. E ainda, com os resultados obtidos neste trabalho, mostrou-se que o uso do refino de malha aleatório, ou seja, aquele em que não há nenhuma relação entre malha grossa e malha fina, apresenta estimativas de erro não confiáveis;
- A literatura recomenda que no uso de malhas em progressão geométrica, a razão da PG da malha fina em relação a razão da PG da malha grossa atenda a Eq. (3.30) (Ferziger e Peric, 2001). Neste trabalho, demonstra-se *a priori* e *a posteriori* que, só se observa a tendência $p_E \rightarrow p_L$ caso a razão da PG na malha grossa e na malha fina também apresentem a tendência $r \rightarrow 1$, que é o que ocorre quando se emprega a eq. (3.30).
- Existe dúvida na literatura (Ferziger e Peric, 2001; Santos *et al.*, 1996; Strauss *et al.* 1999) sobre qual é o valor de p_L a ser adotado, 1 ou 2, para realização de estimativas de erro confiáveis, em problemas que usam a aproximação λ_{CDS}^{ii} em malhas uniforme e não-uniformes. Pelos resultados apresentados neste trabalho fica mostrado que o valor 2 deve ser adotado para p_L caso a malha grossa, seja ela uniforme ou não-uniforme, venha a ser refinada de modo uniforme;
- Pela literatura (Suero, 2006), para variáveis globais obtidas com pós-processamento, para uma estimativa de erro confiável, o erro de discretização *a posteriori* deve ser avaliado em dimensões de espaço fixas. Com os resultados obtidos neste trabalho, confirma-se esta restrição;
- No *MVF*, as discretizações em malhas não-uniformes podem ser de volumes de nós centrados (*VNC*) ou volumes de faces centradas (*VFC*). Neste trabalho realizou-se um estudo com diferentes tipos de refino para estas malhas, com a proposição do refino semi-uniforme (*RSU*). Do estudo realizado *a priori* e *a posteriori*, só se verifica a tendência $p_E \rightarrow p_L$ nos refinamentos recomendados na

Tabela (4.2), em que o refino recomendado *RSU* se destaca por ser o único aplicado a qualquer tipo de malha grossa.

- A literatura afirma que existe diferença entre a análise *a priori* e análise *a posteriori* da ordem do erro de discretização do esquema UDS, para variáveis pós-processadas junto aos contornos (Suero, 2006). Neste trabalho observa-se que esta diferença está relacionada com a posição em se avalia a variável. No caso de se empregar uma discretização de $\frac{1}{2}$ volume no contorno, o esquema UDS aplicado ao contorno apresenta, *a priori* e *a posteriori*, ordem unitária. Caso se empregue uma discretização de volume inteiro no contorno, o esquema UDS aplicado ao contorno apresenta, *a priori* ordem unitária, e *a posteriori* ordem dois, como no esquema CDS. Uma razão possível para isto é porque o esquema UDS foi aplicado sobre uma face do domínio e não sobre um nó.
- Este trabalho mostra que, no uso de aproximações com esquema UDS-2 em malhas não-uniformes, para se ter ordem assintótica igual a dois, deve-se garantir que as distâncias envolvidas no cálculo da variável de interesse sejam divididas igualmente em q partes. Isto pode ser feito através de um refino uniforme e posterior permuta de elementos da malha, conforme foi chamado de malha fina embaralhada.
- Pode-se observar pelos resultados apresentado aqui que soluções numéricas que contém oscilações, independentemente dos tipos de malhas empregadas, apresentam dificuldades para a determinação *a posteriori* da ordem do erro de discretização;
- No uso de refinamentos direcionais, a literatura recomenda a verificação da tendência $p_U \rightarrow p_L$, uma vez que, no caso de refino direcional, $p_E \rightarrow 0$ (Marchi e Silva, 2005). Com resultados apresentados neste trabalho sobre o refino direcional de malha, pode-se confirmar esta recomendação;
- Pelos resultados aqui apresentados pode-se afirmar que, para um mesmo problema e mesmo conjunto de malhas, as tendências da ordem do erro de

discretização observadas *a posteriori* são distintas quando se avaliam variáveis locais, globais, primárias ou secundárias, podendo, por exemplo, haver taxa de redução do erro de discretização diferente de uma variável para outra.

- Neste trabalho é apresentado o problema teste advecção/difusão bidimensional com termo fonte, que poderá ser usado como referência em estudos futuros de dinâmica dos fluidos computacional (*CFD*).

São recomendados para trabalhos futuros estudos da estimativa de erro numérico, em problemas bidimensionais e tridimensionais, empregando:

- malhas não-estruturadas, como por exemplo, malhas triangulares, tetraédricas e de Voronoi, que usam funções de interpolação unidimensionais, e bidimensionais ou tridimensionais;
- modelos matemáticos transientes, não-lineares, de funções periódicas, que envolvam sistemas de equações diferenciais, de solução segregada e acoplada, em conjunto com métodos *multigrid*;
- modelos matemáticos complexos, como por exemplo, problemas de escoamento incompressível e compressível, com termos fonte linear e não-linear, com e sem modelos de turbulência;

Com isso, pode-se observar facilmente que existem muitos desenvolvimentos que ainda devem ser realizados acerca do estudo dos erros numéricos, e este texto contribui para auxiliar o analista numérico a compreender melhor este tema tão importante em *CFD*.

8. REFERÊNCIAS

- ABNT. **Guia Para Expressão da Incerteza de Medição**. Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Normas Técnicas, 1997.
- AIAA. **Editorial policy statement on numerical accuracy and experimental uncertainty**. AIAA Journal, v. 32, n. 1, p. 3, 1994.
- AIAA. **Assessment of Wind Tunnel Data Uncertainty**. AIAA S-071-1995, Washington, USA, 1995.
- AIAA. **Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations**. AIAA G-077-1998. Reston, USA, 1998.
- ASME. Journal of heat transfer editorial policy statement on numerical accuracy. **ASME Journal of Heat Transfer**, v. 116, pp. 797-798, 1994.
- BALIGA, B.R.; PATANKAR, S.V. A new finite element formulation for convection diffusion problems. **Numerical Heat Transfer**, v. 3, pp. 393-409, 1980.
- BLOTTNER, F. G. Accurate Navier-Stokes results for the hypersonic flow over a spherical nose tip. **Journal of Spacecraft and Rockets**, v. 27, n. 2, pp. 113-122, 1990.
- BUTCHER, J. C., JACKIEWICZ, Z. A new approach to error estimation for general linear methods. **Numerische Mathematik**, v. 95, pp.487-502, 2003.
- CELIK, I. Numerical uncertainty in fluid flow calculations: needs for future research. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 115, pp. 194-195, 1993.
- CELIK, I.; CHEN, C. J.; ROACHE, P. J.; SCHEUERER, G. Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 158, 1993.
- CELIK, I.; ZHANG, W. M. Calculation of numerical uncertainty using Richardson extrapolation: application to some simple turbulent flow calculations. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 117, pp. 439-445, 1995.
- CELIK, I.; KARATEKIN, O. Numerical Experiments on application of Richardson extrapolation with nonuniform grids. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 119, pp. 584-590, 1997.
- CELIK, I. Procedure for estimation and reporting of discretization error in CFD applications. **ASME Journal of Fluids Engineering**, 2003.
- COLEMAN, H. W.; STERN, F. Uncertainties and CFD code validation, **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 119, pp. 795-803, 1997.

- DOUGLASS, R. W.; RAMSHAW, J. D. Perspective: future research direction in computational fluid dynamics. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 116, pp. 212-215, 1994.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 2^a ed. Berlin : Springer, 1999.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 3rd rev. ed. Berlin : Springer, 2001.
- FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica de fluidos**. Edusp, 2000.
- FREITAS, C. J. Journal of fluids engineering editorial policy statement on the control of numerical accuracy. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 115, pp. 339-340, 1993.
- GRESHO, P. M.; TAYLOR, C. Editorial. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 19, n. 12, 1994.
- HOFFMAN, J. D. Relationship between the Truncation Errors of Centered Finite-Difference Approximations on Uniform and Nonuniform Meshes. **Journal of Computational Physics**, v. 46, pp. 469-474, 1982.
- ISO. Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement. **International Organization for Standardization**, 1993.
- JANSSEN, R. J. A; HENKES, R. A. W. M. Accuracy of Finite-Volume Discretizations for the Bifurcating Natural-Convection Flow in a Square Cavity. **Numerical Heat Transfer**, Part B, v. 24, pp. 191-207, 1993.
- JONES, W. P.; MENZIES, K. R. Analysis of the Cell-Centred Finite Volume Method for the Diffusion Equation. **Journal of Computational Physics**, v. 165, n.1, pp.45-68, 2000.
- KHODIER, A. M. M. A finite difference scheme on nonuniform grids. **International Journal Computer Mathematic**, v. 77, pp. 145-152, 2001.
- KLINE, S. J., ANAND, N. K., RHODE, D. L. Stanford Conference on complex turbulent flows. **AFOSR-HTTM**, Stanford, 1981.
- KREYSZIG, E. **Advanced Engineering Mathematics**. 8th ed., Wiley, New York, 1999.
- LeVEQUE, R. J. **Numerical Methods for Conservation Laws**. Birkhäuser, Berlin, 1992.
- LI, Y; BALDACCHINO, L. Implementation of Some Higher-Order Convection Schemes on Non-Uniform Grids. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v.21, pp.1201-1220, 1995.

- MCMASTERS, R. L., ZHOU, Z., DOWDING, K. J., SOMERTON, C, Beck, J. V. Exact solution for nonlinear thermal diffusion and its use for verification. **AIAA Journal**, v.3, pp. 366-372, 2002.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. LTC, Rio de Janeiro, 1995, 1^a ed.
- MANTEUFFEL, T. A.; WHITE JR., A. B. The Numerical Solution of Second-Order Boundary Value Problems on Nonuniform Meshes. **Mathematics of Computation**, v.47, n.176, pp.511-535, 1986.
- MARCHI, C. H. **Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos**. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis, 2001.
- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Previsão de Erros de Truncamento de Modelos Numéricos em Malhas Não-Uniformes. **IV SIMMEC**, Uberlândia, pp. 481-488, 2000.
- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Unidimensional Numerical Solution Error Estimation for Convergent Apparent Order. **Numerical Heat Transfer**, Part B, v. 42, pp. 167-188, 2002.
- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Multidimensional discretization error estimation for convergent apparent order. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Science & Engineering**, v.27, pp. 432-439, 2005.
- MARVIN, J. G. Perspective on computational fluid dynamics validation. **AIAA Journal**, v. 33, n. 10, pp. 1778-1787, 1995.
- MATHUR, S.; MURTHY J. Y. Periodic Flow and Heat Transfer Using Unstructured Meshes. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 25, pp. 659-677, 1997.
- MEHTA, U. B. Guide to credible computer simulations of fluid flows. **Journal of Propulsion and Power**, v. 12, n. 5, pp. 940-948, 1996.
- MISHEV, I. D. Finite Volume Methods on Voronoi Meshes. **Numerical Methods Applied**, v. 14, pp. 193-212, 1997.
- MORAIS, E. L. **Verificação de soluções numéricas de escoamentos laminares obtidas com o método dos volumes finitos e malhas não estruturadas**. Dissertação de mestrado, PGMEC, UFPR, 2004.
- MORAIS, E. L.; SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. Verification of the discretization error of numerical solutions of flows using unstructured meshes. **18th COBEM**, CD-ROM, Ouro Preto, 2005.

- OBERKAMPF, W. L.; BLOTTNER, F. G. Issues in computational fluid dynamics code verification and validation. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, pp. 687-695, 1998.
- ORESQUES, N.; FRECHETTE, K. S.; BELITZ, K. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the Earth sciences. *Science*, v. 263, pp. 641-646, 1994.
- PATANKAR, S.V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. McGraw-Hill, New York, 1980, 1^a. ed.
- PINA, H. **Métodos Numéricos**. McGraw-Hill, Lisboa, 1995.
- PINTO, M. A. V., SANTIAGO, C. D., MARCHI, C. H. Efeito de parâmetros do método multigrid sobre o tempo de CPU para a equação de Burgers unidimensional. **XXVI CILAMCE**, CD-ROM, Guarapari, 2005.
- RICHARDSON, L. F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A**, v. 210, pp. 307-357, 1910.
- RICHARDSON, L. F., GAUNT, J. A. The deferred approach to the limit. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A**, v. 226, pp. 299-361, 1927.
- RIZZI, A.; VOS, J. Toward establishing credibility in computational fluid dynamics simulations. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, pp. 668-675, 1998.
- ROACHE, P. J.; GHIA, K. N.; WHITE, F. M. Editorial policy statement on the control of numerical accuracy. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 108, pp. 2, 1986.
- ROACHE, P. J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 116, pp. 405-413, 1994.
- ROACHE, P. J. **Verification and Validation in Computational Science and Engineering**. Hermosa, Albuquerque, 1998.
- ROY, C. J. Grid convergence error analysis for mixed-order numerical schemes. **AIAA Journal**, pp. 595-604, 2003.
- ROY, C. J., MCWHERTER-PAYNE, M. A., OBERKAMPF, W. L. Verification and validation for Laminar Hypersonic Flowfields, Part 1: Verification. **AIAA Journal**, v. 41, n.10, pp. 1934-1943, 2003.
- ROY, C. J., NELSON, C. C., SMITH, T. M., OBER, C. C. Verification of Euler/Navier-stokes codes using the method of manufactured solutions. **International Journal of Numerical Methods**, v. 44, pp. 599-620, 2004.

- RUDY, D. H.; THOMAS, J. L.; KUMAR, A.; GNOFFO, P. A.; CHAKRAVARTHY, S. R. Computation of laminar hypersonic compression-corner flows. **AIAA Journal**, v. 29, n. 7, pp. 1108-1113, 1991.
- SANTOS, L. A.; VASCONCELLOS, J. F. V.; MALISKA, C. R. Análise da acurácia de aproximações do laplaciano em volumes finites usando diagramas de Voronoi. **VI Encontro Nacional de Ciências Térmicas - ABCM**, Rio de Janeiro, p.565-570, 1996.
- SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. Sobre a definição da razão de refino de malhas unidimensionais não-uniformes. **XXV CILAMCE**, CD-ROM, Recife, 2004.
- SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. On the grid refinement ratio for one-dimensional advective problems with nonuniform grids. **18th COBEM**, CD-ROM, Ouro Preto, 2005.
- SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. Efeito do tipo de refino de malhas não-uniformes de volumes finitos sobre a ordem efetiva do erro de discretização. **XXVII CILAMCE**, CD-ROM, Belém, 2006.
- SCHNEIDER, G.E.; RAW, M. J. Control-Volume Finite-Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Co-Located Variables – 2: Application and Validation. **Numerical Heat Transfer**, v. 11, pp. 391-400, 1987.
- SPIEGEL, M.R. **Manual de Fórmulas, Métodos e Tabelas de Matemática**. McGraw Hill, São Paulo, 1992.
- STRAUSS, D.; AZEVEDO, J. L. F.; SILVA, L. F. F. In the application of higher order schemes for compressible flows. **20th Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering**. São Paulo, CD-ROM, 1999.
- SUERO, R. **Verificação de soluções numéricas de escoamentos bidimensionais laminares em malhas uniformes**. Dissertação de mestrado PPGMNE, UFPR, 2006.
- TANIGUCHI, N.; T. KOBAYASHI. Finite Volume Method on the Unstructured Grid **System. Computers & Fluids**, n. 9, v. 34, pp. 287-295, 1991.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. 2^a ed., Taylor & Francis, Washington, 1997.
- TSENG, Y., FERZIGER, J. H. A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry. **Journal of Computational Physics**, v. 192, pp. 593-623, 2003.
- VENKATAKRISHNAN, V. Perspective on unstructure grid flow solvers. **AIAA Journal**, v. 34, n. 3, pp. 533-547, 1996.
- ZHU, J. Z.; ZIENKIEWICZ, O. C. Superconvergence recovery technique and a posteriori error estimates. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 30, pp. 1321-1339, 1990.

APÊNDICE A – Tabelas do Capítulo 3

Tabela A.1 – Ordem efetiva (p_E) obtida *a priori* quando se usam malhas em PG.

r_f	$q = 2$	$q = 3$	r_f	$q = 2$	$q = 3$
0,800000	1,9475321462	1,9139382350	1,050000	1,9974275861	1,9956775273
0,850000	1,9718235050	1,9532456485	1,100000	1,9902189792	1,9836235019
0,900000	1,9880603866	1,9800306260	1,150000	1,9790853968	1,9651731689
0,950000	1,9971572502	1,9952239211	1,200000	1,9646669268	1,9415717112
1,000001	2,0000000000	2,0000000000	–	–	–

Tabela A.2 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1A para as malhas da Fig. 3.3.

$a/(L-c)$	p_E Ponto 2	p_E Ponto 3	$a/(L-c)$	p_E Ponto 2	p_E Ponto 3
0,1	0,286304176	0,910501838	0,6	0,943416476	0,994240701
0,2	0,556393325	0,948975980	0,7	0,785875201	0,977099598
0,3	0,785875201	0,977099598	0,8	0,556393325	0,948975980
0,4	0,943416476	0,994240701	0,9	0,286304176	0,910501838
0,5	1,000000000	1,000000000	–	–	–

Tabela A.3 – Valor da razão de refino (q) que reproduz a ordem assintótica (p_L), para as malhas da Fig. 3.3 com $c = 3L/4$.

$a/(L-c)$	q Ponto 2	q Ponto 3	$a/(L-c)$	q Ponto 2	q Ponto 3
0,1	1,219512224	1,879699230	0,6	1,923076868	1,992031932
0,2	1,470588207	1,930501938	0,7	1,724137902	1,968503952
0,3	1,724137902	1,968503952	0,8	1,470588207	1,930501938
0,4	1,923076868	1,992031932	0,9	1,219512224	1,879699230
0,5	2,000000000	2,000000000	–	–	–

Tabela A.4 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1B no Ponto 2, para malhas das Fig.3.6 (a,b).

$a/(a+b)$	p_E (250-500)	p_E (2500-5000)	p_E (25000-50000)
0,1	0,9930896957	0,9995386079	0,9999561842
0,2	0,9963501881	0,9997654075	0,9999778642
0,3	0,9986848988	0,9999274364	0,9999933502
0,4	1,0000887953	1,0000246697	1,0000026419
0,5	1,0005586333	1,0000570914	1,0000057393
0,6	1,0000929775	1,0000246940	1,0000026422
0,7	0,9986922106	0,9999274789	0,9999933506
0,8	0,9963585310	0,9997654561	0,9999778646
0,9	0,9930959387	0,9995386443	0,9999561845

Tabela A.5 – Ordem efetiva (p_E) do problema 1B, para malhas do tipo da Fig. 3.6 (a,c).

N_f	\bar{h}_f	p_E Ponto 2	p_E Ponto 3
50	0,02000	1,0230856996	1,0228895497
100	0,01000	0,9883594363	0,9929704053
500	0,00200	1,0003164380	0,9993749574
1000	0,00100	1,0004137290	1,0009465079
5000	0,00020	1,0003285887	1,0000373240
10000	0,00010	0,9999763646	0,9994369871
50000	0,00002	1,0000373548	1,0001038466

Tabela A.6 – Ordem efetiva (p_E) do problema 2A no ponto 2, para as malhas da Fig. 3.3.

Malha grossa uniforme				Malha grossa não-uniforme			
$\frac{a}{L-c}$	p_E	$\frac{a}{L-c}$	p_E	$\frac{a}{L-c}$	p_E	$\frac{a}{L-c}$	p_E
0,1	–	0,6	1,852042119	0,1	0,1399836953	0,6	2,129362580
0,2	–	0,7	2,351074441	0,2	0,5437813743	0,7	1,771606826
0,3	–	0,8	–	0,3	1,020340448	0,8	1,128898526
0,4	2,910501849	0,9	–	0,4	1,544090693	0,9	0,442222328
0,5	2,000000000	–	–	0,5	2,000000000	–	–

Tabela A.7 – Ordem efetiva (p_E) do problema 2B no ponto 2, para 7 pares de malhas do tipo da Fig. 3.6.a e 3.6.b.

N_f	\bar{h}_f	p_E refino uniforme	p_E refino aleatório
50	0,02000	2,0096956933	1,9811523004
100	0,01000	2,0029763442	2,0327445838
500	0,00200	2,0005806694	1,9925835992
1000	0,00100	2,0002854241	2,0015354051
5000	0,00020	2,0000570465	1,9973062931
10000	0,00010	2,0000287775	1,9962708034
50000	0,00002	2,0000057337	2,0006837456

Tabela A.8 – Ordem efetiva do problema 3A, para malha grossa com PG de razão r_g .

N_g	r_g	Tipo de refino e ordem efetiva p_E	
		com PG de razão r	com PG de razão \sqrt{r}
100	1,1500	1,979085396888	1,994730045691
	1,1000	1,990218979207	1,997545739972
	1,0100	1,999892875814	1,999973217876
	1,0010	1,999998919053	1,999999729750
	1,0001	1,99999989184	1,999999997295
1000	1,1500	1,979085396889	1,994730045691
	1,1000	1,990218979206	1,997545739972
	1,0100	1,999892875804	1,999973217806
	1,0010	1,999998918420	1,999999728701
	1,0001	1,99999987995	1,999999997599

Tabela A.9 – Ordem efetiva do problema 3A, para malha grossa com $N_g = 100$ e $r=1,01$.

razão de refino (q)	Tipo de refino e ordem efetiva p_E	
	com PG de razão r	com PG de razão $\sqrt[4]{r}$
2	1,763361978306	1,999973217876
4	1,526926851696	1,999983261132
8	1,201558973028	1,999988282716
16	0,921195935608	1,999991107514
32	0,737258848656	1,999992865164
64	0,614382461765	1,999994048127
128	0,526613538655	1,999994895747

Tabela A.10 – Ordem efetiva do problema 3B, para malha grossa não-uniforme e intervalo de integração fixo $x = [0;0,5]$.

N_f	\bar{h}_f	Tipo de refino e ordem efetiva p_E	
		uniforme	aleatório
10	0,100000	1,8602509707	1,5208544629
40	0,025000	1,9921701443	1,9307779427
100	0,010000	1,9987166467	1,8985563570
400	0,002500	1,9999256617	1,7879077248
1000	0,001000	1,9999887345	1,8546300456
4000	0,000250	1,9999993198	1,8322499711
8000	0,000125	1,9999998241	1,8080907176

Tabela A.11 – Ordem efetiva do problema 3B, para malha grossa não-uniforme e intervalo de integração variável em que $f(x) = [0;0,7]$.

N_f	\bar{h}_f	Tipo de refino e ordem efetiva p_E	
		uniforme	aleatório
10	0,10000	2,7767427489	2,3809269289
40	0,02500	2,9378892125	2,9653853884
100	0,01000	1,8787847862	0,6545275469
400	0,00250	1,5574621086	1,9733240947
1000	0,00100	0,8129238296	0,9324108610
4000	0,00025	0,0524982959	0,0445073801
10000	0,00010	0,0131163820	0,0156829757

APÊNDICE B – Tabelas do Capítulo 4

Tabela B.1 – Ordem efetiva do problema 5A para malha grossa uniforme.

N_f	h_f	ordem efetiva p_E em $x = 0,5$				
		RU	RSU	RC	RCF	RA
15	0,0666666	1,0743465477	1,0743465477	1,0782281708	1,0782281708	0,8976783685
33	0,0303030	1,0353535398	1,0353535398	1,0361732060	1,0361732060	1,2771012780
153	0,0065359	1,0078638867	1,0078638867	1,0079026030	1,0079026030	1,3420572460
303	0,0033003	1,0039879109	1,0039879109	1,0039978037	1,0039978037	1,1231090604
1503	0,0006653	1,0008067709	1,0008067709	1,0008071736	1,0008071736	0,6306946639
3003	0,0003330	1,0004039672	1,0004039672	1,0004040682	1,0004040682	1,4093051337
15003	0,0000666	1,0000808874	1,0000808874	1,0000808915	1,0000808915	0,9048763748

Tabela B.2 – Ordem efetiva do problema 5B para malha grossa uniforme.

N_f	h_f	ordem efetiva p_E em $x = 0,5$				
		RU	RSU	RC	RCF	RA
15	0,0666666	–	–	1,9589624047	1,9589624047	–
33	0,0303030	–	–	1,9853487213	1,9853487213	–
153	0,0065359	–	–	1,9973258541	1,9973258541	–
303	0,0033003	–	–	1,9981877616	1,9981877616	–
1503	0,0006653	–	–	1,9996362332	1,9996362332	–
3003	0,0003330	–	–	1,9998180398	1,9998180398	–
15003	0,0000666	–	–	1,9999647125	1,9999647125	–

Tabela B.3 – Ordem efetiva do problema 6A para malha grossa não-uniforme do tipo VFC .

N_f	\bar{h}_f	ordem efetiva p_E em $x = 0,5$				
		RU	RSU	RC	RCF	RA
15	0,0666666	2,1992655916	1,8762930756	1,8603404085	1,8603404085	1,8236342349
33	0,0303030	1,8940096739	1,9382050612	1,9335016446	1,9335016446	2,3420628827
153	0,0065359	2,1226845231	1,9806591394	1,9799872108	1,9799872108	2,2050889694
303	0,0033003	1,7631244627	1,9925183569	1,9922112243	1,9922112243	1,6756597842
1503	0,0006653	2,3398147847	1,9982904576	1,9982786531	1,9982786531	2,1018332325
3003	0,0003330	2,0477436067	1,9994898564	1,9993508647	1,9993508647	2,3067159576
15003	0,0000666	2,1663795428	1,9999487463	1,9998978596	1,9998978596	1,9517930218

Tabela B.4 – Ordem efetiva do problema 6B para malha grossa não-uniforme do tipo VNC.

N_f	\bar{h}_f	ordem efetiva p_E em $x = 0,5$				
		RU	RSU	RC	RCF	RA
15	0,0666666	0,8955563838	0,8955563838	0,9309943734	0,9309885589	0,8592023558
33	0,0303030	0,9428735376	0,9428735376	0,9672787693	0,9672332705	0,9144049529
153	0,0065359	0,9910984635	0,9910984635	0,9823893867	0,9823610256	1,0081460599
303	0,0033003	0,9960595405	0,9960595405	0,9926436709	0,9925996718	1,0111966636
1503	0,0006653	0,9992177039	0,9992177039	0,9966708347	0,9966677021	0,9957712751
3003	0,0003330	0,9996094681	0,9996094681	0,9978996709	0,9978967980	0,9972079006
15003	0,0000666	0,9998083735	0,9998083735	0,9986494876	0,9986374598	1,0089684636

Tabela B.5 – Ordem efetiva do problema 6A para malha grossa não-uniforme aleatória.

N_f	\bar{h}_f	ordem efetiva p_E em $x = 0,5$				
		RU	RSU	RC	RCF	RA
15	0,0666666	2,6996686210	1,8824345438	2,0935502257	1,2570222308	1,7141920235
33	0,0303030	3,2209998238	1,9593885013	2,6759668838	0,7346230560	2,9506363282
153	0,0065359	2,3944315330	1,9845958738	2,3569312081	0,9814463918	1,6697175576
303	0,0033003	1,9889527864	1,9878804044	1,6157423819	1,0210255354	1,2273116678
1503	0,0006653	1,6762462534	1,9993672895	2,1154393010	1,0038801336	1,6764155052
3003	0,0003330	2,2368376294	1,9993710380	1,8450160279	0,9896877155	1,1145876726
15003	0,0000666	2,0489763478	1,9999587564	2,0849489739	0,9928475473	1,0873567836

Tabela B.6 – Ordem efetiva do problema 7 para malha grossa não-uniforme do tipo VFC.

N_f	\bar{h}_f	ordem efetiva p_E em $x = 0,5$				
		RU	RSU	RC	RCF	RA
45	0,022222	2,1953520774	1,9430279731	1,9408594369	1,9408594369	1,9520105123
135	0,007407	1,9785717725	1,9783823490	1,9855631589	1,9855631589	2,0495433807
405	0,002469	1,9928942918	1,9928272962	1,9952099323	1,9952099323	2,1343452930
1215	0,000823	1,9976364374	1,9976338148	1,9984018802	1,9984018802	1,9459846019
3645	0,000274	1,9982209205	1,9989898204	2,0000922679	2,0000922679	2,2732927799
10935	0,000091	2,0588555335	2,0060627460	2,0500140190	2,0500140190	1,4182571172

Tabela B.7 – Ordem efetiva do problema 7 para malha grossa não-uniforme do tipo *VNC*.

N_f	\bar{h}_f	ordem efetiva p_E em $x = 0,5$				
		<i>RU</i>	<i>RSU</i>	<i>RC</i>	<i>RCF</i>	<i>RA</i>
45	0,022222	1,9159178733	1,9159178733	1,6340672969	1,7647633552	1,7790279388
135	0,007407	1,9727538824	1,9727538824	1,9865827560	1,6857175827	1,8922882080
405	0,002469	1,9910008907	1,9910008907	1,9955474138	1,4509484767	2,1123828887
1215	0,000823	1,9970451593	1,9970451593	1,9985224008	1,2223643064	1,8579965829
3645	0,000274	1,9991155862	1,9991155862	1,9972503185	1,0885212421	2,2308807373
10935	0,000091	1,9115550518	1,9115550518	2,0137567520	1,0314862728	2,2697234153

Tabela B.8 – Ordem efetiva do problema 8, no intervalo $x = [0;0,5]$, para malha grossa não-uniforme do tipo *VFC*.

N_f	\bar{h}_f	r_f	ordem efetiva p_E	
			PG (<i>VNC</i>)	PG (<i>VFC</i>)
45	0,022222	1,144714243	1,9820082115	-
135	0,007407	1,046081919	1,9980331663	2,0378087296
405	0,002469	1,015130551	1,9997753868	2,0115229590
1215	0,000823	1,005018292	1,9999746729	2,0037318715
3645	0,000274	1,001669974	1,9999971701	2,0012321841
10935	0,000091	1,000556348	1,9999987787	2,0004094340

APÊNDICE C – Tabelas do Capítulo 5

Tabela C.1 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa uniforme.

$N_{xg} \times N_{yg}$	$N_{xf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	Tipo de refino	
			uniforme	aleatório
40x40	80x80	0,0125000	1,9994916876	1,9900168196
60x60	120x120	0,0083333	1,9997747444	1,9853497531
80x80	160x160	0,0062500	1,9998738072	1,9874117833
100x100	200x200	0,0050000	1,9999197245	1,9782448820
120x120	240x240	0,0041666	1,9999847531	1,9876120867

Tabela C.2 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme.

$N_{xg} \times N_{yg}$	$N_{xf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	Tipo de refino	
			uniforme	aleatório
40x40	80x80	0,0125000	1,9994646048	1,9854493045
60x60	120x120	0,0083333	1,9997689369	1,9718330280
80x80	160x160	0,0062500	1,9998702420	1,9915261106
100x100	200x200	0,0050000	1,9999182175	1,9832459870
120x120	240x240	0,0041666	1,9999635665	1,9827907726

Tabela C.3 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa com PG de razão r .

$N_{xg} \times N_{yg}$	r_g	$N_{xf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	Tipo de refino		
				uniforme	aleatório	com PG de razão $\sqrt[r]{r}$
40x40	1,030	80x80	0,0125000	1,9991989180	1,9874350304	1,9985649724
60x60	1,020	120x120	0,0083333	1,9996428403	1,9862707408	1,9993603404
80x80	1,010	160x160	0,0062500	1,9998233645	1,9655869441	1,9997121977
100x100	1,008	200x200	0,0050000	1,9998875027	1,9836686513	1,9998163073
120x120	1,006	240x240	0,0041666	1,9999244113	1,9874300141	1,9998793648

Tabela C.4 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme, com refino direcional uniforme em x .

$N_{xsg} \times N_{ysg}$	$N_{xg} \times N_{yg}$	$N_{xf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	p_E	p_U
20x20	40x20	80x20	0,0250000	0,6758146539	2,0004453633
70x20	140x20	280x20	0,0133630	0,0832920112	2,0000264631
120x20	240x20	480x20	0,0102062	0,0291383279	2,0000103570
170x20	340x20	680x20	0,0087492	0,0108929241	2,0000061932
220x20	440x20	880x20	0,0075377	0,0065774214	2,0000048986

Tabela C.5 – Ordem efetiva do problema 9, no ponto P , para malha grossa não-uniforme, com refino direcional não-uniforme em y .

$N_{xsg} \times N_{ysg}$	$N_{xg} \times N_{yg}$	$N_{xf} \times N_{yf}$	\bar{h}_f	p_E	p_U
20x20	20x40	20x80	0,0250000	0,6779665488	1,9800034208
20x70	20x140	20x280	0,0133630	0,0835306399	1,9958582699
20x120	20x240	20x480	0,0102062	0,0301588840	1,9784137546
20x170	20x340	20x680	0,0087492	0,0144207060	1,9783840036
20x220	20x440	20x880	0,0075377	0,0077135814	1,9827654423

APÊNDICE D – Tabelas do Capítulo 6

Tabela D.1 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , malha grossa não-uniforme VNC e com refino direcional em x , do tipo RU .

N_{xsg}	N_{xg}	N_{xf}	N_y	\bar{h}_f	p_{Ex}	p_{Ux}
5	15	45		0,0666666666	0,2831060735	1,9207000360
63	189	567		0,0187812056	0,0049361683	1,9995229475
123	369	1107	5	0,0134412973	0,0011670298	1,9995151017
181	543	1629		0,0110803749	0,0003221745	1,9996117231
241	723	2169		0,0096025200	0,0000540393	1,9999866411

Tabela D.2 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , malha grossa não-uniforme VNC e com refino direcional em y , do tipo RU .

N_x	N_{ysg}	N_{yg}	N_{yf}	\bar{h}_f	p_{Ey}	p_{Uy}
	5	15	45	0,0666666666	0,9288050802	1,9725721894
	63	189	567	0,0187812056	0,0146653161	1,9996576907
5	123	369	1107	0,0134412973	0,0007608110	1,9999855537
	181	543	1629	0,0110803749	0,0008448674	2,0000255291
	241	723	2169	0,0096025200	0,0004030465	1,9999996076

Tabela D.3 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , malha grossa não-uniforme VFC e com refino direcional em x , do tipo RU .

N_{xsg}	N_{xg}	N_{xf}	N_y	\bar{h}_f	p_{Ex}	p_{Ux}
5	15	45		0,0666666666	1,7017152161	1,0500190233
63	189	567		0,0187812056	0,0083106320	1,8118909043
123	369	1107	5	0,0134412973	0,0021010500	2,4148873752
181	543	1629		0,0110803749	0,0009130963	1,7062938199
241	723	2169		0,0096025200	0,0006259443	1,7965516461

Tabela D.4 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , malha grossa não-uniforme VFC e com refino direcional em y , do tipo RU .

N_x	$N_{y_{sg}}$	N_{yg}	$N_{y_{f}}$	\bar{h}_f	p_{Ey}	p_{Uy}
5	5	15	45	0,06666666666	0,0078015934	1,7144097443
	63	189	567	0,0187812056	0,0121518693	2,0443551966
	123	369	1107	0,0134412973	0,0005530126	1,4139735202
	181	543	1629	0,0110803749	0,0008224434	2,7464418072
	241	723	2169	0,0096025200	0,0004528649	1,9617028366

Tabela D.5 – Ordem assintótica e aparente do problema 10A, no ponto P , malha grossa não-uniforme VFC e com refino direcional em y , do tipo RSU .

N_x	$N_{y_{sg}}$	N_{yg}	$N_{y_{f}}$	\bar{h}_f	p_{Ey}	p_{Uy}
5	5	15	45	0,06666666666	0,6708599305	1,9382901259
	63	189	567	0,0187812056	0,0114322085	1,9995473294
	123	369	1107	0,0134412973	0,0005349610	1,9999297883
	181	543	1629	0,0110803749	0,0003003211	1,9999806052
	241	723	2169	0,0096025200	0,0000953416	1,9999951691

APÊNDICE E – Trabalhos Publicados

- E1. SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. Sobre a definição da razão de refino de malhas unidimensionais não-uniformes. XXV CILAMCE, CD-ROM, Recife, 2004.**



SOBRE A DEFINIÇÃO DA RAZÃO DE REFINO DE MALHAS UNIDIMENSIONAIS NÃO-UNIFORMES

Fábio Alencar Schneider

schneider@unicenp.edu.br

Curso de Engenharia Mecânica, Centro Universitário Positivo, R. Prof. Pedro Viriato Parigot de Souza, 5300, 81280-310, Curitiba - PR – Brasil

Carlos Henrique Marchi

marchi@demec.ufpr.br

Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná, Caixa postal 19040, CEP 81531-980, Curitiba – PR - Brasil

Resumo. *O objetivo deste trabalho é analisar a definição usual da razão de refino empregada com malhas irregulares (não-estruturadas, não-ortogonais e não-uniformes). Sua importância reside no seguinte: a razão de refino de malhas é um parâmetro que afeta diretamente a estimativa do erro de discretização feita pelos estimadores mais empregados na literatura; e malhas irregulares são amplamente utilizadas na obtenção de soluções numéricas. Os modelos matemáticos usados neste trabalho são a advecção unidimensional de um escalar e a média da integral de funções polinomiais, resolvidos através do método de diferenças finitas. Verificou-se que a definição usual de razão de refino empregada com malhas irregulares é incorreta até mesmo para a malha irregular mais simples, que é a unidimensional não-uniforme. Mas ela é correta quando uma malha não-uniforme é refinada de modo uniforme.*

Palavras-chave: *Erro numérico, CFD, Diferenças finitas, Simulação numérica*

1. INTRODUÇÃO

O erro numérico verdadeiro (E) de uma variável de interesse é a diferença entre a sua solução analítica exata (Φ) e a sua solução numérica (ϕ), isto é, (Ferziger e Peric, 2001)

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

Portanto, a solução numérica ideal é igual à solução analítica exata do problema, ou seja, é aquela em que o erro numérico é nulo. Exemplos de variáveis de interesse em dinâmica dos fluidos são: velocidade, temperatura, pressão, massa específica, vazão, fluxo de massa, fluxo de calor e força.

O valor do erro numérico verdadeiro independe de resultados experimentais mas só pode ser obtido quando a solução analítica do modelo matemático é conhecida. Porém, em termos práticos, isto é, para soluções numéricas de modelos matemáticos cuja solução analítica é desconhecida, não é possível obter o erro numérico. Nestes casos é necessário estimar o valor da solução analítica. Assim, em vez do erro numérico verdadeiro calcula-se o erro numérico estimado (U), que é avaliado pela diferença entre a solução analítica estimada (ϕ_∞) e a solução numérica (ϕ), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (2)$$

Pode-se considerar que o erro numérico é causado pelas seguintes fontes (Marchi e Silva, 2002):

- 1) Erro de truncamento: origina-se das aproximações numéricas empregadas na discretização de um modelo matemático (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998). Em geral, este erro se reduz com a diminuição do tamanho dos elementos da malha, isto é, com a diminuição da distância entre dois nós consecutivos da malha.
- 2) Erro de iteração: é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração (Ferziger e Peric, 2001). As equações discretizadas resultam das aproximações numéricas feitas sobre um modelo matemático. De forma geral, o erro de iteração se reduz com o aumento do número de iterações.
- 3) Erro de arredondamento: ocorre principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações. Ele aumenta com a redução do tamanho dos elementos da malha, isto é, com o aumento do número de nós, elementos ou volumes da malha.
- 4) Erro de programação: inclui os erros causados por pessoas na implementação e no uso de um programa computacional.

O presente trabalho considera apenas os efeitos do erro de truncamento sobre as soluções numéricas. Nesse caso, o erro numérico calculado através da Eq. (1) passa a ser denominado de erro de discretização (Ferziger e Peric, 2001). Nos problemas abordados neste trabalho, não existem erros de iteração, os erros de arredondamento são cerca de 15 ordens de grandeza inferiores aos erros de truncamento e, devido à grande simplicidade dos problemas, acredita-se que não existam erros de programação.

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. A magnitude aceitável para o erro numérico é função, entre outros fatores, da finalidade da solução numérica, dos recursos financeiros envolvidos, do tempo permitido ou disponível para realizar as simulações e dos recursos computacionais existentes. Sabendo-se que as soluções numéricas contêm erros, entre outros motivos, é importante estimá-los porque quando o erro é maior do que o aceitável compromete-se a confiabilidade do uso da solução numérica.

Uma forma de estimar o erro de discretização de soluções numéricas é através do estimador de Richardson (Marchi e Silva, 2002)

$$U_{Ri}(\phi_f) = \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^p - 1)} \quad (3)$$

onde ϕ_f e ϕ_g são soluções numéricas obtidas em duas malhas com número diferente de elementos, e cada uma destas malhas pode ser representada pelo tamanho dos seus elementos (h), isto é, h_f = malha fina e h_g = malha grossa; p representa a ordem assintótica ou formal (p_L) do erro de discretização (Roache, 1994) ou a ordem aparente (p_U); e q é a razão de refino entre as duas malhas, que no caso de malhas unidimensionais uniformes é definida por

$$q = \frac{h_g}{h_f} = \frac{N_f}{N_g} \quad (4)$$

onde N_f e N_g representam, respectivamente, o número de elementos das malhas fina e grossa. No caso de q ser constante entre três malhas, a ordem aparente (p_U) resulta em (De Vahl Davis, 1983)

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_g - \phi_{sg}}{\phi_f - \phi_g}\right)}{\log(q)} \quad (5)$$

onde ϕ_{sg} é a solução numérica obtida na malha supergrossa (h_{sg}). O caso de q variável entre três malhas é abordado por Roache (1998).

Outra forma de estimar o erro de discretização de soluções numéricas é através do estimador GCI (*Grid Convergence Index*) (Roache, 1994). Ele pode ser aplicado através de

$$U_{GCI}(\phi_f) = F_s |U_{Ri}(\phi_f)| \quad (6)$$

onde F_s é um fator de segurança com valor igual a três para aplicações em geral.

A definição usual da razão de refino empregada em malhas irregulares (não-uniformes, não-ortogonais e não-estruturadas) é dada por (Roache, 1994; Celik, 2004)

$$q = \left(\frac{N_f}{N_g}\right)^{\frac{1}{D}} \quad (7)$$

onde D é a dimensão espacial do problema, sendo igual a 1, 2 ou 3, respectivamente, para os casos uni, bi e tridimensional. Essa definição é uma extrapolação direta daquela usada em malhas multidimensionais uniformes. Para ver isso, basta compará-la com a Eq. (4) para o caso unidimensional, no qual $D = 1$.

O objetivo deste trabalho é mostrar: (i) que a definição usual da razão de refino empregada com malhas irregulares, Eq. (7), só é correta no caso limite de malhas uniformes; (ii) que ela é incorreta até mesmo para a malha irregular mais simples, que é a unidimensional não-uniforme; (iii) se existe algum tipo misto de malha entre uniforme e irregular na qual a Eq. (7) é válida; e (iv) se existe e qual é a métrica adequada a se usar em gráficos de erro para

variáveis locais e globais. Não se conhece qualquer trabalho da literatura que tenha abordado estas questões.

A importância deste trabalho reside no seguinte: (i) a razão de refino de malhas é um parâmetro que afeta diretamente a estimativa do erro de discretização feita pelos estimadores de Richardson e GCI, Eqs. (3) e (6); (ii) estes dois estimadores são os recomendados (Celik, 2004) pela *Fluids Engineering Division* da ASME (*American Society of Mechanical Engineers*); e (iii) malhas irregulares são amplamente utilizadas na obtenção de soluções numéricas.

Este texto está organizado da seguinte forma: a próxima seção apresenta a metodologia aplicada neste trabalho; na seção 3 são apresentados os resultados numéricos; e na seção 4, a conclusão deste trabalho.

2. METODOLOGIA

2.1 Aproximações numéricas

O método numérico empregado neste trabalho é o método das diferenças finitas (*MDF*) (Tannehill *et al.*, 1997). Seu princípio é aproximar através da série de Taylor (Kreyszig, 1999) cada termo do modelo matemático de um problema, em cada nó da malha. Por exemplo, a aproximação numérica $(T_{UDS}^i)_j$ no nó j da malha, Fig. 1, para a derivada de primeira ordem com um nó a montante, é dada por

$$(T_{UDS}^i)_j = \frac{(T_j - T_{j-1})}{h_j} \quad (8)$$

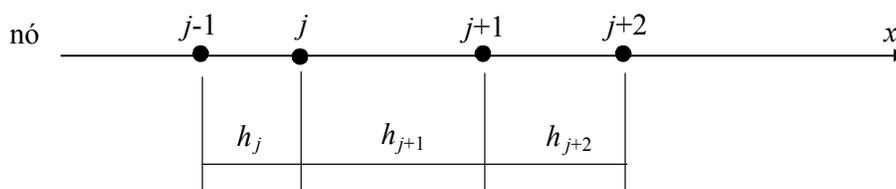


Figura 1 - Malha unidimensional não-uniforme.

O erro de truncamento (ε) desta aproximação é

$$\varepsilon(T_{UDS}^i)_j = T_j^{ii} \frac{h_j}{2} - T_j^{iii} \frac{h_j^2}{6} + T_j^{iv} \frac{h_j^3}{24} - \dots \quad (9)$$

onde os superíndices indicam, respectivamente, derivadas de 2^a, 3^a e 4^a ordens de T no nó j ; h_j é a distância entre dois nós consecutivos da malha; e os três pontos indicam uma série infinita.

A aproximação numérica (T_{int}) para a média de uma variável de campo, obtida através da regra do trapézio (Kreyszig, 1999), é dada por

$$T_{int} = \frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N h_j (T_{j-1} + T_j) \quad (10)$$

onde L é o comprimento do domínio e N é o número de nós da malha. Seu erro de truncamento é

$$\varepsilon(T_{\text{int}}) = -\sum_{j=1}^N \left(T_{j-1/2}^{ii} \frac{h_j^2}{12} + T_{j-1/2}^{iv} \frac{h_j^4}{480} + T_{j-1/2}^{vi} \frac{h_j^6}{53760} + \dots \right) \quad (11)$$

onde $(j-1/2)$ é o ponto médio entre os nós (j) e $(j-1)$.

2.2 Ordens verdadeira, assintótica e efetiva

Por analogia às expressões dos erros de truncamento, Eqs. (9) e (11), admite-se que o erro de discretização $E(\phi)$ é dado por (Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998)

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots \quad (12)$$

onde

ϕ = variável de interesse

h = tamanho dos elementos da malha

C_1, C_2, C_3, \dots = coeficientes que independem de h

p_L, p_2, p_3, \dots = ordens verdadeiras do erro de discretização; números inteiros e positivos

p_L = ordem assintótica do erro de discretização; $p_L \geq 1$; é a inclinação da curva do erro num gráfico $\log(|E|)$ versus $\log(h)$ para $h \rightarrow 0$

A ordem efetiva do erro verdadeiro é definida por (Marchi, 2001)

$$p_E = \frac{\log \left[\frac{E(\phi_g)}{E(\phi_f)} \right]}{\log(q)} \quad (13)$$

Conforme a Eq. (13), a ordem efetiva (p_E) é função do erro verdadeiro da variável de interesse e também da razão de refino (q) entre as malhas. Para os problemas cujas soluções analíticas são conhecidas, ela pode ser usada para verificar se $p_E \rightarrow p_L$ à medida que $h \rightarrow 0$. Ou seja, com base nas soluções numéricas, a ordem efetiva (p_E) pode ser usada para verificar se, à medida que $h \rightarrow 0$, obtém-se a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização, que é um resultado obtido sem qualquer solução numérica.

2.3 Definição dos problemas

Os modelos matemáticos usados neste trabalho são a advecção unidimensional de um escalar e a média da integral de funções polinomiais, representados pelas seguintes equações

$$\frac{dT^A}{dx} = 2x \quad (14)$$

$$T_{\text{int}} = \frac{1}{L} \int T dx \quad (15)$$

onde as funções polinomiais a integrar são

$$T^B = x^2 \quad (16)$$

$$T^C = x^3 \quad (17)$$

Nas Eqs. (14) a (17), os superíndices representam os problemas A , B e C ; T é a variável dependente e x é a variável independente; a condição de contorno do problema A é $T(0) = 0$; e o comprimento do domínio de cálculo é $L = 1$.

As soluções analíticas exatas dos problemas A , B e C são

$$T^A = x^2 \quad (18)$$

$$T_{\text{int}}^B = \frac{1}{3} \quad (19)$$

$$T_{\text{int}}^C = \frac{1}{4} \quad (20)$$

2.4 Discretização dos modelos matemáticos

Aplicando-se a aproximação numérica $(T_{UDS}^i)_j$, dada na Eq. (8), ao problema A , Eq. (14), obtém-se

$$T_j^A = 2x_j h_j + T_{j-1}^A \quad (21)$$

E aplicando-se a aproximação numérica $(T_{\text{int}})_j$, dada na Eq. (10), aos problemas B e C , Eq. (15) a (17), obtém-se respectivamente

$$T_{\text{int}}^B = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N h_j (x_{j-1}^2 + x_j^2) \quad (22)$$

$$T_{\text{int}}^C = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N h_j (x_{j-1}^3 + x_j^3) \quad (23)$$

Estes problemas foram escolhidos porque: (i) não há dúvida alguma na literatura de que a ordem assintótica (p_L) é $p_L = 1$ no caso do problema A e $p_L = 2$ para os problemas B e C , sejam as malhas uniformes ou não-uniformes; (ii) o problema A representa um caso de variável local; e (iii) os problemas B e C representam dois casos de variável global.

Para o problema A , com sua solução analítica, Eq. (18), e o erro de truncamento (ε) da aproximação numérica $(T_{UDS}^i)_j$, Eq. (9), pode-se obter para o erro de discretização

$$E(T^A)_j = (C_1)_j h_j \quad (24)$$

E para os problemas B e C , com suas funções, Eqs. (16) e (17), e o erro de truncamento (ε) da aproximação numérica (T_{int}), Eq. (11), pode-se obter para o erro de discretização

$$E(T_{int}) = \sum_{j=1}^N (C_1)_{j-1/2} h_j^2 \quad (25)$$

onde C_1 é um coeficiente particular de cada problema. Portanto, a equação do erro de discretização, Eq.(12), possui apenas um termo para cada um dos três problemas. Conseqüentemente, a ordem efetiva (p_E) tem que ser igual à ordem assintótica (p_L) para qualquer tamanho (h) dos elementos da malha. Portanto, no caso do problema A , $p_E = 1$ e para os problemas B e C , $p_E = 2$, qualquer que seja h .

3 RESULTADOS

3.1 Malha grossa uniforme

Inicialmente, os resultados foram obtidos partindo-se de uma malha uniforme de comprimento unitário, que pode ser vista na Fig. 2. Para entender o efeito do refino de malha na ordem do erro de discretização, manteve-se a coordenada do ponto 2 fixa nas malhas grossa (h_g) e fina (h_f) e variou-se apenas a posição do ponto flutuante (F), da malha fina, entre $a = 0$ e $a = L/2$. Assim, quando $a = L/4$, o refino de malha é uniforme, caso contrário o refino é dito não-uniforme. Como a solução analítica exata também é conhecida para cada caso, aplicou-se a Eq.(13) para calcular a ordem efetiva (p_E) no ponto 2. Para o cálculo da razão de refino (q), utilizou-se a Eq. (7).

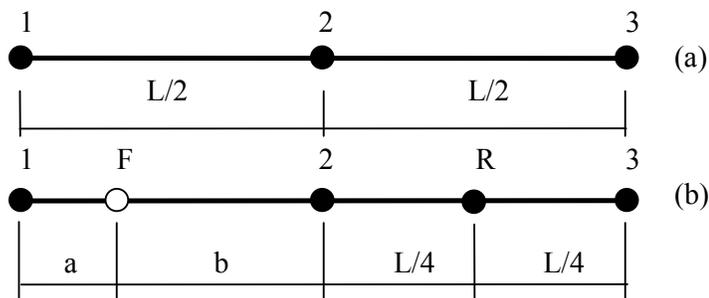


Figura 2 – a) malha grossa uniforme (h_g); b) malha fina não-uniforme (h_f).

As Figs. 3 e 4 apresentam os resultados de T e p_E no ponto 2 para o problema A . As Figs. 5 a 7 apresentam os resultados de T e p_E dos problemas B e C . Em todos os casos, a ordem efetiva (p_E) se iguala à ordem assintótica (p_L) somente quando $a = L/4$, ou seja, quando o refino é uniforme. Observa-se que quanto mais próxima a solução numérica está da solução analítica, maior é o valor da ordem efetiva (p_E).

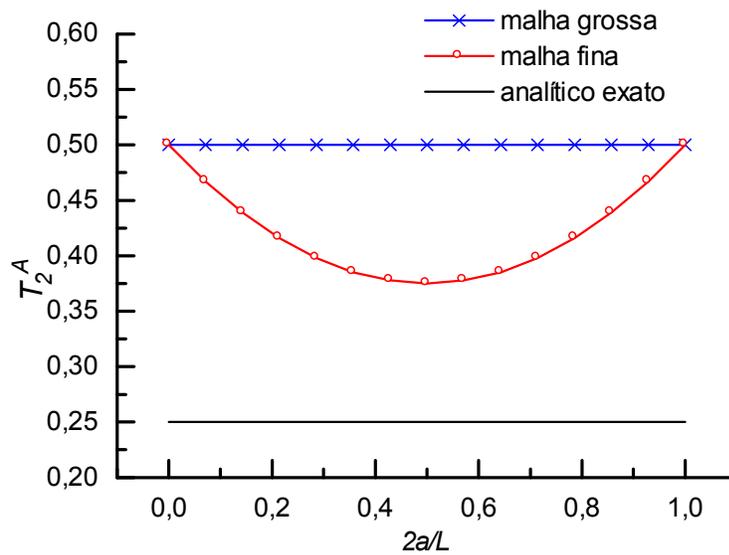


Figura 3 – Soluções do problema A (T^A) no ponto 2 para as malhas da Fig. 2.

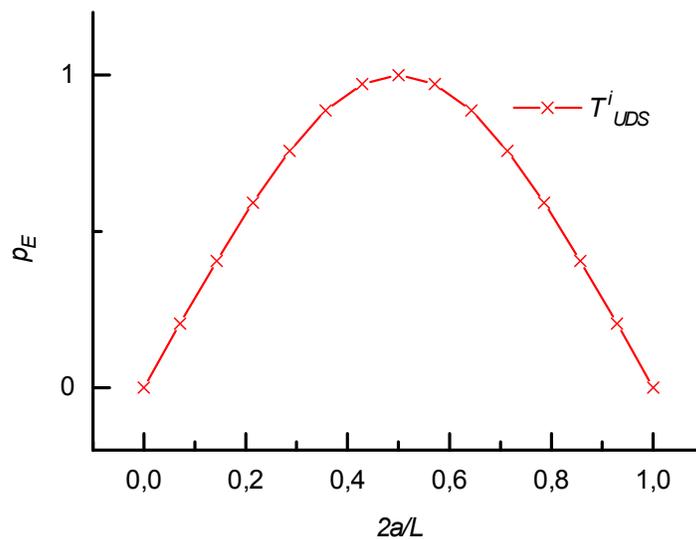


Figura 4 – Ordem efetiva (p_E) do problema A no ponto 2 para as malhas da Fig. 2.

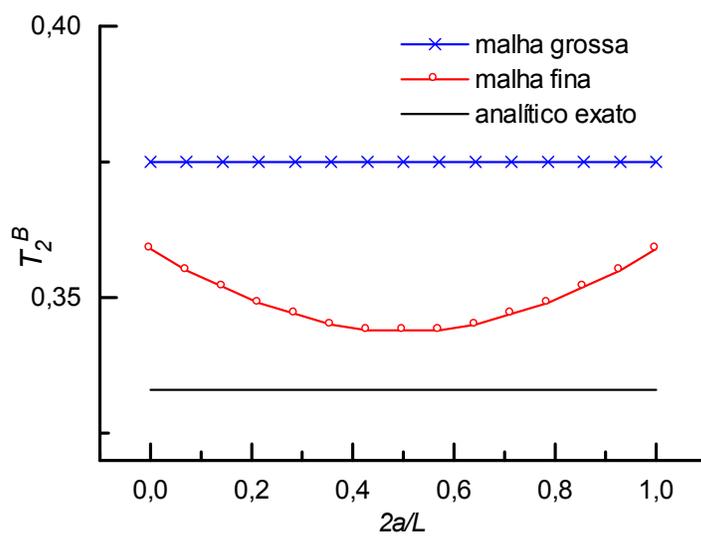


Figura 5 – Soluções do problema B (T^B) para as malhas da Fig. 2.

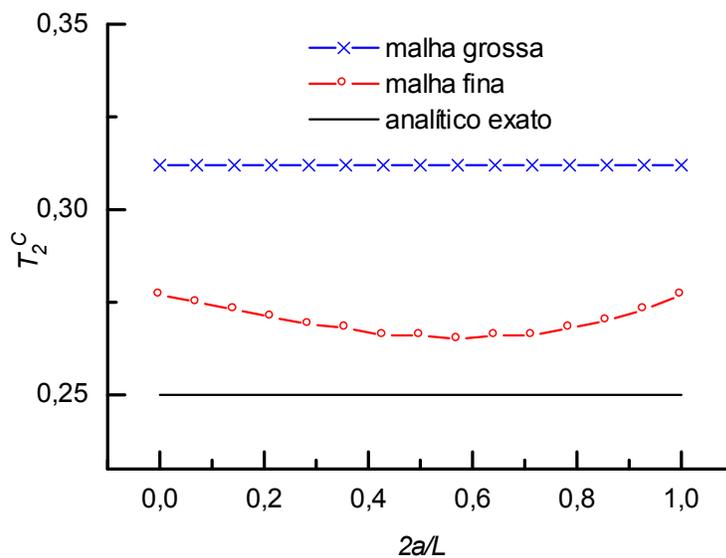


Figura 6 – Soluções do problema C (T^C) para as malhas da Fig. 2.

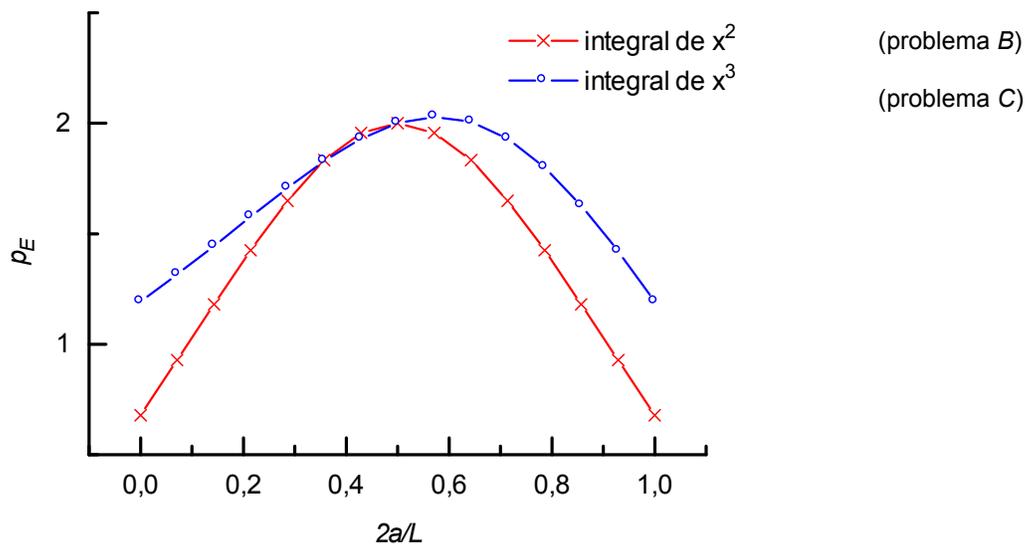


Figura 7 – Ordem efetiva (p_E) dos problemas B e C para as malhas da Fig. 2.

3.2 Malha grossa não-uniforme

Como a malha grossa da Fig. 2 é uma malha uniforme, a etapa seguinte dos testes se concentrou no refino representado na Fig. 8. A malha grossa é não-uniforme e sofre refino uniforme e não-uniforme, conforme os valores de c , a e b .

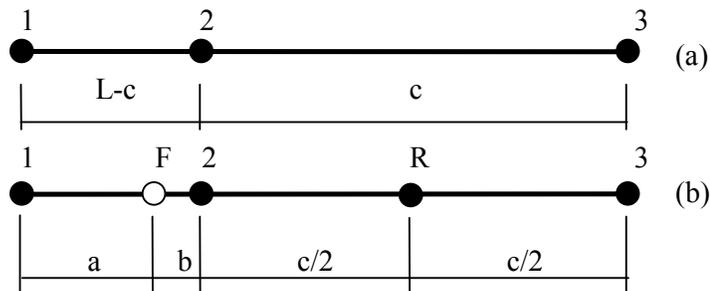


Figura 8 – a) malha grossa não-uniforme (h_g); b) malha fina não-uniforme (h_f).

A Figura 9 apresenta os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) nos três problemas estudados, com $c = 3L/4$. Para finalizar os testes, através da Eq. (13), extraiu-se para cada problema qual seria o valor correto da razão de refino (q) que resultaria no valor da ordem assintótica (p_L). A Fig. 10 apresenta estes resultados. Verificou-se que para cada problema em particular existe uma curva distinta para o valor de (q) e, portanto, não existe uma regra única para o seu cálculo. Porém, no caso do refino ser uniforme, isto é, $a = (L-c)/2$, todas as curvas passam pelo ponto onde $q = 2$.

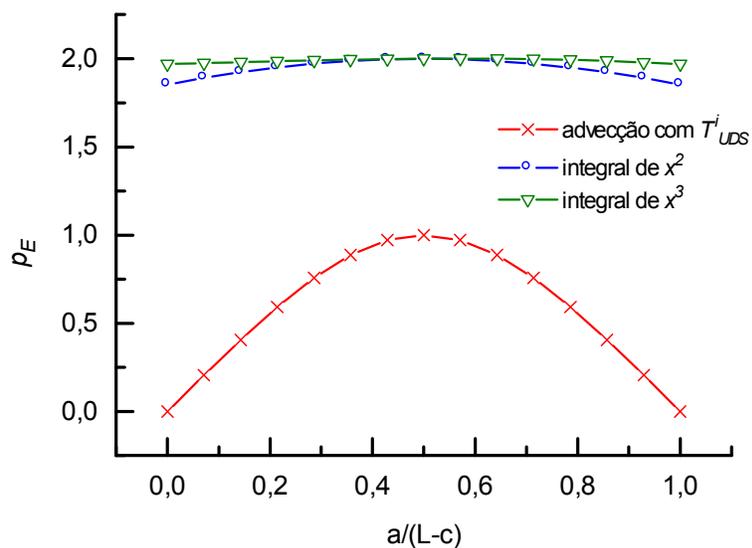


Figura 9 – Ordem efetiva (p_E) dos problemas A , B e C para as malhas da Fig. 8 e $c = 3L/4$.

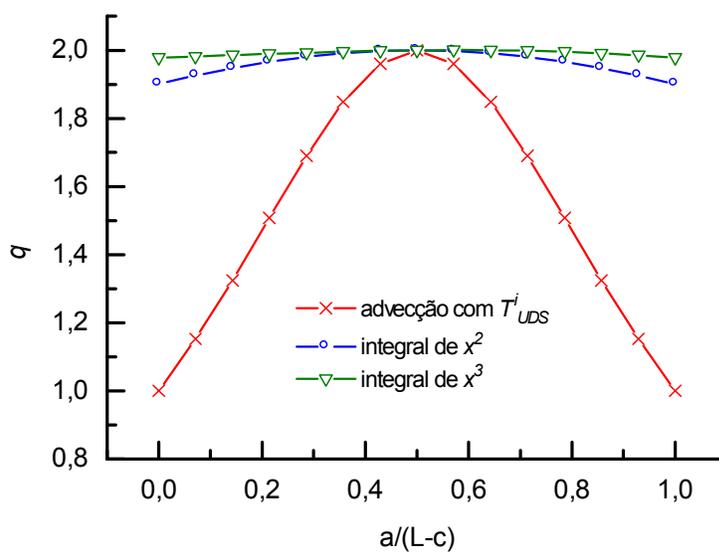


Figura 10 – Valor da razão de refino (q) que reproduz a ordem assintótica (p_L), para as malhas da Fig. 8 e $c = 3L/4$.

4. CONCLUSÃO

Para a definição usual de razão de refino empregada com malhas irregulares, Eq. (7), mostrou-se que:

- 1) Ela é incorreta até mesmo para a malha irregular mais simples, que é a unidimensional não-uniforme.
- 2) Ela é correta quando uma malha não-uniforme é refinada de modo uniforme, ou seja, quando cada elemento da malha grossa é dividido em um número inteiro de segmentos de igual tamanho para gerar a malha fina, sendo este número constante ao longo da malha e igual à própria razão de refino (q).

Com base nos resultados deste trabalho, especula-se que os dois pontos acima também se aplicam ao refino de malhas irregulares multidimensionais (não-ortogonais, não-estruturadas e não-uniformes).

Quando o objetivo é calcular ordens efetiva e aparente, e estimar o valor do erro de discretização, recomenda-se realizar refino uniforme de malhas irregulares. Neste caso, a métrica adequada para fazer gráficos de erro *versus* h , ou ordem *versus* h , pode ser o menor ou o maior tamanho (h) dos elementos de cada malha.

REFERÊNCIAS

- Celik, I. B., 2004. Procedure for estimation and reporting of discretization error in CFD applications. *ASME Journal of Fluids Engineering*. Disponível em: <www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumAccuracy.pdf>. Acesso em 1 June 2004.
- De Vahl Davis, G., 1983. Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 3, pp. 249-264.
- Ferziger, J. H., & Peric, M., 2001. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3. ed. Springer.
- Kreyszig, E., 1999. *Advanced Engineering Mathematics*. 8th ed. Wiley.
- Marchi, C. H., 2001. *Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos*. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis.
- 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.
- Roache, P. J., 1994. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. *Journal of Fluids Engineering*, vol. 116, pp. 405-413.
- Roache, P. J., 1998. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. Hermosa.
- 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. Taylor & Francis.

E2. SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. On the grid refinement ratio for one-dimensional advective problems with nonuniform grids. 18th COBEM, CD-ROM, Ouro Preto, 2005.

ON THE GRID REFINEMENT RATIO FOR ONE-DIMENSIONAL ADVECTIVE PROBLEMS WITH NONUNIFORM GRIDS

Fábio Alencar Schneider

Curso de Engenharia Mecânica, Centro Universitário Positivo
R. Prof. Pedro Viriato Parigot de Souza, 5300, 81280-310, Curitiba - PR – Brasil
Departamento Acadêmico de Mecânica, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná
R. Sete de Setembro, 3165, 81280-330, Curitiba – PR - Brasil
schneider@unicenp.br, fabioas@cefetpr.br

Carlos Henrique Marchi

Departamento de Engenharia Mecânica,
Universidade Federal do Paraná,
Caixa postal 19040, CEP 81531-980, Curitiba – PR
marchi@demec.ufpr.br

Abstract. *The purpose of this work is to analyse the usual definition of grid refinement ratio used with irregular grids (unstructured, nonuniform and nonorthogonal), as well as to define its applicability. The main reasons for this subject are as follows: the grid refinement ratio is a parameter that directly affect the estimated discretization error made by several estimators; and irregular grids are largely used to obtain numerical solutions. The mathematical model used in this work is the one-dimensional advection of a scalar with source term. This model has known analytical solution, which is compared to numerical solution obtained through the finite difference method. It was verified that the usual definition of grid refinement ratio used with irregular grids is incorrect, even for the simplest irregular grid, i.e. one-dimensional and nonuniform grid. But it is correct if a nonuniform grid is refined of a uniform way.*

Keywords: *numerical error, CFD, finite difference scheme, numerical simulation*

1. Introduction

The true numerical error (E) of a variable of interest is the difference between its exact analytical solution (Φ) and its numerical solution (ϕ). Then, an ideal numerical solution is the exact analytical solution of the problem, i.e., that in which the numerical error is void. The true numerical error value does not depend of experimental results, but is only obtained when the analytical solution of the mathematical model is known, i.e., (Ferziger e Peric, 2001)

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

In the unknown analytical solution cases, instead of the true numerical error, an estimated numerical error (U) is made, which is evaluated through the difference between the estimated analytical solution (ϕ_∞) and the numerical solution (ϕ), i.e.,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (2)$$

It is considered that the numerical error is caused by four errors sources (Marchi and Silva, 2002): Truncation error, Iteration error, Round-off error and Programming error. The truncation errors arises from the numeric approximations used in the discretization of a mathematical model (Tannehill et al., 1997; Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998); the iteration error is the difference between the exact solution of the discretized equations and numerical solutions in a given iteration (Ferziger e Peric, 2001); the round-off errors are due mainly to a finite number of digits in arithmetic computations; and the programming errors includes the errors caused by persons while implementing and using a computational program. This work considers only truncation errors over the numerical solution. In this circumstance, the numerical error calculated through Eq. (1) is called discretization error (Ferziger e Peric, 2001). Other errors are negligible.

A way to evaluate the discretization error of a numerical solution is through the Richardson estimator, which can found in many references (Ferziger and Peric, 2001; Roache, 1998)

$$U_{Ri}(\phi_f) = \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^p - 1)} \quad (3)$$

in which ϕ_f and ϕ_g are numerical solutions obtained by two grids with different number of elements, and each one of these grids can be represented through its elements size (h), i.e., $h_f =$ fine grid e $h_g =$ coarse grid; p is the asymptotic

order (p_L) of the discretization error (Roache, 1994) or the apparent order (p_U); and q is the refinement ratio between two grids.

The usual definition of refinement ratio used with irregular grids (nonuniform, nonorthogonal and unstructured) is given by (Roache, 1994; Celik, 2005)

$$q = \left(\frac{N_f}{N_g} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (4)$$

in which N_f and N_g represent, respectively, the number of elements of fine and coarse grids, and D is the spatial dimension of the problem, being equal to 1, 2 or 3, respectively for one, two and three-dimensional cases. In one-dimensional uniform grids the above equation is reduced to

$$q = \frac{N_f}{N_g} \quad (5)$$

The q value can suffer variation as locally between coarse and fine grids, as well as between three grids, as follows (Roache, 1998): the coarse grid related to the fine grid gives a refine value q , and the supercoarse grid related to the coarse grid a refine value q' . Being q constant between three grids, i.e. $q=q'$, the apparent order (p_U) gives (De Vahl Davis, 1983)

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_g - \phi_{sg}}{\phi_f - \phi_g}\right)}{\log(q)} \quad (6)$$

in which ϕ_{sg} is the numerical solution obtained in the supercoarse grid (h_{sg}). This work considers q value as constant between grids. Another way to obtain the estimated discretization error of the numerical solution is through the GCI (Grid Convergence Index) estimator (Roache, 1994).

This aim of this work is to show that: (i) the usual definition of the refinement ratio used with irregular grids, Eq. (4), is correct only in the limit case of uniform grids; (ii) it is incorrect even for the simplest irregular grid, i.e. one-dimensional nonuniform grid; (iii) and if there is a mixed kind of grid between the uniform grid and the irregular grid in which Eq. (4) is valid.

This work validity is as follows: (i) the grid refinement ratio is a parameter that affects directly the estimated discretization error made by the Richardson estimator, Eq. (3); (ii) this estimator is recommended (Celik, 2005) by the Fluids Engineering Division of the ASME (American Society of Mechanical Engineers); and (iii) irregular grids are largely used to obtain numerical solutions.

2. Method

2.1. Numerical approximations

The Finite Difference Method (MDF) is the numerical method used in this work (Tannehill et al., 1997). Its principle is to approximate at each grid node, through the Taylor series (Kreyszig, 1999) each term of a mathematical model describing a problem, in each grid node. For example, a numerical approximation (T_{UDS}^i) $_j$ in the grid node j , Fig. 1, to a first-order derivative by one-point upstream is given by

$$(T_{UDS}^i)_j = \frac{(T_j - T_{j-1})}{h_j} \quad (7)$$

The truncation error (ε) of this approximation is

$$\varepsilon(T_{UDS}^i)_j = T_j^{ii} \frac{h_j}{2} - T_j^{iii} \frac{h_j^2}{6} + T_j^{iv} \frac{h_j^3}{24} - \dots \quad (8)$$

where the superscripts are indicating, respectively, derivatives of 2nd, 3rd e 4th orders of T in the node j ; h_j is the distance between two consecutive grid nodes; and the three points indicate an infinite series.

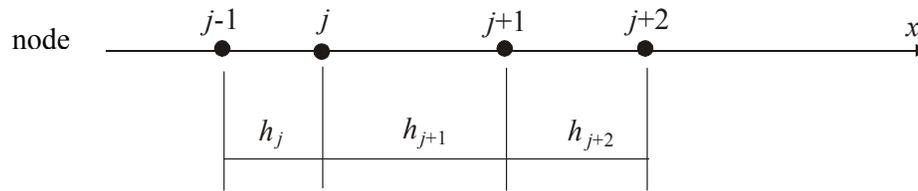


Figure 1. A nonuniform and one-dimensional grid.

It is necessary to see that, having an analytical solution for the mathematical model, it is possible to know previously which is the number of terms appearing in the Eq. (8), that leads to a direct analysis of the discretization error order.

2.2. True, asymptotic and effective order

By comparison of the truncations error expression, Eq. (8), it is accepted that the discretization error $E(\phi)$ is given by (Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998)

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots \quad (9)$$

in which ϕ is the variable of interest; h is the grid spacing sizes; C_1, C_2, C_3, \dots are coefficients that do not change with h ; p_L, p_2, p_3, \dots are the integer and positive numbers representing the true orders of the discretization error; and p_L is the asymptotic order of the discretization error. p_L is always ≥ 1 and shows the error curve inclination in a $\log(|E|)$ versus $\log(h)$ graph to $h \rightarrow 0$.

The effective order of the true error is given by (Marchi, 2001)

$$p_E = \frac{\log \left[\frac{E(\phi_g)}{E(\phi_f)} \right]}{\log(q)} \quad (10)$$

According to Eq. (10), the effective order (p_E) is a true error function of the variable of interest as well as of the refinement ratio (q) between the grids. For problems with known analytical solution, it can be used to verify if $p_E \rightarrow p_L$ while $h \rightarrow 0$, given validity to the used numerical approximations.

2.3 Definition of problems

The mathematical models used in this work are one-dimensional advection problems of a scalar with different source terms, shown by the following equations

$$\frac{dT^A}{dx} = 2x \quad (11)$$

$$\frac{dT^B}{dx} = \frac{e^x}{e-1} \quad (12)$$

In Eqs. (11) and (12), the superscripts represent the problems A and B ; T is the dependent variable; and x is the independent variable. The boundary condition in the problems is $T(0) = 0$ and the problem domain length is $L = 1$.

The exact analytical solutions of problems A and B are

$$T^A = x^2 \quad (13)$$

$$T^B = \frac{e^x - 1}{e - 1} \tag{14}$$

2.4 Discretization of mathematical models

Applying Eq. (7) to problems *A* and *B*, Eqs. (11) and (12), one obtains

$$T_j^A = 2x_j h_j + T_{j-1}^A \tag{15}$$

$$T_j^B = \frac{e^{x_j} h_j}{e - 1} + T_{j-1}^B \tag{16}$$

These problems were chosen because, by the literature, there are no doubt that the asymptotic order (p_L) for them is $p_L = 1$, being them grids uniform or nonuniform, beyond representing examples of local variable.

To the A problem, with its analytical solution, Eq. (13), and the truncation error (ε) of the numerical approximation (T_{UDS}^i), Eq. (8), the following equation can be obtained for the discretization error, Eq. (9):

$$E(T^A)_j = (C_1)_j h_j \tag{17}$$

That is, the discretization error equation has only one term for the problem *A*. In the problem *B*, the discretization error equation has infinite terms of errors. Consequently: (i) for the problem *A*, $p_E = 1$ in any h ; (ii) for the problem *B*, $p_E \rightarrow 1$ when $h \rightarrow 0$.

3. Results

The results showed in this section were obtained for the mathematical model given by Eqs. (13) and (14), using: (i) uniform coarse grid and uniform and nonuniform fine grid; (ii) nonuniform coarse grid and nonuniform fine grid. With these results it is possible to analyze which kind of refine (uniform or nonuniform) reproduces the theoretical asymptotic order of the numerical approximation, given by Eqs. (17).

3.1 Uniform coarse grid

Firstly, the results were obtained with a uniform grid, as seen in Fig. 2. To understand the effect of grid refinement in the discretization error order, the coordinate of point 2 was kept fixed in the coarse grid (h_g) and in the fine grid (h_f), having been made a variation only in position of floating point (*F*) of the fine grid, between $a = 0$ and $a = L/2$. Then, when $a = L/4$, the refine of the grid is uniform; on the contrary the refine is called nonuniform. As the exact analytical solution is also known to each case, Eq.(10) was used to calculate the effective order (p_E) at point 2. Equation (5) was used to calculate the refinement ratio (q).

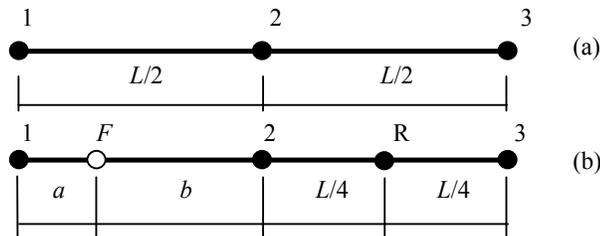


Figure 2. a) uniform coarse grid (h_g); b) nonuniform fine grid (h_f).

Figures 3 and 4 show the results of T and p_E for problem *A* at point 2. Here, the effective order (p_E) is equal to asymptotic order (p_L) only when $a = L/4$, i.e., when the refinement is uniform. It can be seen that as the numerical solution approaches the analytical solution, greater is the value of effective order (p_E). In Fig. 4, for $2a/L=0.5$ the effective order value at points 2 and 3 is $p_E = 1$.

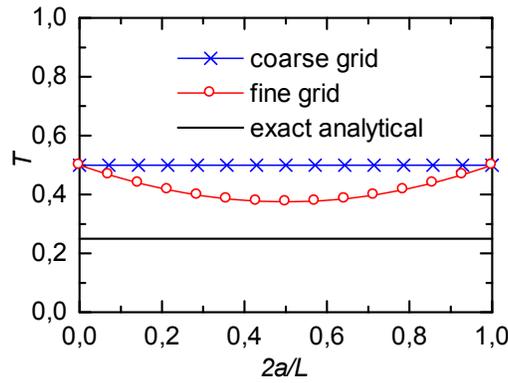


Figure 3. Solutions (T) for problem A at point 2 with grids of Fig. 2.

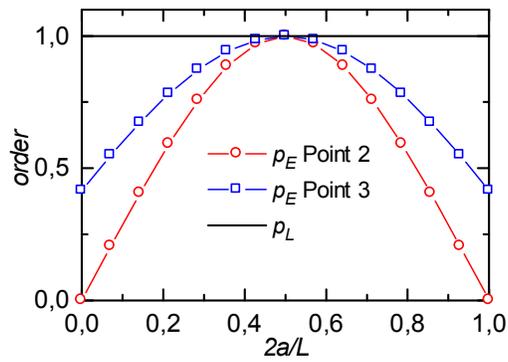


Figure 4. Effective order (p_E) for problem A with grids of Fig. 2.

3.2 Nonuniform coarse grid

As coarse grid of Fig. 2 is uniform, the next step of the tests was concentrated in the refinement shown in Fig. 5. The coarse grid is nonuniform and suffers a uniform and nonuniform refinement, according to the values of c , a and b .

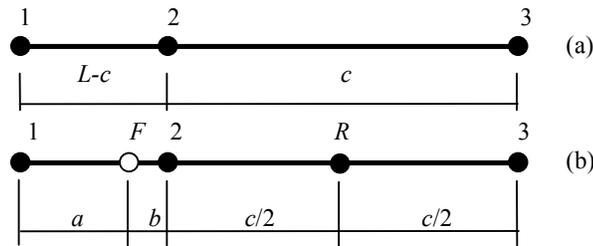


Figure 5. a) nonuniform coarse grid (h_g); b) nonuniform fine grid (h_f).

Figure 6 shows the results obtained for the effective order (p_E) for problem A , with $c = 3L/4$. Here, for $a/(L-c) = 0.5$ the effective order at points 2 and 3 is $p_E = 1$.

From Eq. (10), it was obtained for each problem what should be the correct value of the refinement ratio (q) that would result in the value of asymptotic order (p_L). Figure 7 shows these results. It was seen that there is a different curve to the value of q specific to this problem, and then, there is not a unique rule for its calculation. But in case of refine to be uniform, i.e., $a = (L-c)/2$, the curve pass through the point where $q = 2$.

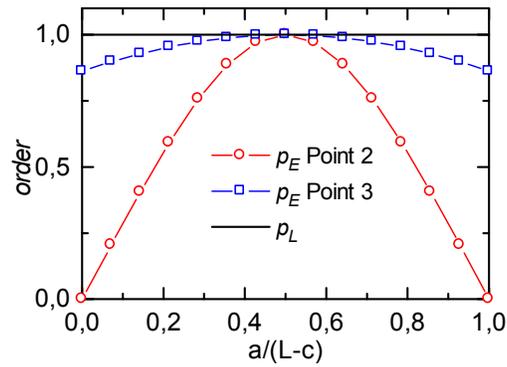


Figure 6. Effective order (p_E) for problem A for grids of Fig. 5 with $c = 3L/4$.

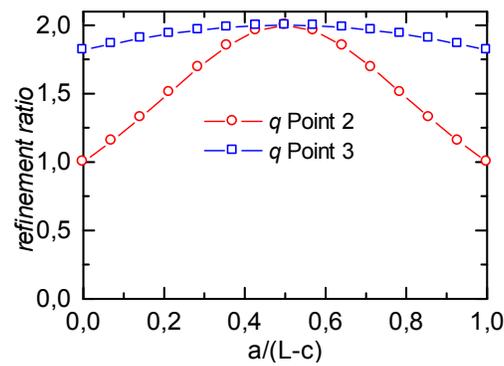


Figure 7. Refinement ratio (q) that reproduce asymptotic order (p_L) for grids of Fig. 5 with $c = 3L/4$.

3.3 Grid with $h \rightarrow 0$

To finish the tests, problem B was solved, whose discretization error equation, Eq.(9), has infinite terms. In this problem, the effective order (p_E) tends to asymptotical order ($p_L = 1$) when $h \rightarrow 0$. The grid used here is shown in Fig. 8, and differs from grid of Fig. 5 only in the number of nodes, these being greater here.

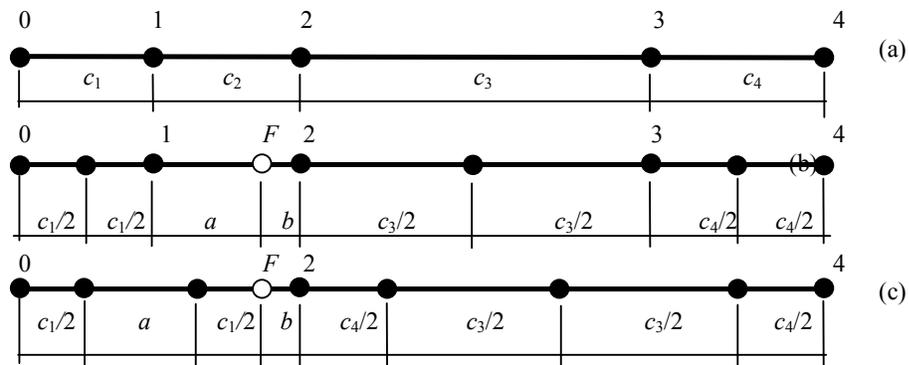


Figure 8. Grids (a) nonuniform coarse (h_g); (b) nonuniform fine (h_f); (c) shuffle nonuniform fine (h_{fe}).

Figures 9 and 10 show the results obtained. Three pairs of grids of kind (a) and (b) according to Fig. 8 were used: (1) grids with 4 and 8 elements; (2) grids with 8 and 16 elements; and (3) grids with 16 and 32 elements. The floating point F is always the point at left of point 2 and the distance between them is (b). Point at left of F is at a distance (a).

Note that when $h \rightarrow 0$, $p_E \rightarrow p_L = 1$ for any value of $a/(a+b)$. In Fig. 10, to $a/(a+b) = 0.5$, the effective order at point 2 is: $p_E = 1.01523$ for grids with 4 and 8 elements; $p_E = 1.00768$ for grids with 8 and 16 elements; and $p_E = 1.00385$ for grids with 16 and 32 elements.

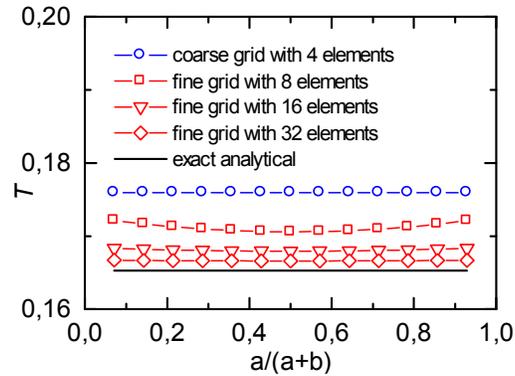


Figure 9. Solutions (T) for problem B at point 2 for three grid pairs of type shown in Fig. 8a and 8b.

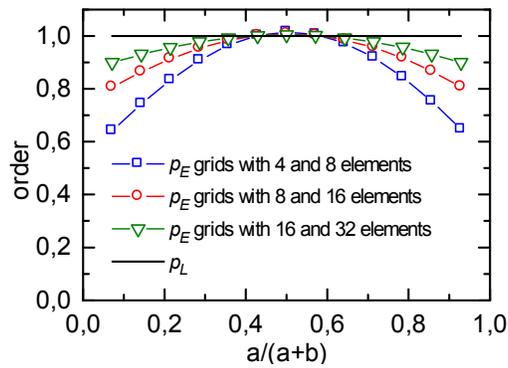


Figure 10. Effective order (p_E) for problem B at point 2 for three grid pairs of type shown in Fig. 8a and 8b.

It was also seen that when $h \rightarrow 0$ for fine grid shown in Fig. 8b, it is possible to change freely the position of grid elements, to the left as well to the right from point 2, as shown in Fig. 8c, without any alteration in curve $p_E \rightarrow p_L = 1$. The results are shown in Fig. 11, at points 2 and 3, obtained for grids with 4, 8, 16, 32, ..., 8192 and 16384 elements, using the refine of type shown in Fig. 8c.

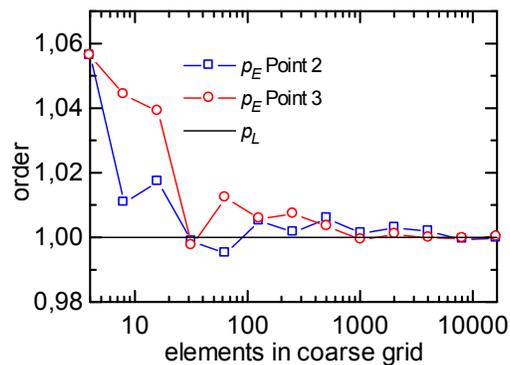


Figure 11. Effective order (p_E) for problem B with thirteen grid pairs of type shown in Fig. 8a and 8c.

From Fig. 10 and 11 it could be seen that when $h \rightarrow 0$, there is no matter the order in which fine grid elements are arranged. It is important only if they were obtained through uniform refinement. In Fig. 11, for the grid with 16384 elements, the value of the effective order at point 2 is $p_E = 0.99964$, and at point 3 is $p_E = 1.00009$. And also it is easy to verify that, in any case, for the greater value of h at coarse and fine grids, or for minor value of h at coarse and fine grids, the ratio h_g/h_f is equal to two.

4. Conclusion

To the usual definition of refinement ratio used with irregular grids, Eq. (4), it was showed that:

- 1) It is incorrect even for the simplest irregular grid, i.e., one-dimensional and nonuniform grid;
- 2) It is correct when a nonuniform grid is refined in a uniform way, i.e., when each element of the coarse grid is divided in an integer number of segments with equal size to produce the fine grid, being this number constant along the grid and equal to the refinement ratio (q) itself.

According to results of this work, it is believed that the two points above can also be to the refinement of multidimensional irregular grids (nonorthogonal, unstructured and nonuniform).

When the goal is to calculate effective and apparent orders, and to estimate the value of discretization error, it is recommended to proceed with uniform refine of irregular grids. In this case, for graphs of error versus h , or order versus h , the suitable metric can be the minor or the greatest size (h) of elements of each grid.

5. References

- Celik, I. B., 2005, "Procedure for estimation and reporting of discretization error in CFD applications", ASME Journal of Fluids Engineering, <http://www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumAccuracy.pdf>.
- De Vahl Davis, G., 1983, "Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution", International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 3, pp. 249-264.
- Ferziger, J. H., & Peric, M., 2001, "Computational Methods for Fluid Dynamics", 3. ed. Springer.
- Kreyszig, E., 1999, "Advanced Engineering Mathematics", 8th ed. Wiley.
- Marchi, C. H., 2001, "Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis.
- 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.
- Roache, P. J., 1994, "Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies", Journal of Fluids Engineering, Vol. 116, pp. 405-413.
- Roache, P. J., 1998, "Verification and Validation in Computational Science and Engineering", Hermosa.
- Tannehill, J. C., Anderson, D. A., & Pletcher, R. H., 1997, "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer", 2. ed. Taylor & Francis.

E3. SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. Efeito do tipo de refino de malhas não-uniformes de volumes finitos sobre a ordem efetiva do erro de discretização. XXVII CILAMCE, CD-ROM, Belém, 2006.



Proceedings of the XXVII Iberian Latin American Congress on
Computational Methods in Engineering
September 3 to 6, 2006 - Belém, Pará - BRAZIL.

EFEITO DO TIPO DE REFINO DE MALHAS NÃO-UNIFORMES DE VOLUMES FINITOS SOBRE A ORDEM EFETIVA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Fábio Alencar Schneider

schneider@unicenp.edu.br

Curso de Engenharia Mecânica, Centro Universitário Positivo (UNICENP)
Curitiba, PR, Brasil

Carlos Henrique Marchi

marchi@demec.ufpr.br

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

Resumo. Atualmente, para os métodos de diferenças finitas e volumes finitos, o principal estimador do erro de discretização é o GCI, que se baseia na extrapolação de Richardson. Para cada variável de interesse, este estimador usa soluções numéricas obtidas em duas ou mais malhas. Um parâmetro importante deste estimador é a ordem do erro de discretização, que em malhas não-uniformes é afetada pelo tipo de refino de malha adotado. No método dos volumes finitos, um volume de controle pode ser construído de duas formas: com os nós centrados entre as faces do volume (VNC – volume de nó centrado) ou com as faces centradas entre os nós (VFC – volume de face centrada). O objetivo deste trabalho é analisar, a partir de malhas com VNC e VFC, que tipos de refino de malhas podem ser realizados, como estes refinamentos devem ser feitos, e qual a relação entre o tipo de refino escolhido e a ordem do erro de discretização. Para cinco tipos de refino de malha, verifica-se se a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização converge para a ordem assintótica (p_L) das aproximações numéricas usadas na discretização do modelo matemático. O modelo matemático usado é a advecção-difusão unidimensional de um escalar, resolvido através do método dos volumes finitos com malhas uniformes e não-uniformes, e esquemas de 1ª e 2ª ordens de acurácia. Concluiu-se que as estimativas do erro de discretização devem ser feitas com malhas refinadas uniforme e sucessivamente a partir de uma malha base, usando-se três tipos de refino definidos no trabalho.

Palavras-chave: Ordem efetiva, extrapolação de Richardson, GCI, erro numérico, CFD.

1. INTRODUÇÃO

Algumas fontes da literatura afirmam que quando se empregam malhas não-uniformes com o esquema de diferença central, a ordem do erro de truncamento degenera do valor dois para a unidade (Ferziger e Peric, 2001). Isso difere do que se observa através de experimentos numéricos, nos quais a ordem permanece igual a dois, como mostram outros trabalhos da literatura (Tannehill et. al., 1997). No presente trabalho, mostra-se que a diferença entre a análise teórica e a verificação prática está ligada à definição da razão de refino (q) de malha (Schneider e Marchi, 2004). O valor de q afeta diretamente a estimativa do erro de discretização feita pelos estimadores baseados na extrapolação de Richardson, que envolve mais de uma malha.

Para compreender como a razão de refino de malha afeta a estimativa do erro de discretização, é necessário entender o que é o erro numérico e como são empregados os estimadores de erro, como por exemplo o estimador de Richardson, GCI (Roache, 1998) e outros. Para uma variável de interesse, o erro numérico verdadeiro (E) é a diferença entre a sua solução analítica exata (Φ) e a sua solução numérica (ϕ). O valor do erro numérico verdadeiro independe de experimentos e só pode ser obtido quando a solução analítica do modelo matemático é conhecida, isto é, (Marchi e Silva, 2002)

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

Quando a solução analítica é desconhecida, pode-se obter o erro numérico estimado (U), que é avaliado pela diferença entre a solução analítica estimada (ϕ_∞) e a solução numérica (ϕ), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (2)$$

Segundo Marchi e Silva (2002), o erro numérico é causado por quatro fontes de erro: truncamento, iteração, arredondamento e programação. A primeira fonte origina-se das aproximações numéricas empregadas na discretização de um modelo matemático (Tannehill et al., 1997; Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998). A segunda é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração (Ferziger e Peric, 2001). A terceira ocorre principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações. E a quarta inclui os erros causados por pessoas na implementação e no uso de um programa computacional. Este trabalho considera apenas os efeitos do erro de truncamento sobre as soluções numéricas. Nesse caso, o erro numérico calculado através da Eq. (1) passa a ser denominado de “erro de discretização” (Ferziger e Peric, 2001). Considera-se no presente trabalho que as outras fontes de erro são inexistentes ou muito pequenas em relação ao erro de truncamento.

Para se obter uma estimativa do erro de discretização, pode-se empregar o estimador de Richardson (Roache, 1994; Marchi e Silva, 2002)

$$U_{Ri}(\phi_f) = \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^p - 1)} \quad (3)$$

onde ϕ_f e ϕ_g são soluções numéricas obtidas em duas malhas com número diferente de volumes de controle, e cada uma destas malhas pode ser representada pelo tamanho dos seus volumes (h), isto é, h_f = malha fina e h_g = malha grossa; p representa a ordem assintótica ou formal (p_L) do erro de discretização (Roache, 1994); e q é a razão de refino entre as duas

malhas. Outra forma de estimar o erro de discretização de soluções numéricas é através do estimador GCI (Grid Convergence Index) (Roache, 1994).

A Eq. (3) mostra que a estimativa do erro de discretização depende da razão de refino de malha, que é definida usualmente em malhas irregulares (não-uniformes, não-ortogonais e não-estruturadas) como (Roache, 1994; Celik, 2004)

$$q = \left(\frac{N_f}{N_g} \right)^{1/D} \quad (4)$$

onde N_f e N_g representam, respectivamente, o número de volumes de controle das malhas fina e grossa, e D é a dimensão espacial do problema. No caso de malhas unidimensionais a equação acima se reduz a

$$q = \frac{N_f}{N_g} \quad (5)$$

Para um experimento numérico de solução analítica conhecida, pode-se obter (Marchi e Silva, 2000)

$$p_E = \frac{\log\left(\frac{\Phi - \phi_g}{\Phi - \phi_f}\right)}{\log(q)} \quad (6)$$

onde p_E é a ordem efetiva do erro de discretização, que pode comprovar experimentalmente a ordem assintótica ou formal (p_L). Ou seja, quando $h \rightarrow 0$, espera-se que $p_E \rightarrow p_L$, caso a análise seja correta.

No método dos volumes finitos, um volume de controle unidimensional pode ser construído de duas formas (Patankar, 1980): com os nós centrados entre as faces do volume (VNC – volume de nó centrado) ou com as faces centradas entre os nós (VFC – volume de face centrada). A Fig. 1 ilustra as malhas do tipo uniforme e não-uniforme com VNC e VFC que são empregadas no presente trabalho.

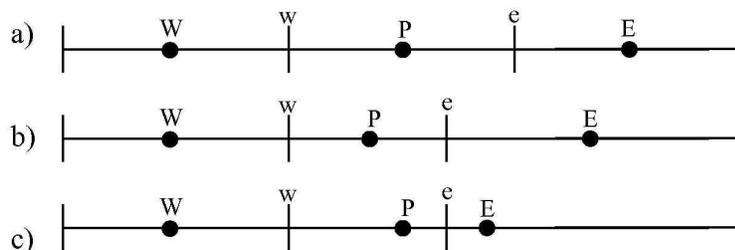


Figura 1- Volumes de controle unidimensionais: (a) uniformes, (b) não-uniformes de nó centrado, e (c) não-uniformes de face centrada.

No caso da malha não-uniforme, o primeiro caso (VNC), Fig. 1b, parece ser mais natural, pois, é mais fácil admitir que no centro do volume esteja armazenado o valor da variável de interesse, seja por uma questão de simetria ou simplesmente porque este valor deve ser representativo para todo o volume. Quando observamos as posições das faces, o segundo caso

(VFC), Fig. 1c, pode ser mais atraente do ponto de vista numérico, pois, as faces sempre estão no ponto médio do segmento que une dois nós vizinhos, o que facilita a aplicação de algumas aproximações numéricas. O objetivo principal deste trabalho é entender como o refino destas malhas afeta a ordem do erro de discretização e verificar quais são os tipos de refino adequados para estimar corretamente o erro numérico.

Este trabalho apresenta na seção 2 a metodologia empregada na obtenção das soluções numéricas, seguida dos tipos de refino de malha analisados. Na seção 3 são apresentados e discutidos os resultados. Na seção 4 apresenta-se a conclusão.

2. METODOLOGIA

O método numérico empregado neste trabalho é o método dos volumes finitos (*MVF*) (Ferziger e Peric, 2001). Nesta seção é apresentada a equação governante do problema, as aproximações numéricas empregadas, a obtenção das equações aproximadas e os tipos de refino de malha que são aplicados às malhas da Fig. 1. As soluções numéricas (ϕ) obtidas nas malhas grossa (h_g) e refinada (h_f) são usadas na Eq. (6) para o cálculo da ordem efetiva (p_E) e comprovação da ordem teórica das aproximações numéricas usadas.

2.1 Modelo matemático

A equação governante do problema advectivo/difusivo unidimensional de um escalar (ϕ) é

$$Pe \frac{d\phi}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2} \quad (7)$$

onde Pe é o número de Peclet (Patankar, 1980) e x é a coordenada espacial. O domínio de cálculo é unitário e as condições de contorno do problema são do tipo de Dirichlet, isto é, ϕ prescrito nos contornos: $\phi(0) = 0$ e $\phi(1) = 1$. A solução analítica do problema é dada por (Ferziger e Peric, 2001)

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

2.2 Modelo numérico

O princípio do método dos volumes finitos (*MVF*) (Ferziger e Peric, 2001) é integrar a equação governante sobre cada volume de controle e aproximar os termos resultantes da integração através de funções de interpolação. Assim, integrando-se a Eq. (7) sobre o volume de controle P da Fig. 1 e usando-se o teorema da divergência de Gauss (Kreyszig, 1999), obtém-se

$$Pe(\phi_e - \phi_w) = (\phi_e^i - \phi_w^i) \quad (9)$$

onde ϕ_e e ϕ_w representam a incógnita ϕ avaliada nas faces leste (e) e oeste (w) do volume de controle P da Fig. 1, e ϕ_e^i e ϕ_w^i , a derivada de primeira ordem de ϕ nas faces leste e oeste. Para

se obter a equação aproximada de ϕ em cada volume de controle, é necessário introduzir na Eq. (9) aproximações de ϕ e de sua derivada primeira (ϕ^i) nas faces do volume de controle.

2.3 Previsão da ordem assintótica (p_L)

Usando-se a série de Taylor, a aproximação numérica com esquema de diferença central (CDS), para a derivada de primeira ordem ϕ^i na face (e) da malha não-uniforme, Fig. 1, é dada por (Marchi e Silva, 2000)

$$\left(\phi_{CDS}^i\right)_e = \frac{(\phi_E - \phi_P)}{(x_e - x_P) + (x_E - x_e)} = \frac{(\phi_E - \phi_P)}{h_{Pe} + h_{eE}} = \frac{(\phi_E - \phi_P)}{h_{PE}} \quad (10)$$

onde h é a distância entre nós ou a distância entre face e nó, conforme os subíndices. Pode-se definir uma relação entre h_{Pe} e h_{PE} da seguinte forma

$$F_e = \frac{(x_e - x_P)}{(x_E - x_P)} = \frac{h_{Pe}}{h_{PE}} \quad (11)$$

Assim, o erro de truncamento (ε) desta aproximação é (Marchi e Silva, 2000)

$$\varepsilon\left(\phi_{CDS}^i\right)_e = \phi_e^{ii} (2F_e - 1) \frac{h_{PE}^2}{2} - \phi_e^{iii} \left[F_e^3 + (1 - F_e)^3\right] \frac{h_{PE}^3}{6} + \dots \quad (12)$$

Observando-se a Eq. (12), pode-se perceber que em uma malha uniforme ou não-uniforme com $F_e = 1/2$, ou seja, quando o volume é de face centrada (*VFC*), a ordem assintótica da aproximação dada pela Eq. (10) é dois. E quando $F_e \neq 1/2$, correspondendo a volume de nó centrado (*VNC*), a ordem da aproximação é unitária.

Da mesma forma, usando-se a série de Taylor, a aproximação para o valor de ϕ na face (e) da malha não-uniforme, Fig. 1, é dada por (Marchi e Silva, 2000)

$$\left(\phi_{CDS}\right)_e = (1 - F_e)\phi_P + F_e\phi_E \quad (13)$$

e o seu erro de truncamento (ε) é (Marchi e Silva, 2000)

$$\varepsilon\left(\phi_{CDS}\right)_e = -\phi_e^{ii} F_e (1 - F_e) \frac{h_{PE}^2}{2} + \phi_e^{iii} F_e (1 - F_e) (2F_e - 1) \frac{h_{PE}^3}{6} - \dots \quad (14)$$

Da Eq. (14), pode-se perceber que para qualquer valor de $F_e \neq 0$, a ordem da aproximação dada pela Eq. (13) é dois. Isto é, tanto para o volume de face centrada (*VFC*) como para o volume de nó centrado (*VNC*) a aproximação será de segunda ordem, seja a malha uniforme ou não-uniforme.

A aproximação do valor de ϕ na face (e) com um ponto à montante (UDS) resulta em

$$\left(\phi_{UDS}\right)_e = \phi_P \quad (15)$$

cujo erro de truncamento (ε) é

$$\varepsilon(\phi_{UDS})_e = \phi_e^i h_{Pe} - \phi_e^{ii} \frac{h_{Pe}^2}{2} + \dots \quad (16)$$

Através da Eq. (16), pode-se perceber que para qualquer tipo de malha a aproximação é de primeira ordem. Assim, para a aproximação ϕ_{UDS} não há dúvidas que ela sempre apresenta ordem unitária para qualquer tipo de malha: uniforme ou não-uniforme.

2.4 Tipos de refino de malhas não-uniformes

Esta seção apresenta cinco tipos de refino de malha que são empregados neste trabalho para obter as soluções numéricas e calcular a ordem efetiva. Em todos os casos a razão de refino é sempre a mesma, ou seja, tem valor (q). Cada refino é acompanhado de uma figura que apresenta em detalhes como estes refinamentos são feitos para uma malha não-uniforme, com razão de refino igual a dois e três.

Refino uniforme (RU). Este refino consiste em dividir o volume de controle em q volumes de igual tamanho independentemente da posição que se encontra o nó do volume. A razão de refino de malha (q) é dada pela Eq. (5), onde N_f é o número de volumes da malha fina e N_g é o número de volumes da malha grossa, conforme a Fig. 2.

Refino semi-uniforme (RSU). Este refino consiste em dividir a primeira e a segunda metade do volume de controle, em q partes, sendo a primeira metade a distância da face esquerda até o nó e a segunda metade a distância do nó até a face direita. A razão de refino continua sendo dada pela Eq. (5), conforme a Fig. 3.

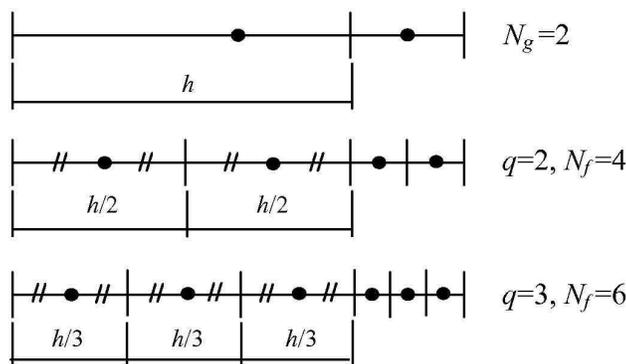


Figura 2 – Refinos uniformes (RU).

Refino entre centros (RC). Este refino consiste em dividir as distâncias entre os nós dos volumes em q partes iguais de modo que surgirão $q-1$ novos volumes entre dois nós consecutivos, conforme a Fig. 4. Este tipo de refino divide as distâncias usadas nas aproximações numéricas por q e assemelha-se ao refino de malha uniforme usado no método de diferenças finitas (Tannehill et al., 1997). Neste caso a razão de refino é dada por

$$q = \frac{N_f + 1}{N_g + 1} \quad (17)$$

Quando $h \rightarrow 0$, o valor de q dado pela Eq. (17) tende ao valor de q dado pela Eq. (5).

Refino entre centros com F_e constante (RCF). Este refino é semelhante ao anterior, porém, para as faces dos volumes da malha fina, é mantida a relação F_e definida na malha

grossa por a/b . Assim, se mantém na malha grossa e fina a relação $F_e = a/b = c/d = e/f$, conforme a Fig. 5. Neste caso a razão de refino também é dada pela Eq. (17).

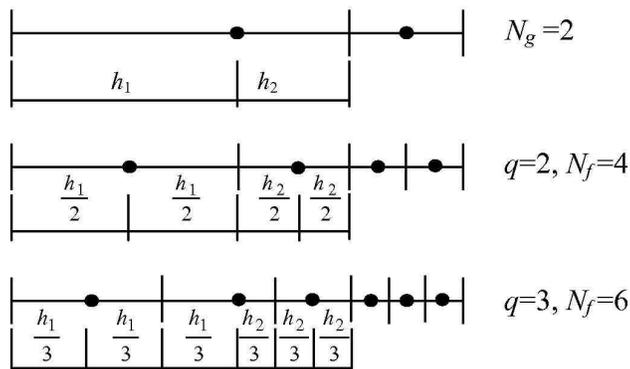


Figura 3 – Refinos semi-uniformes (RSU).

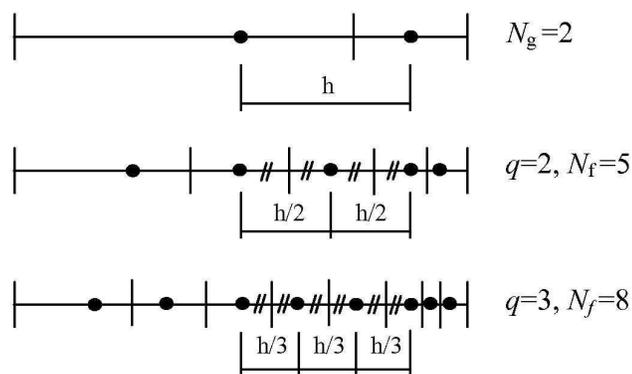


Figura 4 – Refinos entre centros (RC).

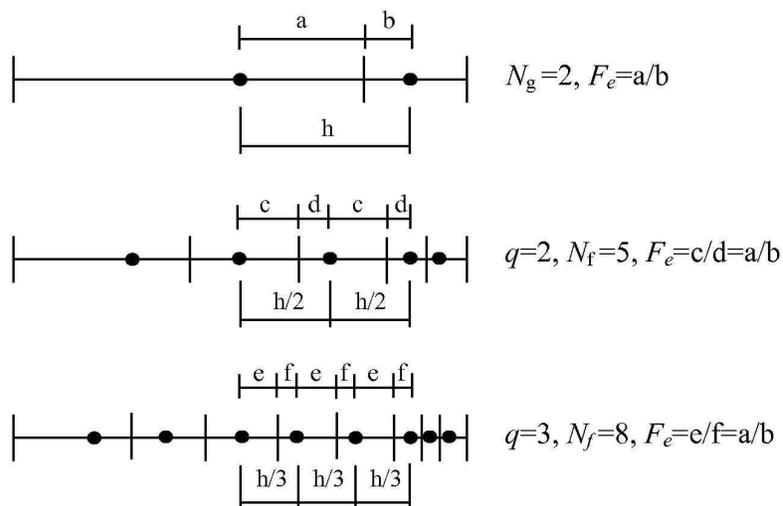


Figura 5 – Refinos entre centros com F_e constante (RCF).

Refino aleatório (RA). Este refino consiste em obter uma malha fina com um número de volumes q vezes maior que o número de volumes da malha grossa, sem que haja uma regra de construção dos volumes. A razão de refino é dada pela Eq. (5).

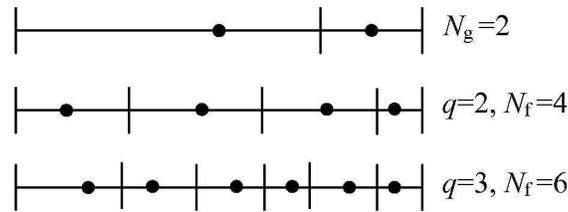


Figura 6 – Refinos aleatórios (RA).

3. RESULTADOS

Conforme descrito anteriormente, para um experimento numérico em que se conhece a solução analítica, pode-se extrair a ordem efetiva (p_E), definida pela Eq. (6), com soluções numéricas obtidas em duas malhas de tamanhos diferentes. Caso a análise seja correta, espera-se que $p_E \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$, onde p_L é a ordem assintótica ou formal, observada *a priori* e de acordo com a aproximação numérica empregada.

Pode-se analisar experimentalmente o comportamento de p_E no limite de $h \rightarrow 0$ através de duas formas comumente empregadas na literatura. A primeira é obter soluções numéricas com pares de malhas não-uniformes que tenham valores de h cada vez mais reduzidos; por exemplo, pares de malhas com 27 e 81 volumes, 81 e 243, 243 e 729, e assim por diante, onde as malhas com 81 volumes dos dois pares não tem relação alguma. A segunda forma é partir de uma malha base não-uniforme e refiná-la sucessivamente com a mesma regra de refino, reduzindo assim o valor de h ; por exemplo, malhas com 15, 45, 135, 405 volumes, e assim por diante. Estas duas análises foram feitas considerando a malha grossa para os três casos mostrados na Fig. 1: malha grossa uniforme, não-uniforme VNC e não-uniforme VFC.

O modelo matemático, Eq. (7), foi resolvido para $Pe = 10$. Para o termo advectivo da Eq. (7) foram usadas as aproximações UDS e CDS, dadas pelas Eqs. (13) e (15). E para o termo difusivo da Eq. (7) foi usada a aproximação CDS, dada pela Eq. (10). As condições de contorno foram aplicadas de duas formas: volume inteiro ou $\frac{1}{2}$ volume na face. Em todos os gráficos, no eixo das abscissas tem-se \bar{h} , que, para o domínio unitário, foi obtido como o inverso do número de volumes da malha grossa. E no eixo das ordenadas, tem-se o valor da ordem efetiva (p_E) do erro de ϕ em $x = \frac{1}{2}$ calculada com a Eq. (6); para isso, usou-se $q = 3$.

3.1 Malha grossa uniforme

Os resultados a seguir foram obtidos sempre com a malha grossa do tipo uniforme, conforme a Fig. 1a e aproximações numéricas de segunda ordem nos termos advectivo e difusivo. A condição de contorno foi aplicada com volumes inteiros nos contornos.

A Tabela 1 e a Fig. 7 mostram os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) com os cinco tipos de refino (RU, RSU, RC, RCF e RA) apresentados na seção 2.4 e com diversos pares de malhas. Verifica-se que refinamentos do tipo RU, RSU, RC e RCF apresentam ordem 2 quando $h \rightarrow 0$. Isto é, os refinamentos realizados estão em conformidade, uma vez que a ordem teórica é atingida quando $h \rightarrow 0$. Para o refino do tipo RA, p_E oscila e, em alguns casos, não pôde ser calculada devido a argumento negativo na função logarítmica da Eq. (6); isto indica

que este tipo de refino não é recomendado para estimativas de erro de discretização de soluções numéricas.

Tabela 1. Ordem efetiva para malha grossa uniforme de diferentes tamanhos.

pares de malhas	ordem efetiva p_E em $x=1/2$				
	RU	RSU	RC	RCF	RA
27 e 81	1,900764	1,900764	1,902660	1,902660	1,165006
81 e 243	1,965510	1,965510	1,965703	1,965703	2,945374
243 e 729	1,988440	1,988440	1,988455	1,988455	3,385236
729 e 2187	1,996143	1,996143	1,996148	1,996148	-
2187 e 6561	1,998806	1,998806	1,998802	1,998802	1,443602
6561 e 19683	1,999568	1,999580	2,005136	2,005136	0,831322

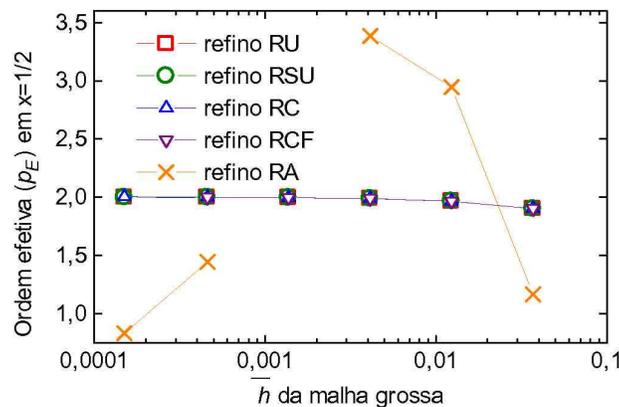


Figura 7 – Ordem efetiva para malha grossa uniforme de diferentes tamanhos.

Uma seqüência de refinamentos sucessivos foi feita para os tamanhos de malha uniforme 15, 45, 135, 405, 1215 e 3645 de acordo com os cinco tipos de refino apresentados. A Tabela 2 e a Fig. 8 apresentam os resultados obtidos, que estão em conformidade com os resultados da Fig. 7 e também indicam que o refino do tipo RA não é recomendado para estimar o erro de discretização de soluções numéricas.

Tabela 2. Ordem efetiva para malha grossa uniforme com refinamentos sucessivos.

Pares de malhas	ordem efetiva p_E em $x = 1/2$				
	RU	RSU	RC	RCF	RA
15 e 45	1,835275	1,835275	1,841447	1,841447	0,810687
45 e 135	1,938708	1,938708	1,957577	1,957577	-
135 e 405	1,979224	1,979224	1,986174	1,986174	1,345876
405 e 1215	1,993061	1,993061	1,995449	1,995449	1,190957
1215 e 3645	1,997700	1,997702	1,998491	1,998491	-
3645 e 10935	1,999234	1,999234	1,999234	1,999234	1,231453

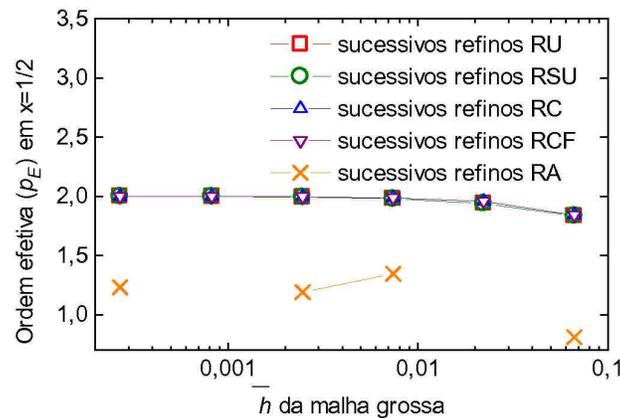


Figura 8 – Ordem efetiva para malha grossa uniforme com refinamentos sucessivos.

3.2 Malha grossa não-uniforme de nó centrado (VNC)

As Tabelas 3 e 4 e as Figs. 9 e 10 apresentam os resultados obtidos para malha do tipo grossa não-uniforme de nó centrado (VNC), representada na Fig. 1b. Estes resultados, como no caso anterior, também foram obtidos com aproximações numéricas de segunda ordem nos termos advectivos e difusivos e condição de contorno aplicada com volumes inteiros nos contornos.

A Tabela 3 e a Fig. 9 mostram que, partindo-se de uma malha grossa não-uniforme VNC e usando-se os refinamentos RU, RSU, RC e RCF, p_E tem o mesmo tipo de comportamento mostrado na seção 3.1. Isto é, quando $h \rightarrow 0$, o valor de p_E tende ao valor teórico (p_L). Novamente, o refinamento RA não é recomendado para estimar o erro de discretização de soluções numéricas.

Tabela 3. Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VNC de diferentes tamanhos.

Pares de malhas	ordem efetiva p_E em $x = \frac{1}{2}$				
	RU	RSU	RC	RCF	RA
27 e 81	1,937517	1,937517	1,964147	2,103427	1,771009
81 e 243	1,940158	1,940158	1,949252	2,334162	1,976873
243 e 729	1,990607	1,990607	2,026987	2,053361	1,906915
729 e 2187	1,997667	1,997667	1,906257	1,923489	2,228274
2187 e 6561	1,994558	1,994559	2,027104	1,990958	1,587827
6561 e 19683	1,999051	1,998944	2,005372	2,041280	1,474546

A fim de confirmar as tendências observadas na Fig. 9, procedeu-se com os refinamentos sucessivos da malha não-uniforme VNC, cujos resultados estão apresentados na Tabela 4 e na Fig. 10. Pode-se observar nesta figura que no refinamento do tipo RCF a ordem de p_E degenera para a unidade à medida que o tamanho da malha diminui, ou seja, quando $h \rightarrow 0$, conforme pôde ser verificado *a priori* pela Eq. (12). No refinamento RCF, a relação de distâncias entre o centro e a face dos volumes é mantida constante da malha grossa para a malha fina. Ou seja, partindo-se de uma malha grossa não-uniforme VNC e fazendo-se refinamento do tipo RCF, as faces dos volumes de controle de qualquer malha grossa ou fina, estão fora do ponto médio entre nós consecutivos, levando à degeneração da ordem. Mas esta degeneração só ocorre quando a

malha grossa é do tipo representado na Fig. 1b, isto é, as faces dos volumes não são centradas. Para o refino RA, a ordem oscila em torno do valor teórico, como nos casos anteriores.

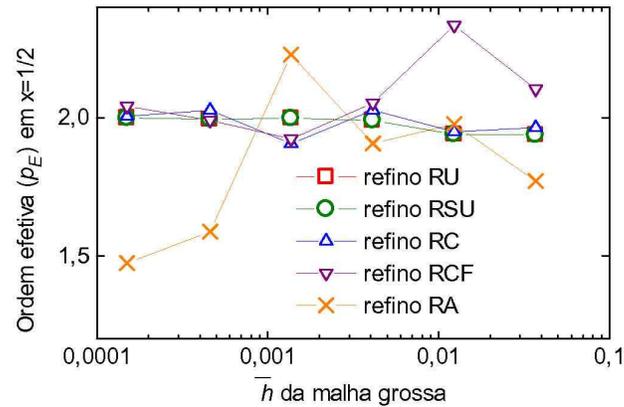


Figura 9 – Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VNC de diferentes tamanhos.

Tabela 4. Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VNC com refinamentos sucessivos.

pares de malhas	ordem efetiva p_E em $x = \frac{1}{2}$				
	RU	RSU	RC	RCF	RA
15 e 45	1,931901	1,931901	1,560282	1,665217	1,946866
45 e 135	1,985062	1,985062	1,916558	1,467985	1,679765
135 e 405	1,995931	1,995931	1,972019	1,237563	2,167846
405 e 1215	1,998749	1,998749	1,990710	1,096043	2,275804
1215 e 3645	1,999596	1,999596	1,996914	1,034489	1,557377
3645 e 10935	1,999912	1,999942	1,998843	1,014587	2,052621

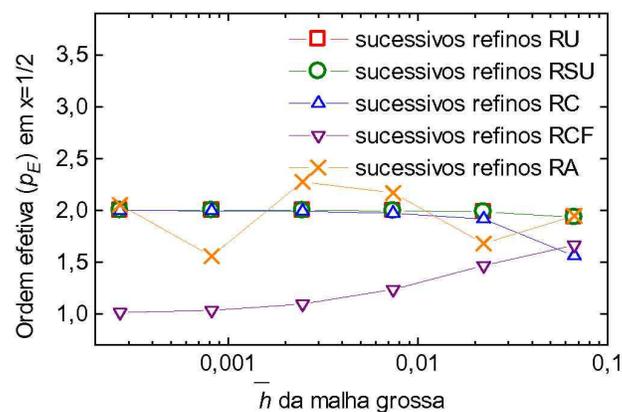


Figura 10 – Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VNC com refinamentos sucessivos.

3.3 Malha grossa não-uniforme de face centrada (VFC)

As Tabelas 5 e 6 e as Figs. 11 e 12 apresentam os resultados obtidos para malha do tipo grossa não-uniforme de face centrada (VFC), representada na Fig. 1c. Estes resultados, como nos casos anteriores, também foram obtidos com aproximações numéricas de segunda ordem

nos termos advectivos e difusivos e condição de contorno aplicada com volumes inteiros nos contornos.

Tabela 5. Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VFC de diferentes tamanhos.

Pares de malhas	ordem efetiva p_E em $x = 1/2$				
	RU	RSU	RC	RCF	RA
27 e 81	1,967012	1,944720	1,945922	1,945922	1,907300
81 e 243	2,198413	1,956397	1,956981	1,956981	2,243695
243 e 729	2,018960	1,980824	1,980897	1,980897	2,269605
729 e 2187	1,980668	2,026769	1,996771	1,996771	1,847123
2187 e 6561	2,051483	1,997586	1,997586	1,997586	2,3870780
6561 e 19683	1,990567	1,999928	1,999926	1,999926	2,043214

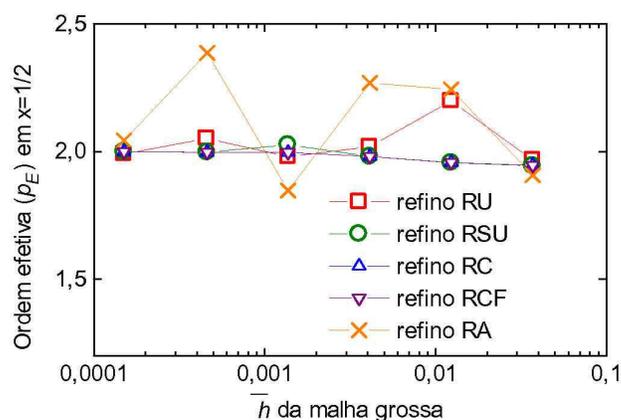


Figura 11 – Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VFC de diferentes tamanhos.

Observa-se na Fig. 11 que existe uma oscilação de p_E em torno do valor teórico para os refinamentos do tipo RU, RSU e RA. Esta tendência de oscilação se confirma para todos os refinamentos (RU, RSU, RC, RCF e RA) quando é feita uma análise com maior número de casos ou valores de h médio. A oscilação de p_E em torno do valor teórico nos casos RU, RSU, RC e RCF, tem amplitude menor do que a oscilação de p_E para o caso RA. O refino RA apresentou alguns casos onde o valor de p_E não pôde ser obtido devido a argumento negativo na função logarítmica da Eq. (6).

A Tabela 6 e a Fig. 12 apresentam os resultados obtidos no caso da malha não-uniforme VFC ser submetida a refinamentos sucessivos. Observa-se que em todos os tipos de refinamentos, exceto RA, o valor de p_E tende ao valor teórico para $h \rightarrow 0$.

3.4 Aproximação de primeira ordem no termo advectivo

Também foram obtidas soluções numéricas da Eq. (7) com as aproximações dadas pelas Eqs. (10) e (15), ou seja, aproximação de primeira ordem para o termo advectivo e de segunda ordem para o termo difusivo. Neste caso, quando $h \rightarrow 0$, o valor de p_E tende sempre ao valor teórico da aproximação de mais baixa ordem, ou seja, à unidade. Isto ocorre para qualquer tipo de malha grossa refinada nos casos RU, RSU, RC, RCF e RA. As Tabelas 7 e 8 e Figs. 13 e 14 apresentam alguns destes resultados.

Tabela 6. Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VFC com refinamentos sucessivos.

Pares de malhas	ordem efetiva p_E em $x = 1/2$				
	RU	RSU	RC	RCF	RA
15 e 45	1,917449	1,887576	1,891256	1,891256	1,609406
45 e 135	1,963215	1,953731	1,967957	1,967957	1,888220
135 e 405	1,987923	1,984330	1,989605	1,989605	1,879672
405 e 1215	1,996010	1,994771	1,996586	1,996586	2,245715
1215 e 3645	1,998675	1,998259	1,998870	1,998870	1,948956
3645 e 10935	1,999853	1,999764	1,999692	1,999692	1,929694

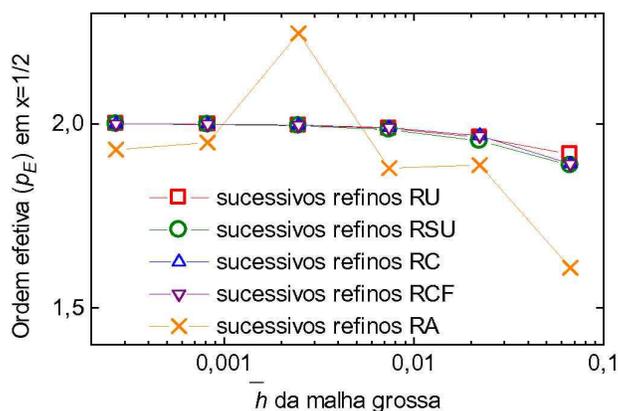


Figura 12 – Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VFC com refinamentos sucessivos.

Tabela 7. Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VNC com refinamentos sucessivos e aproximação UDS nos termos advectivos.

Pares de malhas	ordem efetiva p_E em $x = 1/2$				
	RU	RSU	RC	RCF	RA
15 e 45	1,110744	1,110744	1,137432	1,139181	1,138968
45 e 135	1,054688	1,054688	1,061729	1,063281	0,992530
135 e 405	1,020859	1,020859	1,022829	1,023505	1,065850
405 e 1215	1,007277	1,007277	1,007889	1,008127	0,994360
1215 e 3645	1,002463	1,002463	1,002658	1,002743	1,003042
3645 e 10935	1,001045	1,001045	1,001237	1,001338	0,996748

3.5 Meio volume nos contornos

Também foi avaliado o comportamento do valor de p_E no caso de existir meio volume de controle nos contornos do domínio. Isso altera a forma da aplicação da condição de contorno. Nenhum comportamento diferente do exposto nas seções 3.1 a 3.4 foi observado.

4. CONCLUSÃO

Para estimar erros de discretização, recomenda-se usar refinamentos sucessivos do tipo RU, RSU e RC a partir de uma malha base. Esta recomendação é indicada para estimadores de

erro baseados na extrapolação de Richardson, que empregam duas ou mais malhas, e soluções numéricas obtidas com o método de volumes finitos. Especula-se que esta recomendação também se aplica ao refino de malhas irregulares multidimensionais (não-ortogonais, não-uniformes e não-estruturadas) usadas com o método de volumes finitos.

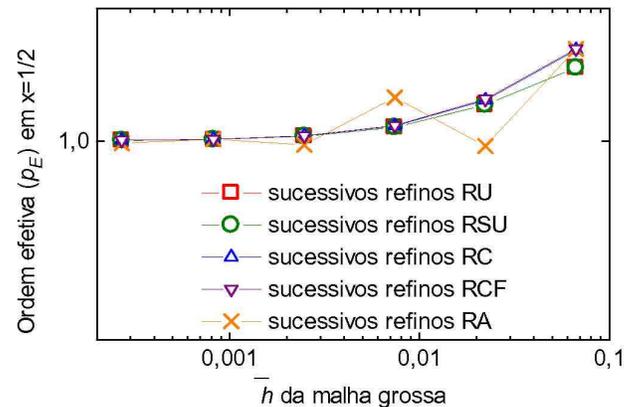


Figura 13 – Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VNC com refinamentos sucessivos e aproximação UDS nos termos advectivos.

Tabela 8. Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VFC com refinamentos sucessivos e aproximação UDS nos termos advectivos.

Pares de malhas	ordem efetiva p_E em $x = \frac{1}{2}$				
	RU	RSU	RC	RCF	RA
15 e 45	1,218166	1,107062	1,122227	1,122227	1,168448
45 e 135	1,052418	1,055443	1,057596	1,057596	1,045381
135 e 405	1,020358	1,021485	1,021738	1,021738	1,014101
405 e 1215	1,007143	1,007536	1,007562	1,007562	1,013484
1215 e 3645	1,002422	1,002555	1,002557	1,002557	1,006204
3645 e 10935	1,000759	1,000843	1,000908	1,000908	1,010892

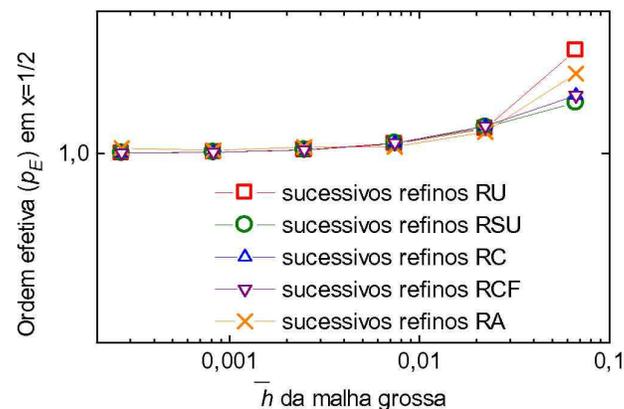


Figura 14 – Ordem efetiva para malha grossa não-uniforme VFC com refinamentos sucessivos e aproximação UDS nos termos advectivos.

REFERÊNCIAS

- Celik, I. B., 2004. Procedure for estimation and reporting of discretization error in CFD applications. *ASME Journal of Fluids Engineering*. Disponível em: <www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumAccuracy.pdf>. Acesso em 1 June 2004.
- Ferziger, J. H., & Peric, M., 2001. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3. ed. Springer.
- Kreyszig, E., 1999. *Advanced Engineering Mathematics*. 8th ed. Wiley.
- Marchi, C. H., Silva, A. F. C., 2000. Previsão de erros de truncamento de modelos numéricos em malhas não-uniformes. In: *IV SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL*. Anais... Uberlândia, v. 1, 2000, p. 481-488.
- 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.
- Patankar, S.V., 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere.
- Roache, P. J., 1994. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. *Journal of Fluids Engineering*, vol. 116, pp. 405-413.
- Roache, P. J., 1998. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. Hermosa.
- Schneider, F.A., Marchi, C. H., 2004. Sobre a definição da razão de refino de malhas unidimensionais não-uniformes. In: *XXV Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia*. Anais... Recife, 2004. Paper CIL18-024.
- Tannehill, J. C., Anderson, D. A., & Pletcher, R. H., 1997. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 2. ed. Taylor & Francis.