

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

EDUARDO MATOS GERMER

**VERIFICAÇÃO DE FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO EM
ADVECÇÃO-DIFUSÃO 1D COM VOLUMES FINITOS**

CURITIBA
JUNHO DE 2009

EDUARDO MATOS GERMER

**VERIFICAÇÃO DE FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO EM
ADVECÇÃO-DIFUSÃO 1D COM VOLUMES FINITOS**

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, na área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Orientador: Prof. Carlos Henrique Marchi, Dr.Eng.Mec.

**CURITIBA
JUNHO DE 2009**

TERMO DE APROVAÇÃO

EDUARDO MATOS GERMER

**VERIFICAÇÃO DE FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO EM
ADVECÇÃO-DIFUSÃO 1D COM VOLUMES FINITOS**

Dissertação aprovada como requisito parcial à obtenção de grau de Mestre em Engenharia Mecânica, área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Cezar Otaviano Ribeiro Negrão

UTFPR

Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki

UFPR

Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi

UFPR/PG-MEC

Presidente

Curitiba, 28 de agosto de 2009.

*“À minha esposa, pela paciência e apoio.
E às nossas filhas, Clara, Beatriz e Sofia,
por toda a felicidade que nos trazem.”*

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Governo Brasileiro, através da Universidade Federal do Paraná (UFPR), pela oportunidade que me foi dada de obter, tanto o grau de engenheiro, quanto à possibilidade de fazer este curso de mestrado.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação da Engenharia Mecânica (PGMEC) da Universidade Federal do Paraná, por abrir esta oportunidade, a um estudante empregado, ter a oportunidade de buscar obter o grau de mestre. Oportunidades sempre muito raras para esta classe de estudantes.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi, fundamental nesta minha formação, e a quem, desde já, parabeno pelos resultados que vem tendo à frente do PGMEC, evidenciado pelo reconhecimento cada vez maior do programa a nível nacional.

Agradeço novamente, e sempre, aos meus pais, Claus e Nilda, pela educação que me proporcionaram, e pela orientação aos estudos como base de uma boa vida profissional e cidadã. Oportunidade também rara neste país.

Agradeço à Caô e Dudu, pelos momentos de lazer e descontração, e nossos fins-de-semana de conversa fiada e diversão.

Agradeço à Lê e Rodrigo, pelo amor e carinho dados às minhas filhas enquanto finalizava meus trabalhos.

Agradeço a todos os meus amigos, Fabrício, Feijão, Sapo, Fábio, Milico, Nani, Buturi, Guzi, Carlão, Marcelo, Chucruta, Vermelho, Jean e tantos outros pela influência na minha formação extra classe, que reflete fortemente na formação moral de cada um de nós.

Agradeço à Fabiana pela paciência e ajuda, além de todo pessoal, Cosmo, Luciano, Roberta, Fabiane, Márcio, Leandro, e todos do grupo de estudos em CFD do programa de pós graduação em engenharia mecânica da UFPR pela ajuda sempre que necessário.

Agradeço aos membros da banca, Dr. Luciano Kiyoshi Araki, Dr. Cezar Otaviano Ribeiro Negrão e Dr. Humberto Ricardo Vidal Gutierrez, pelo tempo gasto na leitura do trabalho, além das sugestões para sua melhoria.

E finalmente, agradeço a todos os grandes mestres, que através da história, com seu exemplo, e a beleza de suas obras, nos fazem sempre vislumbrar, e porque não, sonhar, com algo sempre melhor.

RESUMO

Este trabalho tem como base a dinâmica dos fluidos computacional. Dentro das possibilidades desta área o foco deste trabalho é o estudo do erro de discretização gerado pelo uso de funções de interpolação (FI). Para atingimento deste objetivo adotou-se o fenômeno de advecção-difusão, unidimensional, sem termo fonte. Outras considerações foram: regime permanente, propriedades constantes, condições de contorno de Dirichlet, método numérico dos volumes finitos e aplicação de volumes fictícios na fronteira. Foram adotadas para aproximação do termo advectivo duas FI's de 1ª ordem, sete de 2ª ordem e uma de 3ª ordem. Para aproximação do termo difusivo foram usadas uma FI de 2ª ordem e outra de 4ª ordem. Para cada destes conjuntos de FI's (termo advectivo/termo difusivo), foram realizadas simulações em 15 malhas distintas, começando com 5 nós e refinando até 23.914.845 nós, com razão de refino 3. Para acompanhamento dos resultados, definiram-se quatro variáveis de interesse: variável T_c (valor da variável T no ponto médio, obtido pelo valor nodal do volume central em malha com número ímpar de nós); variável T_m (valor médio da variável T obtido com a regra do retângulo); variável I (fluxo da variável T na face da fronteira direita do domínio); e finalmente a variável L (média da norma l_1). Foi realizada a análise *a priori* de cada uma das variáveis, obtendo as ordens verdadeira (p_V) e assintótica (p_L) de cada uma das quatro variáveis. Com as simulações foram obtidas as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U), onde se confirmaram os resultados obtidos na análise *a priori* para todas as variáveis de interesse, exceto para a variável I . Quanto às magnitudes de erros, obtivemos magnitudes menores com a utilização das múltiplas extrapolações de Richardson (MER). Em relação ao desempenho comparativo entre as funções de interpolação, pôde-se constatar a melhor performance do esquema QUICK/CDS-4 para erros obtidos sem MER, e do esquema CDS-2 para erros obtidos com MER. E finalmente confirmaram-se os resultados anteriores para outros valores do número de Peclet.

Palavras-chave: Volumes Finitos, erros *a priori*, erros *a posteriori*, advecção-difusão, MER, CFD.

ABSTRACT

This work is based on Computational Fluid Dynamics. Among the possibilities of this area, the focus was the study of discretization error generated by interpolation functions (IF`s). To achieve this aim was considered the one-dimensional advection-diffusion problem, in one dimensional space, without source term. Other considerations were: steady-state flow, constant properties, Dirichlet boundary condition, finite volume method and ghost cell on boundaries. For the approximation of the advection term were adopted two IF of 1st order, seven of 2nd order and one of 3rd order. To approximate diffusive term were used one 2nd order IF and one 4th order IF. To each of those pairs of IF`s (advective term/difusive term), simulations for 15 distinct grids were performed, beginning with 5 control volumes (CV`s) and refining till 23.914.845 CV`s, with refine rate of 3. Four variables of interest were defined: variable T_c (value of variable T at middle point of domain, got by the nodal value of the central volume in an odd grid), variable T_m (medium value of variable T get with rectangle interpolation rule), variable I (flux of variable T at the face of east boundary of domain); and finally variable L (average value of norm l_1). A priori error analysis of each variable were conducted, getting the true orders (p_V) and asymptotic order (p_L) for each one of four variables. After simulations the effective (p_E) and apparent (p_U) orders were defined, and the results of priori analysis were confirmed, except for variable I . Using the method of multiples Richardson extrapolation (MER) could be obtained better magnitude of discretization error. Comparing the performance of interpolation functions, could be seen better performance of QUICK/CDS-4 when the error was obtained without MER, and CDS-2 for error obtained using MER. And finally could be confirmed all results achieved before with other values of Peclet number.

Key Words: Finite Volume, a priori errors, a posteriori errors, advection-diffusion, MER, CFD.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 – Significado físico dos termos da Eq. (2.3).....	27
Figura 2.2 – Discretização do espaço unidimensional.....	28
Figura 2.3 – Volume de nó centrado (VNC) e volume de face centrada (VFC).....	28
Figura 2.4 – Volume genérico “P” e seus vizinhos no domínio discreto (malha uniforme unidimensional)	29
Figura 2.5 – Refino uniforme em malha não-uniforme (Schneider, 2007).....	30
Figura 2.6 – Meio volume de fronteira	32
Figura 2.7 – Volumes das fronteiras esquerda e direita no domínio unidimensional.....	33
Figura 2.8 – Balanço para os volumes de fronteira.	34
Figura 2.9 - Região discretizada	49
Figura 2.10 – Passando de um domínio discreto de diferenças finitas para volumes finitos... ..	49
Figura 4.1 – Gráfico “módulos do erro de discretização x h” para a variável T_c	78
Figura 4.2 – Gráfico “módulos do erro de discretização x h” para a variável T_m	79
Figura 4.3 - Gráfico “módulos do erro de discretização x h” para a variável I	80
Figura 4.4 - Gráfico “módulos do erro de discretização x h” para a variável L	81
Figura 4.5 – Ordem efetiva das funções de interpolação para a variável T_c	83
Figura 4.6 – Ordem aparente das funções de interpolação para a variável T_c	83
Figura 4.7 – Gráfico das ordens verdadeiras e assintótica dos erros da variável T_c (CDS-2/CDS-2)	84
Figura 4.8 - Gráfico “módulos do erro de discretização com MER e sem MER x h” para a variável T_c	88
Figura 4.9 - Gráfico “módulos do erro de discretização com MER e sem MER x h” para a variável T_m	90
Figura 4.10 - Gráfico “módulos do erro de discretização com MER e sem MER x h” para a variável I	91
Figura 4.11 - Gráfico “módulos do erro de discretização com MER e sem MER x h” para a variável L	93
Figura 4.12 – Ordem efetiva utilizando CDS-2 para diversos valores de Pe para a variável T_c	96
Figura 4.13 – Ordem aparente utilizando CDS-2 para diversos valores de Pe para a variável T_c	96
Figura 4.14 – Gráfico “módulos dos erros de discretização (com UDS) x h” com variação de Pe para a variável T_c	97
Figura 4.15 – Gráfico “módulos dos erros de discretização (com CDS-2) x h” com variação de Pe para a variável T_c	98
Figura 4.16 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com QUICK4) x h” com variação de Pe para a variável T_c	98
Figura 4.17 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com $Pe=0,01$) x h” com variação das FI’s para a variável T_c	100
Figura 4.18 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com $Pe=0,1$) x h” com variação das FI’s para a variável T_c	101
Figura 4.19 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com $Pe=1$) x h” com variação das FI’s para a variável T_c	102
Figura 4.20 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com $Pe=10$) x h” com variação das FI’s para a variável T_c	102
Figura 4.21 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com $Pe=100$) x h” com variação das FI’s para a variável T_c	103
Figura A.2.1 – Volume genérico “P” e seus vizinhos no domínio discreto unidimensional .	114

Figura A.2.2 – Volumes no contorno esquerdo do domínio	114
Figura A.2.3 – Volumes no contorno direito do domínio	115
Figura B.2.1 – Volume genérico “P” e seus vizinhos no domínio discreto unidimensional .	135
Figura B.5.1 – Face genérica “j” e suas relações nodais nas vizinhanças mais próximas.....	137

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Esquema de Obtenção de Resultados com MER.....	58
Tabela 3.1 – Tabela das variáveis de interesse.....	63
Tabela 3.2 – Valor analítico das variáveis de interesse com $Pe=0,01$	64
Tabela 3.3 – Valor analítico das variáveis de interesse com $Pe=0,1$	64
Tabela 3.4 – Valor analítico das variáveis de interesse com $Pe=1$	65
Tabela 3.5 – Valor analítico das variáveis de interesse para $Pe=5$	65
Tabela 3.6 – Valor analítico das variáveis de interesse com $Pe=10$	65
Tabela 3.7 – Valor analítico das variáveis de interesse com $Pe=100$	65
Tabela 3.8 – Funções de interpolação utilizadas	66
Tabela 3.9 – Ordens verdadeiras e assintóticas das funções de interpolação	69
Tabela 3.10 – Ordens verdadeiras e assintótica das aproximações das variáveis	70
Tabela 3.11 – Ordens verdadeiras e assintótica das variáveis.....	71
Tabela 4.1 – Tempos de processamento (segundos) x FI x malha	75
Tabela 4.2 – Quantidade de iterações para atingimento de igual ordem de magnitude de erro para a variável T_c	76
Tabela 4.3 – Projeção de tempo necessário para atingimento de magnitude de erro 10^{-22} para a variável T_c	76
Tabela 4.4 – Memória computacional em GB necessárias para a simulação x Nós x FI.....	77
Tabela 4.5 – Ordens verdadeiras, efetivas e aparentes da variável T_c	82
Tabela 4.6 - Ordens verdadeiras, efetivas e aparentes da variável T_m	85
Tabela 4.7 - Ordens verdadeiras, efetivas e aparentes da Variável I	86
Tabela 4.8 - Ordens verdadeiras, efetivas e aparentes da variável L	87
Tabela 4.9. Redução de nós de malhas para erros fixos (CDS-2) – variável T_c	89
Tabela 4.10. Redução dos erros para malhas fixas (CDS-2) – variável T_c	89
Tabela 4.11. Redução de nós de malhas para magnitudes de erros fixos (CDS-2) – variável T_m	90
Tabela 4.12. Redução dos erros para malhas fixas (CDS-2) – variável T_m	91
Tabela 4.13. Redução de nós de malhas para magnitudes de erros fixos (CDS-2) – variável I	92
Tabela 4.14. Redução dos erros para malhas fixas (CDS-2) – variável I	92
Tabela 4.15. Redução de nós de malhas para magnitudes de erros fixos (CDS-2) – variável L	94
Tabela 4.16. Redução dos erros para malhas fixas (CDS-2) – variável L	94
Tabela 4.17. Tamanho de malhas para vários Peclet para magnitudes de erros fixos (UDS) – variável T_c	99
Tabela 4.18. Variação dos erros com variação de Peclet para malhas fixas (UDS) – variável T_c	99
Tabela 4.19. Parte do processo de aplicação do MER usando CDS-2 com $Pe=100$ para a variável T_c	104
Tabela B.1 – Ordens verdadeiras e assintótica do erro de discretização da variável I.....	161
Tabela B.2 – Ordens verdadeiras e assintótica do erro de discretização da variável II.....	162
Tabela B.3 – Ordens verdadeiras e assintóticas do erro de discretização da variável III.....	164
Tabela B.4 – Ordens verdadeiras e assintótica do erro de discretização da variável IV.....	165

LISTA DE ABREVIATURAS

ADS	<i>Adaptable Difference Scheme</i>
AIAA	<i>American Institute of Aeronautics and Astronautics</i>
ANS	<i>American Nuclear Society</i>
ASCI	<i>Accelerated Strategic Computing Initiative</i>
ASME	<i>American Society of Mechanics Engineers</i>
CC	Condições de Contorno
CDS-2	<i>Central Difference Scheme de 2ª ordem</i>
CDS-4	<i>Central Differencing Scheme de 4ª ordem</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CSM	<i>Computacional Solid Mechanics</i>
CV	<i>Control Volume</i>
DMSO	<i>Defense Modeling and Simulation Office</i>
DOE	<i>Department of Energy</i>
EDP	Equações Diferenciais Parciais
ENS	Equações de Navier Stokes
Eq	Equação
Fig	Figura
FI	Função de Interpolação
GCI	<i>Roache's Grid Convergence Index</i>
JFE	<i>Journal of Fluids Engineering</i>
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MER	Múltiplas Extrapolações de Richardson
MVF	Método dos Volumes Finitos
QUICK	<i>Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics</i>
RA	Refino Aleatório
RC	Refino entre Centros
RFE	Refino entre Centros com Fe constante
RSU	Refino Semi Uniforme
RU	Refino Uniforme
UDS	<i>Upstream Differencing Scheme</i>
UDS-2	<i>Upstream Differencing Scheme de 2ª ordem</i>

TDMA	<i>Tri-diagonal Matrix Algorithm</i>
TVD	<i>Total Variation Diminishing</i>
VFC	Volume de Face Centrada
VNC	Volume de Nó Centrado
V&V	Verificação e Validação
WUDS	<i>Weighted Upstream Differencing Scheme</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

E	Erro de Discretização
Pe	Número de Peclet
p_L	Ordem Assintótica
p_V	Ordem Verdadeira
p_E	Ordem Efetiva
p_U	Ordem Aparente
Re	Número de Reynolds
S_ϕ	Termo Fonte
u	Velocidade (escalar) do fluxo λ
U	Incerteza da Solução Numérica
h	tamanho dos elementos da malha
α	Fator de Intensidade da Advecção
β	Fator de Intensidade da Difusão
ϵ_τ	Erro de Truncamento
ϵ_n	Erro de Iteração
ϵ_π	Erro de Arredondamento
ϵ_τ	Erro de programação
λ_∞	Solução Analítica Estimada
λ	Solução Numérica
Λ	Solução Analítica
θ	Efetividade da Estimativa de Erro
ϕ	Variável de Interesse
ϕ_m	Média da Variável de Interesse
ϕ_w	Valor da variável dependente na face oeste
ϕ_e	Valor da variável dependente na face leste
ϕ_W	Valor da variável dependente no nó oeste
ϕ_{WW}	Valor da variável dependente no 2º nó a oeste
ϕ_E	Valor da variável dependente no nó leste
ϕ_{EE}	Valor da variável dependente no 2º nó a leste

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	DEFINIÇÃO DO PROBLEMA	18
1.2	RELEVÂNCIA DO PROBLEMA	20
1.3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	23
1.4	OBJETIVOS DA DISSERTAÇÃO	24
1.5	DELINEAMENTO DA DISSERTAÇÃO	25
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	26
2.1	EQUAÇÕES GOVERNANTES	26
2.2	MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS	26
2.3	DISCRETIZAÇÃO	27
2.4	REFINO DA MALHA COMPUTACIONAL	30
2.5	CONDIÇÕES DE CONTORNO	31
2.6	VOLUMES DE FRONTEIRA	32
2.6.1	Método do Meio Volume	32
2.6.2	Método dos Volumes Fictícios	33
2.6.3	Método do Balanço para os Volumes de Fronteira	33
2.7	FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO	34
2.8	FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO PARA TERMOS ADVECTIVOS	36
2.8.1	UDS (<i>Upstream Difference Scheme</i>)	36
2.8.2	UDS-2 (<i>Upstream Difference Scheme de 2ª ordem</i>)	37
2.8.3	CDS-2	37
2.8.4	QUICK	38
2.8.5	PLDS (<i>Power Law Difference Scheme</i>)	39
2.8.6	WUDS	39
2.8.7	ALFA	40
2.8.8	TVD	40
2.8.9	ADS	41
2.9	FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO PARA TERMOS DIFUSIVOS	42
2.9.1	CDS-2	43
2.9.2	CDS-4	43
2.10	MÉTODO DIRETO DE SOLUÇÃO	43
2.11	ACURÁCIA E ERROS	45
2.11.1	Conceitos de Incerteza	45
2.11.2	Conceitos de Erros	45
2.11.3	Fontes de Erros em Soluções Numéricas	46
2.11.4	Erros de Iteração	47
2.11.5	Erros de Arredondamento	47
2.11.6	Erro de Programação	47
2.11.7	Erros de Modelagem	48
2.11.8	Erros de Truncamento	48
2.11.9	Erro de Discretização	54
2.12	ESTIMADORES DE ERROS DE DISCRETIZAÇÃO	54
2.12.1	Estimativas de Erro <i>a Priori</i>	55
2.12.2	Estimativa de Erro <i>a Posteriori</i>	55
2.12.3	Estimador de Richardson	56
2.13	MÚLTIPLAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON (MER)	57
3	PROCEDIMENTOS MATEMÁTICOS E NUMÉRICOS	59
3.1	MODELO MATEMÁTICO	60

3.1.1	Fenômeno Físico.....	60
3.1.2	Características Físicas.....	60
3.1.3	Equação Governante.....	61
3.1.4	Variáveis de Interesse.....	62
3.1.5	Soluções Analíticas – Relações Matemáticas.....	63
3.1.6	Soluções Analíticas – Obtenção dos Valores.....	64
3.2	MODELO NUMÉRICO.....	66
3.3	RELAÇÕES ALGÉBRICAS USADAS NAS ROTINAS DO PROGRAMA.....	67
3.4	ANÁLISE A <i>PRIORI</i> DO ERRO NUMÉRICO.....	68
3.4.1	Análise a <i>Priori</i> da Ordem do Erro de Truncamento das Funções de Interpolação.....	69
3.4.2	Análise a <i>Priori</i> da Ordem do Erro de Truncamento das Aproximações para Obtenção das Variáveis de Interesse.....	69
3.4.3	Análise a <i>Priori</i> da Ordem do Erro de Discretização Final.....	70
3.5	SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	71
3.5.1	Obtenção das Soluções Numéricas das Variáveis de Interesse.....	72
3.5.2	Obtenção das Ordens e Magnitudes dos Erros de Discretização.....	73
3.5.3	Verificação do Impacto do Número de Peclet no Erro de Discretização.....	73
4	RESULTADOS DA EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO.....	74
4.1	TEMPO DE PROCESSAMENTO.....	74
4.2	MEMÓRIA COMPUTACIONAL.....	77
4.3	MAGNITUDE DOS ERROS NUMÉRICOS (A <i>POSTERIORI</i>).....	78
4.3.1	Variável T_c	78
4.3.2	Variável T_m	79
4.3.3	Variável I	80
4.3.4	Variável L	81
4.4	ORDENS ASSINTÓTICA, EFETIVA E APARENTE.....	81
4.4.1	Variável T_c	82
4.4.2	Variável T_m	84
4.4.3	Variável I	85
4.4.4	Variável L	86
4.5	REFINAMENTO DO ERRO COM MÚLTIPLAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON.....	87
4.5.1	Variável T_c	87
4.5.2	Variável T_m	89
4.5.3	Variável I	91
4.5.4	Variável L	93
4.6	IMPACTO DA VARIAÇÃO DO NÚMERO DE PECLLET NO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO.....	94
4.6.1	Comparação em Função das FI's Utilizadas.....	95
4.6.2	Comparação por Número de Peclet.....	100
5	CONCLUSÃO.....	105
5.1	CONSTATAÇÕES GERAIS.....	105
5.2	CONTRIBUIÇÕES.....	108
5.3	TRABALHOS FUTUROS.....	109
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	110
A.1	DADOS DO PROBLEMA.....	114
A.2	DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO.....	114
A.3	DISCRETIZAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO.....	115
A.3.1	NÓS INTERNOS (“P” VARIANDO DE “1” A “N”).....	115

A.3.2	VOLUMES DE CONTROLE FICTÍCIOS – CONTORNO ESQUERDO ($P=0$)	115
A.3.3	VOLUMES DE CONTROLE FICTÍCIOS – CONTORNO DIREITO ($P=N+1$)	116
A.4	DETERMINAÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES ALGÉBRICAS	116
A.4.1	UDS / CDS-2	116
A.4.1.1	Nós $P=1$ a $P=N$	116
A.4.1.2	Nó $P=0$	117
A.4.1.3	Nó $P=N+1$	117
A.4.2	CDS-2 / CDS-2	118
A.4.3	UDS-2 / CDS-2	118
A.4.3.1	Nós $P=2$ a $P=N-1$	118
A.4.3.2	Nó $P=1$	119
A.4.3.3	Nó $P=N$	120
A.4.3.4	Nós $P=0$ e $P=N+1$	120
A.4.4	WUDS	120
A.4.4.1	Nós $P=1$ a $P=N$	121
A.4.4.2	Nó $P=0$	121
A.4.4.3	Nó $P=N+1$	121
A.4.5	PLDS	122
A.4.5.1	Nós $P=1$ a $P=N$	122
A.4.5.2	Nós $P=0$ e $P=N+1$	122
A.4.6	ADS / CDS-2	123
A.4.6.1	Nós $P=1$ a $P=N$	123
A.4.6.2	Nós $P=0$ e $P=N+1$	124
A.4.7	TVD / CDS-2	124
A.4.7.1	Nós $P=1$ a $P=N$	124
A.4.7.2	Nós $P=0$ e $P=N+1$	125
A.4.8	ALFA / CDS-2	125
A.4.8.1	Nós $P=1$ a $P=N$	125
A.4.8.2	Nós $P=0$ e $P=N+1$	126
A.4.9	QUICK / CDS-2	126
A.4.9.1	Nós $P=3$ e $P=N-1$	126
A.4.9.2	Nó $P=1$	126
A.4.9.3	Nó $P=2$	127
A.4.9.4	Nó $P=N$	128
A.4.9.5	Nós $P=0$ e $P=N+1$	128
A.4.10	QUICK / CDS-4	128
A.4.10.1	Nós $P=3$ a $P=N-2$	128
A.4.10.2	Nós $P=1$	130
A.4.10.3	Nó $P=2$	131
A.4.10.4	Nó $P=N-1$	132
A.4.10.5	Nós $P=N$	133
A.4.10.6	Nós $P=0$ e $P=N+1$	134
B.1	DADOS DO PROBLEMA	135
B.2	DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO	135
B.3	MODELO NUMÉRICO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE	135
B.4	ANÁLISE A <i>PRIORI</i> DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO	136
B.5	DESENVOLVIMENTO EM SÉRIE DE TAYLOR	137

B.6	ANÁLISE A <i>PRIORI</i> DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICAS DAS FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO	138
B.6.1	CDS-2 / CDS-2.....	138
B.6.1.1	Aproximação do Termo Difusivo - Derivada Primeira da Variável na Face do Volume com CDS-2.....	138
B.6.1.2	Aproximação do Termo Advectivo - Valor de "Λ" na Face com CDS-2.....	140
B.6.2	UDS / CDS-2.....	141
B.6.3	UDS-2 / CDS-2.....	142
B.6.4	WUDS.....	144
B.6.4.1	Aproximação do Termo Advectivo	144
B.6.4.2	Aproximação do Termo Difusivo.....	146
B.6.5	ALFA.....	148
B.6.6	ADS	148
B.6.7	TVD	149
B.6.8	PLDS.....	150
B.6.9	QUICK / CDS-2	151
B.6.10	QUICK / CDS-4	152
B.7	ANÁLISE A <i>PRIORI</i> DO ERRO DE TRUNCAMENTO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE	154
B.7.1	PRIMEIRA VARIÁVEL DE INTERESSE – VALOR DE “A” CENTRAL (N ÍMPAR) 154	
B.7.2	SEGUNDA VARIÁVEL DE INTERESSE – VALOR DE “A” MÉDIO (REGRA DO RETÂNGULO)	154
B.7.2.1	Resolução da Integral Numérica.....	154
B.7.2.2	Demonstração do Valor Médio (Regra do Retângulo)	155
B.7.3	TERCEIRA VARIÁVEL DE INTERESSE $\Lambda^i_{x=1}$	157
B.7.4	QUARTA VARIÁVEL DE INTERESSE – MÉDIA DA NORMA (\bar{l}_1):	159
B.8	ANÁLISE A <i>PRIORI</i> DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA DA VARIÁVEL I	159
B.9	ANÁLISE A <i>PRIORI</i> DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA DA VARIÁVEL II	161
B.9.1	CDS-2/CDS-2.....	161
B.10	ANÁLISE A <i>PRIORI</i> DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICAS DA VARIÁVEL III.....	163
B.10.1	CDS-2 / CDS-2.....	163
B.11	ANÁLISE A <i>PRIORI</i> DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA DA VARIÁVEL IV.....	164
B.11.1	CDS-2 / CDS-2.....	164

1 INTRODUÇÃO

Este capítulo inicial, de introdução à dissertação, foi dividido em cinco tópicos. Inicialmente é apresentado o problema que será estudado de forma bastante genérica. Na seqüência, apresentam-se as motivações que sustentam a certeza de que este trabalho terá utilidade para a disciplina e para futuros desenvolvimentos. Após isto são mostrados os objetivos do trabalho de forma mais específica. E finalmente, é exposta a estrutura em que está montado o trabalho.

1.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

A dinâmica dos fluidos computacional (DFC), ou *Computational Fluid Dynamics* (CFD), como é mais conhecida, é uma área que utiliza técnicas computacionais para simulação de problemas de transferência de calor e mecânica dos fluidos (FORTUNA, 2000; VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Este conceito inicial da CFD dando tanta relevância à tecnologia computacional, pode dar a idéia de que antes do advento da computação digital, por volta de 1950, a CFD praticamente não existia, e os problemas que envolviam escoamentos de fluidos e trocas de calor não eram passíveis de solução.

Isto de fato não é verdade. Apesar de bastante limitado, comparado aos dias atuais, muito já era feito na análise e aplicação a projetos de engenharia. Na verdade esta tecnologia computacional veio facilitar muito os trabalhos dos profissionais da área, tornando possível a solução de um número maior de problemas.

Esta afirmação pode ser compreendida, se leva-se em conta que os fenômenos relacionados a escoamentos têm sua modelagem matemática representada por equações diferenciais parciais (EDP's), cujas soluções analíticas são conhecidas somente para poucos casos especiais (FERZIGER e PÈRIC, 1999). Sendo que, na maioria das vezes, esta solução só é encontrada após uma série de simplificações do fenômeno físico, o que acaba afastando o resultado obtido do fenômeno real (MALISKA, 2004). A característica principal deste método analítico é a sua pouca abrangência, obtendo porém, nos casos onde é viável, a solução exata do problema (MALISKA, 2004).

Outra forma de análise possível é através de métodos experimentais, que buscam estudar estes fenômenos através de sua reprodução em dimensões reais, ou em escala. Estas soluções são muitas vezes um tanto caras, sendo que, algumas vezes os fenômenos podem ainda ser de difícil reprodução.

E finalmente, a terceira forma de análise é através do método numérico. Este método é muito próximo ao método analítico, considerando sua natureza teórica de solução das EDP's, porém, sua solução parte da modelagem matemática do fenômeno passando pela discretização (obtenção de um modelo numérico) e posterior solução algébrica do sistema de equações obtido.

Após o entendimento dos métodos possíveis para análise de problemas em dinâmica dos fluidos, é interessante que o conceito de CFD seja revisto, passando então a entendê-la como uma área que trata da obtenção de soluções numéricas para EDP's com uso do computador (FORTUNA, 2000).

Para conseguir estas soluções, os métodos numéricos mais utilizados são, o método de volumes finitos (MVF), o de elementos finitos (MEF) e o de diferenças finitas (MDF), sendo que, no âmbito da CFD o mais usado é o MVF (MALISKA, 2004).

O processo de solução numérica difere da solução analítica principalmente na sua abrangência e acurácia. Enquanto a solução analítica de uma EDP numa região R implica na obtenção de função contínua para a variável dependente nesta região, a solução numérica traz a desvantagem de não poder tratar R como um espaço contínuo, e só admite solução para pontos discretos deste espaço (FORTUNA, 2000).

A acurácia da solução numérica está fortemente relacionada às aproximações utilizadas para sua obtenção. Considerando que, em grande parte dos casos, estas aproximações são conseguidas através de expansões em séries de Taylor (séries infinitas), torna-se necessário a redução desta série em representações finitas. Esta transformação na representação da série acarreta certo erro ao processo, que explica, em parte, a menor acurácia do método numérico em relação ao analítico.

A análise de erros, através de testes de verificação e validação (V&V), tem sido uma necessidade quando se pretende divulgar artigos ou trabalhos em publicações científicas de renome (ROACHE, 1998). Por isto, antes de fazer qualquer projeto, ou estudo na área de dinâmica dos fluidos, deve-se fazer uma prévia análise dos erros envolvidos. Isto pode ser feito através de estimativas *a priori* e estimativas *a posteriori*.

Na estimativa *a priori*, procura-se avaliar qualitativamente as dimensões do erro gerado pelas aproximações numéricas utilizadas. Já na estimativa *a posteriori*, faz-se a análise

do erro de forma quantitativa, bastando para isto determinar a diferença entre a solução analítica e a solução numérica obtida, o que nem sempre é possível pois as soluções analíticas do problema são desconhecidas para boa parte dos casos. Isto faz com que seja necessário obter estimativas de erro com base em soluções analíticas estimadas, e passa-se a falar em incerteza da solução numérica.

Os modelos cujas soluções analíticas não são conhecidas, tem seus erros previstos através de estimadores de erros, que possibilitam fazer o estudo dos erros envolvidos nos métodos numéricos utilizados em CFD.

Considerando o exposto acima, este trabalho tem como objetivo o estudo do erro de truncamento e seu impacto no erro numérico final. Isto se deve ao fato de ser esta a principal fonte de erro, contribuindo mais significativamente no valor do erro numérico. Para isto foram tomados alguns cuidados para tornar os outros erros (iteração, arredondamento e programação) tão pequenos quanto possível, para que o erro de truncamento prevaleça no erro numérico.

O trabalho se baseia num problema unidimensional de advecção-difusão, resolvido com algumas funções de interpolação determinadas. A escolha deste problema como referência tem como justificativa o fato de ser uma equação muito utilizada em testes de novos modelos matemáticos e funções de interpolação, como pode ser visto em Ferziger e Pèric (1999).

1.2 RELEVÂNCIA DO PROBLEMA

O crescente impacto da modelagem computacional nos trabalhos de engenharia tem feito com que os trabalhos de pesquisa direcionados ao desenvolvimento de métodos quantitativos, que comparem os resultados computacionais e experimentais, recebam atenção cada vez maior (OBERKAMPF e BARONE, 2006).

Pode-se ver em Freitas (1999) que análises de nível de acurácia no desenvolvimento de soluções numéricas não são práticas comuns. Sua explicação para isto é a percepção de que a análise de erros não é tão importante e só consome tempo. Porém, a aplicação de modelos sem análises mais aprofundadas tem sido mais custosas.

Nos Estados Unidos da América (USA) o *Defense Modelling and Simulation Office* (DMSO) do *Department of Defense* tem liderado trabalhos na área de V&V no que diz respeito a conceitos e terminologia. Outro departamento do governo americano com grande

interesse nesta área é o *Accelerated Strategic Computing Initiative (ASCI)* do *Department of Energy (DOE)* (OBERKAMPF e TRUCANO, 2002).

Também é bastante oportuno a observação de Oberkampf e Trucano (2002), quanto à participação da CFD na área de V&V:

É justo dizer que usuários de métodos computacionais e experimentais do campo da dinâmica dos fluidos têm sido pioneiros no desenvolvimento de metodologias e procedimentos em validação. Embora, é também justo dizer, que o campo da CFD tem, em geral, procedido através de um caminho que é independente da validação. Há diversas razões porque a comunidade de CFD não tem percebido uma forte necessidade para V&V de códigos, especialmente validação.

A razão básica pela qual os autores justificam isto, é o clima de competição que se estabeleceu entre os usuários de métodos computacionais e experimentais, quando na verdade deveriam trabalhar de forma complementar. Vale ainda verificar uma outra parte do texto que pode ajudar a justificar o trabalho:

...há uma necessidade crítica por caracterizações detalhadas das condições experimentais e a estimação de incerteza das medidas do experimento. Similarmente, a estimativa quantitativa de erros numéricos pelo analista de CFD é uma necessidade. Para problemas complexos de engenharia, isto requer uma estimativa *a posteriori* de erro; não apenas análise formal de erro ou estimativa de erro *a priori*. (OBERKAMPF e TRUCANO, 2002).

Outro importante pesquisador da área, demonstra sua apreensão quanto ao destino dos estudos em V&V.

A seriedade com que V&V tem sido procurada em 2002 é surpreendente e animador. Parece que muitos usuários de métodos computacionais, de várias disciplinas, tem se tornado comprometido com o cuidado do trabalho... Mais que em qualquer outra atividade em que tenho participado, o campo de V&V requer esforço da comunidade, cooperação, comunicação honesta e aberta, construção de consenso, e tolerância pessoal (ROACHE, 2002).

Nesta apresentação, Roache parece corroborar as palavras de Oberkampf e Trucano (2002), no que diz respeito à competição e falta de cooperação, travando o desenvolvimento desta importante área.

Roache (2004) ainda explicita sua preocupação com a relação entre a modelagem computacional e a sociedade. Segundo ele, estes são anos de pseudociência e anti racionalismo, em que acaba-se ficando sobre o fio da navalha, pois cada erro cometido é de grande impacto para a opinião pública, acabando por traduzir-se em descrédito, para uma sociedade cada dia menos crente na ciência.

Além disto, os trabalhos de simulação estão geralmente relacionados a atividades de grande responsabilidade, tornando os erros catastróficos. Por isto a insistência na atenção que deve-se ter com as atividades de V&V nos trabalhos de modelagem computacional

Pode-se ver então, a partir do ponto de vista de alguns dos mais importantes pesquisadores desta área, a necessidade de trabalhos que estudem os impactos dos processos numéricos na acurácia das soluções, buscando sempre reduzir ao máximo os erros gerados.

Estes trabalhos de análises de erros estão relacionados a uma área que vem se desenvolvendo com grande intensidade em CFD, que é a de estudos envolvendo a verificação e validação (V&V), e que tiveram um grande interesse durante a década passada.

Este fato fica bastante evidente a partir da formação de grupos com foco em padronização na área, e nos vários trabalhos publicados desde então (OBERKAMPF e SCHWER, 2007).

Apesar da importância da última década, vê-se antes disto, já em 1986 uma preocupação importante quanto à organização e normatização do assunto. Pode-se verificar em Roache (1997 apud ROACHE et al., 1986), que no ano de 1986 os editores do *Journal of Fluids Engineering* (JFE) publicaram requerimentos mínimos que devem ser atendidos em relação a quantificação da acurácia numérica.

A partir de então, vários periódicos começaram a adotar normas de quantificação de incertezas numéricas. conforme mencionado por Roache (1997). Aparecem a *ASME Editorial Board* em 1994, o *American Institute for Aeronautics and Astronautics* (AIAA) também em 1994, e Gresho & Taylor também em 1994.

Em seu artigo de 1997, Roache inicia buscando definir conceitos importantes, mas que parecem ainda sem consenso no meio da dinâmica dos fluidos. Exemplo disto são os termos validação e verificação, erros numéricos e erros de modelagem, erros de discretização e erros de geração de malha, entre outros.

Na área específica da CFD, surgem os trabalhos do AIAA, com seu comitê de padronização em CFD, que lançou em 1998 o *AIAA Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations* (G-077-1998), um marco na organização dos trabalhos nesta área.

Com este mesmo foco de V&V, porém, na área de mecânica dos sólidos computacionais, a *American Society of Mechanics Engineers* (ASME), através de seu subcomitê de V&V em *Computational Solid Mechanics* (CSM), (PTC-60), publica em 2006 o *Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics* (ASME V&V 10-2006). Recentemente a mesma ASME formou o comitê de V&V em CFD e *Heat Transfer*

(PTC-61). Já a *American Nuclear Society* (ANS) apresenta em 2006, uma revisão de seus padrões de V&V, lançados inicialmente em 1987 (ANS-104).

Na área de elaboração de critérios para aceitação de artigos em publicações da área, tem-se as seguintes entidades:

- *ASME Journal of Fluid Engineering* (1991);
- *Clinical Biomechanics Journal* (2005); e
- *AIAA Technical Journals* (2006)

Em 2007, o periódico *Engineering with Computers* lança, o que Oberkamp e Schwer (2007) acreditam ser, a primeira edição especial de um jornal totalmente voltado à V&V. Os artigos ali apresentados são resultado de um mini simpósio em *Advances and Accomplishes in V&V*, que ocorreu como parte do *World Congress on Computational Mechanics* em 2006.

1.3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Além dos estudos apresentados até aqui, mostrando este desenvolvimento relacionado a trabalhos especificamente voltados à normatização de atividades de V&V, tem-se trabalhos correlatos de aplicação, como apresentados a seguir.

Pode-se ver em Leonard (1995) um estudo mostrando a diferença do erro de truncamento entre esquemas de advecção-difusão com diferenças finitas e volumes finitos, especialmente a ordem de acurácia do esquema QUICK para problemas de advecção-difusão permanentes.

Abassi et al. (2003) mostram um estudo sobre funções de interpolação aplicadas em fluxo bidimensional incompressível, e comparadas em termos de estabilidade numérica do processo e acurácia. A conclusão apresentada mostrou que, para fluxos sem direção privilegiada, as funções de interpolação lineares tem melhores resultados. Para fluxos com direção privilegiada, tanto a função de interpolação linear clássica quanto a exponencial têm igual acurácia.

O trabalho de Abdou e Soliman (2005) traz uma forma de solução da equação de Burgers utilizando método da iteração variacional.

Bi (2006) apresenta um trabalho que mostra que o esquema Mortar *Upwind* converge com ordem ótima na norma H^1 em problemas de advecção-difusão.

Em Bradot-Nico et al. (2007) vê-se a aplicação do esquema *upwind* na solução de um problema de advecção em múltiplas dimensões em malha cartesiana.

No trabalho de Diskin e Thomas (2007), uma nova ferramenta de análise computacional chamada *downscaling* (DS) *test* é apresentada e aplicada no estudo da taxa de convergência dos erros de discretização e truncamento da discretização em volumes finitos em malhas não estruturadas.

Já Araya et al. (2007), introduzem uma estrutura de estimativa de erro baseada na solução de problemas locais. Os índices de efetividade do estimador se mostraram significativamente melhor que o, previamente conhecido, estimador de base residual.

E finalmente, vários trabalhos vem sendo desenvolvidos pelo grupo de CFD da UFPR, podendo-se destacar alguns trabalhos como Marchi, Novak e Santiago (2008), que demonstram a eficácia das múltiplas extrapolações de Richardson (MER) como meio para redução do erro de discretização, sendo neste caso específico utilizado para a equação de Laplace bidimensional. Ainda dentro do grupo, tem-se o artigo de Marchi e Alves (2008), com estudo sobre verificação numérica em malhas unidimensionais com diferenças finitas.

Com base no exposto até aqui, pode-se verificar que o presente trabalho pretende acrescentar ainda mais aos estudos e desenvolvimentos que a área de V&V vem passando nos últimos anos, focando um tema bastante presente nos artigos mais recentes da área e indicando caminhos possíveis a trilhar no futuro.

1.4 OBJETIVOS DA DISSERTAÇÃO

O objetivo geral deste trabalho é verificar o efeito do tipo de aproximação numérica utilizada na discretização da equação de advecção-difusão, unidimensional, sem termo fonte em regime permanente.

Os objetivos específicos do trabalho são:

- Deduzir (análise *a priori*) as ordens assintótica e verdadeiras do erro de discretização;
- Verificar *a posteriori* o erro de discretização com e sem múltiplas extrapolações de Richardson;

- Verificar a *posteriori* as ordens assintótica e verdadeiras através da ordem aparente;
- Comparar os erros e ordens das diversas funções de interpolação; e
- Verificar o efeito da variação do número de Peclet na solução numérica.

1.5 DELINEAMENTO DA DISSERTAÇÃO

A dissertação será apresentada em sete capítulos, distribuídos da seguinte forma:

- O primeiro capítulo, introdutório, definiu o problema que será estudado, as motivações e importância do trabalho, seus objetivos gerais e específicos, e o delineamento do projeto;
- O segundo capítulo consiste da fundamentação teórica do tema, desenvolvendo os principais conceitos, necessários ao desenvolvimento e compreensão do trabalho;
- O terceiro capítulo descreve os procedimentos analíticos e numéricos utilizados para obtenção dos objetivos do trabalho;
- O quarto capítulo mostra os resultados obtidos nas diversas simulações realizadas; e
- O quinto capítulo fecha o trabalho propriamente dito, mostrando as conclusões finais a que se chegou.

Apresentados os capítulos acima, as seções posteriores trazem as referências bibliográficas, bases do trabalho, e finalmente, nas últimas seções, dois apêndices com as demonstrações de como foram obtidos alguns dados importantes do trabalho.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo tem como objetivo apresentar os principais conceitos abordados no trabalho. É um capítulo bastante extenso mas importante para o entendimento dos resultados finais.

2.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES

São as formulações matemáticas utilizadas para resolver problemas representativos de fenômenos físicos. No caso dos fenômenos em CFD, as equações governantes representam descrições matemáticas das leis de conservação da física:

- A massa do fluido é conservada;
- A taxa de variação da quantidade de movimento linear deve ser igual à soma das forças atuantes sobre a partícula de fluido; e
- A taxa de variação da energia é igual à soma da taxa de adição de calor, e a taxa de trabalho realizado pela partícula de fluido.

Considerando uma variável genérica “ ϕ ”, a forma conservativa para todos os escoamentos de fluido pode ser descrita como a Eq.(2.1), conhecida como equação de transporte para a propriedade “ ϕ ” (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \phi) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma \vec{\nabla} \phi) + S_{\phi} \quad (2.1)$$

Esta é a equação considerada inicialmente para procedimentos computacionais em CFD, sendo então adequada para descrição matemática de cada fenômeno específico.

2.2 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Segundo Maliska (2004) qualquer método que obtenha as equações aproximadas levando em consideração, e satisfazendo, a conservação das propriedades em nível de volumes elementares, é um método de volumes finitos. Considerando como volume

elementar, o menor volume de fluido ainda tratado como um meio contínuo, ou seja, que não é afetado pelas atividades moleculares / atômicas do fluido.

Pode-se obter as equações discretizadas de duas formas através do método dos volumes finitos. A primeira é através de um balanço da propriedade no volume elementar. Já a segunda é por meio de integração, sobre o volume de controle (CV), no espaço e no tempo, das equações na forma conservativa. Utilizando a integração sobre o volume elementar e considerando a Eq.(2.1), obtém-se (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995),

$$\int_{CV} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{CV} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \phi) dV = \int_{CV} \vec{\nabla} \cdot (\Gamma \vec{\nabla} \phi) dV + \int_{CV} S_{\phi} dV \quad (2.2)$$

Aplicando o teorema da divergência de Gauss na Eq. (2.2), chega-se a

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} \rho \phi dV + \int_{A_{cv}} \vec{n} \cdot (\rho \vec{V} \phi) dA = \int_{A_{cv}} \vec{n} \cdot (\Gamma \vec{\nabla} \phi) dA + \int_{CV} S_{\phi} dV \quad (2.3)$$

A Fig.2.1 mostra o significado físico de cada um dos termos desta equação.

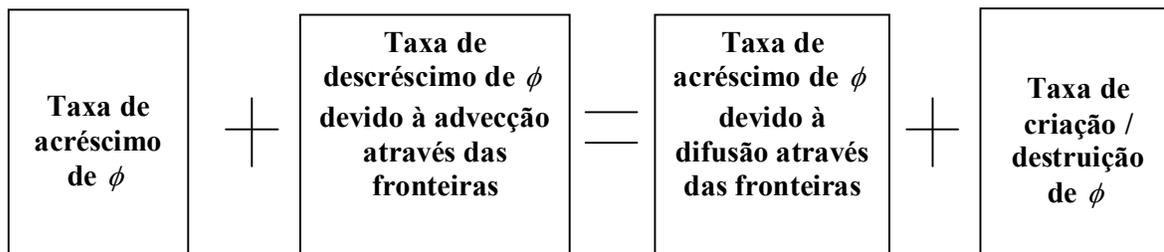


Figura 2.1 – Significado físico dos termos da Eq. (2.3)

2.3 DISCRETIZAÇÃO

Para discretização da EDP deve-se primeiramente discretizar o espaço, ou domínio, que é a região em que a modelagem física foi feita. Isto é realizado dividindo-o em pontos, ou volumes de controle (CV), processo representado pela Fig.2.2.

A divisão da região, ou discretização, gera uma malha de pontos/volumes de controle. Os pontos, ou nós, são os locais onde serão definidas as variáveis de interesse, por isto é importante que seja feita uma análise pormenorizada na geração da malha.

Verifica-se em Schneider (2007) que a geração da malha pode ser de quatro formas básicas: uniforme, não-uniforme, estruturada e não-estruturada.

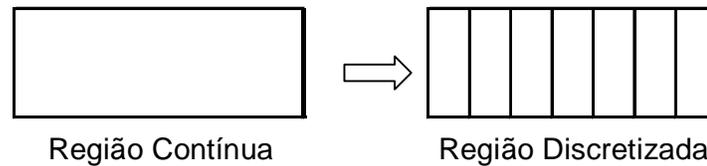


Figura 2.2 – Discretização do espaço unidimensional

A malha não-uniforme é aquela em que os tamanhos de seus elementos constitutivos variam aleatoriamente. A aplicação deste tipo de malha se justifica quando for necessário um refino em determinado local da malha, onde descontinuidades ou grandes gradientes de alguma propriedade de interesse se fizerem presentes. Já a malha uniforme, ao contrário da anterior, tem elementos de mesmo tamanho.

A não-estruturada é aquela que não existe lei de formação entre os elementos que a compõem, sendo mais difícil de trabalhar, em função de sua complexidade computacional, mas por outro lado, sendo extremamente versátil quando trata-se de geometrias irregulares. Já a estruturada tem lei de formação específica.

Quando tem-se um domínio regular a melhor maneira de se obter a solução numérica é usando uma malha estruturada, que resulta em menor custo computacional. Deste modo, as malhas estruturadas uniformes devem ter preferência sobre as outras, só não sendo usadas quando seu uso não for adequado.

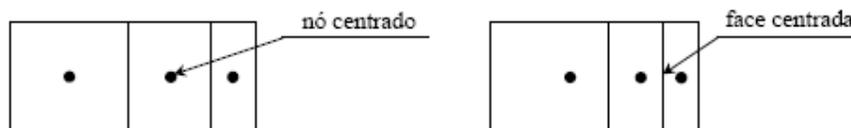


Figura 2.3 – Volume de nó centrado (VNC) e volume de face centrada (VFC)

As discretizações com o método dos volumes finitos ainda trazem duas outras peculiaridades na geração das malhas, que dizem respeito ao posicionamento do nó no volume de controle. Aqui existem duas possibilidades (Fig. 2.3) que são, geração de malhas de nós centrados e de faces centradas. As malhas de nós centrados são geradas quando os nós estão localizados no ponto médio entre as faces de cada CV. Já as de face centradas são feitas quando a malha é gerada posicionando-se inicialmente os nós, e depois centrando-se as faces dos CV's no ponto médio entre os nós.

Com base no exposto acima, o trabalho tomou por base as malhas estruturadas uniformes, que conseqüentemente são simultaneamente do tipo de nós centrados e faces centradas.

Quanto ao tamanho dos elementos de malha, pode-se ver intuitivamente que, quanto mais fina for a malha, ou seja, quanto maior for o número de pontos, mais fiel ao modelo matemático será o resultado obtido (menor o erro de discretização).

Depois de gerada a malha, é necessário discretizar a EDP, ou seja, escrevê-la em função dos pontos onde será resolvida. Para isto é necessário utilizar uma forma de discretização que aproxime a equação diferencial inicial, resultando em um sistema algébrico de equações a ser resolvido (FERZIGER e PÈRIC, 1999).

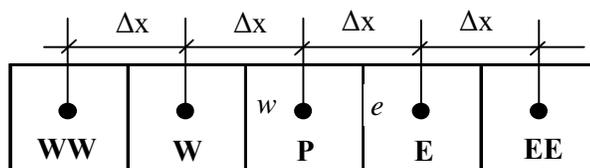


Figura 2.4 – Volume genérico “P” e seus vizinhos no domínio discreto (malha uniforme unidimensional)

Para exemplificar o que está exposto, supõe-se a seguir um problema de condução unidimensional, cuja modelagem matemática seja representada por,

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + S_{\phi} = 0. \quad (2.4)$$

Aplicando o MVF e integrando-a no volume elementar “P” da Fig. 2.4, resulta em,

$$\int_w^e \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dx + \int_w^e S_{\phi} dx = 0 \quad (2.5)$$

Realizando as integrais, tem-se,

$$\left[\Gamma \frac{d\phi}{dx} \Big|_e - \Gamma \frac{d\phi}{dx} \Big|_w \right] + S_{\phi_p} \cdot \Delta x_p = 0 \quad (2.6)$$

sendo S_{ϕ_p} o termo fonte e Δx_p o tamanho do volume de controle em x .

O processo de discretização ainda não está finalizado, uma vez que a Eq.(2.6) ainda não está descrita em função do domínio discreto. Nesta equação estão presentes os termos

difusivos na face leste, identificado pelo índice “ e ”, e na face oeste, indicado pelo índice “ w ”. Eles representam o fluxo difusivo através das respectivas faces no volume elementar “ P ”.

Porém, o interesse é obter-se a solução para o ponto discreto “ P ” deste volume elementar. Tem-se então que escrever estes fluxos nas faces leste e oeste em função destes pontos discretos da malha, e de seus nós vizinhos (Fig.2.4). Para isto, torna-se necessário fazer aproximações numéricas através das funções de interpolação, cuja qualidade numérica é fundamental para a acurácia da solução obtida (MARCHI, 1993).

2.4 REFINO DA MALHA COMPUTACIONAL

Para o estudo dos erros de discretização, é preciso obter as soluções numéricas em malhas de diferentes dimensões dos CV's, isto é feito através do refinamento da malha.

Verifica-se em Schneider (2007) cinco formas de refino de malha para volumes finitos. São eles os refinamentos uniforme (RU), semi-uniforme (RSU), entre centros (RC), entre centros com fator de interpolação constante (RFE) e refino aleatório (RA). A Fig. 2.5 ilustra o tipo de refino uniforme, que pode ser aplicado para malhas uniformes e não-uniformes.

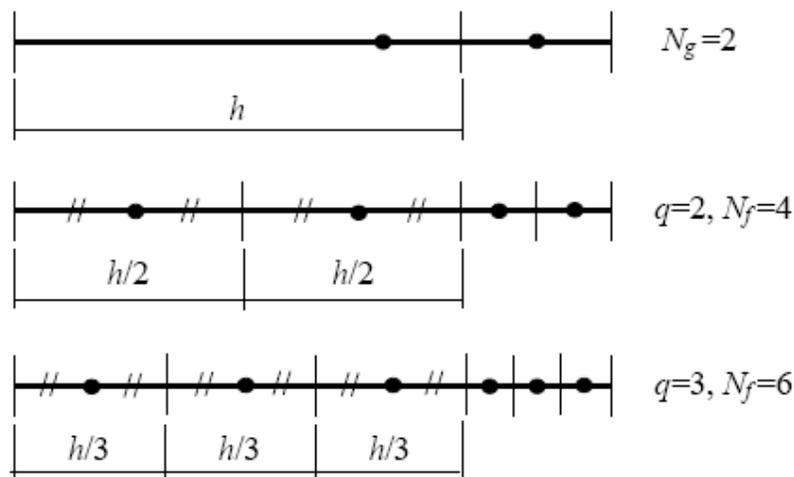


Figura 2.5 – Refino uniforme em malha não-uniforme (Schneider, 2007)

Como neste trabalho foi considerada uma malha uniforme com nós centrados, escolheu-se o refino uniforme para a malha. Este tipo de refino tem como base a divisão de cada volume de controle em (n) volumes de mesmo tamanho, independente da posição em que se encontra o centro do volume. Sua razão de refino (q) é dada por,

$$q = \left(\frac{N_f}{N_g} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (2.7)$$

onde N_f e N_g são o número de volumes da malha mais fina e mais grossa respectivamente, e D é a dimensão do problema (uni, bi ou tridimensional).

2.5 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Condições de contorno (CC) são os valores necessários para a solução de uma EDP, de forma a torná-la (solução) única, ou seja, que façam com que uma, e somente uma solução possa ser destacada de uma família de soluções, satisfazendo a EDP tanto no domínio, quanto nas fronteiras.

Pode-se ver em Tannehill et al. (1997) que a aplicação das condições de contorno tem papel essencial na solução computacional de problemas em CFD, sendo que a técnica de utilização tem papel fundamental na estabilidade e convergência da solução numérica.

Esta visão é confirmada por Chung (2002) que relata as instabilidades da solução geradas por especificações incorretas das condições de contorno. Outros efeitos destas incorreções podem ser a não convergência, ou mesmo resultados sem acurácia, motivo pelo qual, sua importância para a solução ser tão grande.

A forma como se aplica as condições de contorno nas soluções analíticas são bem conhecidas, o que não é o caso para a solução numérica, onde muitas vezes aproximações devem ser feitas.

Após verificadas a importância das condições de contorno e como são aplicadas, torna-se necessário saber que tipos de CC's são usadas para solução de problemas em CFD, ou de forma mais geral, para soluções de EDP's. Existem três tipos, que são: Dirichlet, Neumann e Robin.

A condição de contorno de Dirichlet, ou também chamada de primeiro tipo, é aquela em que os valores da variável dependente são conhecidas nas fronteiras (CHUNG, 2002 e TANNEHILL et al., 1997). A segunda forma de condição de contorno é a de Neumann, ou de segundo tipo, que surge quando tem-se a derivada normal da variável na fronteira (TANNEHILL et al., 1997). E finalmente a condição de contorno de Robin, ou do terceiro tipo, que é uma combinação linear das duas anteriores, ou seja, tem-se o valor de uma

combinação da variável e de sua derivada normal na fronteira, sendo necessário neste caso, a realização do balanço de energia na superfície da fronteira (INCROPERA e DEWITT, 1996).

2.6 VOLUMES DE FRONTEIRA

Foi apresentado acima o que vem a ser as condições de contorno, sua importância, e os tipos de CC's que podem ser utilizadas para solução de EDP's. Será visto agora, como considerar estas CC's na discretização do domínio, e de que modo esta discretização afeta a obtenção das equações algébricas necessárias à solução dos problemas em CFD.

Segundo Maliska (2004) pode-se aplicar as condições de contorno no domínio discretizado de três formas básicas: a de meio volume, a de volumes fictícios, e a do balanço para os volumes de fronteira.

2.6.1 Método do Meio Volume

Pode-se ver em Maliska (2004) que o método do “meio volume” de fronteira, é aquele em que o domínio é discretizado de tal forma, que o centro do volume de controle da fronteira seja localizado exatamente sobre a fronteira, conforme pode ser visto na Fig. 2.6.

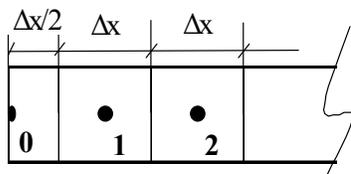


Figura 2.6 – Meio volume de fronteira

A vantagem deste método é que tem-se o valor nodal de fronteira como o valor da própria CC, não necessitando a geração de relações e aproximações para obtenção deste valor. Ainda assim, esta vantagem só aparece quando aplica-se a CC de Dirichlet, pois com as de Neumann ou Robin tem-se ainda que fazer um balanço nos volumes de fronteira, gerando novas relações.

Outro problema que aparece diz respeito à não uniformidade dos volumes, que gera dificuldades nas rotinas computacionais, pois geram sub-rotinas específicas nestes pontos. No

caso de um domínio unidimensional não chega a ser um complicador, porém, quando tratar-se num domínio bi ou tridimensional, pode-se estar falando até em volumes de 12,5% do tamanho do volume genérico (volumes de canto no caso tridimensional).

E finalmente, como último complicador deste caso, tem-se a importante questão conceitual em relação à observância da conservação de energia e de outras propriedades nestes meio volumes, que não é observada.

2.6.2 Método dos Volumes Fictícios

Neste método o domínio é discretizado de tal forma que o domínio real contenha os volumes de controle internos da malha. Para isto são gerados volumes fictícios nas fronteiras, ou seja, volumes que não existem no domínio real, e que são considerados para fins da aplicação das condições de contorno, conforme pode ser visto na Fig.2.7.

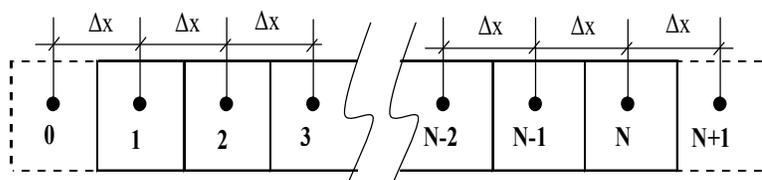


Figura 2.7 – Volumes das fronteiras esquerda e direita no domínio unidimensional

Uma importante característica deste método é que ele satisfaz às leis da conservação. Isto porque o sistema de equações algébricas é obtido inicialmente fazendo a integração das equações conservativas para todos os volumes internos, que já garante a satisfação da conservação dos volumes. E finalmente as relações para obtenção dos valores nos nós fictícios são feitas a partir de relações algébricas simples.

A desvantagem do método é a geração de mais algumas incógnitas, que são as oriundas dos volumes fictícios. Novamente, não é problemático para domínios unidimensionais, porém, para bi ou tridimensionais pode ser limitante em termos computacionais.

2.6.3 Método do Balanço para os Volumes de Fronteira

Com este método, a integração das equações governantes, em sua forma conservativa, não é feita somente para os volumes de controle internos, mas é feita também

para os volumes de controle de fronteira (Fig. 2.8). Isto faz com que o processo seja fisicamente correto, uma vez que as leis da conservação são satisfeitas em todo o domínio.

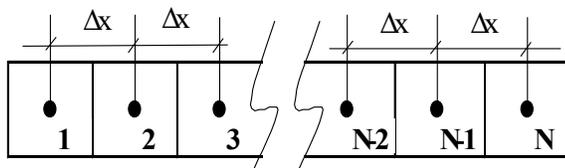


Figura 2.8 – Balanço para os volumes de fronteira.

Para o caso unidimensional existirão três conjuntos de integrações para gerar o sistema de equações algébricas. Uma para cada volume de fronteira e um terceiro para o domínio que vai do nó 2 a N-1. Desta forma, as equações conservativas são integradas para todos os volumes de controle.

2.7 FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO

Conforme pode-se ver em Marchi (1993), função de interpolação (FI) é aquela relação utilizada para expressar os valores das incógnitas do problema e de sua derivada normal nas faces dos volumes de controle. Sob outro ponto de vista, Maliska (2004) diz que as FI's tem como objetivo conectar os pontos nodais, que são os locais de armazenamento das variáveis de interesse.

Ambos os conceitos são corretos e complementares, sendo possível dizer que, as FI's são relações utilizadas para obtenção dos valores das incógnitas do problema e de sua derivada normal nas faces dos volumes de controle, obtendo, ao mesmo tempo, relações conectivas dos pontos (nodais) da malha discretizada.

Tendo mais claro o que são as FI's, é possível ver agora de que forma estas relações são obtidas. A primeira é com a representação das relações nodais através de expansões em séries de Taylor. A segunda é através de interpolações polinomiais (FORTUNA, 2000).

A expansão em séries de Taylor permite escrever o valor da variável em cada ponto da malha através de uma série infinita (FORTUNA, 2000). Por serem infinitas, deve-se considerar um ponto de “corte” (truncamento), onde deseja-se obter a quantificação finita da variável a partir da série. Desta afirmativa, fica claro que, uma parte da série foi descartada, ou seja, a série foi truncada em determinado ponto. Este resíduo não considerado é um erro do processo numérico, que neste caso é conhecido como erro de truncamento (ϵ_τ).

Considerando este aspecto, a principal preocupação é conseguir trabalhar com funções de interpolação que tenham o menor erro de truncamento possível, sendo que a função ideal seria aquela que conectasse os pontos nodais com a própria solução do problema a ser resolvido. Isto ocorre num número muito limitado de problemas.

Maliska (2004) também alerta para o fato que as FI's devem gerar o menor erro de truncamento possível, e adiciona ainda que devem envolver o menor número possível de pontos nodais, de modo a não gerar uma matriz muito complexa.

Com base na definição de Maliska (2004), a aproximação CDS-2 (*Central Difference Scheme* de segunda ordem) se torna bastante interessante, uma vez que é de 2ª ordem, e envolve somente dois pontos nodais. Porém, ele também alerta que este tipo de FI, de alta ordem, tende a gerar oscilações numéricas em regiões de grandes gradientes em problemas de advecção dominante.

Voltando à definição dada por Marchi (1993) vê-se dois tipos de relações que devem ser geradas. A primeira é para conseguir o valor da variável na face, termo advectivo. Já a segunda relação é para conseguir o valor da derivada normal na face, que é o termo difusivo.

A aproximação numérica dos termos difusivos não traz grandes problemas de estabilidade para o método numérico, e em geral a utilização do esquema de diferenças centrais é satisfatório (MALISKA, 2004). Já os termos advectivos devem ser melhor trabalhados. Para Chung (2002), enquanto os termos advectivos ditam a acurácia da solução, os termos difusivos mantêm sua estabilidade.

Foram apresentadas anteriormente algumas questões relativas aos erros de truncamento gerado por estas aproximações. Torna-se bastante importante neste momento entender, mesmo que de modo vago ou intuitivo, qual a relação entre a ordem da FI e seu erro de truncamento.

As funções de interpolação podem ser classificadas pela ordem do erro gerado. Quanto a isto podem ser de 1ª, 2ª, 3ª,ou de enésima ordem, sendo que, quanto maior a ordem, mais acurada, em termos de resultado, é a solução numérica. Outro aspecto importante relativo a isto é que, quanto maior a ordem do erro da FI, maior o número de nós envolvidos na relação dada pela FI.

O exposto acima faz crer que aproximações de mais alta ordem são as mais adequadas, porém, isto pode não ser verdade. Para Fortuna (2004), quanto maior o número de pontos envolvidos na aproximação, maior o risco de problema de instabilidade do método numérico. Além disto, quando próximos à fronteira, o grande número de pontos pode fazer

com que alguns caiam fora do domínio, e outra aproximação é necessária para estas regiões, gerando algumas complicações computacionais adicionais.

Quando se utilizam malhas grossas, os erros das FI's de alta ordens não são necessariamente menores que as de baixa ordem (FORTUNA, 2000 apud FLETCHER, 1992). Isto porque a função expandida em série de Taylor pode apresentar descontinuidades, por não ser suave o suficiente. O resultado disto é que suas derivadas de mais alta ordem na série podem não diminuir de magnitude, como se supõe, fazendo com que a ordem do erro que está sendo considerado acabe por perder seu significado.

Finalmente, Fortuna (2000) sugere que se considere ordens de erro dentro de uma razoabilidade, com o objetivo de obtenção de boa eficiência computacional, ou seja, uma boa relação entre estrutura computacional e precisão de resultados.

2.8 FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO PARA TERMOS ADVECTIVOS

Pode-se ver em Maliska (2004) que o termo advectivo tem como característica física a transmissão de perturbações apenas no sentido da velocidade. Matematicamente isto se justifica por ser este um termo parabólico. Mais adiante será visto o impacto desta característica nas soluções dos problemas.

A seguir serão apresentadas as principais funções de interpolação usadas neste trabalho para aproximação dos termos advectivos. Todos os termos das equações tem por base a Fig. 2.4, considerando também que são aplicadas a malhas unidimensionais uniformes.

2.8.1 UDS (*Upstream Difference Scheme*)

Conhecido como *Upstream Difference Scheme*, ou *upwind*, é o mais simples e estável de todos (MARCHI, 1993). Possui acurácia de 1ª ordem. É um esquema dissipativo, que não gera oscilações numéricas quando utilizado para os termos advectivos, porém, suaviza os altos gradientes.

Esta é a única aproximação que satisfaz incondicionalmente um critério conhecido como *boundedness condition*¹, ou seja, não irá gerar soluções oscilatórias, embora seja

¹ *Boundedness Condition* é um critério que afirma que, na ausência de termos fontes, os valores nodais internos de determinada variável de interesse, devem estar entre os valores mínimos e máximos das condições de contorno. Outra imposição desta condição é que todos os coeficientes das equações discretizadas tenham o mesmo sinal (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2005).

numericamente difusiva. Este é um critério difícil de ser garantido, e apenas alguns esquemas de 1ª ordem garantem esta propriedade. Esquemas de mais alta ordem podem não atender a este requisito, porém, isto ocorre mais frequentemente em malhas mais grossas, sendo resolvido com um refinamento da malha (FERZIGER E PÈRIC, 1999).

Sua relação é dada pelas seguintes equações,

$$\phi_w = \phi_W \quad \phi_e = \phi_P \quad u \geq 0 \quad (2.8)$$

$$\phi_w = \phi_P \quad \phi_e = \phi_E \quad u \leq 0 \quad (2.9)$$

2.8.2 UDS-2 (*Upstream Difference Scheme de 2ª ordem*)

Este é o esquema UDS com aproximação de 2ª ordem. Na literatura é também conhecido como *Beam-Warming Scheme* (MURTHY et al., 1998).

Foi aqui considerado para velocidades positivas ($u > 0$) e as relações que definem os valores das variáveis nas faces são dadas por,

$$\phi_e = \frac{3 \cdot \phi_P - \phi_W}{2} \quad (2.10)$$

$$\phi_w = \frac{3 \cdot \phi_W - \phi_{WW}}{2} \quad (2.11)$$

Este esquema foi desenvolvido para melhorar a ordem de erro gerada. É um esquema muito complexo, devido às várias possibilidades de direções do fluxo, e necessita uma grande quantidade de interpolações. A possibilidade de ocorrência de oscilações na solução numérica quando utilizando malhas grossas, e a dificuldade de programação, fizeram com que este esquema não fosse muito difundido (FERZIGER e PÈRIC, 1999).

2.8.3 CDS-2

Abreviação de *Central Difference Scheme*, o CDS-2 é um esquema de 2ª ordem. É utilizado de forma muito positiva para os termos difusivos, porém, pode trazer erros consideráveis quando aplicado aos termos advectivos. Este erro aumenta à medida que tem-se um aumento no número de Peclet (ou Reynolds).

É a aproximação mais largamente utilizada, sendo uma interpolação linear entre dois nós próximos. Assim como todas as aproximações de ordem maior que um, pode gerar oscilações na solução. Uma de suas desvantagens físicas é que a direção do fluxo não é levada em conta, recebendo influência de mesma intensidade dos nós à direita e à esquerda.

Para Maliska (2004) este é um esquema que, quando aplicado aos termos convectivos, tende a criar coeficientes negativos nas equações discretizadas, o que pode impedir a obtenção da solução. Diz ainda que a presença de aproximações no termo advectivo, quando estes forem dominantes, gera instabilidades e produz soluções impregnadas de oscilações numéricas (*wiggles*) em regiões de grandes gradientes. Para ele, os esquemas de alta ordem não tem a capacidade de dissipar estas oscilações, ou seja, são conhecidos como esquemas não-dissipativos.

As seguintes relações representam este esquema,

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (2.12)$$

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad (2.13)$$

2.8.4 QUICK

Abreviação de *Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics*. Função de interpolação desenvolvida por Leonard em 1979 (MARCHI, 1993). Sua idéia básica é aumentar a ordem da aproximação, que, neste caso se torna de 3ª ordem. É ligeiramente superior à CDS, mas ambas convergem com erro de 2ª ordem, sendo raro observarem-se diferenças significativas entre os dois esquemas (MALISKA, 2004).

Conforme indicado, no esquema CDS-2 a aproximação entre dois nós próximos foi feito por interpolação linear. Neste caso a aproximação é feita por uma parábola, necessitando um ponto a mais para sua construção (FERZIGER e PÈRIC, 1999).

Considerando a velocidade $u > 0$, tem-se este esquema representado por,

$$\phi_e = \frac{6}{8} \cdot \phi_P + \frac{3}{8} \cdot \phi_E - \frac{1}{8} \cdot \phi_W \quad (2.14)$$

$$\phi_w = \frac{6}{8} \cdot \phi_W + \frac{3}{8} \cdot \phi_P - \frac{1}{8} \cdot \phi_{WW} \quad (2.15)$$

2.8.5 PLDS (*Power Law Difference Scheme*)

Esquema desenvolvido por Patankar em 1979. Sua base conceitual é a busca por corrigir algumas inconsistências do esquema híbrido. A principal delas é a consideração de que o efeito da difusão cessa tão logo tenha-se $-2 \geq Pe_h$ e $Pe_h \geq 2$, onde Pe_h é o Peclet da malha, dado por,

$$Pe_h = \frac{\rho \cdot u \cdot \Delta x}{\Gamma}, \quad (2.16)$$

Neste esquema, o efeito da difusão cessa assim que Pe excede o valor 10. Se Pe está entre zero e dez, o fluxo é analisado usando uma expressão polinomial.

Considerando a possibilidade de escrever a equação de advecção-difusão discretizada de uma forma genérica por (PATANKAR, 1980),

$$a_p \cdot \phi_p = a_E \cdot \phi_E + a_W \cdot \phi_W + b_p, \quad (2.17)$$

pode-se definir os valores de a_E e a_W para o esquema PLDS como,

$$a_E = D_e \cdot \max\left[0, (1 - 0,1 \cdot |Pe_e|)^5\right] + \max[-F_e, 0] \quad (2.18)$$

$$a_W = D_e \cdot \max\left[0, (1 - 0,1 \cdot |Pe_w|)^5\right] + \max[F_w, 0] \quad (2.19)$$

sendo que, as relações D , F e Pe são dadas por,

$$Pe = \frac{F}{D} = \frac{\rho \cdot u}{\Gamma / \Delta x} \quad (2.20)$$

A proximidade deste esquema ao esquema exponencial é muito grande, em termos de resultado, o que leva Patankar (1980) a considerá-lo como o mais propício em problemas de advecção-difusão, sendo o esquema híbrido relegado somente a alguns casos mais específicos.

2.8.6 WUDS

Abreviação de *Weighted Upstream Differencing Scheme*, esta função de interpolação é associada a dois coeficientes, α e β , que dependem do número de Peclet (Pe) e traduzem o peso da advecção e difusão no fenômeno. Como esta seção trata da aproximação do termo

advectivo, ou seja, em determinar o valor das variáveis nas faces, será considerado somente o termo α , que é obtido por,

$$\alpha = \frac{Pe^2}{10 + 2Pe^2} \quad (2.21)$$

onde Pe é obtido através da Eq.(2.16).

Para obtenção dos valores das variáveis nas faces usam-se as seguintes relações,

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right)\phi_E \quad (2.22)$$

$$\phi_w = \left(\frac{1}{2} + \alpha_w\right)\phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w\right)\phi_P \quad (2.23)$$

2.8.7 ALFA

O esquema alfa aqui considerado é um esquema similar ao WUDS, onde é definido um valor específico para alfa nas equações abaixo.

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right)\phi_E \quad (2.24)$$

$$\phi_w = \left(\frac{1}{2} + \alpha\right)\phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right)\phi_P \quad (2.25)$$

2.8.8 TVD

Para Chung (2002), o mais importante desenvolvimento em CFD foi o UDS de 2ª ordem com alta resolução, conhecido como TVD, abreviação de *Total Variation Diminishing*. Os estudos de desenvolvimento deste esquema se iniciaram em 1959 com Godunov e tiveram desenvolvimentos posteriores, com Van Leer em 1973 e 1979, Harten e Lax em 1981, Harten em 1983 e 1984, Osher em 1984, Osher e Chakravarthy em 1984 e, finalmente, revisado por Hirsch em 1990.

Segundo Marchi (1993), estes tipos de esquema foram desenvolvidos para evitar o surgimento de oscilações na solução numérica em problemas unidimensionais.

A condição principal para um esquema TVD é que, a variação total da solução, dada pela Eq.2.26, decresça com as iterações (BLAZEK, 2001).

$$TVD = \sum_I (U_{I+1} - U_I) \quad (2.26)$$

Os esquemas TVD são implementados como uma média dos fluxos advectivos, combinados com um termo de dissipação adicional. Se o termo de dissipação depender do sinal da velocidade, então é chamado TVD simétrico, caso contrário é um TVD *upwind*, que tem melhor ordem de acurácia que o anterior (BLAZEK, 2001). É um esquema de 2ª ordem em regiões de fluxos suaves, e de 1ª ordem em regiões de descontinuidade (BLAZEK, 2001).

O esquema TVD utilizado neste trabalho será do tipo *Superbee*, proposto por Roe em 1983. Sua representação, como segue, foi tirada de Marchi (1993),

$$\alpha_e = \frac{1}{2}(1 - \Psi_e) \quad (2.27)$$

$$r_e = \frac{(\phi_P^* - \phi_W^*)}{(\phi_E^* - \phi_P^*)} \quad (2.28)$$

$$\Psi_e = \text{MAX}[0; \text{MIN}(2r_e; 1); \text{MIN}(r_e; 2)] \quad (2.29)$$

As Eqs. (2.27) e (2.28) são válidas para $u > 0$. O fator r_e introduz uma não-linearidade no cálculo de Ψ_e e α_e (MARCHI, 1993). Após calculados os valores de “ α ” para a face leste, e face oeste, estes devem ser substituídos nas Eqs.(2.22) e (2.23) para obtenção das aproximações com o esquema TVD.

2.8.9 ADS

O esquema ADS, ou *Adaptable Difference Scheme*, é apresentado a seguir pelas Eqs. (2.30), (2.31), (2.32) e (2.33) (MARCHI, 1993). Neste esquema o valor de ϕ_e^* não depende do sentido do escoamento.

$$\phi_e^- = \phi_P^* + \frac{1}{2} \cdot (\phi_P^* - \phi_W^*) \quad (2.30)$$

$$\phi_e^m = \frac{1}{2} \cdot (\phi_P^* + \phi_E^*) \quad (2.31)$$

$$\phi_e^+ = \phi_E^* - \frac{1}{2} \cdot (\phi_{EE}^* - \phi_E^*) \quad (2.32)$$

$$\phi_e^* = \text{MAX}[\text{MIN}(\phi_e^-; \phi_e^m); \text{MIN}(\phi_e^-; \phi_e^+); \text{MIN}(\phi_e^m; \phi_e^+)] \quad (2.33)$$

sendo ϕ_e^- obtido pela extrapolação linear de ϕ_w e ϕ_p sobre a face leste do volume de controle P; ϕ_e^m é a média aritmética entre ϕ_p e ϕ_E ; ϕ_e^+ obtido pela extrapolação linear de ϕ_{EE} e ϕ_E sobre a face leste do volume de controle P. Desta forma ϕ_e^* obtida pela Eq. (2.33) corresponde a um valor intermediário entre ϕ_e^- , ϕ_e^m e ϕ_e^+ .

2.9 FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO PARA TERMOS DIFUSIVOS

Como característica física dos termos difusivos tem-se sua natureza elíptica, que faz com que as perturbações sejam transmitidas (difundidas), em todas as direções, ou seja, independente da velocidade do fluxo, existe a difusão mesmo no sentido contrário ao da velocidade.

Conforme visto anteriormente, a aproximação dos termos difusivos não gera grandes problemas ao método numérico, dando estabilidade, enquanto o termo advectivo dá acurácia, ou seja, tem maior impacto sobre o erro numérico. Isto torna necessário algum cuidado para que as ordens de erro das FI's do termo difusivo não poluam as ordens de erro das FI's do termo advectivo.

Para focar a influência dos termos advectivos no erro da solução numérica, foram escolhidas aproximações para os termos difusivos tais, que seus erros tivessem impactos menores que das aproximações dos termos advectivos na solução numérica final. Isto explica a escolha de uma aproximação de 2ª ordem para as FI's advectivas de 1ª e 2ª ordem, e uma aproximação de 4ª ordem para o esquema QUICK, de 3ª ordem de erro de truncamento. Será possível ainda, ao final do trabalho, identificar a influência da ordem do CDS-2 no esquema QUICK, que resulta na redução da ordem de 3ª para 2ª ordem.

2.9.1 CDS-2

O esquema CDS-2 é de 2ª ordem e tem como vantagens sua simplicidade, por envolver somente dois pontos nodais, e sua alta ordem com relação a seu erro de truncamento. Por isto, tem seu uso amplamente disseminado.

As derivadas de 1ª ordem são definidas nas faces por,

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \quad (2.34)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \quad (2.35)$$

2.9.2 CDS-4

O esquema CDS-4 é de 4ª ordem e tem a vantagem de sua elevada ordem de erro, porém, tem como desvantagem ter quatro pontos nodais envolvidos no cálculo, o que traz algumas complicações computacionais.

As derivadas de 1ª ordem são definidas nas faces pelas Eqs.(2.36) e (2.37).

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e = \frac{27\phi_E - 27\phi_P + \phi_W - \phi_{EE}}{24\Delta x} \quad (2.36)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_w = \frac{27\phi_P - 27\phi_W + \phi_{WW} - \phi_E}{24\Delta x} \quad (2.37)$$

2.10 MÉTODO DIRETO DE SOLUÇÃO

O TDMA, ou algoritmo de *Thomas*, ou ainda *Tri-Diagonal Matrix Algorithm*, é um método que resolve de forma direta sistemas de equações, cuja matriz de coeficientes é do tipo tridiagonal. Este será o método utilizado para solução do sistema de equações algébricas geradas a partir da discretização das equações diferenciais que governam o fenômeno.

Este método de solução é utilizado para sistemas unidimensionais, podendo ser utilizado também em sistemas bi ou tridimensionais com algumas adaptações e com a utilização de métodos iterativos associados.

Tendo por base a Eq. (2.6), que foi integrada usando o MVF, e após serem feitas as aproximações numéricas dos termos difusivos e advectivos, resulta, para cada volume de controle, uma equação no formato da Eq. (2.17). Tem-se então um sistema de equações algébricas. Lembrando que é um sistema linear, que pode ser representado de forma matricial pela Eq. (2.38). Sendo que, no caso de problemas unidimensionais trata-se com matrizes tridiagonais.

$$[A][\phi] = [B] \quad (2.38)$$

O objetivo do método é encontrar uma solução direta do tipo da Eq. (2.39). Sendo que, P_p e Q_p , são os coeficientes do método TDMA.

$$\phi_p = P_p \cdot \phi_E + Q_p \quad (2.39)$$

Para cálculo dos coeficientes do método, serão utilizadas a Eq.(2.40) e (2.41). Sendo que, estes coeficientes são válidos somente para os nós internos da malha.

$$P_p = \frac{a_E}{a_p - a_W \cdot P_W} \quad (2.40)$$

$$Q_p = \frac{b_p + a_W \cdot Q_W}{a_p - a_W \cdot P_W} \quad (2.41)$$

No contorno esquerdo ($N=1$), verificam-se as relações dadas por,

$$P_{P(1)} = \frac{a_{E(1)}}{a_{P(1)}} \quad (2.42)$$

$$Q_{P(1)} = \frac{b_{P(1)}}{a_{P(1)}} \quad (2.43)$$

Para o contorno direito, ou seja, o nó “N”, resulta,

$$\phi_{P(N)} = Q_{P(N)} \quad (2.44)$$

Desta forma, para solução com o TDMA, devem ser feitos os seguintes passos:

- Cálculo de P_1 e Q_1 , com as Eqs.(2.42) e (2.43);
- Cálculo de P_p e Q_p , com as Eqs.(2.40) e (2.41), para os nós $P=2$ a N ;
- Obtenção de ϕ_N da Eq.(2.44); e
- Obtenção de ϕ_p para $P=N-1 \dots 1$ com a Eq. (2.39).

Para utilização do método, deve-se ter o cuidado de garantir a positividade dos coeficientes, evitando problemas de convergência. Outra observância é quanto à conservação do fluxo nas interfaces, caso não seja respeitado pode-se novamente ter problemas de convergência. E finalmente, buscar a obtenção de termos fonte negativos em sua linearização, buscando garantir a dominância diagonal da matriz.

2.11 ACURÁCIA E ERROS

Devido as sérias conseqüências dos resultados das atividades de CFD em aplicações práticas, e ainda, as restrições relativas à exatidão das soluções numéricas exigidas pelos periódicos na área de CFD, muito tem sido feito para estudar a acurácia dos resultados de trabalhos de modelagem e simulação.

2.11.1 Conceitos de Incerteza

Segundo Freitas (1999), a incerteza é a diferença entre a quantidade estimada e seu valor real, podendo ser de três tipos: incerteza de entrada, incerteza do modelo e incerteza numérica (erro iterativo e de discretização).

A incerteza de entrada é aquele parâmetro inserido no processo, mas que não foi bem definido, sendo que não tem nenhuma relação com o modelo. A incerteza do modelo, vem da implementação adotada em cada caso. E finalmente, a incerteza numérica, que é aquela inserida pela discretização e pelos processos iterativos. Para ele, este é o único erro que não pode ser eliminado, sendo a solução para isto a sua minimização. O desafio então é desenvolver estimadores de erros que as quantifiquem.

2.11.2 Conceitos de Erros

Como conceito de erro pode-se considerar o que diz o AIAA (1998), onde “erro é uma deficiência reconhecível em qualquer fase da atividade de modelagem e simulação, que não é devido à falta de conhecimento”.

Para Freitas (1999), erro é a diferença entre um valor observado ou calculado e um valor exato. Diz ainda que ele é inserido no processo pelas representações truncadas das séries

de Taylor das derivadas, e também pelos processos iterativos. Chamando ambos finalmente de erros de discretização.

Oberkampf et al. (2002) trazem a mesma interpretação do AIAA (1998), dizendo que é uma inacurácia reconhecível em cada passo da atividade de modelagem e simulação, que não é devido à falta de conhecimento. Porém, o erro pode ser conhecido ou não. Os conhecidos são aquelas faltas de acurácia reconhecidas pelo analista, que pode ter uma idéia do seu tamanho e impacto no problema (precisão aritmética do computador, aproximações e conversão das EDP's em equações numéricas discretas).

Já os erros desconhecidos são aquelas inacurácias não detectadas pelo analista, mas que são passíveis de reconhecimento. Podem ser erros ou enganos cometidos pelo analista (OBERKAMPF et al., 2002).

2.11.3 Fontes de Erros em Soluções Numéricas

Dando seqüência aos conceitos aqui discutidos, será visto adiante como são classificados os erros envolvidos nas soluções numéricas, e apesar da variação na nomenclatura usada por alguns autores, os conceitos não diferem muito.

Ferziger e Pèric (1999) classificam estes erros como erros de modelagem, de discretização, de iteração e de programação. Já Fortuna (2000) os classifica como erros de modelagem, geométricos, discretização, convergência (iteração) e arredondamento.

Porém, para o desenvolvimento do trabalho, a base será a dada por Marchi (2001), que não difere muito dos autores acima, classificando-os em erros de truncamento (ε_τ), erros de iteração (ε_η), erros de arredondamento (ε_π) e erro de programação (ε_p).

Considerando que o erro de uma solução numérica (E), para uma variável de interesse “ ϕ ”, pode ser representada por,

$$E(\phi) = E(\varepsilon_\tau, \varepsilon_\eta, \varepsilon_\pi, \varepsilon_p) \quad (2.45)$$

Cada um destes erros entra na solução numérica podendo ter magnitudes e sinais diferentes, podendo se anular ou não.

2.11.4 Erros de Iteração

É a diferença entre a solução exata e a solução iterativa das equações discretizadas (FERZIGER e PÈRIC, 1999).

Tem-se em alguns casos que lidar com equações não-lineares, que são linearizadas e então resolvidas por processos iterativos. Estes processos devem parar em algum momento, isto é feito, geralmente, obedecendo a um critério de convergência, ou seja, a aceitação de um erro pré-determinado (FERZIGER e PÈRIC, 1999).

Mesmo que o processo seja convergente e a iteração seja feita num ciclo tão grande quanto se queira, nunca se obtém a solução exata das equações discretizadas. Esta diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em determinada iteração é o erro de iteração (ε_n).

2.11.5 Erros de Arredondamento

Também conhecido como *round-off errors*, são os erros devido à representação finita dos números reais. Não pode ser evitado, mas pode ser reduzido através da utilização de precisão dupla ou quádrupla (FORTUNA, 2000).

Em Marchi (2001) verifica-se que, se com a redução da malha h temos a redução do erro de truncamento, com o erro de arredondamento ocorre o inverso.

Supondo que o erro de iteração tenha sido reduzido a um valor insignificante, ainda assim a solução exata do problema não é atingida, isto porque existem ainda os erros de arredondamento computacionais, que ocorreram durante a solução do problema (FERZIGER e PERIC, 1999).

2.11.6 Erro de Programação

Estes erros estão relacionados à própria geração do programa, que pode resultar em erros. Para Ferziger e Pèric (1999) uma parte crítica do programa são as condições de contorno, que devem ser satisfeitas. Além da possibilidade de geração de erros no programa, outros erros podem surgir se os usuários não souberem aplicar os programas de forma correta (FERZIGER e PERIC, 1999).

2.11.7 Erros de Modelagem

É a diferença entre o fenômeno físico e a solução exata do modelo matemático. Nesta classe de erros podem ser considerados os seguintes (FERZIGER e PÈRIC, 1999):

- Modelagem: é o erro entre o fenômeno físico, e o modelo matemático desenvolvido;
- Propriedades do Fluxo: erros gerados por propriedades do fluido que não são muito bem conhecidas; e
- Condições de Contorno: erro gerado pela dificuldade de especificar as condições de contorno em alguns casos.

2.11.8 Erros de Truncamento

Conforme descrito em Ferziger e Pèric (1999), como as equações discretizadas são representadas por aproximações truncadas da equação diferencial, a solução não será exata, ou seja, não irá satisfazer a equação diferencial. Esta diferença é conhecida por erro de truncamento (ε_t). E, para uma malha com espaçamento h , este erro será definido por,

$$\beta(\Phi) = B(\Phi) + \varepsilon_t, \quad (2.46)$$

onde $\beta(\Phi)$ é o operador simbólico que representa a equação diferencial e $B(\Phi)$ é o operador simbólico que representa o sistema de equações algébricas obtidas pela discretização na malha h .

Estes erros podem ser determinados através da expansão em série de Taylor em torno de um ponto, de forma a obter as expressões numéricas das derivadas do operador diferencial (MALISKA, 2004). Vale então o entendimento de que forma a expansão em série de Taylor ajudará a encontrar as aproximações.

Conforme pode ser visto em Kreyszig (1999), a série de Taylor é uma série infinita que pode ser escrita como,

$$\Lambda_{j+1} = \Lambda_j + \Lambda_j^i \cdot h + \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{2!} + \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^3}{3!} + \dots + \Lambda_j^n \cdot \frac{h^n}{n!} + \dots \quad (2.47)$$

A expansão acima foi baseada na região discretizada mostrada na Fig.2.9.

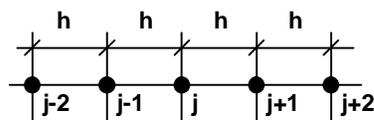


Figura 2.9 - Região discretizada

onde " Λ " representa a variável dependente do modelo matemático considerado, " Λ_{j+1} " é o valor analítico da variável que se deseja obter no ponto " $j+1$ ", a partir do valor analítico " Λ_j ", conhecido para o ponto " j ", numa malha uniforme, cujos nós tem espaçamento " h " entre eles. São ainda conhecidos os valores de suas derivadas nos nós envolvidos.

Considere-se ainda que " Λ " é uma função de " x ", contínua no intervalo fechado $[a,b]$, e ainda possui derivadas contínuas de ordem " n " neste mesmo intervalo. Pode-se ver em Apostol (1967), que esta série só será convergente se para " n " tendendo a infinito, o valor do erro tende a zero.

Se a função " Λ " é infinitamente diferenciável no intervalo aberto $]a,b[$, e existe uma constante positiva " k ", tal que a relação dada pela Eq.(2.48), seja verdadeira para todo " x " no intervalo $]a,b[$, então, a série de Taylor gerada por " Λ " converge para " $\Lambda(x)$ " para todo valor de " x " neste intervalo.

$$|\Lambda^n(x)| \leq k^n, \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.48)$$

Pode-se redefinir agora o domínio discreto mostrado na Fig. 2.9 em notações mais adequadas ao método dos volumes finitos, representando o domínio pela Fig.2.10.

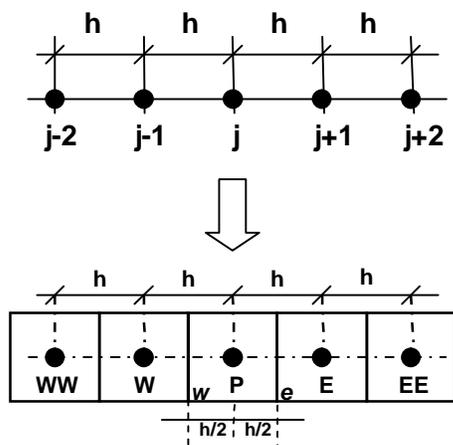


Figura 2.10 – Passando de um domínio discreto de diferenças finitas para volumes finitos

Considerando ainda, que a equação discretizada, no método dos volumes finitos, exige que tenhamos relações dos valores da variável " $\Lambda(x)$ " nas faces e nos nós, podem ser desenvolvidas as seguintes relações, baseados na nova configuração de domínio discreto:

$$\Lambda_p = \Lambda_e + \Lambda_e^i \cdot \left(\frac{h}{2}\right) + \Lambda_e^{ii} \cdot \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^2}{2!} + \Lambda_e^{iii} \cdot \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^3}{3!} + \Lambda_e^{iv} \cdot \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^4}{4!} + \dots \quad (2.49)$$

$$\Lambda_p = \Lambda_w - \Lambda_w^i \cdot \left(\frac{h}{2}\right) + \Lambda_w^{ii} \cdot \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^2}{2!} - \Lambda_w^{iii} \cdot \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^3}{3!} + \Lambda_w^{iv} \cdot \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^4}{4!} + \dots \quad (2.50)$$

As relações desenvolvidas acima, mostram o valor analítico de " Λ " no ponto genérico "P" utilizando as faces leste (e) e oeste (w), obtidas através de séries de Taylor. Elas serão utilizadas para discretização das equações, porém, há ainda um inconveniente, o de haver representações infinita para os valores das variáveis nestes nós. O próximo passo então será encontrar uma representação finita para estas séries de tal modo que esta relação possibilite discretizar as equações, gerando um sistema algébrico de equações que possam ser resolvidas com o TDMA.

Uma forma de obter isto é truncando a série em determinado ponto, transformando a série infinita numa relação finita. Ao fazer isto gera-se um erro, que é o erro de truncamento. Ou seja, o erro de truncamento da aproximação (função de interpolação), é a diferença entre o valor analítico do operador diferencial, ou da variável, na face, e seu valor numérico neste ponto.

Para análise dos erros será levado em consideração que o valor analítico da variável (Λ) será igual ao seu valor numérico (λ) acrescido de seu erro de discretização (E):

$$\Lambda = \lambda + E(\lambda) \quad (2.51)$$

Deve-se lembrar que uma das premissas do trabalho é que somente o erro de truncamento será relevante na formação do erro de discretização, ou seja:

$$E(\lambda) = \varepsilon(\lambda) \quad (2.52)$$

Substituindo a Eq.(2.52) em (2.51), resulta uma relação do erro de truncamento para o caso em que este é o mais significativo no erro da solução numérica. Ou seja, o valor analítico da variável é seu valor numérico mais o erro de truncamento:

$$\Lambda = \lambda + \varepsilon(\lambda) \quad (2.53)$$

Voltando às relações desenvolvidas nas Eqs.(2.49) e (2.50), para o caso da relação dada para o valor da variável na face leste, a partir do ponto “P” dado pela Eq.(2.49), consegue-se o esquema “*upwind*” truncando a série, e escrevendo-o da seguinte forma:

$$\Lambda_e = \Lambda_p + \varepsilon_\tau \quad (2.54)$$

Sendo que o erro de truncamento neste caso é;

$$\varepsilon_\tau = \Lambda_p^i \cdot \frac{(h/2)}{\sqrt{2}} + \Lambda_p^{ii} \cdot \frac{(h/2)^2}{2!} + \Lambda_p^{iii} \cdot \frac{(h/2)^3}{3!} + \Lambda_p^{iv} \cdot \frac{(h/2)^4}{4!} + \dots \quad (2.55)$$

E, comparando as Eqs.(2.53) e (2.54), tem-se que:

$$\lambda_e = \Lambda_p \quad (2.56)$$

Reescrevendo a Eq.(2.54) considerando a Eq.(2.56), tem-se:

$$\Lambda_e = \lambda_e + \varepsilon_\tau \quad (2.57)$$

Que é a relação dada pela função de interpolação *upwind* (UDS) para a face leste, em fluxo de velocidade positiva ($u > 0$).

Em Marchi (2001), vê-se que a Eq.(2.55) pode ainda ser representada pela equação geral do erro de truncamento, dada por,

$$\varepsilon(\lambda) = c_1 \cdot h^{p_1} + c_2 \cdot h^{p_2} + c_3 \cdot h^{p_3} + \dots \quad (2.58)$$

onde os termos “ c ” são constantes positivas ou negativas, ou ainda funções independentes de “ h ”, e onde os expoentes em “ p ” são dispostos em ordem crescente.

Tem-se ainda em Tannehill et al. (1997), que um pressuposto importante para que a relação dada pela Eq.(2.58) seja aceitável, é que seja satisfeita a condição de consistência. Segundo esta, o erro de truncamento deve tender a zero com o refinamento da malha, ou seja, quando “ h ” tende a zero.

Dizer que o erro tende a zero quer dizer que a equação discretizada tende à equação diferencial inicial. Isto é bastante simples de se constatar, bastando lembrar o que foi dito por Ferziger e Pèric (1999), mostrado pela Eq.(2.46).

Desta condição, pode-se mostrar ainda que, quando $h \rightarrow 0$, o termo de maior impacto no erro de truncamento é o primeiro termo em “ h ”, ou seja, o termo em “ h ” de menor

ordem. Considerando a Eq.(2.58) pode-se dizer que a ordem do erro é de ordem p_L , também conhecida por ordem assintótica do erro de truncamento.

No caso exemplificado acima (UDS) resulta que, para esta aproximação do valor de Λ_e , seu erro de truncamento é de primeira ordem.

Mostrou-se então que o erro de truncamento de uma função representada por uma série de Taylor tem seu erro de truncamento definido como a diferença entre seu valor analítico no ponto “x” e seu valor numérico neste mesmo ponto.

Até agora pôde-se ver o erro de truncamento como uma operação de truncamento propriamente dita em uma série representativa de determinada variável, em determinado ponto nodal. É necessário agora ampliar este conceito para o erro de truncamento gerado pela substituição de uma ou mais destas funções, representadas por séries de Taylor, numa EDP que está sendo discretizada.

Para isto será considerada a inserção de duas aproximações em determinada EDP em seu processo de discretização. Cada uma destas aproximações irá inserir na equação discretizada, um erro de truncamento local.

Levando em consideração a Eq.(2.6) representativa de um processo de discretização ainda não finalizado, e considerando ainda nesta relação que seu termo fonte seja nulo, tem-se sua redução a,

$$\Gamma \frac{d\Lambda}{dx} \Big|_e - \Gamma \frac{d\Lambda}{dx} \Big|_w = 0 \quad (2.59)$$

Adotando agora, como aproximações para os operadores diferenciais, a aproximação por diferenças centrais dadas pelas Eqs.(2.34) e (2.35), para as faces leste e oeste respectivamente.

Considerando ainda que cada uma destas aproximações irá gerar um erro de truncamento, conforme pode-se ver da relação geral dada pela Eq.(2.53), obtém-se então, sem necessidade de demonstração no momento, as seguintes relações,

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial x} \Big|_e = \frac{\Lambda_E - \Lambda_P}{h} + \varepsilon_\tau^1 \quad (2.60)$$

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial x} \Big|_w = \frac{\Lambda_P - \Lambda_W}{h} + \varepsilon_\tau^2 \quad (2.61)$$

as notações “1” e “2” nos erros de truncamento (ε_τ) das aproximações foram inseridas para diferenciar as parcelas de erro devido a cada uma destas aproximações.

Aqui, substituindo estas relações na Eq.(2.59), obtém-se:

$$\Gamma\left(\frac{\Lambda_E - \Lambda_P}{h} + \varepsilon_\tau^1\right) - \Gamma\left(\frac{\Lambda_P - \Lambda_W}{h} + \varepsilon_\tau^2\right) = 0 \quad (2.62)$$

Deixando numa forma mais abreviada:

$$\Gamma\left(\frac{\Lambda_E - 2\Lambda_P + \Lambda_W}{h}\right) + \Gamma(\varepsilon_\tau^1 + \varepsilon_\tau^2) = 0 \quad (2.63)$$

Considerando o teorema da propagação dos erros (KREYSZIG, 1999), que diz que, na adição e subtração, o limite do erro resultante destas operações é a soma dos limites de erros de cada um dos termos, tem-se da Eq.(2.63) que o erro de truncamento final será,

$$\varepsilon_\tau = \varepsilon_\tau^1 + \varepsilon_\tau^2 \quad (2.64)$$

ou seja, o erro de truncamento da equação discretizada em determinado nó, será a soma dos erros de truncamento locais das aproximações utilizadas.

Extrapolando para o resultado dado pela equação discretizada, confirma-se o que foi dito em Ferziger e Pèric (1999), dado pela Eq.(2.46), ou seja, que o erro de truncamento é a diferença entre a solução analítica da EDP menos a solução da equação discretizada, dada pela solução do sistema de equações algébricas obtidas pelo processo de discretização. Esta assertiva é verdadeira caso considere-se que somente o erro de truncamento é relevante na solução numérica da EDP, que é o presente caso.

Considerando a equação geral do erro de truncamento dado pela Eq.(2.58), é possível tirar mais dois conceitos bastante importantes para o trabalho, qual sejam, o de ordens verdadeiras e assintóticas.

As ordens verdadeiras (p_V) do erro de truncamento são os expoentes de “ h ” dos termos não nulos na equação geral do erro de truncamento, dados pela Eq.(2.58). Sendo representadas por p_L, p_2, p_3, \dots , que, conforme já descrito, estão ordenadas de forma crescente. Estes valores são números inteiros positivos que geralmente seguem uma ordem aritmética, ou seja, tem uma razão definida entre seu valor e seu subsequente.

Já a ordem assintótica do erro de truncamento é o índice de menor valor na equação geral do erro de truncamento, ou seja, é o valor de p_L . Este valor representa a ordem do erro de truncamento e seu significado vem do fato de que, quando $h \rightarrow 0$, este termo representa o termo mais significativo do erro.

2.11.9 Erro de Discretização

O erro de discretização é a diferença entre a solução exata das equações governantes, e a solução exata da aproximação discreta (FERZIGER e PERIC, 1999).

Pode-se ter inúmeras fontes para os erros de discretização, conforme apresentado em Ferziger e Pèric (1999). Uma das fontes deste erro é o uso de aproximações para solução numérica do problema.

Outra fonte é o erro de geração de malha. Não é um erro claramente definido na literatura, porém, Ferziger e Peric (1999) o mencionam como uma fonte de erros. Isto é explicado pois dependendo da forma da malha, ou melhor, da distribuição dos elementos de volumes na malha, o tipo de aproximação escolhido pode ser muito bom para determinadas regiões de fluxo, porém podem não ser tão acurados em outras áreas.

Como forma de auxílio em pontos que serão vistos adiante, pode-se ver em Marchi (2001), que a equação genérica para o erro de discretização, pode ser descrita por,

$$E(\phi) = C_1.h^{P_1} + C_2.h^{P_2} + C_3.h^{P_3} + C_4.h^{P_4} + \dots \quad (2.65)$$

sendo que os termos desta equação tem o mesmo significado já explicado para os termos da Eq. (2.58).

2.12 ESTIMADORES DE ERROS DE DISCRETIZAÇÃO

Os erros de discretização só podem ser estimados se forem comparadas as soluções em malhas sistematicamente refinadas, e, a qualidade do erro de uma aproximação é descrita em termos de sua ordem (FERZIGER e PERIC, 1999). Estas ordens de aproximação são encontradas através das expansões em séries de Taylor.

Para estimar os erros de discretização pode-se usar basicamente dois conceitos, fazer estimativas a *priori*, ou seja, tentar prever inicialmente como irá se comportar o processo resolutivo adotado para obtenção das soluções das EPD's. E ainda estimativas a *posteriori*, que são responsáveis por indicar o quão adequada está a solução numérica, se comparada à solução analítica do problema, ou no caso de não as ter, comparada às soluções analíticas estimadas do problema. Será apresentado adiante o que quer dizer cada um destes temas.

2.12.1 Estimativas de Erro a *Priori*

São utilizados para estimar a ordem do erro de discretização, que é feito estimando-se o erro de truncamento do modelo matemático através da série de Taylor, e admitindo-se que o erro de discretização (E) tenha a mesma forma funcional quando o tamanho “*h*” dos elementos da malha tende a zero (MARCHI, 2001).

Este tipo de estimativa é feito quando o interesse é em definir as ordens assintótica (p_L) e verdadeiras (p_V), dos erros de truncamento.

Ainda em Marchi (2001) pode-se observar que quanto menor a malha, ou seja, maior o número de nós do domínio discretizado, menor será o erro de discretização. Esta afirmação é facilmente confirmada pela Eq.(2.65).

2.12.2 Estimativa de Erro a *Posteriori*

São utilizados para calcular efetivamente a magnitude do erro de discretização, ou seja, seu valor quantitativo. A forma mais simples de verificar a magnitude do erro de discretização é comparando o resultado da solução numérica com o resultado das soluções analíticas. Processo bastante simples e lógico, porém sem muita razão de ser, salvo casos de estudos de processos numéricos. Isto porque se existe a possibilidade de conseguir a solução analítica de determinado problema, não faz sentido a obtenção de sua solução numérica.

De qualquer forma, em casos onde estão sendo analisados processos de soluções numéricas, como é o caso destes trabalho, a análise a *posteriori* é feita comparando a solução numérica obtida (λ) com a solução analítica (Λ), e neste caso o erro de discretização ($E(\lambda)$) é dado por,

$$E(\lambda) = \Lambda - \lambda \quad (2.66)$$

Para os casos onde não tem-se a solução analítica, a maioria dos casos, é necessário fazer a análise com base em soluções analíticas estimadas, que são obtidas com o uso de alguns estimadores. Nestes casos fala-se de incerteza da solução numérica (U),

$$U = \lambda_\infty - \lambda \quad (2.67)$$

sendo “ λ_∞ ” a estimativa do valor da solução analítica, e “ λ ” é a solução numérica.

Estas incertezas são obtidas através do uso de alguns estimadores de erros. Como aparece em Marchi (2001), existem vários métodos para estes cálculos, porém, podem ser divididos em dois grupos, o primeiro estima o erro com base na solução numérica calculada sobre uma única malha, o segundo grupo considera a estimativa de erro sobre as soluções numéricas obtidas sobre diferentes malhas.

2.12.3 Estimador de Richardson

O estimador de Richardson nos dá a incerteza da solução numérica para casos em que a solução analítica não é conhecida, assim, a incerteza (U_{RI}) de uma solução numérica (λ) é obtida empregando a Eq.(2.68), baseado numa solução analítica estimada (λ_∞).

$$U_{RI}(\lambda) = \lambda_\infty - \lambda \quad (2.68)$$

Pode-se obter o λ_∞ por meio da extrapolação de Richardson dada por,

$$\lambda_\infty = \lambda_1 + \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (2.69)$$

onde λ_1 e λ_2 são as soluções numéricas obtidas com as malhas fina e grossa, cujo tamanho (h) dos volumes de controle é h_1 e h_2 , respectivamente, e q é a razão de refino da malha, dada por,

$$q = \frac{h_2}{h_1} \quad (2.70)$$

Com a substituição da Eq. (2.69) na Eq. (2.68) o estimador de Richardson resulta em,

$$U_{RI}(\lambda) = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (2.71)$$

Ordem Efetiva:

A ordem efetiva é a ordem do erro conseguido a partir de uma solução analítica conhecida, mais duas soluções numéricas em malhas refinadas com uma razão de refino (q).

Esta ordem pode ser obtida com duas soluções numéricas “ λ_1 ” e “ λ_2 ” em malhas distintas de tamanhos “ h_1 ” e “ h_2 ”, respectivamente. Necessita-se ainda a razão de refino “ q ”, e tendo o conhecimento da solução analítica “ Λ ” (Marchi, 2001).

$$p_E = \frac{\log\left[\frac{\Lambda - \lambda_2}{\Lambda - \lambda_1}\right]}{\log[q]} \quad (2.72)$$

Ordem Aparente:

A ordem aparente é obtida quando não tem-se a solução analítica do problema, ou seja, na maioria dos casos. Para sua obtenção, são necessárias três soluções numéricas obtidas com o refino uniforme da malha.

Esta ordem do erro de discretização permite verificar, *a posteriori*, se, à medida que o tamanho de malha tende à zero, a ordem da incerteza tende à ordem assintótica (Marchi, 2001).

$$p_U = \frac{\log\left[\frac{\lambda_2 - \lambda_3}{\lambda_1 - \lambda_2}\right]}{\log[q]} \quad (2.73)$$

Pode-se ver acima que são necessárias soluções numéricas para três malhas distintas, sendo que, neste caso, a razão de refino deve ser um valor constante.

2.13 MÚLTIPLAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON (MER)

A técnica de múltiplas extrapolações de Richardson (MER) é utilizada para reduzir o erro de discretização. Tal método tem como base a extrapolação de Richardson generalizada para estimar tais erros (Marchi et al., 2008). Sua utilização exige três ou mais soluções numéricas.

Para obter a solução numérica (λ) em determinada malha (g), com “ m ” extrapolações de Richardson, usa-se,

$$\lambda_{g,m} = \lambda_{g,m-1} + \frac{\lambda_{g,m-1} - \lambda_{g-1,m-1}}{q^{p_m} - 1} \quad (2.75)$$

A Eq.(2.75) é válida para $m = 1$ a $M-1$, e $g = m+1$ a M ; onde m é o número de extrapolações; M é o número de malhas diferentes sobre as quais foram obtidas soluções numéricas (λ) sem qualquer extrapolação, neste trabalho usando o método TDMA; g representa cada uma das malhas, sendo $g=1$ a malha mais grossa do conjunto de malhas, isto é, aquela na qual a distância h entre dois nós consecutivos tem o maior valor. A malha mais fina ocorre em $g=M$, e é aquela na qual a distância h entre dois nós consecutivos tem o menor valor. A razão de refino é dada por q , e é representada pela Eq.(2.70). Para $m = 0$ tem-se a solução numérica (λ) sem qualquer extrapolação; e p_m são as ordens verdadeiras do erro de discretização.

Pode-se ver na Tab.2.1 que sem nenhuma extrapolação tem-se as soluções numéricas das diversas malhas com o método utilizado (no caso deste trabalho o TDMA). A partir da 1ª extrapolação tem-se os resultados extrapolados a partir da 2ª malha. Para a 2ª extrapolação tem-se os resultados extrapolados a partir da 3ª malha e assim sucessivamente, até que a última extrapolação resulte em valor somente para a última malha (a mais refinada).

Isto implica dizer que os melhores resultados numéricos para cada malha são os apresentados pela células achuradas da Tab.2.1, ou seja, $\lambda_{1,0}; \lambda_{2,1}; \lambda_{3,2}; \dots; \lambda_{M,M-1}$, que são os resultados que mais sofreram extrapolações.

Tabela 2.1 – Esquema de Obtenção de Resultados com MER

		Quantidade de Extrapolações								
		0	1	2	3	4	5	6	7	M-1
Malhas	1	$\lambda_{1,0}$								
	2	$\lambda_{2,0}$	$\lambda_{2,1}$							
	3	$\lambda_{3,0}$	$\lambda_{3,1}$	$\lambda_{3,2}$						
	4	$\lambda_{4,0}$	$\lambda_{4,1}$	$\lambda_{4,2}$	$\lambda_{4,3}$					
	5	$\lambda_{5,0}$	$\lambda_{5,1}$	$\lambda_{5,2}$	$\lambda_{5,3}$	$\lambda_{5,4}$				
	6	$\lambda_{6,0}$	$\lambda_{6,1}$	$\lambda_{6,2}$	$\lambda_{6,3}$	$\lambda_{6,4}$	$\lambda_{6,5}$			
	7	$\lambda_{7,0}$	$\lambda_{7,1}$	$\lambda_{7,2}$	$\lambda_{7,3}$	$\lambda_{7,4}$	$\lambda_{7,5}$	$\lambda_{7,6}$		
	8	$\lambda_{8,0}$	$\lambda_{8,1}$	$\lambda_{8,2}$	$\lambda_{8,3}$	$\lambda_{8,4}$	$\lambda_{8,5}$	$\lambda_{8,6}$	$\lambda_{8,7}$	
	M	$\lambda_{M,0}$	$\lambda_{M,1}$	$\lambda_{M,2}$	$\lambda_{M,3}$	$\lambda_{M,4}$	$\lambda_{M,5}$	$\lambda_{M,6}$	$\lambda_{M,7}$	$\lambda_{M,M-1}$

3 PROCEDIMENTOS MATEMÁTICOS E NUMÉRICOS

Este capítulo apresentará o modo como foram feitos todos os procedimentos necessários para o atingimento dos objetivos descritos nesta dissertação.

Inicialmente serão mostrados os modelos matemáticos considerados. Para isto, parte-se da equação geral do transporte, dada pela relação da Eq.(2.1), e, com base no fenômeno físico, são feitas as simplificações possíveis, obtendo-se finalmente a equação governante do fenômeno.

Definida esta equação, serão então apresentadas as variáveis de interesse que servirão de base para o estudo do erro de discretização. Conjuntamente, serão mostradas as relações matemáticas que resultaram nas soluções analíticas destas variáveis para tal equação governante.

Conforme já dito no trabalho, a importância das soluções analíticas é dar subsídios para comparar os resultados numéricos obtidos com cada função de interpolação (FI), podendo então verificar-se o erro de discretização efetivo de cada caso.

Após realizados os passos acima, serão iniciadas discussões em torno das questões numéricas da solução da equação governante. O primeiro passo nesta direção será o de definir as premissas consideradas para solução numérica do problema, ou seja, qual o método numérico utilizado, a forma de discretização do espaço, condições de contorno, entre outras.

Posteriormente é mostrado esquematicamente como foram utilizadas as FI's, assim como as relações algébricas que definem as variáveis de interesse.

Até aqui foram definidos todos os pontos necessários para iniciar a tratativa do erro de discretização envolvido nos processos numéricos, falta agora verificar de que forma são obtidas as ordens dos erros de discretização, ou seja, como serão feitas as análises *a priori* do erro.

Tais análises envolvem uma verificação tanto do erro de truncamento das FI's como dos erros de truncamento relativos às aproximações das variáveis. Isto se explica por ambos participarem na composição do erro de discretização final de cada variável de interesse.

Resta então a descrição de como foram obtidas as soluções numéricas, abrangendo um pequeno roteiro computacional em termos de *software*, indicando os programas utilizados, assim como o *hardware* disponível.

E finalmente o cálculo das variáveis de interesse para outros valores de Pe , usados posteriormente para verificar o impacto da variação deste número adimensional no erro de discretização.

O que se pretende com este capítulo é que possa dar subsídios ao leitor para que tenha todas as condições de, em caso de interesse, poder reproduzir os cálculos feitos, obtendo os mesmos resultados aqui apresentados, ou seja, tem-se como objetivo garantir da melhor forma possível a sua repetibilidade.

3.1 MODELO MATEMÁTICO

3.1.1 Fenômeno Físico

O tipo de fenômeno escolhido para estudo no trabalho foi o de advecção-difusão. Sua escolha se deve ao fato de ter-se neste fenômeno dois tipos de aproximações numéricas onde são utilizadas as funções de interpolação, que são os termos difusivo e advectivo, onde a escolha das funções de interpolação exerce papel crucial na magnitude do erro de discretização final.

Fisicamente, estes dois mecanismos de transferência de calor fazem parte de um fenômeno físico chamado convecção, que pode ser descrito genericamente como a transferência de energia devido à movimentação randômica a nível molecular (difusão), e também devido à movimentação macroscópica do fluido (INCROPERA e DEWITT, 1996).

3.1.2 Características Físicas

O termo características físicas foi designado para descrever que tipos de simplificações foram usadas na equação geral de transporte, representada pela Eq.(2.1), para chegar-se à equação governante do fenômeno.

As simplificações foram feitas como segue, considerando que aquela variável genérica “ ϕ ” assume a representação da temperatura “ T ”:

- Coordenadas cartesianas;
- Espaço unidimensional (considerando somente o eixo “ x ”)

$$(\vec{\nabla}(\rho T \vec{V})) = \frac{\partial(\rho T \vec{u})}{\partial x} \quad \text{e} \quad (\vec{\nabla}(\Gamma \nabla T)) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial T}{\partial x} \right);$$

- Fluido: newtoniano, incompressível;
- Regime permanente ($\partial T / \partial t = 0$);
- Problema advectivo-difusivo;
- Propriedades constantes: ($\rho = cte \Rightarrow \partial \rho / \partial t = 0$ $\partial \rho / \partial x = 0$) e
 $(\Gamma = cte \Rightarrow \partial \Gamma / \partial x = 0)$;
- Sem termo fonte ($S_\phi = 0$); e
- Fluxo plenamente desenvolvido: velocidade não varia na linha de fluxo analisada no domínio ($\partial u / \partial x = 0$).

3.1.3 Equação Governante

Será mostrado a seguir o processo para se chegar à equação governante do fenômeno, partindo da Eq.(2.1), e ainda considerando que a variável genérica “ ϕ ” assume a representação da temperatura “T”. Considera-se inicialmente o formato unidimensional do espaço, impondo esta condição à Eq.(2.1), tem-se:

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho T u)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial T}{\partial x} \right) + S_\phi \quad (3.1)$$

Considerando agora as propriedades constantes, regime permanente e termo fonte nulo, impondo isto à Eq.(3.1), tem-se,

$$\rho u \frac{dT}{dx} = \Gamma \frac{d^2 T}{dx^2} \quad (3.2)$$

onde, utilizando variáveis adimensionais, resulta,

$$\frac{\rho u c_p L}{k} = Pe \quad (3.3)$$

e,

$$Pe \cdot \frac{dT}{dx} = \frac{d^2 T}{dx^2} \quad (3.4)$$

Esta equação representa a equação de conservação de energia térmica, cujo escoamento é permanente, unidimensional, fluido incompressível, sem geração de calor, e onde o fluido tem propriedades constantes.

O modelo matemático apresentado traz vantagens indiscutíveis ao trabalho. Inicialmente, tem-se uma formulação matemática passível de obtenção de sua solução analítica, o que permite relacionar os valores obtidos da solução numérica com os valores da solução analítica, ou seja, a solução exata. Segundo, que é um problema relativamente simples, em termos computacionais, o que justifica a hipótese de considerar o erro de programação próximo a zero.

3.1.4 Variáveis de Interesse

Para análise do impacto das funções de interpolação no erro de discretização, foram definidas quatro variáveis de interesse, sendo duas locais e duas globais.

As variáveis consideradas são:

- T_c : variável dependente T em $x = 1/2$, obtida diretamente do valor nodal, utilizando número ímpar de volumes na malha;
- T_m : média de T no domínio, para $0 \leq x \leq 1$, obtida pela regra do retângulo;
- L : média da norma (l_1) do erro de discretização de T ; e
- I : derivada de primeira ordem de T em $x = 1$, obtida com o esquema UDS-2.

A motivação para escolha destas variáveis foram:

- T_c : escolhida por ser a variável dependente do problema. Inicialmente estudou-se os impactos de obtê-la através do valor da solução numérica do nó central, em domínio discretizado com número ímpar de nós, ou através do valor médio dos nós centrais em domínio discretizado com número par de nós. Verificou-se que os resultados não apresentavam diferenças significativas, por isto optou-se por utilizar domínio discreto com número ímpar de nós;
- T_m : variável secundária, pós processada, é a média do campo da variável dependente. Inicialmente estudou-se o impacto de obtê-la utilizando a regra do retângulo ou do trapézio. Verificou-se que não havia diferença significativa, o que fez com que fosse escolhida a regra do retângulo;
- I : fluxo de calor na face do domínio, dado importante nestes tipos de problemas. Inicialmente verificou-se o impacto em obter este valor utilizando

a aproximação UDS e UDS-2. Por não ser significativa a diferença optou-se por utilizar a aproximação UDS-2;

- L : indica as magnitudes dos erros de discretização.

A tabela 3.1 mostra as variáveis analisadas e sua característica local ou global.

Tabela 3.1 – Tabela das variáveis de interesse

Tipo da Variável	Solução Analítica (Λ)	Solução Numérica (λ)	Tipo de Variável com relação à variável independente
Dependente	Φ	T	Local
Média da Variável Dependente	Φ_m	T_m	Global
Primeira derivada da variável dependente	Φ^i	T_{UDS-2}^i	Local
Média da norma l_I	$\mathbf{0}$	\bar{l}_1	Global

3.1.5 Soluções Analíticas – Relações Matemáticas

Para resolução da equação governante do fenômeno descrita acima, foram consideradas as seguintes condições de contorno de Dirichlet, sendo T uma função de x :

$$T(0) = 0, \quad T(1) = 1 \quad (3.5)$$

Com isto define-se a solução analítica da equação de advecção-difusão considerada, conforme dada por Ferziger e Pèric (1999), como,

$$T(x) = \frac{e^{x.Pe} - 1}{e^{Pe} - 1} \quad (3.6)$$

Para a primeira variável de interesse, considerando T em $x = 1/2$, resulta,

$$T(1/2) = T_c = \frac{e^{Pe/2} - 1}{e^{Pe} - 1} \quad (3.7)$$

Tem-se ainda, para a média da variável T , partindo da definição que:

$$T_m = \int_0^1 T(x).dx \quad (3.8)$$

Cuja sua solução analítica (Marchi e Alves, 2008):

$$T_m = \frac{e^{Pe} - Pe - 1}{Pe.(e^{Pe} - 1)} \quad (3.9)$$

Para a derivada primeira de ϕ em $x = 1$, tem-se a seguinte solução analítica:

$$I = \frac{Pe.e^{Pe}}{e^{Pe} - 1} \quad (3.10)$$

E finalmente, para a média da norma l_1 do erro de discretização, tem-se (Marchi e Alves, 2008),

$$L = \frac{\sum_{i=1}^N |T_i^{analítico} - T_i^{numérico}|}{N} \quad (3.11)$$

3.1.6 Soluções Analíticas – Obtenção dos Valores

Com base nas relações matemáticas apresentadas acima, foram calculados os valores das soluções analíticas para cada uma das variáveis de interesse, exceto a média da norma \bar{l}_1 cujo valor é nulo. Os resultados obtidos analiticamente, utilizando vários valores para Peclet são:

Tabela 3.2 – Valor analítico das variáveis de interesse com Pe=0,01

VARIÁVEL DE INTERESSE	VALOR (Pe=0,01)
T_c	4,987500026041601562664697623548269154494E-1
T_m	4,991666680555522486855158521391688697724E-1
I	1,00500833331944447751314484147860831130

Tabela 3.3 – Valor analítico das variáveis de interesse com Pe=0,1

VARIÁVEL DE INTERESSE	VALOR (Pe=0,1)
T_c	4,875026035157896563384986678705528697489E-1
T_m	4,916680552249503759539226897526430330871E-1
I	1,050833194477504962404607731024735696691

3.2 MODELO NUMÉRICO

Após definida as soluções analíticas da equação governante do fenômeno, partiu-se então para a modelagem numérica, definindo os meios que permitirão obter as soluções numéricas do fenômeno e posterior estudo do erro de discretização.

Para a modelagem numérica, levou-se em consideração as seguintes premissas:

- Método dos Volumes Finitos;
- Domínio unitário ($0 \leq x \leq 1$);
- Sistema de coordenadas cartesianas;
- Discretização em domínio unidimensional (considerando somente eixo “x”);
- Discretização do espaço considerando malhas estruturadas, uniformes e de nós centrados;
- Condições de contorno de Dirichlet: $T(0) = 0$ e $T(1) = 1$;
- Aplicação das condições de contorno com volumes fictícios;
- Volumes reais: “1” a “N”;
- Volumes fictícios: “0” e “N+1”;
- Velocidade de fluxo positivo ($u > 0$)
- Para análise dos erros de discretização e comparação das diversas funções de interpolação foi utilizado o número de Peclet (Pe) igual a 5;

Tabela 3.8 – Funções de interpolação utilizadas

Esquema	Aproximação Termo	Aproximação Termos
	Advectivo	Difusivo
I	UDS-1	CDS-2
II	CDS-2	CDS-2
III	WUDS	
IV	PLDS	
V	QUICK	CDS-2
VI	UDS-2	CDS-2
VII	ADS	CDS-2
VIII	TVD	CDS-2
IX	ALFA	CDS-2
X	QUICK	CDS-4

Como o intuito é verificar o impacto das funções de interpolação no erro de discretização, utilizaram-se as seguintes funções de interpolação mostradas na tabela 3.8.

Utilizando as funções de interpolação da Tab.3.8 para discretização da equação governante, foram obtidos os coeficientes e termos fontes da equação geral, que para o espaço unidimensional tem a forma mostrada pela Eq.(3.12) (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2005):

$$a_p.T_p = a_E.T_E + a_W.T_W + S_\phi \quad (3.12)$$

sendo que o termo fonte S_ϕ englobou os termos que não aparecem como leste ou oeste. Exemplo foi o caso do QUICK, que envolve outros nós a oeste tratados com correção adiada.

Para cada conjunto de funções de interpolação utilizadas, foi encontrado um sistema de equações, cada qual com seus coeficientes (a_p, a_E, a_W) e termo fonte (S_ϕ) específicos. O apêndice A mostra as expressões que representam estes termos.

Com base nesta equação geral, obteve-se uma equação para cada nó do domínio, obtendo-se então um sistema de equações algébricas. Para solução destas equações usou-se o método TDMA.

3.3 RELAÇÕES ALGÉBRICAS USADAS NAS ROTINAS DO PROGRAMA

Discretizando o espaço unidimensional do domínio em volumes uniformes de nós centrados e faces centradas, conforme Fig.2.7, pode-se obter o tamanho de cada volume utilizando a seguinte relação:

$$\Delta x = \frac{L_c}{N} \quad (3.13)$$

onde L_c é o comprimento do domínio de cálculo e N é o número de volumes da malha.

Para o refino da malha, foi considerada uma razão de refino (q) constante e igual a 3. Esta relação é obtida fazendo:

$$q = \frac{N_2}{N_1} \quad (3.14)$$

sendo N_1 o número de volumes da malha mais grossa e N_2 o número de volumes da malha mais refinada.

Para o cálculo das quatro variáveis de interesse estudadas foram deduzidas expressões algébricas, que darão sua solução numérica. Tendo como base o esquema da Fig.2.4, tem-se as seguintes relações para as variáveis:

- Variável dependente T_c , com número ímpar de nós na malha, ou seja, o valor da variável é obtida diretamente no valor nodal, no centro do volume:

$$T_c = T_p = T\left(\frac{N+1}{2}\right) \quad (3.15)$$

- Média de T obtida pela regra do retângulo (KREYSZIG, 1999), considerando o domínio unitário:

$$T_m = \Delta x \cdot \sum_{p=1}^N T_p \quad (3.16)$$

- Média da norma \bar{l}_1 do erro de discretização da variável:

$$L = \bar{l}_1 = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N |\Phi_p - T_p| \quad (3.17)$$

onde o termo Φ_p é a solução analítica do nó em questão, e T_p é a solução numérica no nó.

- Derivada de 1ª ordem de T em $x = 1$ obtida com UDS-2 (TANNEHILL et al., 1997), cujos índices seguem configuração da Fig.2.10:

$$I = \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=1} = \frac{8T_p - 9T_w + T_{ww}}{3\Delta x} \quad (3.18)$$

3.4 ANÁLISE A *PRIORI* DO ERRO NUMÉRICO

Após definidas as relações algébricas que definirão os valores das variáveis, serão analisados agora, quais os erros a *priori* envolvidos na solução numérica destas. Lembrando que esta análise implica numa avaliação qualitativa do erro de discretização final.

3.4.1 Análise a *Priori* da Ordem do Erro de Truncamento das Funções de Interpolação

Inicia-se o estudo das ordens de erros a *priori* analisando a participação no erro de truncamento devido às funções de interpolação, cujas relações são demonstradas nas Eqs. 2.8 a 2.37.

Tabela 3.9 – Ordens verdadeiras e assintóticas das funções de interpolação

FI's	Termo	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica
UDS	Advectivo	1, 2, 3...	1
CDS-2	Advectivo	2, 4, 6...	2
UDS-2	Advectivo	2, 3, 4...	2
WUDS	Advectivo / Difusivo	2, 4, 6...	2
PLDS	Advectivo / Difusivo	2, 4, 6...	2
ADS	Advectivo	2, 4, 6...	2
ALFA	Advectivo	1, 2, 3...	1
TVD	Advectivo	2, 4, 6...	2
QUICK	Advectivo	3, 4, 5...	3
CDS-2	Difusivo	2, 4, 6...	2
CDS-4	Difusivo	4, 6, 8....	4

Na Tab.3.9 pode-se ver quais são as ordens verdadeiras e assintóticas para cada uma das FI's. Não será demonstrada aqui a forma de sua obtenção, porém este processo consta do apêndice B.

3.4.2 Análise a *Priori* da Ordem do Erro de Truncamento das Aproximações para Obtenção das Variáveis de Interesse

Neste segundo passo, são levadas em consideração as ordens dos erros das variáveis de interesse, cujos valores encontram-se na Tab.3.10. Novamente, não há preocupação aqui em demonstrar sua obtenção, este processo está demonstrado no apêndice B.

Tabela 3.10 – Ordens verdadeiras e assintótica das aproximações das variáveis

Variável	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica
T_c	*	*
T_m	2, 4, 6...	2
I	2, 3, 4...	2
L	*	*

Importante notar que a variável T_c tem seu valor dado pela solução no centro do volume de controle, ou seja, no valor nodal. Isto implica dizer, que não há relação que agregue maior ordem ao erro de truncamento, a não ser os inseridos pela aplicação das próprias FI's. Para a variável L o mesmo se aplica, sendo suas ordens de erros definidas pela variável T_c , conforme será demonstrado adiante.

3.4.3 Análise a *Priori* da Ordem do Erro de Discretização Final

Será visto agora, qual a ordem do erro final de cada variável de interesse, considerando que sua obtenção está contaminada com erro de truncamento das funções de interpolação aplicadas (subitem 3.4.1), assim como da relação para obtenção da própria variável (subitem 3.4.2).

As ordens dos erros de truncamento final, conseguidas após considerar o erro de truncamento das FI's e os erros inseridos pelas aproximações dos modelos numéricos das próprias variáveis de interesse, são mostradas na Tab.3.11. Lembrando que as aproximações para o termo difusivo foram todas feitas com o CDS-2 (onde necessário), exceto para o QUICK, que foi aproximado com CDS-2 e CDS-4. Para facilitar o entendimento, daqui em diante as referências passam a ser de QUICK2 quando o termo difusivo foi aproximado com CDS-2, e QUICK4 quando aproximado com CDS-4

Novamente, não preocupou-se no decorrer do texto, de demonstrar como chega-se a este valor, mas caso o leitor tenha interesse, estas demonstrações fazem parte do apêndice B.

Tabela 3.11 – Ordens verdadeiras e assintótica das variáveis

Função de Interpolação Termo Advectivo	Variáveis de Interesse							
	T_c		T_m		I		L	
	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica
UDS	1, 2, 3...	1	1, 2, 3...	1	1, 2, 3...	1	1, 2, 3...	1
CDS-2	2, 4, 6...	2	2, 4, 6...	2	2, 3, 4...	2	2, 4, 6...	2
UDS-2	2, 3, 4...	2	2, 3, 4...	2	2, 3, 4...	2	2, 3, 4...	2
WUDS	2, 4, 6...	2	2, 4, 6...	2	2, 3, 4...	2	2, 4, 6...	2
PLDS	2, 4, 6...	2	2, 4, 6...	2	2, 3, 4...	2	2, 4, 6...	2
ADS	2, 4, 6...	2	2, 4, 6...	2	2, 3, 4...	2	2, 4, 6...	2
ALFA	1, 2, 3...	1	1, 2, 3...	1	1, 2, 3...	1	1, 2, 3...	1
TVD	2, 4, 6...	2	2, 4, 6...	2	2, 3, 4...	2	2, 4, 6...	2
QUICK2	2, 3, 4...	2	2, 3, 4...	2	2, 3, 4...	2	2, 3, 4...	2
QUICK4	3, 4, 5...	3	2, 3, 4...	2	2, 3, 4...	2	3, 4, 5...	3

3.5 SOLUÇÃO NUMÉRICA

Serão descritos a seguir, quais foram os meios e a estrutura computacional utilizada para obtenção das soluções numéricas da equação governante.

Para obtenção da solução numérica, foram utilizados programas computacionais desenvolvidos em Fortran 2003 por meio do aplicativo *Intel Visual Fortran 9.1*, utilizando precisão quádrupla (REAL*16). O tipo de projeto para criação do programa foi o *Fortran Console Application*, versão *release*.

As simulações foram feitas em computadores do Laboratório de Experimentação Numérica (LENA-1) da Universidade Federal do Paraná. Foram utilizados dois computadores, o CFD-13 que possui processador Intel Core2Quad, com velocidade de barramento de 2.4 GHz, memória de 8GB de RAM e Windows XP 64 bits, e o CFD-8 com processador Intel Pentium IV, 3.0 GHz, 2.0 GB RAM.

Para facilitar o entendimento, a partir deste ponto as ações foram divididas em três etapas, que foram as seguintes.

3.5.1 Obtenção das Soluções Numéricas das Variáveis de Interesse

Conforme já dito em seção anterior, para cada conjunto de FI utilizada, e aí entenda-se conjunto a FI para o termo advectivo e outra para o termo difusivo, foi gerado um sistema de equações algébricas, que foram resolvidas através do método TDMA.

O programa computacional utilizado para obtenção destes valores foi Peclet_1Dp_2p2, tendo sido o programa gerado em 09-set-2008. Cujo algoritmo de solução tem, de uma forma geral, a seguinte rotina :

- 1) leitura dos dados de entrada (variáveis, condições de contorno, número de volumes, valor de Pe , função de interpolação utilizada, nome do arquivo de saída);
- 2) obtenção do tamanho dos volumes da malha;
- 3) cálculo dos coeficientes e termos fonte de cada volume da malha;
- 4) resolução do sistema de equações algébricas, obtendo a solução numérica, com o uso do método TDMA; e
- 5) visualização dos resultados das variáveis e erros de discretização, obtidos através da comparação da solução numérica com a solução analítica.

E finalmente, para obtenção da solução numérica final, foram assumidos ainda:

- Precisão quádrupla (REAL*16);
- O número de Peclet considerado para todos os processos de simulação foi 5;
- Para a simulação com aproximação ALFA, considerou-se o coeficiente alfa como 0,05;
- O refinamento da malha foi de ordem 3, iniciando a primeira simulação com 5 nós e a última simulação com 23.914.845 nós. Ou seja, para cada FI obteve-se a solução numérica em 15 malhas distintas;
- O processo acima foi feito para cada FI (10 no total) considerada, totalizando 150 simulações. Nesta fase foram obtidos os valores numéricos das variáveis de interesse para cada simulação feita. Isto significa que cada variável de interesse teve 15 resultados (das 15 malhas) para cada função de interpolação;

- Por meio do gerenciador de tarefas do Windows pôde-se obter o desempenho computacional durante a simulação, verificando a ocupação de memória máxima para cada simulação; e
- Através do programa `Peclet_1Dp_2p2` foi possível obter o tempo de processamento de cada simulação, através da função `CPU_TIME` disponível na biblioteca do aplicativo Fortran/2003.

3.5.2 Obtenção das Ordens e Magnitudes dos Erros de Discretização

Após obter os valores numéricos provenientes de cada simulação, estes dados foram utilizados para obtenção das ordens aparente e efetiva do erro de discretização. Isto foi feito utilizando o estimador de Richardson, e a extrapolação de Richardson generalizada. Calculou-se ainda a magnitude do erro de discretização com a múltipla extrapolação de Richardson.

De modo prático, os valores obtidos na solução numérica foram submetidos a um programa baseado no estimador de Richardson. Com isto obtiveram-se tanto as ordens efetivas e aparentes dos erros para cada função de interpolação, assim como os valores absolutos dos erros. Este programa foi o `Richardson_3p1` gerado em 12-Dez-2007.

3.5.3 Verificação do Impacto do Número de Peclet no Erro de Discretização

Para verificar o impacto do número de Peclet sobre o erro de discretização foram escolhidas três funções de interpolação (UDS, CDS-2 e QUICK4) utilizadas anteriormente, sendo uma de cada ordem do erro de truncamento.

Com isto, obtiveram-se as soluções numéricas para a variável de interesse T_c através do programa `Peclet_1Dp_2p2`, e as ordens e magnitudes dos erros de discretização através do programa `Richardson_3p1`.

Para verificação do impacto do número de Peclet no resultado do erro de discretização, foi considerada a variação do Pe assumindo os seguintes valores: 0,01 ; 0,1 ; 1 ; 10 ; 100.

As tabelas de 3.2 a 3.7 mostram os valores analíticos de cada Pe . Reforçando que estes valores foram obtidos com o software *Maple*, já descrito no subitem 3.1.5, e com a estrutura computacional descrita no início deste item.

4 RESULTADOS DA EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO

Neste capítulo são analisados os resultados obtidos no trabalho, tendo por base os objetivos definidos anteriormente.

Apresenta-se inicialmente uma variável marginal ao trabalho, que não é foco do estudo, mas que foi acompanhada devido a sua relevância na escolha de FI's para resolução de problemas similares ao estudado. Esta característica é o tempo computacional necessário para realização das simulações e obtenção das soluções numéricas.

Seguindo as atividades, são confrontadas as ordens obtidas na análise *a priori*, com as ordens obtidas após as realizações das simulações, ou seja, com as ordens obtidas *a posteriori*.

Na seqüência, são verificadas as magnitudes, em termos quantitativos, dos erros de discretização obtidos com a utilização das FI's definidas. Estas ordens de magnitude são obtidas através da extrapolação de Richardson.

O próximo passo é então o de comparar as magnitudes dos erros obtidos utilizando as múltiplas extrapolações de Richardson (MER), com os erros obtidos com a extrapolação de Richardson simples.

E finalmente, verifica-se que impactos podem causar as variações do número de Peclet no erro de discretização final.

4.1 TEMPO DE PROCESSAMENTO

Apesar de ser um item não identificado como objetivo principal do trabalho, este resultado é de interesse para mostrar as velocidades das simulações utilizando cada FI, para uma mesma estrutura computacional.

A seguir, a Tab.4.1 apresenta o tempo total de processamento de cada função de interpolação, por malha, sendo o tempo apresentado em segundos. Estes tempos foram os necessários para obtenção de todas as variáveis, sendo assim, não pode-se analisar os tempos de processamento para obtenção de variável a variável.

Pode-se ver na Tab.4.1 que as FI's UDS, PLDS, CDS-2, WUDS e ALFA têm um tempo de processamento significamente inferior das demais FI's. Considerando a malha mais refinada e comparando a função de interpolação ALFA com a UDS-2, constata-se que a

primeira requer aproximadamente 1,4% do tempo que a segunda. Se, com o mesmo critério anterior, comparam-se os extremos, ou seja, a função UDS com a ADS, vê-se que a primeira necessita 0,8% do tempo dispendido pela segunda.

Tabela 4.1 – Tempos de processamento (segundos) x FI x malha

Nós	Não utiliza ciclos iterativos					Utiliza ciclos iterativos				
	UDS	PLDS	CDS-2	WUDS	ALFA	UDS-2	TVD	QUICK2	QUICK4	ADS
5	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
15	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
45	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,016	0,016	0,016
135	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,016	0,016	0,016	0,031	0,031
405	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,031	0,047	0,062	0,078	0,094
1.215	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,125	0,141	0,188	0,250	0,266
3.645	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,735	0,406	0,578	0,734	0,781
10.935	0,016	0,016	0,016	0,016	0,016	1,125	1,234	1,734	2,172	2,344
32.805	0,031	0,031	0,031	0,047	0,047	3,375	3,719	5,203	6,797	7,281
98.415	0,125	0,125	0,125	0,141	0,141	10,172	11,125	15,922	20,422	22,438
295.245	0,359	0,359	0,391	0,406	0,438	30,375	33,891	48,344	59,266	67,531
885.735	1,062	1,094	1,156	1,266	1,281	91,219	102,016	146,781	186,719	207,172
2.657.205	3,172	3,250	3,484	3,781	3,812	274,469	302,578	437,750	540,125	606,125
7.971.615	9,422	9,594	10,188	11,406	11,578	810,750	882,688	1.295,172	1.624,719	1.245,359
23.914.845	28,906	29,422	31,406	34,453	34,688	2.474,562	2.724,094	2.744,094	3.359,922	3.749,031

O principal motivo destas grandes diferenças de tempos, entre estes dois grupos de FI's, é a necessidade de processos iterativos para alguns deles. Apesar de não carregarem muito a máquina, ou seja, não necessitarem muita memória, necessitam de muito tempo para conclusão das operações.

Deve-se no entanto considerar que uma das premissas iniciais do trabalho é que os processos iterativos fossem realizados até o erro de máquina. Verificou-se que 100 iterações seriam suficientes para o atingimento deste critério, razão pela qual os tempos apresentados para os esquemas que tem processo iterativo são os tempos totais para execução desta quantidade de iterações.

A consideração anterior impede uma análise um pouco mais clara dos tempos apresentados na Tab.4.1. Para tentar esclarecer esta questão apresenta-se na Tab.4.2 uma relação onde, para cada malha, mostra-se a quantidade de iterações necessárias para que cada FI atinja determinada magnitude de erro (da ordem de 10^{-22}) para a variável T_c .

Pode-se ver então, da Tab.4.2, que das FI's apresentadas a QUICK4 é a que dispense comparativamente maior número de processos iterativos. Enquanto isto a QUICK2 é a que converge de forma mais rápida. E finalmente, tanto UDS-2, TVD, QUICK2 e ADS necessitam aproximadamente quantidade de processos iterativos muito próximos à medida que a malha é refinada (mesmo em malhas mais grossas).

Tabela 4.2 – Quantidade de iterações para atingimento de igual ordem de magnitude de erro para a variável T_c

Nós	UDS-2	TVD	QUICK2	QUICK4	ADS
5	31	34	37	40	50
15	25	21	23	28	33
45	16	17	15	23	17
135	12	12	11	19	12
405	10	8	8	17	9
1.215	8	7	7	16	7
3.645	7	6	4	14	6
10.935	6	5	5	13	5
32.805	4	4	4	9	4
98.415	4	3	3	10	4
295.245	4	3	3	8	2
885.735	4	3	3	7	3
2.657.205	3	3	2	5	2
7.971.615	3	2	2	4	4
23.914.845	3	2	2	4	7

Fazendo uma relação dos tempos para execução das 100 iterações para cada uma destas FI's (Tab.4.1), com a quantidade de iterações necessárias para cada FI (Tab.4.2), pode-se fazer uma projeção do tempo necessário para atingimento da quantidade de iterações apresentadas na Tab.4.2. Estes valores são apresentados na Tab.4.3.

Tabela 4.3 – Projeção de tempo necessário para atingimento de magnitude de erro 10^{-22} para a variável T_c

Nós	UDS-2	TVD	QUICK2	QUICK4	ADS
5	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
15	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
45	0,000	0,000	0,002	0,004	0,003
135	0,002	0,002	0,002	0,006	0,004
405	0,003	0,004	0,005	0,013	0,008
1.215	0,010	0,010	0,013	0,040	0,019
3.645	0,051	0,024	0,023	0,103	0,047
10.935	0,068	0,062	0,087	0,282	0,117
32.805	0,135	0,149	0,208	0,612	0,291
98.415	0,407	0,334	0,478	2,042	0,898
295.245	1,215	1,017	1,450	4,741	1,351
885.735	3,649	3,060	4,403	13,070	6,215
2.657.205	8,234	9,077	8,755	27,006	12,123
7.971.615	24,323	17,654	25,903	64,989	49,814
23.914.845	74,237	54,482	54,882	134,397	262,432

Vê-se na Tab.4.3 que os tempos das FI's que utilizam processos iterativos continuam mais altos que as outras que não utilizam este tipo de processo (Tab.4.1). Além disto, se comparados os dados obtidos da Tab.4.3 aos apresentados pela Tab.4.1 para as FI's que não

usam processo iterativo, pode-se verificar que o processo iterativo com menor tempo de processamento (TVD) necessita de aproximadamente 57% mais tempo do que a FI sem processo iterativo e que tem o maior tempo de processamento (ALFA), quando considerada a malha mais refinada.

A noção destes tempos é um subsídio interessante na escolha da FI a ser utilizada em projetos. Isto porque possibilita a adequação do método de solução à estrutura computacional existente, assim como o tempo disponível para execução do trabalho. Ou, sob outro ponto de vista, pode também ser uma possibilidade de economia, em termos de custo computacional, e também de tempo.

4.2 MEMÓRIA COMPUTACIONAL

Aborda-se aqui outro item não identificado nos objetivos do trabalho, mas que aparece, juntamente com o tempo de processamento, como um item interessante para mostrar as necessidades de *hardware* para solução do problema.

A Tab. 4.4 apresenta a ocupação de memória computacional máxima em *gigabytes* (GB), para cada malha gerada e cada função de interpolação utilizada. Similarmente à obtenção do tempo computacional, os valores apresentados são os necessários para obtenção de todas as variáveis, sendo assim, não se pode analisar variável a variável.

Tabela 4.4 – Memória computacional em GB necessárias para a simulação x Nós x FI

	QUICK4	UDS	CDS-2	QUICK2	ALFA	WUDS	PLDS	UDS-2	TVD	ADS
5	0,427	0,455	0,450	0,385	0,459	0,491	0,492	0,493	0,471	0,402
15	0,427	0,455	0,457	0,385	0,460	0,491	0,492	0,493	0,471	0,402
45	0,427	0,455	0,457	0,385	0,460	0,491	0,492	0,493	0,471	0,406
135	0,427	0,455	0,457	0,385	0,460	0,491	0,492	0,493	0,471	0,406
405	0,428	0,455	0,457	0,385	0,460	0,491	0,492	0,493	0,471	0,407
1.215	0,428	0,455	0,456	0,385	0,460	0,491	0,492	0,493	0,471	0,408
3.645	0,428	0,455	0,456	0,385	0,460	0,492	0,492	0,494	0,473	0,408
10.935	0,435	0,457	0,458	0,393	0,461	0,493	0,493	0,494	0,473	0,410
32.805	0,435	0,460	0,460	0,393	0,464	0,495	0,498	0,498	0,477	0,415
98.415	0,445	0,466	0,467	0,404	0,471	0,503	0,504	0,506	0,486	0,425
295.245	0,471	0,487	0,489	0,429	0,492	0,524	0,526	0,536	0,514	0,456
885.735	0,574	0,551	0,552	0,521	0,574	0,609	0,611	0,615	0,615	0,544
2.657.205	0,846	0,818	0,818	0,769	0,840	0,854	0,856	0,861	0,901	0,784
7.971.615	1,55	1,51	1,51	1,46	1,53	1,54	1,55	1,56	1,69	1,65
23.914.845	3,62	3,66	3,67	3,67	3,68	3,69	3,69	3,71	4,06	4,05

Analisando a Tab.4.4 pode-se ver que a necessidade de memória computacional para solução do problema com estas FI's não diferem muito. Isto fica claro na comparação dos

extremos, ou seja, a função QUICK4 com a ADS, é fácil verificar que a primeira necessita 89% da memória ocupada pela segunda.

A noção desta ocupação de memória é um subsídio interessante na definição do projeto, pois pode auxiliar na escolha da estrutura de *hardware*, ou sob outro ponto de vista, dá uma idéia das limitações de utilização do *hardware* disponível.

4.3 MAGNITUDE DOS ERROS NUMÉRICOS (A *POSTERIORI*)

4.3.1 Variável T_c

A análise da variável T_c demonstra de forma bastante clara a influência das funções de interpolação no erro de discretização. Isto ocorre pois a análise dos erros das variáveis T_m e I ainda sofrem influência dos erros inseridos devido às outras aproximações necessárias à sua obtenção, mais especificamente a regra do retângulo para T_m e UDS-2 para I .

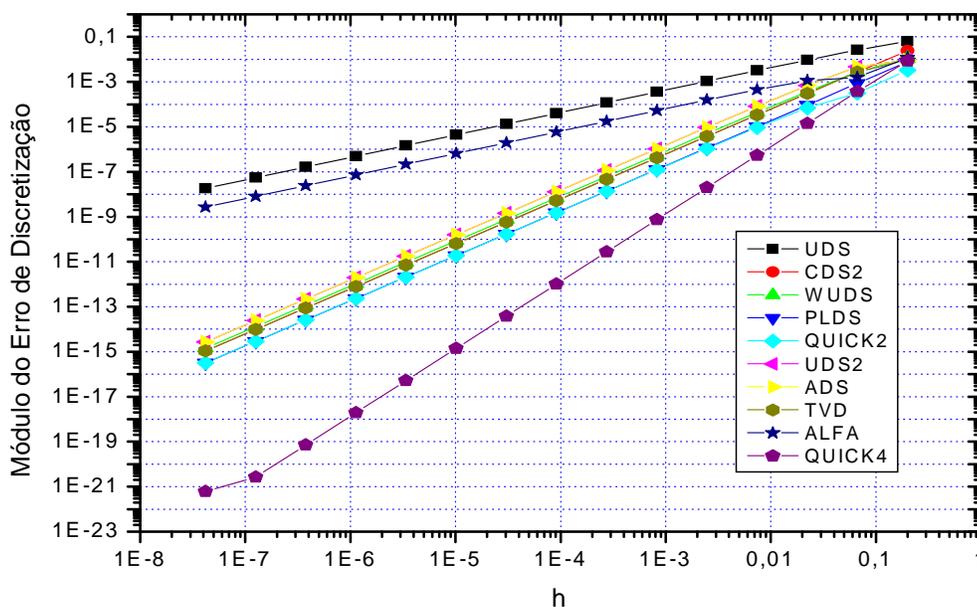


Figura 4.1 – Gráfico “módulos do erro de discretização x h” para a variável T_c .

Fazendo agora a análise dos erros, pode-se verificar na Fig. 4.1 que a função de interpolação QUICK4, atinge valores do erro de discretização menores, da ordem de 10^{-21} .

Ve-se ainda que para a malha mais fina, as funções estão agrupadas conforme sua ordem assintótica. Analisando desta forma tem-se:

- 1ª ordem: UDS e ALFA atingem a mesma magnitude de erro na malha mais refinada, na ordem de 10^{-8} ;
- 2ª ordem: Todos os erros atingem praticamente a mesma ordem de grandeza na malha mais refinada, em torno de 10^{-15} . Tem-se também a confirmação da influência do erro de 2ª ordem do CDS-2 na aproximação do termo difusivo, quando usa-se o QUICK (3ª ordem) para a aproximação do termo advectivo;
- 3ª ordem: o esquema QUICK, quando usado com o CDS-4, garante sua ordem natural do erro de truncamento, atingindo a ordem de 10^{-21} na malha mais refinada.

4.3.2 Variável T_m

Os erros analisados para a variável T_m vem do erro de truncamento da FI, e também do erro de truncamento da aproximação do modelo numérico para obtenção da própria variável, motivo pelo qual as ordens verdadeiras e assintótica obtidas aqui podem diferir das obtidas para a variável T_c .

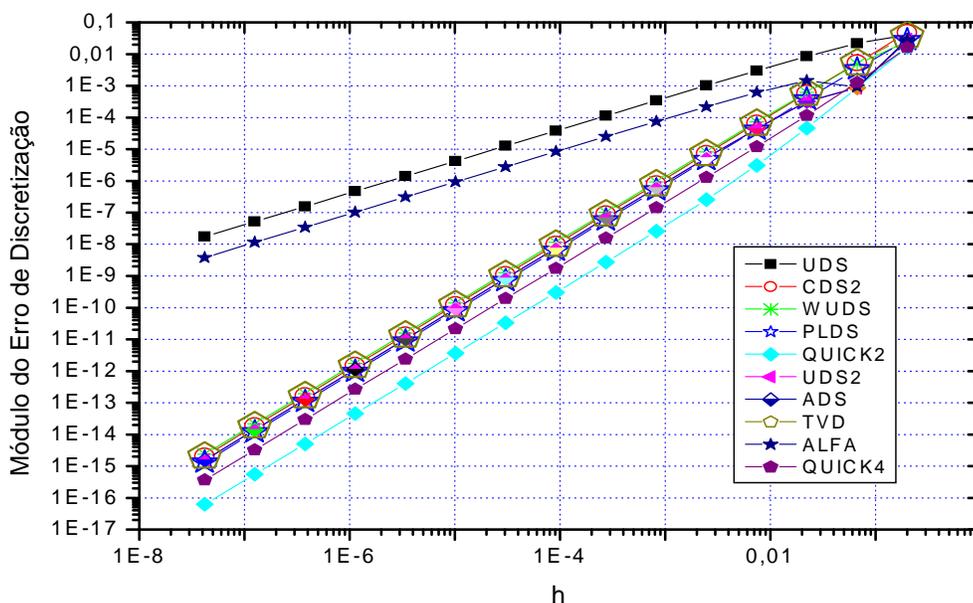


Figura 4.2 – Gráfico “módulos do erro de discretização x h” para a variável T_m

Com relação aos erros obtidos, neste caso, os valores apresentados na Fig. 4.2 confirmam os resultados mostrados nas análises *a priori*. Tem-se então um agrupamento das FI's que resultam em erros de 2ª ordem (CDS-2, UDS-2, WUDS, PLDS, ADS, QUICK2, QUICK4 e TVD), com magnitude do erro da ordem de aproximadamente 10^{-16} na malha mais refinada. Já as FI's com erro de discretização de 1ª ordem (UDS e ALFA) aparecem também agrupadas, e tem sua magnitude de erro da ordem de aproximadamente 10^{-9} na malha mais refinada.

4.3.3 Variável I

Os erros analisados para a variável I , seguem a mesma análise feita para a variável T_m , quando falamos em sua diferença em relação à variável T_c .

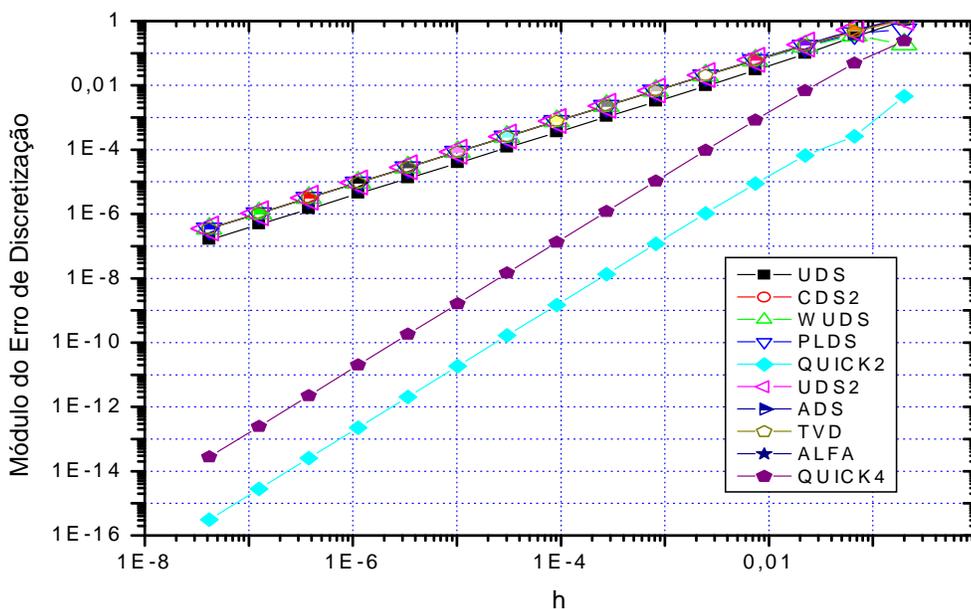


Figura 4.3 - Gráfico “módulos do erro de discretização x h” para a variável I

Com relação aos erros obtidos, a Fig.4.3 mostra que neste caso os valores obtidos na malha mais fina, apresentam os esquemas QUICK2 e QUICK4 com os menores erros, da ordem de 10^{-16} e 10^{-14} respectivamente. Logo depois os outros esquemas de 1ª ordem (CDS-2, UDS2, WUDS, PLDS, ADS, TVD, UDS e ALFA), com erros de ordem de magnitude de 10^{-6} na malha mais refinada.

4.3.4 Variável L

Os erros analisados para a variável L , seguem a mesma análise feita para a variável T_c , uma vez que sua obtenção não implica em aproximações adicionais.

Com relação aos erros obtidos, a Fig. 4.4 mostra que neste caso os valores obtidos na malha mais fina apresentam o esquema QUICK4, de 3ª ordem, com os menores valores de erros, da ordem de aproximadamente 10^{-21} na malha mais fina. A seguir vem os esquemas de 2ª ordem, com valores de erros da ordem de 10^{-15} na malha mais fina, e finalmente os UDS e ALFA de 1ª ordem, atingindo 10^{-8} na malha mais fina.

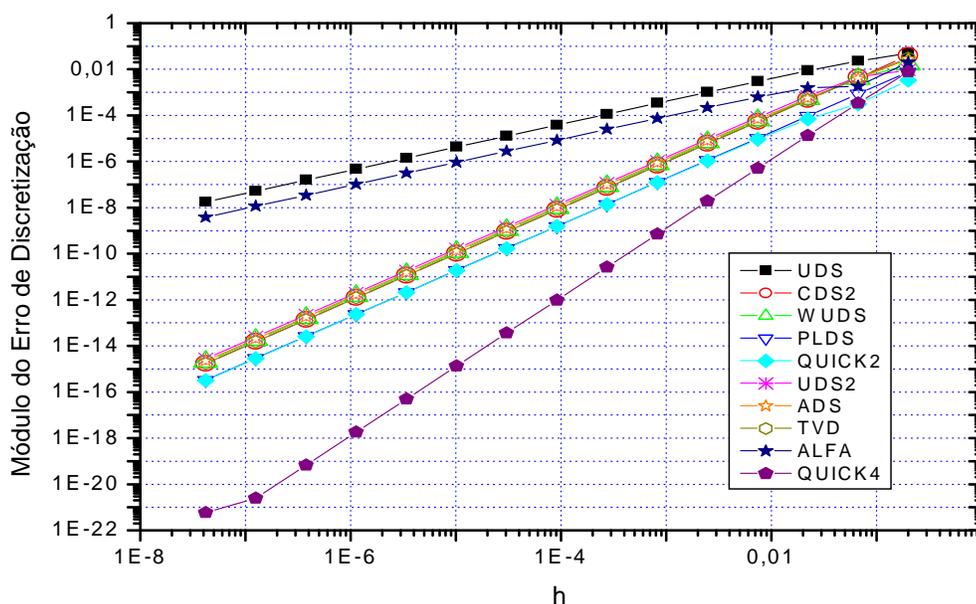


Figura 4.4 - Gráfico “módulos do erro de discretização x h” para a variável L

4.4 ORDENS ASSINTÓTICA, EFETIVA E APARENTE

A seguir são apresentados os resultados obtidos nos cálculos das ordens efetiva e aparente. Estes valores são então comparados com os obtidos na análise *a priori*. Com isto pode-se verificar a efetividade deste tipo de análise inicial (*a priori*) para problemas similares ao tratado neste trabalho.

4.4.1 Variável T_c

Analisando os dados listados na Tab.4.5 tem-se que os resultados inicialmente esperados foram atingidos, ou seja, os valores das ordens efetiva e aparente tendem à ordem assintótica com o refino da malha.

Este resultado traz grandes vantagens em termos de perspectivas de resultados para problemas deste tipo. Isto porque, fazendo a análise de erros *a priori*, pode-se ter uma idéia inicial das ordens de erros que serão obtidas *a posteriori*, uma vez que as ordens de erro *a priori* devem ser confirmadas, como o foram aqui.

Tabela 4.5 – Ordens verdadeiras, efetivas e aparentes da variável T_c

Função de Interpolação Termo Adectivo	T_c			
	Análise <i>a priori</i>		Análise <i>a posteriori</i>	
	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica	Ordem Efetiva	Ordem Aparente
UDS	1, 2, 3...	1	1	1
CDS-2	2, 4, 6...	2	2	2
UDS-2	2, 3, 4 ..	2	2	2
WUDS	2, 4, 6 ..	2	2	2
PLDS	2, 4, 6 ..	2	2	2
ADS	2, 4, 6 ..	2	2	2
ALFA	1, 2, 3...	1	1	1
TVD	2, 4, 6 ..	2	2	2
QUICK2	2, 3, 4 ..	2	2	2
QUICK4	3, 4, 5...	3	3	3

O que foi apresentado na Tab. 4.5 é confirmado pelos gráficos apresentados nas Figs. 4.5 e 4.6, que mostram as ordens efetivas e aparentes de cada função de interpolação. Vê-se nestes gráficos que as ordens dos erros ficam mais evidentes à medida que a malha é refinada. Isto nada mais é do que foi definido inicialmente como ordem assintótica do erro, ou seja, é a ordem a que tende o erro quando o tamanho do elemento de malha tende a zero.

Deve-se notar ainda, nas Figs. 4.5 e 4.6, que as ordens efetiva e aparente para o esquema QUICK4 apresenta descontinuidade na malha mais refinada. Isto se deve à

influência dos erros de arredondamento e de máquina, que também aparecem na Fig. 4.1 para a malha mais fina deste mesmo esquema.

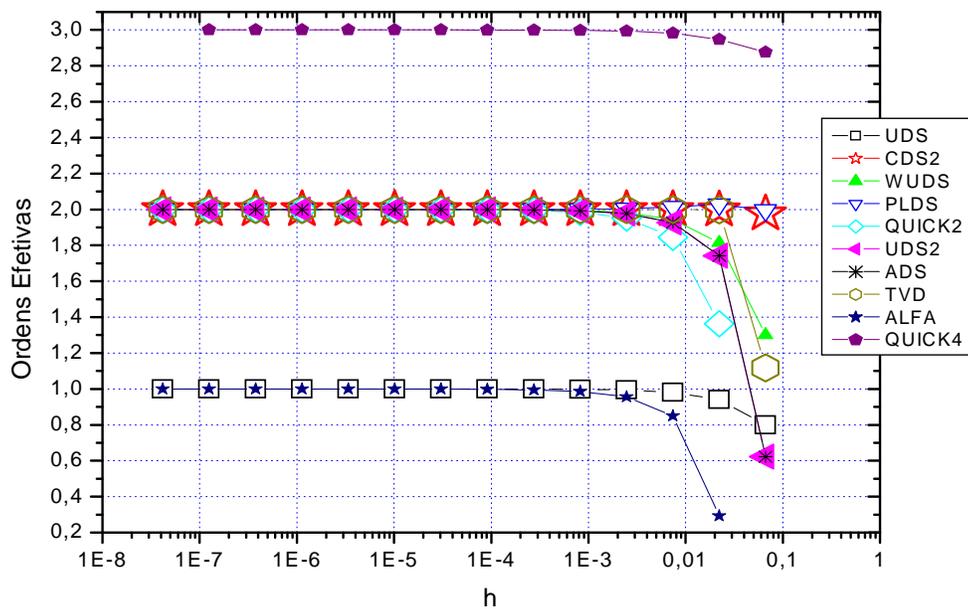


Figura 4.5 – Ordem efetiva das funções de interpolação para a variável T_c

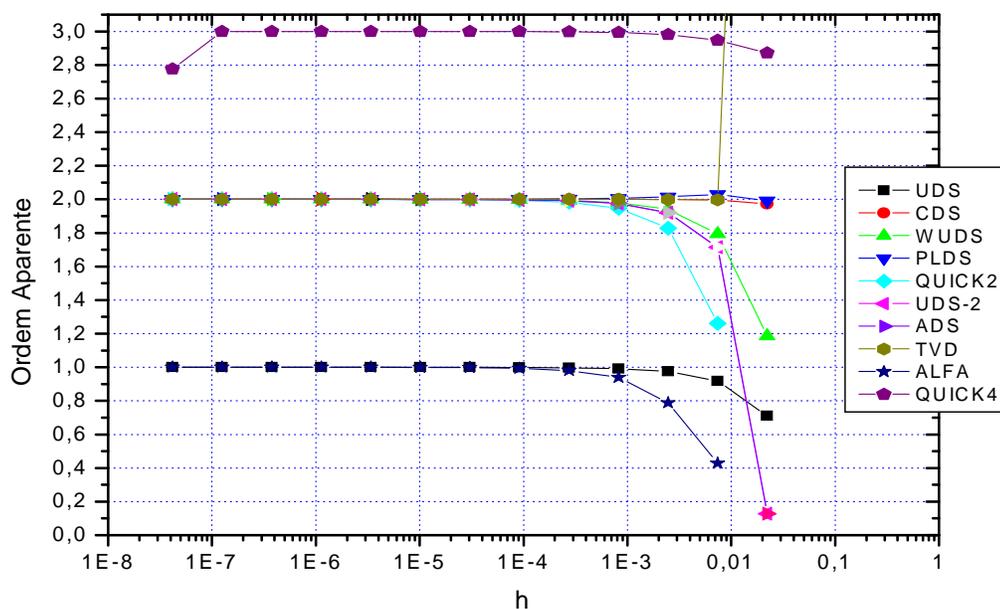


Figura 4.6 – Ordem aparente das funções de interpolação para a variável T_c

A Fig.4.7 apresenta as ordens efetivas (pE) e as ordens aparentes (pU) do erro de discretização obtidas para o esquema CDS-2. Pode-se verificar que estas ordens confirmam os valores das ordens verdadeiras (p_L , p_1 e p_2) e assintótica (p_L) obtidas na análise *a priori*, ou seja, atingem os valores dois, quatro, seis e assim sucessivamente. Estes índices são as potências de “ h ” que aparecem na Eq. (2.65).

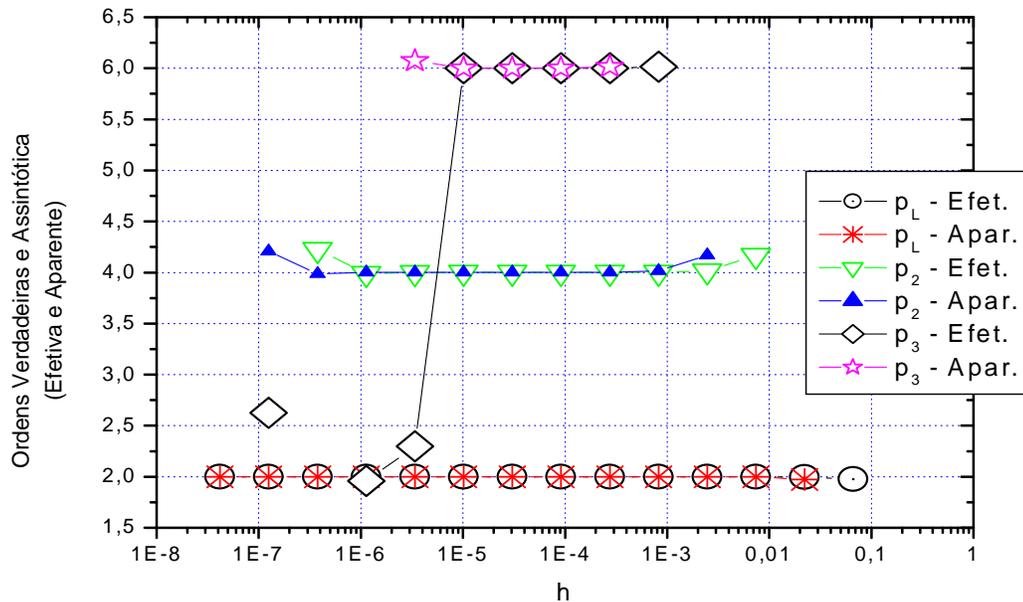


Figura 4.7 – Gráfico das ordens verdadeiras e assintótica dos erros da variável T_c (CDS-2/CDS-2)

4.4.2 Variável T_m

Assim como o caso da variável T_c , vê-se na Tab.4.6, que as ordens efetiva e aparente obtidas *a posteriori*, confirmam as análises feitas *a priori*, trazendo as vantagens já descritas de que, para este tipo de problema, tem-se na análise *a priori* uma ferramenta importante de previsão de erros de discretização.

Tabela 4.6 - Ordens verdadeiras, efetivas e aparentes da variável T_m

Função de Interpolação Termo Advectivo	T_m			
	Análise a <i>Priori</i>		Análise a <i>Posteriori</i>	
	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica	Ordem Efetiva	Ordem Aparente
UDS	1, 2, 3...	1	1	1
CDS-2	2, 4, 6...	2	2	2
UDS-2	2, 3, 4...	2	2	2
WUDS	2, 4, 6...	2	2	2
PLDS	2, 4, 6...	2	2	2
ADS	2, 4, 6...	2	2	2
ALFA	1, 2, 3...	1	1	1
TVD	2, 4, 6...	2	2	2
QUICK2	2, 3, 4...	2	2	2
QUICK4	2, 3, 4...	2	2	2

4.4.3 Variável I

Analisando a Tab. 4.7 pode-se ver que os resultados obtidos não são os esperados para o caso de algumas FI's (CDS-2, UDS-2, WUDS, PLDS, ADS e TVD). Vê-se nestes casos que a ordem do erro de discretização a *posteriori* foi degenerada. Este comportamento pode estar relacionado tanto com o erro de poluição, quanto à forma de aplicar as condições de contorno, uma vez que esta variável está sendo analisada no contorno, em $x = I$.

Pode-se verificar no apêndice B, no desenvolvimento do sub-item B.6.1.1, as características do erro de poluição, que nada mais é que o “carregamento” dos erros de discretização de nós vizinhos para o cálculo de determinado nó.

A influência da forma de aplicação das condições de contorno na ordem do erro de discretização pode ser explicada pois, para a análise de variáveis no contorno, as análises a *priori* podem não detectar degenerações que influenciarão o erro a *posteriori*.

Tabela 4.7 - Ordens verdadeiras, efetivas e aparentes da Variável I

Função de Interpolação Termo Advectivo	I			
	Análise a <i>Priori</i>		Análise a <i>Posteriori</i>	
	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica	Ordens Efetivas	Ordens Aparentes
UDS	1, 2, 3...	1	1	1
CDS-2	2, 3, 4, .	2	1	1
UDS-2	2, 3, 4...	2	1	1
WUDS	2, 3, 4...	2	1	1
PLDS	2, 3, 4...	2	1	1
ADS	2, 3, 4...	2	1	1
ALFA	1, 2, 3...	1	1	1
TVD	2, 3, 4...	2	1	1
QUICK2	2, 3, 4...	2	2	2
QUICK4	2, 3, 4...	2	2	2

4.4.4 Variável L

E finalmente, analisando a Tab. 4.8, vê-se que os valores das ordens efetiva e aparente tendem à ordem assintótica com o refinamento da malha. Conforme dito anteriormente para as variáveis T_c e T_m , este resultado traz a vantagem de ter-se, para este tipo de problema, uma ferramenta importante de análise a *priori* dos erro de discretização envolvidos na solução numérica.

Outro ponto importante é que a ordem aparente do erro tende à ordem assintótica quando a malha é refinada. Considerando que a ordem aparente é a análise do erro de discretização a *posteriori*, quando não se tem a solução analítica, este resultado informa que, para este tipo de problema, mesmo que não se tenha a solução analítica, tem-se na ordem aparente um referencial confiável para verificar a acurácia de nossa solução numérica.

Tabela 4.8 - Ordens verdadeiras, efetivas e aparentes da variável L

Função de Interpolação Termo Advectivo	L			
	Análise a <i>Priori</i>		Análise a <i>Posteriori</i>	
	Ordens Verdadeiras	Ordem Assintótica	Ordens Efetivas	Ordens Aparentes
UDS	1, 2, 3...	1	1	1
CDS-2	2, 4, 6...	2	2	2
UDS-2	2, 3, 4...	2	2	2
WUDS	2, 4, 6...	2	2	2
PLDS	2, 4, 6...	2	2	2
ADS	2, 4, 6...	2	2	2
ALFA	1, 2, 3...	1	1	1
TVD	2, 4, 6...	2	2	2
QUICK2	2, 3, 4...	2	2	2
QUICK4	3, 4, 5...	3	3	3

4.5 REFINAMENTO DO ERRO COM MÚLTIPLAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON

A seguir são demonstradas as vantagens da utilização das Múltiplas Extrapolações de Richardson (MER) para o refinamento, redução, do erro de discretização. Isto é feito utilizando somente três dos dez esquemas apresentados no trabalho. Foram escolhidos um de 1ª ordem (UDS), um de 2ª ordem (CDS-2) e o único de 3ª ordem (QUICK4).

4.5.1 Variável T_c

Analisando a Fig. 4.8, vê-se que as curvas obtidas com MER (Emer-UDS, Emer-CDS2 e Emer-QUICK4), atingem magnitudes de erros bem mais baixas, ou mais refinadas, que seus respectivos pares, que não utilizam MER (Eh-UDS, Eh-CDS2 e Eh-QUICK4).

Analisando ainda a Fig.4.8, vê-se que nos três casos de utilização do MER, o erro de arredondamento passa a afetar o resultado final a partir da malha de 10.935 nós, 98.415 nós 295.245 nós, para os esquemas CDS-2, QUICK4 e UDS respectivamente.

O erro obtido com CDS-2 utilizando MER tem resultados melhores que o QUICK4 a partir da malha de 45 CV's. Entenda-se por melhores resultado magnitudes de erros menores quando comparam-se malhas de mesmo número de CV's. Caso o MER não seja utilizado este resultado se inverte, tendo o QUICK4 melhores resultados que o CDS-2 para qualquer malha. Uma hipótese para isto é o fato das ordens verdadeiras do esquema CDS-2 respeitarem uma progressão aritmética de ordem 2, enquanto o esquema QUICK4 tem suas ordens verdadeiras acrescidas sempre de uma unidade. Isto pode fazer com que a cada extrapolação do MER o CDS-2 aumente sua ordem em 2, enquanto o QUICK4 aumenta em somente um.

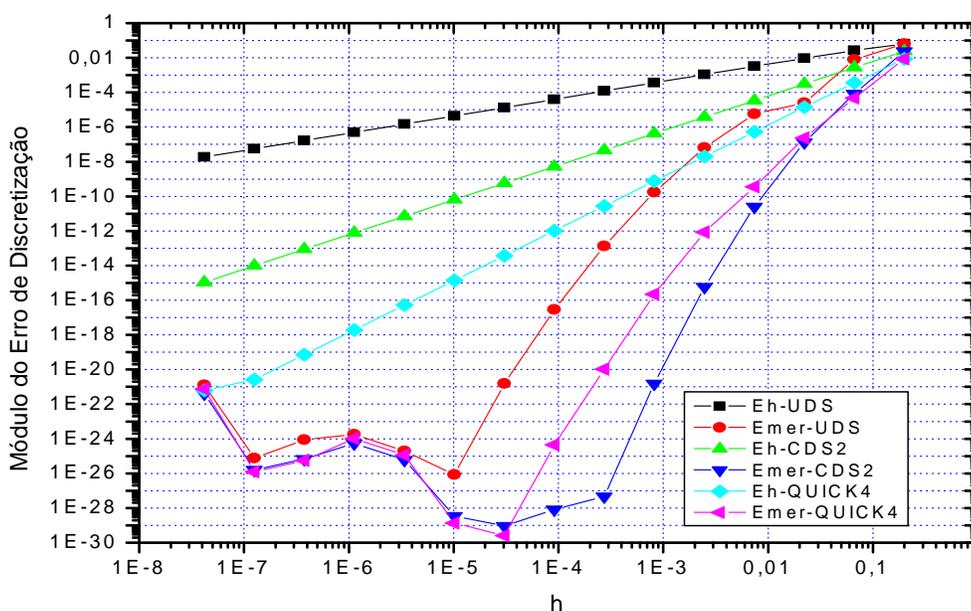


Figura 4.8 - Gráfico “módulos do erro de discretização com MER e sem MER x h” para a variável T_c

Pode-se ainda comparar quantitativamente estas vantagens de utilização do MER. Para isto, foi escolhida uma das 3 FI's, mais especificamente a CDS-2, e confrontados os dados de duas formas. Na primeira, definiu-se determinadas magnitudes de erros de discretização, comparando em que tamanho de malha tal erro ocorre para processo com MER e sem MER. E num segundo ponto, foi definido um tamanho de malha e demonstrado as magnitudes de erros obtidas no processo com e sem MER.

Para o primeiro caso, pode-se ver na Tab.4.9 que, para atingir a magnitude de erro de 10^{-7} , o processo sem MER precisa uma malha 27 vezes maior que a malha usada pelo processo com MER. À medida que a magnitude dos erros diminuem, vê-se discrepância ainda maior, chegando, o processo sem MER, a necessitar de uma malha 19.209 vezes maior que a malha usando MER, para atingir erros de magnitude 10^{-15} .

Tabela 4.9. Redução de nós de malhas para erros fixos (CDS-2) – variável T_c

Magnitude do Erro	1,00E-07	1,00E-11	1,00E-15
Erro (Eh)	4,22E-07	6,44E-11	9,81E-15
Nós da Malha	1.215	98.415	7.971.615
Erro (Emer)	1,32E-07	2,54E-11	5,80E-16
Nós da Malha	45	135	415
Relação entre Malha Eh / Malha Emer	27	729	19.209

Seguindo agora outra forma comparativa vê-se na Tab. 4.10 que, com uma malha fixa de 45 volumes, o processo sem MER tem erro aproximadamente 2.340 vezes maior que o processo com MER na mesma malha. Com o refinamento da malha esta discrepância aumenta, sendo que, com a malha de 32.805 volumes, o processo sem MER atinge um erro aproximadamente 62 quintilhões de vezes maior que o processo com MER para a mesma malha.

Tabela 4.10. Redução dos erros para malhas fixas (CDS-2) – variável T_c

Malha (nós)	45	1215	32805
h	2,22E-02	8,23E-04	3,05E-05
Erro (Eh)	3,08E-04	4,22E-07	5,79E-10
Erro (Emer)	1,32E-07	1,55E-21	9,34E-30
Eh/Emer	2,34E+03	2,72E+14	6,20E+19

Estes resultados são importantes pois impactam diretamente na necessidade computacional utilizada, sendo que, os processos com MER necessitam menos memória e menor tempo computacional, ou seja, uma estrutura computacional de mais baixo custo, que os processos sem MER para atingir os mesmos erros.

4.5.2 Variável T_m

Analisando a Fig.4.9, vê-se que os resultados se assemelham aos obtidos com a variável T_c . As curvas obtidas com MER (Emer-UDS, Emer-CDS2 e Emer-QUICK4),

chegam a magnitudes de erros bem mais baixas, ou mais refinadas que seus respectivos pares, que não utilizam MER (Eh-UDS, Eh-CDS2 e Eh-QUICK4).

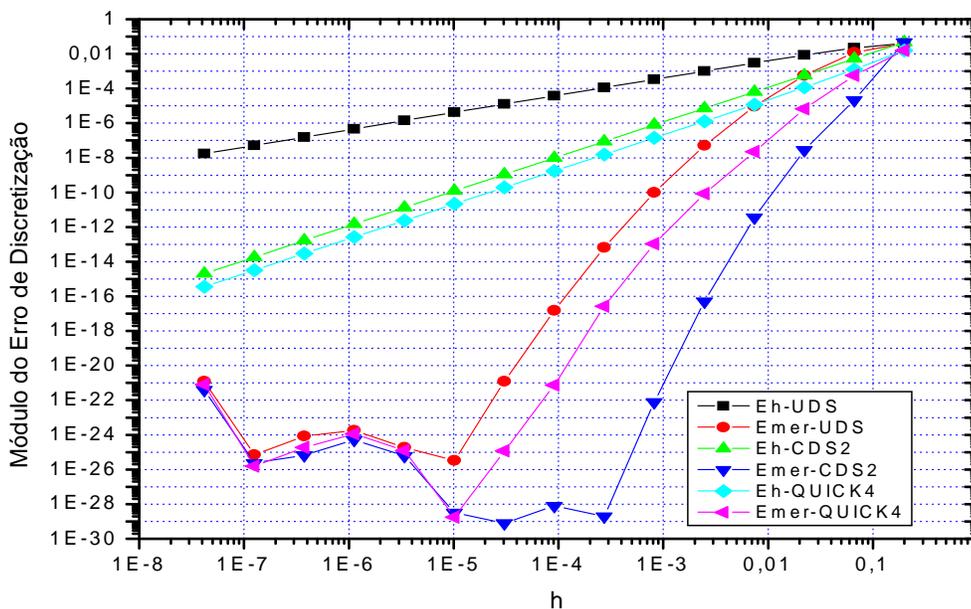


Figura 4.9 - Gráfico “módulos do erro de discretização com MER e sem MER x h” para a variável T_m

Fazendo agora o mesmo processo comparativo realizado para a variável T_c pode-se ver na Tab.4.11 que, para atingir a magnitude de erro de 10^{-7} , o processo sem MER precisa uma malha 27 vezes maior que a malha usada pelo processo com MER. À medida que a magnitude dos erros diminuem, vê-se discrepância ainda maior, chegando, o processo sem MER, a necessitar de uma malha 59.048 vezes maior que a malha, usando MER, para atingir erros de magnitude 10^{-15} .

Tabela 4.11. Redução de nós de malhas para magnitudes de erros fixos (CDS-2) – variável T_m

Magnitude do Erro	1,00E-07	1,00E-11	1,00E-15
Erro (Eh)	7,99E-07	1,35E-11	2,06E-15
Nós da Malha	1.215	295.245	23.914.485
Erro (Emer)	2,81E-08	3,62E-12	5,13E-17
Nós da Malha	45	135	405
Relação entre Malha Eh / Malha Emer	27	2.187	59.048

Seguindo agora outra forma comparativa vê-se na Tab. 4.12 que, com uma malha fixa de 45 volumes de controle, o processo sem MER tem erro aproximadamente 20.700 vezes maior que o processo com MER na mesma malha. Com o refinamento da malha esta

discrepância aumenta, sendo que, com a malha de 32.805 volumes, o processo sem MER atinge um erro aproximadamente 136 quintilhões de vezes maior que o processo com MER para a mesma malha.

Tabela 4.12. Redução dos erros para malhas fixas (CDS-2) – variável T_m

Malha (nós)	45	1215	32805
h	2,22E-02	8,23E-04	3,05E-05
Erro (Eh)	5,82E-04	7,99E-07	1,10E-09
Erro (Emer)	2,81E-08	7,72E-23	8,06E-30
Eh/Emer	2,07E+04	1,03E+16	1,36E+20

Desta forma chega-se às mesmas conclusões feitas para a variável T_c , de que processos com MER necessitam menos memória e tempo computacional.

4.5.3 Variável I

Analisando a Fig. 4.10, vê-se que os resultados se assemelham aos obtidos com a variável T_c . As curvas obtidas com MER (Emer-UDS, Emer-CDS2 e Emer-QUICK4), chegam a ordens de erros bem mais baixas, ou mais refinadas que seus respectivos pares, que não utilizam MER (Eh-UDS, Eh-CDS2 e Eh-QUICK4).

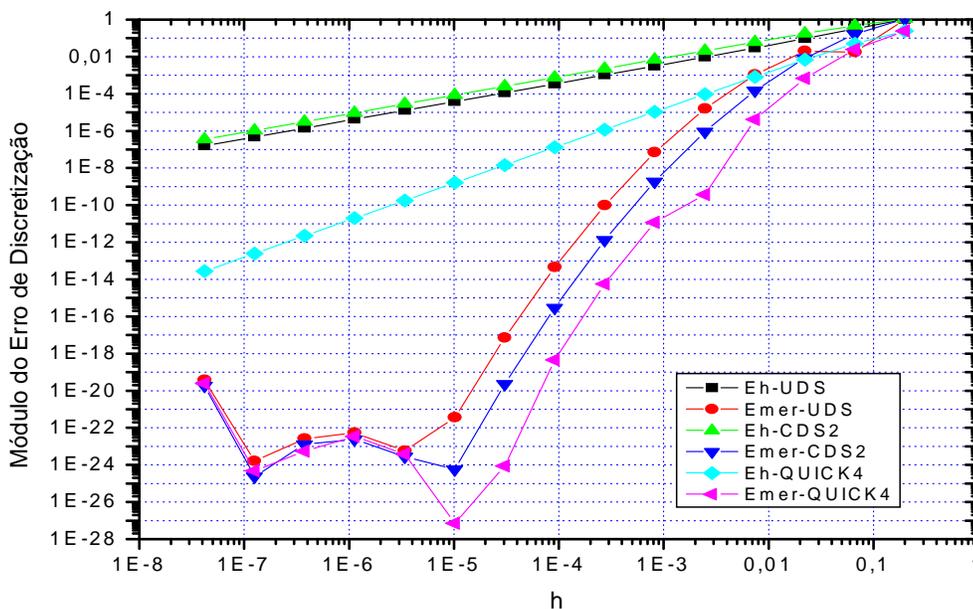


Figura 4.10 - Gráfico “módulos do erro de discretização com MER e sem MER x h” para a variável I

Aqui ainda deve-se fazer outra consideração importante. Para as variáveis T_c e T_m os esquemas CDS-2 e QUICK4 chegavam a erros de discretização muito próximos, em termos de magnitude, o que não ocorre neste caso onde QUICK4 atinge magnitude da ordem de 10^{-27} , enquanto o CDS-2 fica na ordem de 10^{-24} .

Fazendo agora o mesmo processo comparativo feito para a variável T_c tem-se na Tab.4.13 que, para atingir a magnitude de erro de 10^{-3} , o processo sem MER precisa uma malha 27 vezes maior que a malha usada pelo processo com MER. À medida que a magnitude dos erros diminuem, vê-se discrepância ainda maior, chegando, o processo sem MER, a necessitar de uma malha 59.048 vezes maior que a malha, usando MER, para atingir erros de magnitude 10^{-7} .

Tabela 4.13. Redução de nós de malhas para magnitudes de erros fixos (CDS-2) – variável I

Magnitude do Erro	1,00E-03	1,00E-05	1,00E-07
Erro (Eh)	6,89E-03	8,52E-05	3,51E-07
Nós da Malha	1.215	98.415	23.914.485
Erro (Emer)	8,38E-03	1,49E-04	9,33E-07
Nós da Malha	45	135	405
Relação entre Malha Eh / Malha Emer	27	729	59.048

Seguindo agora outra forma comparativa tem-se na Tab. 4.14 que, com uma malha fixa de 45 volumes de controle, o processo sem MER tem erro aproximadamente 21 vezes maior que o processo com MER na mesma malha. Com o refinamento da malha esta discrepância aumenta, sendo que, com a malha de 32.805 volumes, o processo sem MER atinge um erro aproximadamente 11,2 quatrilhões de vezes maior que o processo com MER para a mesma malha.

Tabela 4.14. Redução dos erros para malhas fixas (CDS-2) – variável I

Malha (nós)	45	1215	32805
h	2,22E-02	8,23E-04	3,05E-05
Erro (Eh)	1,76E-01	6,89E-03	2,56E-04
Erro (Emer)	8,38E-03	1,90E-09	2,28E-20
Eh/Emer	2,11E+01	3,63E+06	1,12E+16

Desta forma chega-se às mesmas conclusões feitas para a variável T_c , de que processos com MER necessitam menos memória e tempo computacional.

4.5.4 Variável L

Analisando a Fig.4.11, verifica-se que os resultados se assemelham aos obtidos com a variável T_c . As curvas obtidas com MER (Emer-UDS, Emer-CDS2 e Emer-QUICK4), chegam a magnitudes de erros bem mais baixas que seus respectivos pares, que não utilizam MER (Eh-UDS, Eh-CDS2 e Eh-QUICK4).

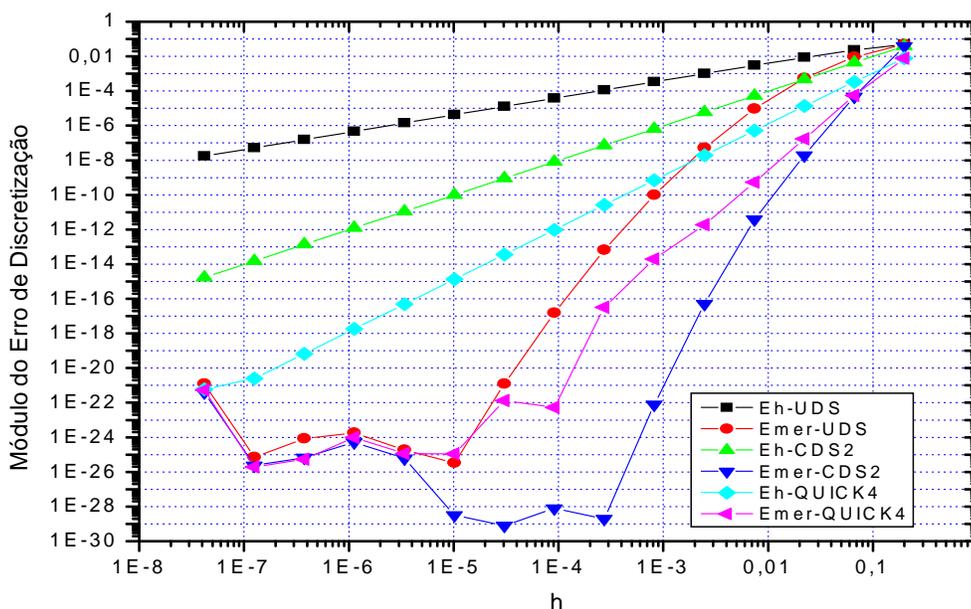


Figura 4.11 - Gráfico “módulos do erro de discretização com MER e sem MER x h” para a variável L

Para o esquema QUICK4 o refinamento do erro com o MER não foi tão significativo quanto para os outros dois esquemas, muito provavelmente por já estar sendo influenciado pelo erro de máquina.

Vale verificar que para este caso o esquema CDS-2, que atingia magnitudes de erro menores que o QUICK4, tem seu comportamento alterado quando tratado com o MER, passando a atingir ordens de magnitude menores que o QUICK4, ou seja, reduzindo ainda mais o erro de discretização. A hipótese para isto segue a mesma já aplicada à variável T_c .

Fazendo agora o mesmo processo comparativo feito para a variável T_c tem-se na Tab.4.15 que, para atingir a magnitude de erro de 10^{-7} , o processo sem MER precisa uma malha 27 vezes maior que a malha usada pelo processo com MER. À medida que a magnitude dos erros aumentam, vê-se discrepância ainda maior, chegando, o processo sem MER, a

necessitar de uma malha 59.048 vezes maior que a malha, usando MER, para atingir erros de magnitude 10^{-15} .

Tabela 4.15. Redução de nós de malhas para magnitudes de erros fixos (CDS-2) – variável L

Magnitude do Erro	1,00E-07	1,00E-11	1,00E-15
Erro (Eh)	6,57E-07	1,11E-11	1,70E-15
Nós da Malha	1.215	295.245	23.914.485
Erro (Emer)	1,95E-08	3,92E-12	5,01E-17
Nós da Malha	45	135	405
Relação entre Malha Eh / Malha Emer	27	2.187	59.048

Seguindo agora outra forma comparativa vê-se na Tab. 4.16 que, com uma malha fixa de 45 volumes de controle, o processo sem MER tem erro aproximadamente 24.500 vezes maior que o processo com MER na mesma malha. Com o refinamento da malha esta discrepância aumenta, sendo que, com a malha de 32.805 volumes, o processo sem MER atinge um erro aproximadamente 112 quintilhões de vezes maior que o processo com MER para a mesma malha.

Tabela 4.16. Redução dos erros para malhas fixas (CDS-2) – variável L

Malha (nós)	45	1215	32805
h	2,22E-02	8,23E-04	3,05E-05
Erro (Eh)	4,79E-04	6,57E-07	9,02E-10
Erro (Emer)	1,95E-08	7,77E-23	8,05E-30
Eh/Emer	2,45E+04	8,46E+15	1,12E+20

Desta forma chega-se às mesmas conclusões feitas para a variável T_c , de que processos com MER necessitam menos memória e tempo computacional.

4.6 IMPACTO DA VARIAÇÃO DO NÚMERO DE PECLLET NO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Até este ponto pôde-se verificar os tempos de processamento, a ocupação de memória computacional, as ordens de erro e as vantagens obtidas com a utilização do MER. Nesta etapa, pretende-se mostrar qual o impacto da variação do número de Peclet sobre o erro de discretização final.

Para atingimento deste objetivo foi analisada somente a variável T_c , obtida com três conjuntos de funções de interpolação distintas, sendo uma de cada ordem. Entenda-se por

conjuntos de FI's, ao par formado pela FI usada para aproximação do termo difusivo, e a usada para aproximar o termo advectivo.

Foram escolhidas para FI de primeira ordem o par UDS/CDS-2 (termo advectivo/termo difusivo), para segunda o CDS-2/CDS-2 e finalmente para terceira ordem o QUICK/CDS-4.

Para variação do número de Peclet foram definidos cinco valores distintos (10^{-2} , 10^{-1} , 1, 10 e 100), sendo então feitas as simulações para obtenção dos erros com múltiplas extrapolações de Richardson.

É importante alertar que o número de Peclet tem valor definido pelas características do fenômeno físico em questão, tendo sua variação para este caso, efeito meramente ilustrativo, que dará uma noção de seu impacto no erro de discretização. Não faz sentido escolher o número de Peclet que dê os menores erros de discretização, como é feito para as FI's, pois como já dito, este número é uma característica importante do fenômeno.

4.6.1 Comparação em Função das FI's Utilizadas

Analisando inicialmente as ordens efetiva e aparente obtidas com os diversos valores de Peclet, aplicados com o esquema CDS-2, vê-se nas Figs. 4.12 e 4.13 que os valores obtidos coincidem com aqueles obtidos para o valor de $Pe=5$, calculado anteriormente neste trabalho. Este resultado já era esperado e confirma que o valor de Pe não altera a ordem efetiva do erro.

Apesar desta confirmação, é importante observar as discontinuidades que ocorrem nas malhas mais grossas ($1E-3 < h < 1$) para valores de Pe de 10 e 100. Isto se explica pelos valores muito elevados de Pe ($Pe \gg 1$), fazendo com que a advecção seja muito maior que o efeito difusivo no fenômeno. O impacto disto na solução numérica é que a diferença entre valores de erros verificados entre malhas refinadas sucessivamente, são grandes no início do processo (nas malhas mais grossas). Pode-se ver isto na Fig. 4.15, onde o erro ($Pe=100$) só se estabiliza após a malha com 405 CV's. Considerando ainda que as relações matemáticas para obtenção das ordens efetiva e aparente são representadas pelas Eqs. (2.72) e (2.73), que envolve operações logarítmicas, pode-se ver que estas diferenças podem causar divergência no resultado.

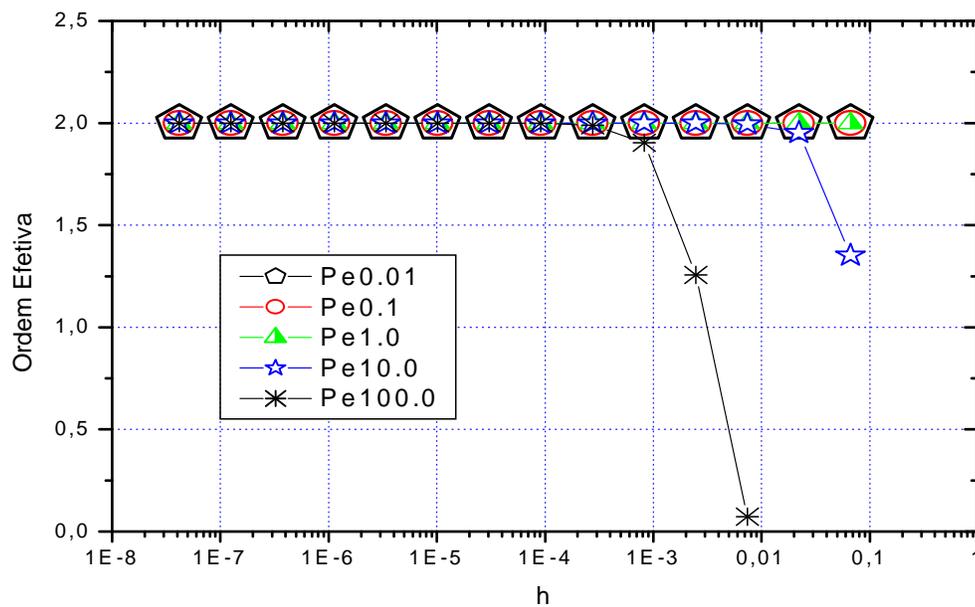


Figura 4.12 – Ordem efetiva utilizando CDS-2 para diversos valores de Pe para a variável T_c

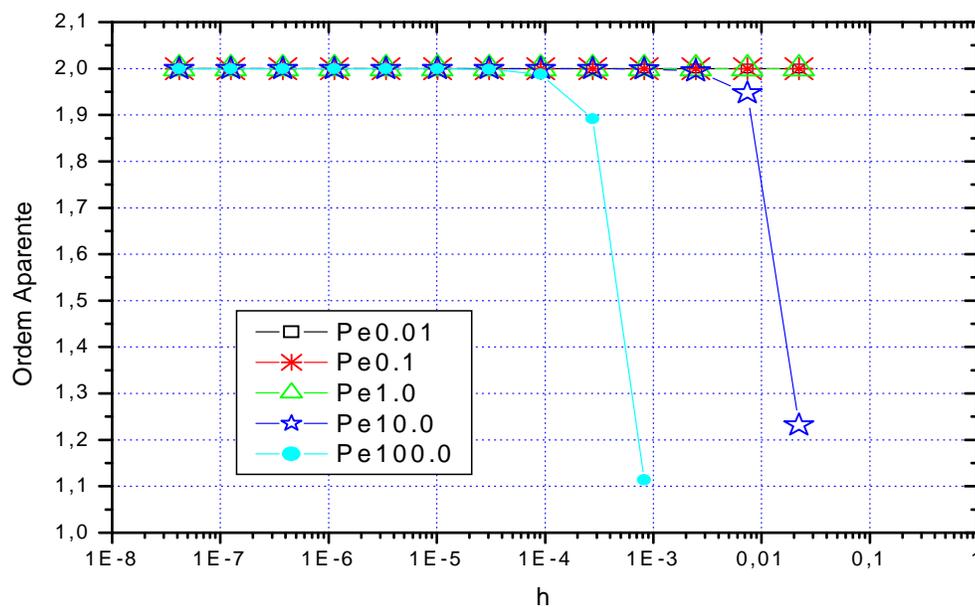


Figura 4.13 – Ordem aparente utilizando CDS-2 para diversos valores de Pe para a variável T_c

Analisando agora os erros em termos de suas magnitudes, vê-se nos esquemas UDS (Fig.4.14), CDS-2 (Fig.4.15) e QUICK4 (Fig.4.16), que quanto menor o número de Peclet (Pe), menores são os erros obtidos para malhas de mesmo tamanho, tanto para resultados com ou sem MER. Deve-se observar, porém, que este comportamento não se apresenta para $Pe=100$. Neste caso quando não utiliza-se MER os erros obtidos são menores que os obtidos com MER até aproximadamente o 10º refinamento da malha para o UDS e QUICK4, e o 9º para o CDS-2, quando então o comportamento se inverte e os valores de erros com MER são menores que os valores sem MER. Isto se explica porque existe forte alteração no comportamento da magnitude do erro obtido sem MER à medida que a malha é refinada e neste caso o MER acaba suavizando estas variações. Este ponto será melhor explicado adiante, no subitem 4.6.2.

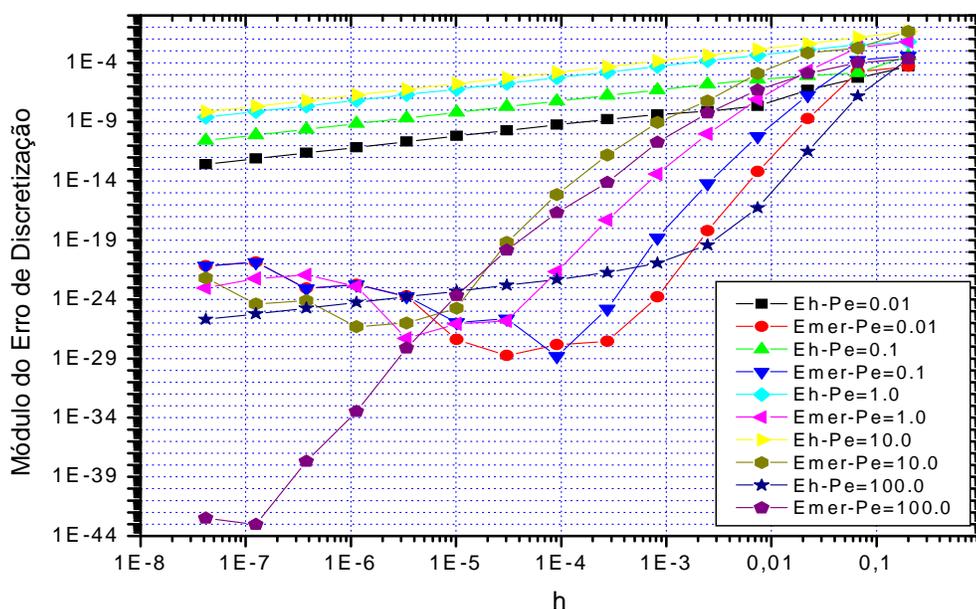


Figura 4.14 – Gráfico “módulos dos erros de discretização (com UDS) x h” com variação de Pe para a variável T_c

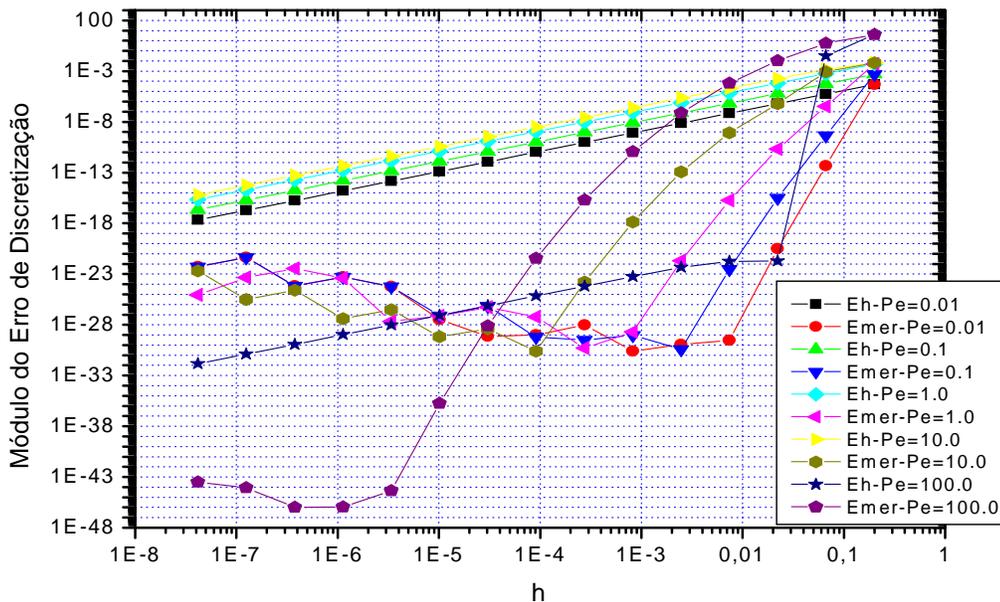


Figura 4.15 – Gráfico “ módulos dos erros de discretização (com CDS-2) x h ” com variação de Pe para a variável T_c

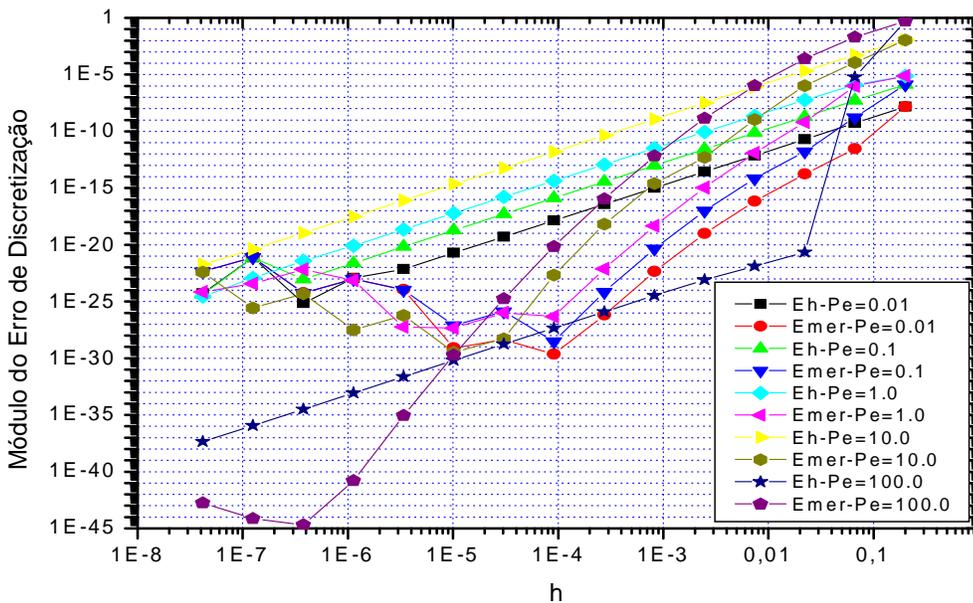


Figura 4.16 - Gráfico “ módulos dos erros de discretização (com QUICK4) x h ” com variação de Pe para a variável T_c

Outra análise possível é a comparação quantitativa dos resultados com variação do número de Peclet. Tomando por base a aproximação UDS, uma vez que as outras FI's (CDS-2 e QUICK4) tem comportamento semelhante, pode-se inicialmente determinar a magnitudes de erros de discretização e comparar em que tamanho de malha tal erro ocorre para os números de Peclet definidos. Outra forma é definir um tamanho de malha e verificar as magnitudes de erros atingidas com as variações de Peclet.

Para o primeiro caso, pode-se ver na Tab.4.17 que, para atingir a magnitude de erro de 10^{-10} , os tamanhos das malhas devem ser refinados à medida que o número de Peclet aumenta, chegando num ponto onde não há mais refinamento possível, uma vez que o erro de máquina se faz presente.

Tabela 4.17. Tamanho de malhas para vários Peclet para magnitudes de erros fixos (UDS) – variável T_c

Magnitude do Erro	1,00E-10	1,00E-15	1,00E-20
Erro (Pe=0,01)	1,85E-09	6,28E-14	6,35E-19
Nós da Malha (Pe=0,01)	45	135	405
Erro (Pe=0,1)	6,25E-11	6,36E-15	1,62E-19
Nós da Malha (Pe=0,1)	135	405	1.215
Erro (Pe=1)	9,58E-11	3,87E-14	2,24E-22
Nós da Malha (Pe=1)	405	1.215	10.935
Erro (Pe=10)	8,97E-10	7,00E-16	6,74E-20
Nós da Malha (Pe=10)	1215	10.935	32.805
Erro (Pe=100)	1,89E-11	7,67E-15	1,40E-20
Nós da Malha (Pe=100)	1215	10.935	32.805

Seguindo agora outra forma comparativa vê-se na Tab. 4.18 que, com uma malha fixa de 45 volumes de controle, os fenômenos com Peclet menores, atingem erros menores, chegando a ser 6.920 vezes menor com $Pe=0,01$ que o valor obtido com $Pe=100$.

Tabela 4.18. Variação dos erros com variação de Peclet para malhas fixas (UDS) – variável T_c

Malha (nós)	45	1215	32805
h	2,22E-02	8,23E-04	3,05E-05
Erro (Pe=0,01)	1,85E-09	1,58E-24	1,74E-29
Erro (Pe=0,1)	1,83E-07	1,62E-19	2,25E-26
Erro (Pe=1,0)	2,11E-05	3,87E-14	1,50E-26
Erro (Pe=10,0)	6,92E-04	8,97E-10	6,74E-20
Erro (Pe=100,0)	1,28E-05	1,89E-11	1,40E-20

Estes resultados demonstram que os processos com Pe baixos necessitam menos memória e tempo computacional.

4.6.2 Comparação por Número de Peclet

Utilizando inicialmente o valor de 0,01 para o número de Peclet pode-se ver pela Fig.4.17 que o comportamento das FI's é muito similar ao comportamento apresentado com Pe com valor 5, mostrado na Fig.4.5. Isto vale se são analisadas simplesmente as magnitudes de erro atingidas e seus valores para cada FI, resultando no mesmo de $Pe = 5$, com CDS-2 com ordem mais baixa, seguida por QUICK4 e UDS.

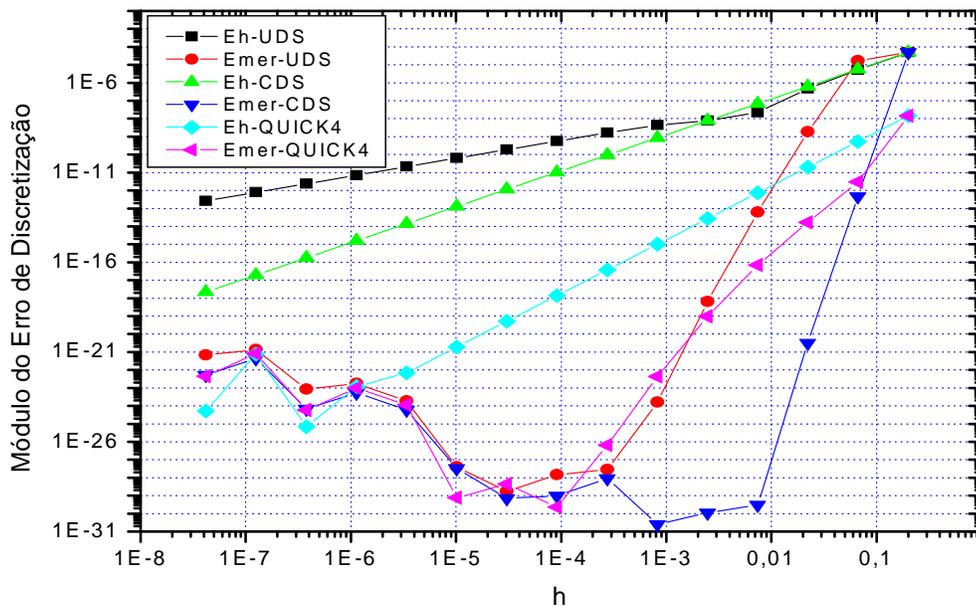


Figura 4.17 - Gráfico “ módulos dos erros de discretização (com $Pe=0,01$) x h ” com variação das FI's para a variável T_c

Porém, mais importante aqui, é notar que estas magnitudes de erros, muito similares às da Fig.4.5, foram obtidas de forma mais rápida. Analisando o esquema CDS-2, é fácil notar que, para $Pe=5$ foi necessário refinar a malha até o décimo refinamento para atingir erros da mesma magnitude que os obtidos para $Pe=0,01$ após o quarto passo de refinamento.

Isto faz com que fenômenos que tenham Pe menores tenham vantagens em termos computacionais, pois pode-se obter as mesmas magnitudes de erros com malhas mais grossas, necessitando menor estrutura computacional, resultando em racionalização de custo.

Outro ponto a observar é que as curvas das FI's, principalmente UDS e QUICK4, são bastante próximas, resultado que não aparecia na Fig.4.5, onde há uma distinção bastante clara no comportamento de cada curva das FI's.

Fazendo agora o número de $Pe=0,1$ (Fig. 4.18), pode-se ver, analogamente ao já analisado anteriormente, que as FI's atingem as mesmas ordens de $Pe=0,01$ e $Pe=5$, porém, chegam nesta ordem após o quinto passo de refinamento, ou seja, após refinar a malha inicial pela quinta vez.

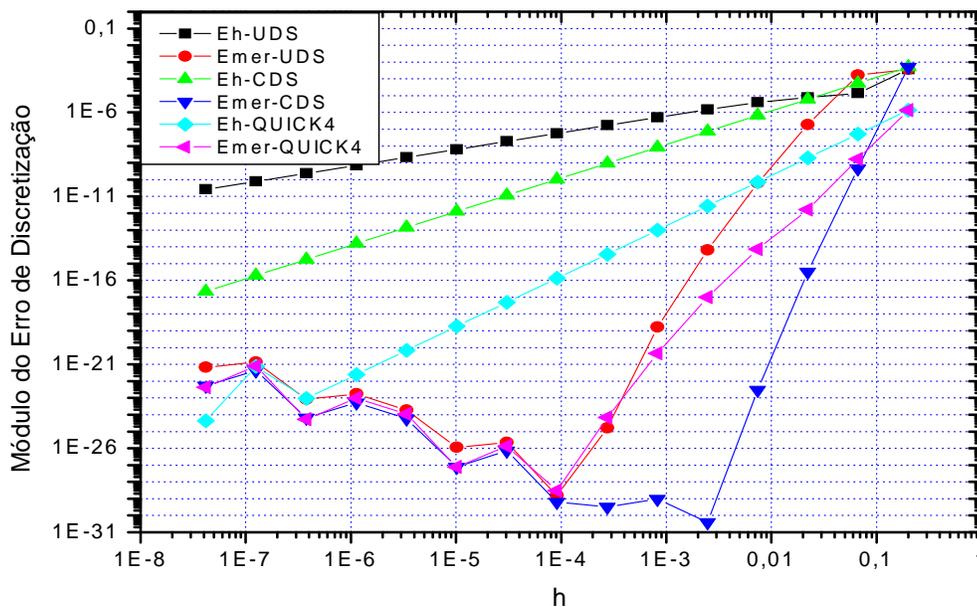


Figura 4.18 - Gráfico “ módulos dos erros de discretização (com $Pe=0,1$) x h” com variação das FI's para a variável T_c

Este comportamento continua ocorrendo quando tem-se $Pe=1,0$ (Fig. 4.19) e $Pe=10,0$ (Fig. 4.20), sendo que, para atingir as mesmas magnitudes de erros ditadas anteriormente, teve-se que refinar as malhas 7 e 8 vezes respectivamente.

Vale ainda notar, que à medida que aumenta o número de Peclet as curvas das FI's que pareciam ter comportamentos, e inclinações muito próximas até agora, em $Pe=10$ já apresentam comportamentos bastante característicos, tendo inclinações diferentes.

E finalmente, analisando o comportamento das FI's para o $Pe=100$, a Fig. 4.21 mostra comportamento bastante distinto do que foi visto anteriormente, principalmente no que diz respeito às magnitudes de erro obtidas. Ao contrário das magnitudes atingidas até aqui, que se aproximavam de 10^{-30} , neste caso específico conseguiu-se valores de 10^{-44} , ou seja,

magnitudes de erros aproximadamente 10^{14} vezes menor que para os outros valores de Peclet. Isto se deve aos baixos valores assumidos pela variável T_c devido ao elevado Pe .

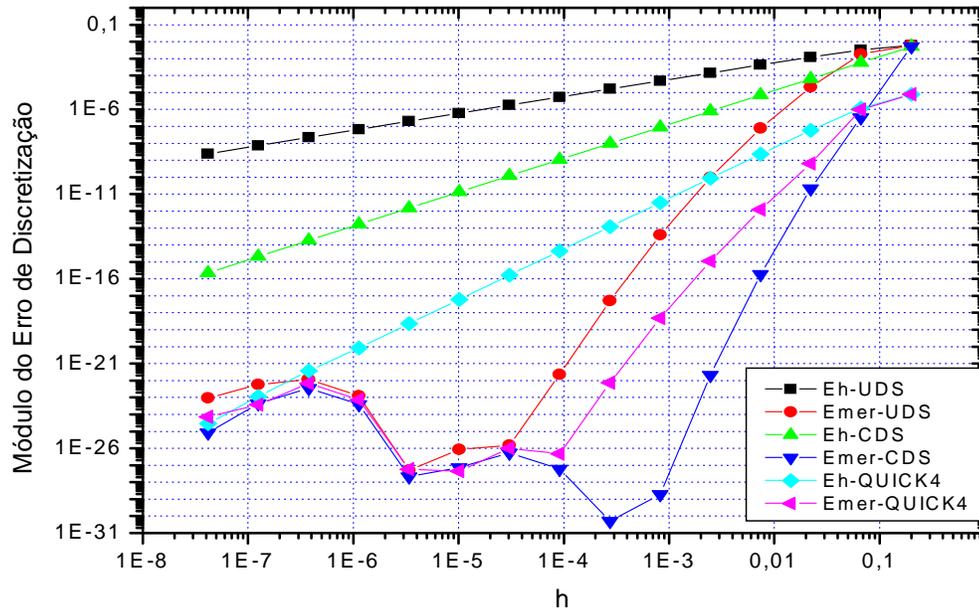


Figura 4.19 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com $Pe=1$) x h ” com variação das FI’s para a variável T_c

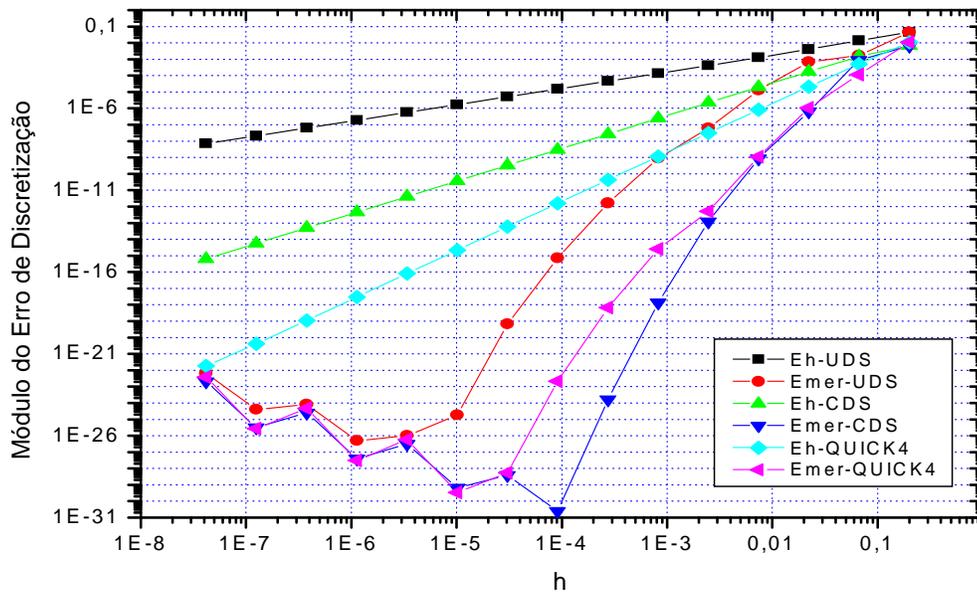


Figura 4.20 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com $Pe=10$) x h ” com variação das FI’s para a variável T_c

Ainda com base na Fig. 4.21 o comportamento das curvas das FI's é muito peculiar, pois até o 6° refinamento de malha (1.215 volumes), os menores erros ocorrem com UDS, seguido por QUICK4 e CDS-2, neste ponto ocorre uma mudança, e o esquema CDS-2 passa a dar melhores resultados, seguido de QUICK4 e UDS. Este fato já foi explicado anteriormente no sub-item 4.5.1.

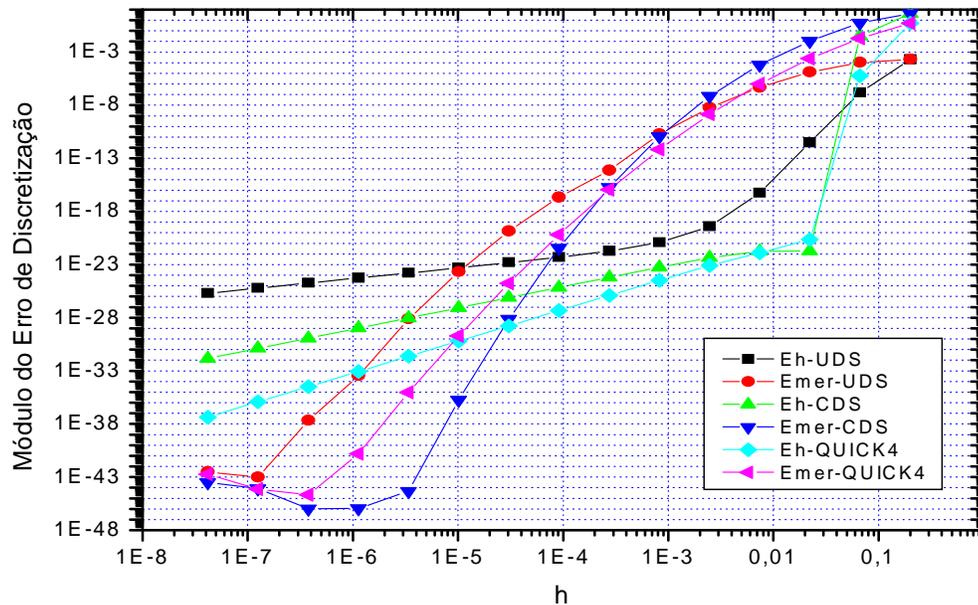


Figura 4.21 - Gráfico “módulos dos erros de discretização (com $Pe=100$) x h ” com variação das FI's para a variável T_c

No sub-item anterior afirmou-se que o motivo pelo qual os valores com MER são maiores que os sem MER para o caso de $Pe=100$, até certo ponto do refinamento, é devido à forte alteração na ordem de magnitude do erro na curva sem MER.

Isto pode ser explicado verificando-se inicialmente que em determinado passo do refinamento da malha (Fig.4.21), mais especificamente no 5° para o UDS e 3° para o CDS-2 e QUICK4, a inclinação da curva dos valores obtidos sem MER ($Eh-Pe=100$) muda fortemente, principalmente nos casos do CDS-2 e QUICK4, sendo o UDS um pouco mais suave.

Considerando que a obtenção do erro obtido com MER é feita utilizando a Eq.(2.75), e que os valores considerados são os mostrados na Tab.2.1 (células hachuradas), tem-se que, quando existe uma descontinuidade muito forte entre resultados consecutivos o MER acaba suavizando e carregando, a cada extrapolação, a magnitude do maior erro. Este

comportamento só é revertido no momento em que, com a redução natural que o MER traz no erro de discretização, este erro finalmente se torne menor que erro obtido sem MER.

Tabela 4.19. Parte do processo de aplicação do MER usando CDS-2 com $Pe=100$ para a variável T_c

		Quantidade de Extrapolações						
		0	1	2	3	4	5	6
Malhas	1	4.14E+00						
	2	-3.07E-02	-5.52E-01					
	3	1.92E-22	3.83E-03	1.07E-02				
	4	1.78E-22	1.76E-22	-4.79E-05	-6.28E-05			
	5	4.47E-23	2.80E-23	2.62E-23	6.59E-08	7.55E-08		
	6	5.53E-24	6.28E-25	2.85E-25	2.49E-25	-1.00E-11	-1.13E-11	
	7	6.22E-25	8.34E-27	5.96E-28	2.05E-28	1.67E-28	1.70E-16	1.91E-16

A Tab.4.19 ilustra o que foi dito anteriormente apresentando uma parte do processo de aplicação do MER para o esquema CDS-2 com $Pe=100$. Vale observar que o processo completo teve o refino até a 15ª malha e 14 extrapolações. Pode-se ver nesta tabela, que no refino da malha 2 para a malha 3, nos resultados sem extrapolação, existe forte redução no erro, reduzindo sua ordem de magnitude de 10^{-2} para 10^{-22} . Este fato irá afetar a extrapolação seguinte, uma vez que o erro da malha 3 na extrapolação 1 aumenta da antiga ordem de magnitude 10^{-22} para 10^{-3} . Isto se explica ao verificar-se na Eq.(2.75), de definição do MER, que para obtenção do erro da malha 3 na extrapolação 1 estão envolvidos os valores das malhas 2 e 3 sem extrapolação. Como a malha 2 tem uma magnitude de erro muito maior que a 3, ele acaba sendo “carregado” para a próxima extrapolação. Este efeito só cessa no momento em que, com a redução natural do MER, o valor do erro da extrapolação atinge o erro obtido sem MER (nenhuma extrapolação), que para o caso do CDS-2 ocorre aproximadamente na 9ª extrapolação, conforme pode-se ver na Fig.4.21.

De uma forma geral, exceções feitas a alguns pontos específicos, vê-se que, para vários valores de Peclet, o esquema CDS-2 com MER ainda traz resultados bastante vantajosos, considerando que tem-se o interesse de obter os menores erros com malhas não tão refinadas.

5 CONCLUSÃO

Neste último capítulo do trabalho será apresentado um resumo do que foi feito até aqui, assim como as contribuições que, acredita-se, este trabalho possa trazer para a área.

5.1 CONSTATAÇÕES GERAIS

Conforme descrito inicialmente, o trabalho realizou seu objetivo principal, que era o de estudar a influência das funções de interpolação no erro de discretização final das soluções numéricas. Para isto foi utilizada como equação geral do fenômeno a equação de advecção-difusão sem termo fonte. As características do fenômeno ainda abrangiam o espaço unidimensional, fluido incompressível, escoamento permanente, e espaço unitário. As condições de contorno foram consideradas de Dirichlet, e o método de discretização foi o de volumes finitos com volumes fictícios nos contornos.

Para aproximação do termo advectivo foram utilizados nove tipos de funções de interpolação, sendo eles, UDS, CDS-2, UDS-2, WUDS, PLDS, ALFA, ADS, TVD e QUICK. Já o termo difusivo foi aproximado com CDS-2 para todas as aproximações do termo advectivo acima, e o CDS-4 para aproximação com QUICK.

Como resultados, pôde-se ver inicialmente que os tempos de processamento dividem as FI's em dois grupos distintos. Num deles, que compreende as FI's UDS, CDS-2, PLDS, WUDS e ALFA, os tempos obtidos para solução na malha mais refinada (23.914.845 nós) tomaram aproximadamente 34 segundos. Já o outro grupo, com as FI's UDS-2, ADS, TVD, QUICK2 e QUICK4, para a mesma malha e executando somente o número de iterações necessárias para atingimento de erros com mesma ordem de magnitude, necessitaram aproximadamente 54 segundos, ou seja, 57% mais tempo gasto em rotinas de cálculo. Isto se explica basicamente pelos processos iterativos de solução utilizados pelo segundo grupo de FI's.

Considerando a capacidade computacional, vê-se que não há diferença muito grande nas necessidades de memória computacional para todas as FI's utilizadas.

Quanto às análises feitas *a priori* dos erros que esperava-se encontrar ao fim das simulações, os resultados foram positivos para as variáveis T_c , T_m e L , mostrando que, para este tipo de problema, as análises *a priori*, sendo feitas da forma correta, são confirmadas ao

fim do processo de solução numérica, para todas as FI's utilizadas aqui. Isto foi confirmado ao constatar-se que as ordens efetiva e aparente obtidas a *posteriori* confirmaram as ordens assintóticas obtidas a *priori*.

A afirmação que a ordem aparente confirmou a ordem assintótica também é positivo, pois, para problemas em que não se tenha as soluções analíticas, o estimador de Richardson é efetivo para obtenção destas ordens.

Para a variável I , que é analisada na fronteira, as análises a *priori* não foram confirmadas para as seguintes FI's : CDS-2, UDS-2, WUDS, PLDS, ADS e TVD. Este comportamento pode estar relacionado tanto ao erro de poluição quanto à forma de aplicar as condições de contorno, uma vez que esta variável está sendo analisada na fronteira ($x=1$).

Quanto ao comportamento comparativo entre as FI's, pode-se analisar inicialmente os erros obtidos sem MER. Para estes casos, pode ser visto na Fig. 4.1 que as magnitudes de erros são melhores, para a variável T_c , se utiliza-se o esquema QUICK4. Para a variável T_m (Fig. 4.2), o esquema QUICK2 tem valores um pouco melhores, mas dentro de uma faixa que engloba praticamente todas as outras FI's, de forma que não existe grande diferença na utilização de qualquer uma delas, exceto UDS e ALFA, de primeira ordem, que tem erros comparativamente elevados. A variável I (Fig.4.3) tem comportamento análogo à variável T_m , com o esquema QUICK2 tendo melhores resultados. E finalmente a variável L (Fig.4.4) que apresenta o esquema QUICK4 com erros de menor magnitude que qualquer outra FI utilizada.

As análises feitas acima foram com base em erros obtidos sem múltiplas extrapolações de Richardson (MER). Será analisado agora o efeito do MER na obtenção dos erros. Para isto, utilizou-se somente os esquemas UDS, CDS-2 e QUICK4.

No caso da variável T_c (Fig. 4.8), o resultado foi uma inversão na melhor FI a ser utilizada. Se sem MER tinha-se vantagem com o QUICK4, com MER a melhor FI passou a ser a CDS-2. Não em termos de magnitude de erro atingida, que são similares a partir de certo nível de refinamento, mas sim porque consegue atingir erros de magnitudes semelhantes ao QUICK4 em malhas mais grossas. Pôde-se ver ainda que a vantagem da utilização do MER é bastante significativa. Isto fica facilmente observável nas Tabs. 4.9 e 4.10 que mostram que sem MER, para atingir as mesmas magnitudes de erros obtidos com MER, precisa-se de malhas até 20 mil vezes menores que as malhas com MER. Da mesma forma, para a mesma malha, o erro sem MER chega a ser 62 quintilhões de vezes maior que o erro com MER.

Para a variável T_m (Fig. 4.9) tem-se novamente vantagens na utilização do CDS-2. Seguindo o mesmo raciocínio que o utilizado para a variável T_c , apesar dos erros com QUICK4 e CDS-2 atingirem iguais magnitudes, a partir de certo nível de refinamento, o

CDS-2 permite a obtenção de erros menores em malhas mais grossas. Quanto à utilização do MER, mostrou-se igualmente vantajoso, podendo-se ver nas Tabs. 4.11 e 4.12, que processos sem MER precisam de malhas até 60 mil vezes menores que as malhas com MER, para obtenção de erros de mesma magnitude. Da mesma forma, para a mesma malha, o erro sem MER chega a ser 136 quintilhões de vezes maior que o erro com MER.

A variável I (Fig. 4.10) repete o já dito para as variáveis T_c e T_m , e tem no CDS-2 um esquema muito vantajoso em ser utilizado. Quanto à utilização do MER, mostrou-se igualmente vantajoso, podendo-se ver nas Tabs. 4.13 e 4.14, que processos sem MER precisam de malhas até 60 mil vezes menores que as malhas com MER, para obtenção de erros de mesma magnitude. Da mesma forma, para a mesma malha, o erro sem MER chega a ser 11,2 quatrilhões de vezes maior que o erro com MER.

E finalmente, para a variável L (Fig. 4.11), seguindo ainda o exposto anteriormente para as outras variáveis, tem-se no CDS-2 um esquema melhor. Quanto à utilização do MER, mostrou-se igualmente vantajoso, podendo-se ver nas Tabs. 4.15 e 4.16, que processos sem MER precisam de malhas até 60 mil vezes menores que as malhas com MER, para obtenção de erros de mesma magnitude. Da mesma forma, para a mesma malha, o erro sem MER chega a ser 112 quintilhões de vezes maior que o erro com MER.

De um modo geral, desconsiderando tempos de processamento e memória computacional, para processos de obtenção de erros sem MER, os esquemas QUICK4 tiveram vantagem sobre as outras FI's, atingindo magnitudes de erros significativamente menores que as outras para qualquer tamanho de malha, e em todas as variáveis estudadas. Já quando foram obtidos os valores de erros com MER, os esquemas CDS-2 e QUICK4 atingiram, para as quatro variáveis, igual magnitude de erro (a partir de certo nível de refino da malha). A grande diferença, que faz considerar o esquema CDS-2 nestes casos como mais vantajoso, é que, para mesmos tamanhos de malha, ele tem erros menores que o QUICK4. Considerando ainda que este é um esquema de 2ª ordem, que trata as aproximações com somente dois pontos vizinhos, resulta num processo computacionalmente muito mais simples e rápido. Dentro desta perspectiva considera-se o uso do CDS-2 para este tipo de problema bastante interessante.

E finalmente, foi feita a análise do impacto da variação do número de Peclet no erro de discretização. Neste ponto, pôde-se ver inicialmente, que a tendência para $h \rightarrow 0$ das ordens aparente e efetiva não é afetada pela variação de Pe , resultado já esperado. Quanto às magnitudes de erros obtidas, o comportamento também se manteve muito próximo do conseguido quando trabalhando com $Pe=5$, ou seja, não utilizando MER o esquema QUICK4

se mostra mais vantajoso, e se o MER é usado, o esquema CDS-2 apresenta melhores resultados. Esta análise foi somente ilustrativa, uma vez que não pode-se escolher o número de Peclet que será usado para resolver o problema, sendo este número uma função do fenômeno físico estudado.

Estes foram, resumidamente, os resultados atingidos pelo trabalho, sendo que os grandes tópicos podem ser resumidos na confirmação da efetividade das análises *a priori* na previsão da ordem do erro; nos melhores resultados dos erros obtidos com MER; nas melhores performances dos esquemas QUICK4 e CDS-2 para erros obtidos sem MER e com MER respectivamente; e finalmente para a confirmação dos resultados anteriores para outros valores do número de Peclet.

5.2 CONTRIBUIÇÕES

Este trabalho pôde:

- Mostrar detalhadamente as análises feitas *a priori* do erro de truncamento de cada uma das FI's, também, de cada uma das aproximações para obtenção de cada uma das variáveis, para cada uma das FI's; e, finalmente para o erro de discretização final, que considera tanto o erro de truncamento das FI's quanto o erro de truncamento das aproximações das variáveis;
- Confirmar, para as variáveis T_c , T_m e L , de que as ordens efetiva e aparente, obtidas *a posteriori*, coincidem com as ordens obtidas na análise *a priori*, resultado que possibilita antever as ordens de erros que serão obtidas após o problema ser resolvido;
- Confirmar, para as variáveis T_c , T_m e L , da ordem aparente com a ordem assintótica. Como a ordem aparente é obtida para problemas onde não temos a solução analítica, isto nos permite dizer que o estimador de Richardson é efetivo para este tipo de problema;
- Mostrar que, as ordens efetiva e aparente, para a variável I , sofreram degeneração de ordem, muito provavelmente influenciada pelo erro de poluição, e pela condição de contorno, uma vez que esta variável é analisada na fronteira;
- Mostrar que o esquema CDS-2 se mostrou bastante vantajoso, atingindo erros da magnitude do QUICK4 (3ª ordem) em malhas mais grossas, com tempos

computacionais mais reduzidos. Lembrando que isto foi obtido quando utilizou-se as múltiplas extrapolações de Richardson para obtenção do erro de discretização;

- Comprovar que as múltiplas extrapolações de Richardson (MER) geram erros de discretização significativamente menores que processos sem MER. Se são comparados erros de mesma magnitude, o processo com MER o atingiu em malhas pelo menos 27 vezes mais grossas que os processos sem MER, chegando este valor, em alguns casos, a ser de 60 mil vezes mais grossas ; e
- Mostrar que, quanto maior o número de Peclet, maior necessidade há de refinar a malha para obtenção de erros de igual magnitude aos obtidos em malhas menores, com Peclet menor.

5.3 TRABALHOS FUTUROS

Como sugestão para trabalhos futuros, pode-se citar:

- Expansão do espaço da equação de advecção-difusão, utilizando espaços bi e tridimensionais;
- Verificação da influência das FI's em problemas não-lineares, como a equação de Burgers; e
- Fazer estudo mais específico sobre os tempos necessários para obtenção das soluções numéricas com cada FI.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABASSI, H. ; TURKI, S. ; NASRALLAH, S.. *Interpolation Functions in Control Volume Finite Element Method*. *Computacional Mechanics*, 30: 303-309, 2003.

ABDOU, M.A. ; SOLIMAN, A.A.. *Variational Iteration Method for Solving Burgers and Coupled Burger`s Equations*. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 181: 245-251, 2005.

AIAA. *Guide for the verification and Validation of Computacional Fluid Dynamics Simulations*. *AIAA-G-077-1998*, Amecican Institute of Aeronautics and Astronautics, Reston, V.A., 1998.

ARAYA, R. ; BEHRENS, E. ; RODRIGUEZ, R.. *Error Estimators for Advection-Reaction-Diffusion Equations Based on the Solution of Local Problems*. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 206: 440-453, 2007.

BRADOT-NICO, F. ; BRISSAUD, F. ; GUINOT, V.. *A Finite Volume Upwind Scheme for the Solution of the Linear Advection-Diffusion Equation with Sharp Gradients in Multiple Dimensions*. *Advances in Water Resources*, 30: 2002-2025, 2007.

BI, Chunjia. *Mortar Upwind Finite Volume Element Method for Convection Diffusion Problems*. *Applied Mathematics and Computation*, 183: 831-841, 2006.

BLAZEK, J. *Computacional Fluid Diynamics: Principles and Aplications*. Ed. Elsevier, 2001.

BOX GEP. *Sampling and Bayes Inference in Scienteific Modeling and Robustness*. *Journal Statistic Society* , 143: 383-430, 1980.

CHUNG, T.J. *Computacional Fluid Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

DISKIN, B. ; THOMAS, J.L.. *Accuracy Analisys for Mixed-Element Finite-Volume Discretization Schemes*. *National Institute of Space*, NIA Report N. 2007-08, 2007.

- FERZIGER, J.H. ; PERIC, M.. *Computacional Methods for Fluid Dynamics*. Berlin, Ed.Springer – Verlag, 2^a Ed., 1999.
- FORTUNA, Armando de Oliveira. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos**. 1.Ed. São Paulo: Edusp, 2000.
- FREITAS, Christopher. *The Issue of Numerical Uncertainty. Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, p.29 – 34, Melbourne, Dez.1999.
- INCROPERA, F.; DEWITT, D. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 4th Ed. Wiley . 1996.
- KREYSZIG, E. *Advanced Engineering Mathematics*. 8^aed. New York: Wiley, 1999.
- LEONARD, B.P.. *A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation*. *Comput.Methods Appl.Mech.Eng.*, Vol.19, p.59-98, 1979.
- LEONARD, B.P.. *Order of Accuracy of QUICK and Related Convection-Diffusion Schemes*. *Applied Mathematic Modelling*, Vol.19, p. 640-653 , 1995.
- MALISKA, Clovis R.. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2^a Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.
- MARCHI, C.H. **Esquemas de Alta Ordem para a Solução de Escoamentos de Fluidos sem Dispersão Numérica**. RBCM, Vol.XV, n.3, p.231-249, 1993.
- MARCHI, C.H. ; SILVA, A.F.C. **Condições Suficientes para Determinar com Acurácia e Confiabilidade Erros de Discretização em CFD**. XX CILAMCE, São Paulo: Nov.1999. CD-ROM.
- MARCHI, C.H. ; SILVA, A.F.C. *Unimentional Numerical Solution Error Estimation for Convergent Apparent Order*. *Numerical Heat Transfer*, Part.B, 42: 167-188, 2002.
- MARCHI, C.H.. **Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos**. Curitiba, 2001, Apresentado como Tese de Doutorado à UFSC em 2001.

MARCHI, C.H.; NOVAK, L.A.; SANTIAGO, C.D. **Múltiplas Extrapolações de Richardson para Reduzir e Estimar o Erro de Discretização da Equação de Laplace 2D.** XXIX CILAMCE, Maceió, 2008.

MARCHI, C.H.; ALVES, A.C.. **Verificação de Soluções Numéricas 1D Obtidas com Diferenças Finitas e Malhas Uniformes.** XXIX CILAMCE, Maceió, 2008.

MURTHY, J.Y.; MINKOWYCZ, W.J.; SPARROW, E.M.. *Handbook of Numerical Heat Transfer.* 2nd Ed. John Wiley & Sons, 2006.

OBERKAMPF, W.L.; DELAND, S.M.; RUTHERFORD, B.M.; DIEGERT, K.V.; ALVIN, K.F. *Error and uncertainty in modeling and simulation. Reliability Engineering and System Safety,* 75, p.333-357, 2002.

OBERKAMPF, W.L.. ; TRUCANO, T.G. *Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics.. Progress in Aerospace Sciences,* 38, p.209-272, 2002.

OBERKAMPF, W.L. ; BARONE, M.F. *Measures of Agreement Between Computation and Experiment: Validations Metrics. Journal of Computational Physics,* 217, p.5-36, 2006.

OBERKAMPF, W.L. ; SCHWER, L.E. *Special Issue on Verification and Validation. Engineering With Computers,* London, v.23, n.4, p.243-244, 2007.

PATANKAR, Suhas V.. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.* New York: Taylor & Francis, 1980.

ROACHE, P.J.; GHIA, K. ; WHITE, F. *Editorial Policy Statement on the Control of Numerical Accuracy. ASME Journal of Fluids Engineering,* 108: 2, 1986.

ROACHE, P.J. *Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. Journal of Fluids Engineering,* vol.116, p.405-413, 1994.

ROACHE, P.J. *Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics. Annual Review of Fluid Mechanics,* 29: 123-160, 1997.

ROACHE, P.J. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering.* Albuquerque: Hermosa Publishers, 1998.

ROACHE, P.J. *Recent Contributions to Verification and Validation Methodology*. Los Lunas: [s.n.], [2002].

ROACHE, P.J. *RBuilding PDE Codes to be Verifiable and Validatable*. *Computing in Science and Engineering*, p.30-38, 2004.

SCHLESINGER, S. *Terminology for Model Credibility*. *Simulation*: 1979, 32:103-104.

SCHNEIDER, F. **Verificação de Soluções Numéricas em Problemas Difusivos e Advectivos com Malhas Não-Uniformes**. Curitiba, 2007, Apresentado como Tese de Doutorado apresentado à UFPR em 2007.

TANNEHILL, J.C.; ANDERSON, D.A.; PLETCHER, R.H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. New York: Taylor & Francis, 1997.

VERSTEEG, H.K ; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. London: Prentice Hall, 1995.

APÊNDICE A – Determinação dos coeficientes e termos fontes

A.1 DADOS DO PROBLEMA

- Modelo Matemático: $Pe \cdot \frac{d\phi}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2}$
- Condições de Contorno de Dirichlet: $\phi(0) = 0$ $\phi(1) = 1$
- Método de Discretização das Equações: Volumes Finitos
- Nós das fronteiras: tratados como volumes fictícios
- Volumes Reais: "1" a "N"
- Volumes Fictícios: "0" e "N+1"
- Velocidade do escoamento é positiva, ou seja, $u > 0$.
- Erro de Discretização = Erro de Truncamento.

A.2 DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO

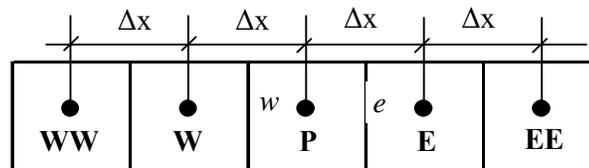


Figura A.2.1 – Volume genérico “P” e seus vizinhos no domínio discreto unidimensional

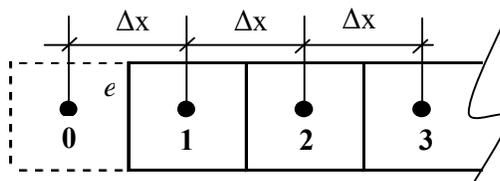


Figura A.2.2 – Volumes no contorno esquerdo do domínio

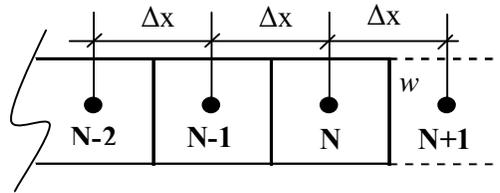


Figura A.2.3 – Volumes no contorno direito do domínio

A.3 DISCRETIZAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

Conforme descrito anteriormente, o método para discretização do modelo matemático será o dos volumes finitos.

A.3.1 NÓS INTERNOS (“P” VARIANDO DE “1” A “N”)

$$Pe\left(\frac{d\phi}{dx}\right) - \frac{d}{dx}\left(\frac{d\phi}{dx}\right) = 0 \quad (\text{A.3.1})$$

$$\int_w^e Pe \frac{d\phi}{dx} dx - \int_w^e \frac{d}{dx} \left(\frac{d\phi}{dx} \right) dx = 0 \quad (\text{A.3.2})$$

$$Pe \left[\phi|_e - \phi|_w \right] - \left[\frac{d\phi}{dx}|_e - \frac{d\phi}{dx}|_w \right] = 0 \quad (\text{A.3.3})$$

A.3.2 VOLUMES DE CONTROLE FICTÍCIOS – CONTORNO ESQUERDO

(P=0)

Para aproximação numérica do contorno esquerdo, faremos uma média aritmética simples. Lembrando que as relações obtidas aqui valem para todas as funções de interpolação usadas nestes nó (P=0), exceto QUICK.

$$\phi_w = \phi(0) = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (\text{A.3.4})$$

Usando a condição de contorno $\phi(0) = 0$, temos que :

$$\phi_P = -\phi_E \quad (\text{A.3.5})$$

A.3.3 VOLUMES DE CONTROLE FICTÍCIOS – CONTORNO DIREITO (P=N+1)

Para aproximação numérica do contorno direito, faremos uma média aritmética simples. Lembrando que as relações obtidas aqui valem para todas as funções de interpolação usadas nestes nó (P=1), exceto QUICK.

$$\phi_e = \phi(1) = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad (\text{A.3.6})$$

Usando a condição de contorno $\phi(1) = 1$, temos que :

$$\phi_P = 2 - \phi_W \quad (\text{A.3.7})$$

A.4 DETERMINAÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES ALGÉBRICAS

A determinação do sistema de equações algébricas será definida conforme a função de interpolação utilizada para as aproximações numéricas, o objetivo é aplicar as aproximações nas equações discretizadas, de modo a obter uma representação no formato genérico:

$$a_P \cdot \phi_P = a_E \cdot \phi_E + a_W \cdot \phi_W + b_P \quad (\text{A.4.1})$$

A.4.1 UDS / CDS-2

Consideraremos neste caso a FI UDS para o termo advectivo e a CDS-2 para o termo difusivo.

A.4.1.1 Nós $P=1$ a $P=N$

Aplicando inicialmente para os nós internos ($P=1$ a $P=N$), com a equação (A.3.3), temos:

$$Pe[\phi_p - \phi_w] - \left[\frac{\phi_E - \phi_p}{\Delta x} - \frac{\phi_p - \phi_w}{\Delta x} \right] = 0 \quad (\text{A.4.2})$$

Desenvolvendo a equação e deixando na forma genérica da eq. (A.4.1), temos:

$$a_E = 1 \qquad a_W = 1 + Pe.\Delta x \quad (\text{A.4.3})$$

$$a_P = a_E + a_W = 2 + Pe.\Delta x \qquad b_P = 0$$

As relações acima, formarão um sistema de equações que vão de $P=1$ a $P=N$.

A.4.1.2 Nó $P=0$

Para o nó da fronteira esquerda, usaremos a eq.(A.3.4), usando a condição de contorno deixando-a na forma genérica dada pela eq.(A.4.1).

$$a_E = -1 \qquad a_W = 0 \quad (\text{A.4.4})$$

$$a_P = 1 \qquad b_P = 0$$

A.4.1.3 Nó $P=N+1$

Para o nó da fronteira esquerda, usaremos a eq.(A.3.7), deixando-a na forma genérica dada pela eq.(A.4.1).

$$a_E = 0 \qquad a_W = -1 \quad (\text{A.4.5})$$

$$a_P = 1 \qquad b_P = 2$$

A.4.2 CDS-2 / CDS-2

Consideraremos neste caso a função de interpolação (FI) UDS para o termo advectivo e a CDS-2 para o termo difusivo. Aplicando inicialmente para os nós internos ($P=1$ a $P=N$), com a equação (A.3.3), temos:

$$Pe \left[\frac{\phi_E + \phi_P}{2} - \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \right] - \left[\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right] = 0 \quad (\text{A.4.6})$$

Desenvolvendo a equação e deixando na forma genérica da eq. (A.4.1), temos:

$$\begin{aligned} a_E &= 2 - Pe \cdot \Delta x & a_W &= 2 + Pe \cdot \Delta x \\ a_P &= a_E + a_W = 4 & b_P &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4.7})$$

As relações acima, formarão um sistema de equações que vão de $P=1$ a $P=N$.

A.4.3 UDS-2 / CDS-2

Consideraremos neste caso a FI UDS-2 para o termo advectivo e a CDS-2 para o termo difusivo.

A.4.3.1 Nós $P=2$ a $P=N-1$

Aplicando inicialmente para os nós internos ($P=2$ a $P=N-1$), com a equação (A.3.3), temos:

$$Pe \left[\left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_W}{2} \right) - \left(\phi_W + \frac{\phi_W - \phi_{WW}}{2} \right) \right] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.6})$$

Desenvolvendo a equação e deixando na forma genérica da eq. (A.4.1), temos:

$$(4 + 3 \cdot Pe \cdot \Delta x) \cdot \phi_P = (2 + 4 \cdot Pe \cdot \Delta x) \cdot \phi_W + 2 \cdot \phi_E - Pe \cdot \Delta x \cdot \phi_{WW} \quad (\text{A.4.7})$$

Considerando correção adiada:

$$\phi_e = \phi_P + \Delta \phi_e^* \quad \text{onde} \quad \Delta \phi_e^* = \frac{\phi_P^* - \phi_W^*}{2} \quad (\text{4.8})$$

$$\phi_w = \phi_W + \Delta\phi_w^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_w^* = \frac{\phi_W^* - \phi_{WW}^*}{2} \quad (4.9)$$

Voltando à Eq.(A.3.3), temos:

$$Pe. \left[(\phi_P + \Delta\phi_e^*) - (\phi_w + \Delta\phi_w^*) \right] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (A.4.10)$$

Fazendo as movimentações para deixar na forma genérica da Eq.(A.4.1), temos:

$$(2 + Pe.\Delta x).\phi_P = (1 + Pe.\Delta x).\phi_W + 1.\phi_E + Pe.\Delta x.(\Delta\phi_w^* - \Delta\phi_e^*) \quad (A.4.11)$$

Aplicando as relações dadas pelas Eqs.(A.4.8) e (A.4.9), temos:

$$(2 + Pe.\Delta x).\phi_P = (1 + Pe.\Delta x).\phi_W + 1.\phi_E + Pe.\Delta x.\left(\frac{2\phi_W^* - \phi_P^* - \phi_{WW}^*}{2}\right) \quad (A.4.12)$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para os nós P=2 a P=N-1:

$$a_E = 1 \quad a_W = 1 + Pe.\Delta x \quad (A.4.13)$$

$$a_P = a_E + a_W = 2 + Pe.\Delta x \quad b_P = Pe.\Delta x.\left(\frac{2\phi_W^* - \phi_P^* - \phi_{WW}^*}{2}\right)$$

A.4.3.2 Nó P=1

Para o nó P=1, temos, partindo da Eq.(A.3.3) temos:

$$Pe. \left[(\phi_P + \Delta\phi_e^*) - (\phi_w) \right] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (A.4.14)$$

Como $\phi_w = 0$, e não necessitando correção adiada, temos:

$$(4 + 3.Pe.\Delta x).\phi_P = (2 + Pe.\Delta x).\phi_W + 2.\phi_E \quad (A.4.15)$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para o nó P=1:

$$a_E = 2 \quad a_W = 2 + Pe.\Delta x \quad (A.4.16)$$

$$a_P = a_E + a_W = 4 + 3.Pe.\Delta x \quad b_P = 0$$

A.4.3.3 Nó $P=N$

Para o nó $P=N$, temos, partindo da Eq.(A.3.3) temos:

$$Pe.[(\phi_e) - (\phi_w + \Delta\phi_w^*)] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.17})$$

Como $\phi_e = 1$, e com correção adiada, temos:

$$(2).\phi_P = (1 + 2.Pe.\Delta x).\phi_W + 1.\phi_E + Pe.\Delta x. \left(\frac{\phi_W^* - \phi_{WW}^*}{2} - 1 \right) \quad (\text{A.4.18})$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para o nó $P=N$:

$$a_E = 1 \quad a_W = 1 + 2.Pe.\Delta x \quad (\text{A.4.19})$$

$$a_P = 2 \quad b_P = Pe.\Delta x. \left(\frac{\phi_W^* - \phi_{WW}^*}{2} - 1 \right)$$

A.4.3.4 Nós $P=0$ e $P=N+1$

E finalmente para os nós $P=0$ e $P=N+1$, temos os coeficientes dados pelas relações das Eqs.(A.4.4) e (A.4.5) respectivamente.

A.4.4 WUDS

Consideraremos neste caso a FI WUDS para os termo advectivo e difusivo. Inicialmente definiremos numericamente os termos α e β que tem a função de balancear a intensidade de cada termo no fenômeno. Desta forma:

$$\alpha = \frac{(Pe.\Delta x)^2}{10 + 2.(Pe.\Delta x)^2} \quad (\text{A.4.20})$$

$$\beta = \frac{1 + 0,005.(Pe.\Delta x)^2}{1 + 0,05.(Pe.\Delta x)^2} \quad (\text{A.4.21})$$

A.4.4.1 Nós $P=1$ a $P=N$

Aplicando as aproximações do WUDS para os volumes reais ($P=1$ a $P=N$), com a equação (3.3), temos:

$$Pe \left[\left(\left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \phi_E \right) - \left(\left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) \phi_P \right) \right] - \left[\beta_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \beta_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.22})$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para os nós $P=1$ a $P=N$:

$$\begin{aligned} a_E &= \beta_e - \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \cdot Pe \cdot \Delta x & a_W &= \beta_w + \left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \cdot Pe \cdot \Delta x \\ a_P &= a_E + a_W = \beta_e + \beta_w + (\alpha_e + \alpha_w) \cdot Pe \cdot \Delta x & b_P &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4.23})$$

A.4.4.2 Nó $P=0$

Para o nó $P=0$, temos:

$$\left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \cdot \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \cdot \phi_E = \phi_e = 0 \quad (\text{A.4.24})$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para o nó $P=0$, temos:

$$\begin{aligned} a_E &= \alpha_e - \frac{1}{2} & a_W &= 0 \\ a_P &= \frac{1}{2} + \alpha_e & b_P &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4.25})$$

A.4.4.3 Nó $P=N+1$

Para o nó $P=N+1$, temos:

$$\left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \cdot \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) \cdot \phi_P = \phi_w = 1 \quad (\text{A.4.26})$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para o nó $P=N+1$, temos:

$$\begin{aligned} a_E &= 0 & a_W &= -\alpha_w - \frac{1}{2} \\ a_P &= \frac{1}{2} - \alpha_w & b_P &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.4.27})$$

A.4.5 PLDS

Consideraremos neste caso a FI PLDS para os termo advectivo e difusivo. Inicialmente definiremos numericamente o termo β que tem a função de balancear a intensidade de cada termo no fenômeno. Desta forma:

$$\beta = \frac{(1 - 0,1 \cdot Pe)^5}{Pe} \quad (\text{A.4.28})$$

A.4.5.1 Nós $P=1$ a $P=N$

Aplicando as aproximações do PLDS para os volumes reais ($P=1$ a $P=N$), com a equação (A.3.3), temos:

$$Pe \cdot [(\phi_P - \beta(\phi_E - \phi_P)) - (\phi_W - \beta(\phi_P - \phi_W))] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.29})$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para os nós $P=1$ a $P=N$:

$$\begin{aligned} a_E &= Pe \cdot \Delta x \cdot \beta + 1 & a_W &= Pe \cdot \Delta x \cdot (1 + \beta) + 1 \\ a_P &= a_E + a_W = Pe \cdot \Delta x \cdot (1 + 2 \cdot \beta) + 2 & b_P &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4.30})$$

A.4.5.2 Nós $P=0$ e $P=N+1$

E finalmente para os nós $P=0$ e $P=N+1$, temos os coeficientes dados pelas relações das Eqs.(A.4.4) e (A.4.5) respectivamente.

A.4.6 ADS / CDS-2

Consideraremos neste caso a FI ADS para o termo advectivo e CDS-2 para o termo difusivo. Para definição do coeficiente α_e precisamos inicialmente calcular as relações representadas pelas Eqs. (A.4.31) a (A.4.35).

$$\phi_e^- = \phi_P^* + \frac{1}{2} \cdot (\phi_P^* - \phi_W^*) \quad (\text{A.4.31})$$

$$\phi_e^m = \frac{1}{2} \cdot (\phi_P^* + \phi_E^*) \quad (\text{A.4.32})$$

$$\phi_e^+ = \phi_E^* - \frac{1}{2} \cdot (\phi_{EE}^* - \phi_E^*) \quad (\text{A.4.33})$$

$$\phi_e^* = \text{MAX}[\text{MIN}(\phi_e^-; \phi_e^m); \text{MIN}(\phi_e^-; \phi_e^+); \text{MIN}(\phi_e^m; \phi_e^+)] \quad (\text{A.4.34})$$

$$\alpha_e^* = \frac{(2 \cdot \phi_e^* - \phi_P^* - \phi_E^*)}{2 \cdot (\phi_P^* - \phi_E^*)} \quad (\text{A.4.35})$$

Com base nisto, definiremos o valor de α_e

$$\alpha_e = \text{MIN}[0,5; \text{MAX}(-0,5; \alpha_e^*)] \quad (\text{A.4.36})$$

Sendo que:

$$\text{Se } P=0 \quad \text{ou} \quad P=N \quad \Rightarrow \quad \alpha_e = 0 \quad (\text{A.4.37})$$

A.4.6.1 Nós $P=1$ a $P=N$

Aplicando as aproximações do ADS para os volumes reais ($P=1$ a $P=N$), com a equação (A.3.3), temos:

$$Pe \cdot \left[\left(\left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \cdot \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \cdot \phi_E \right) - \left(\left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \cdot \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) \cdot \phi_P \right) \right] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.38})$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para os nós $P=1$ a $P=N$:

$$\begin{aligned} a_E &= 1_e - \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right).Pe.\Delta x & a_W &= 1 + \left(\frac{1}{2} + \alpha_w\right).Pe.\Delta x \\ a_P &= a_E + a_W = 2 + (\alpha_e + \alpha_w).Pe.\Delta x & b_P &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4.39})$$

A.4.6.2 Nós $P=0$ e $P=N+1$

E finalmente para os nós $P=0$ e $P=N+1$, temos os coeficientes dados pelas relações das Eqs.(A.4.4) e (A.4.5) respectivamente.

A.4.7 TVD / CDS-2

Consideraremos neste caso a FI TVD para o termo advectivo e CDS-2 para o termo difusivo. Para definição do coeficiente α_e precisamos inicialmente calcular as relações representadas pelas Eqs. (A.4.40) a (A.4.42)

$$r_e = \frac{(\phi_P^* - \phi_W^*)}{(\phi_E^* - \phi_P^*)} \quad (\text{A.4.40})$$

$$\Psi_e = \text{MAX}[0; \text{MIN}(2r_e; 1); \text{MIN}(r_e; 2)] \quad (\text{A.4.41})$$

$$\alpha_e = \frac{1}{2}(1 - \Psi_e) \quad (\text{A.4.42})$$

Sendo que:

$$\text{Se } P=0 \quad \text{ou} \quad P=N \quad \Rightarrow \quad \alpha_e = 0 \quad (\text{A.4.43})$$

A.4.7.1 Nós $P=1$ a $P=N$

Aplicando as aproximações do ADS para os volumes reais ($P=1$ a $P=N$), com a equação (A.3.3), temos:

$$Pe \cdot \left[\left(\left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \cdot \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \cdot \phi_E \right) - \left(\left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \cdot \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) \cdot \phi_P \right) \right] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.44})$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para os nós $P=1$ a $P=N$:

$$\begin{aligned} a_E &= 1_e - \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right).Pe.\Delta x & a_W &= 1 + \left(\frac{1}{2} + \alpha_w\right).Pe.\Delta x \\ a_P &= a_E + a_W = 2 + (\alpha_e + \alpha_w).Pe.\Delta x & b_P &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4.45})$$

A.4.7.2 Nós $P=0$ e $P=N+1$

E finalmente para os nós $P=0$ e $P=N+1$, temos os coeficientes dados pelas relações das Eqs.(A.4.4) e (A.4.5) respectivamente.

A.4.8 ALFA / CDS-2

Consideraremos neste caso a FI ALFA para o termo advectivo e CDS-2 para o termo difusivo. Neste caso, os coeficientes α_e e α_w são prescritos. Em nosso trabalho consideramos,

$$\alpha_e = \alpha_w = 0,05 \quad (\text{A.4.46})$$

A.4.8.1 Nós $P=1$ a $P=N$

Aplicando as aproximações do ALFA para os volumes reais ($P=1$ a $P=N$), com a equação (A.3.3), temos:

$$Pe \left[\left(\left(\frac{1}{2} + \alpha_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e \right) \phi_E \right) - \left(\left(\frac{1}{2} + \alpha_w \right) \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \alpha_w \right) \phi_P \right) \right] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{4.47})$$

Considerando então a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para os nós $P=1$ a $P=N$:

$$\begin{aligned} a_E &= 1_e - \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right).Pe.\Delta x & a_W &= 1 + \left(\frac{1}{2} + \alpha_w\right).Pe.\Delta x \\ a_P &= a_E + a_W = 2 + (\alpha_e + \alpha_w).Pe.\Delta x & b_P &= 0 \end{aligned} \quad (\text{4.48})$$

Deixaremos indicado os termos α_e e α_w de forma genérica nas Eqs.(A.4.48).

A.4.8.2 Nós $P=0$ e $P=N+1$

E finalmente para os nós $P=0$ e $P=N+1$, temos os coeficientes dados pelas relações das Eqs.(A.4.4) e (A.4.5) respectivamente.

A.4.9 QUICK / CDS-2

Consideraremos neste caso a FI QUICK para o termo advectivo e CDS-2 para o termo difusivo. Considerando correção adiada:

$$\phi_e = \phi_p + \Delta\phi_e^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_e^* = \frac{3.\phi_E^* - 2.\phi_p^* - \phi_w^*}{8} \quad (\text{A.4.49})$$

$$\phi_w = \phi_w + \Delta\phi_w^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_w^* = \frac{3.\phi_p^* - 2.\phi_w^* - \phi_{ww}^*}{8} \quad (\text{A.4.50})$$

A.4.9.1 Nós $P=3$ e $P=N-1$

Iniciando para os volumes reais ($P=3$ a $P=N-1$), com a equação (A.3.3), temos:

$$Pe.\left[\left(\phi_p + \Delta\phi_e^*\right) - \left(\phi_w + \Delta\phi_w^*\right)\right] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_p}{\Delta x}\right) - \left(\frac{\phi_p - \phi_w}{\Delta x}\right)\right] = 0 \quad (\text{A.4.51})$$

Substituindo as Eqs.(A.4.49) e (A.4.50) em (A.4.51), e considerando a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para os nós $P=3$ a $P=N-1$:

$$\begin{aligned} a_E &= 1 & a_w &= 1 + Pe.\Delta x \\ a_p &= a_E + a_w = 2 + Pe.\Delta x & b_p &= \frac{Pe.\Delta x}{8} \cdot (5.\phi_p^* - \phi_w^* - \phi_{ww}^* - 3.\phi_E^*) \end{aligned} \quad (\text{A.4.52})$$

A.4.9.2 Nó $P=1$

Considerando agora o nó $P=1$, e fazendo ainda aproximação DDS-2 para o termo difusivo na face oeste:

$$Pe \cdot [(\phi_p + \Delta\phi_e^*) - (\phi_w)] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{9\phi_P - 8\phi_W - \phi_E}{3\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.53})$$

Considerando na Eq.(A.4.53) que:

$$\phi_w = 0 \quad (\text{A.4.54})$$

$$\phi_e = \phi_p + \Delta\phi_e^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_e^* = \frac{3\phi_E^* - \phi_P^* - 2\phi_W^*}{8} \quad (\text{A.4.55})$$

Substituindo as Eqs.(A.4.54) e (A.4.55) em (A.4.53) e considerando-se a forma genérica da Eq.(A.4.1), temos para o nó P=1:

$$\begin{aligned} a_E &= 4 & a_W &= 0 \\ a_P &= 12 + 3\cdot Pe \cdot \Delta x & b_P &= \frac{3\cdot Pe \cdot \Delta x}{8} \cdot (\phi_P^* - 3\phi_E^*) \end{aligned} \quad (\text{A.4.56})$$

A.4.9.3 Nó P=2

Analisando agora os coeficientes para o nó P=2:

$$Pe \cdot [(\phi_p + \Delta\phi_e^*) - (\phi_w + \Delta\phi_w^*)] - \left[\left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.57})$$

Considerando que:

$$\phi_w = \phi_W + \Delta\phi_w^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_w^* = \Delta\phi_e^* \Big|_{P=1} = \frac{3\phi_P^* - \phi_W^*}{8} \quad (\text{A.4.58})$$

$$\phi_e = \phi_p + \Delta\phi_e^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_e^* = \frac{3\phi_E^* - 2\phi_P^* - \phi_W^*}{8} \quad (\text{A.4.59})$$

Substituindo as Eqs.(A.4.58) e (A.4.59) em (A.4.57), e deixando na forma genérica da Eq.(A.4.1) temos:

$$\begin{aligned} a_E &= 1 & a_W &= 1 + Pe \cdot \Delta x \\ a_P &= a_E + a_W = 2 + Pe \cdot \Delta x & b_P &= \frac{Pe \cdot \Delta x}{8} \cdot (5\phi_P^* - 3\phi_E^*) \end{aligned} \quad (\text{A.4.60})$$

A.4.9.4 N3 P=N

Analisando agora o n3 P=N, e fazendo a aproxima33o UDS-2 para o termo difusivo face leste, temos:

$$Pe \cdot [(\phi_e) - (\phi_w + \Delta\phi_w^*)] - \left[\left(\frac{8\phi_e - 9\phi_P + \phi_w}{3\Delta x} \right) - \left(\frac{\phi_P - \phi_w}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.61})$$

Considerando ainda que:

$$\phi_e = 1 \quad (\text{A.4.62})$$

$$\phi_w = \phi_w + \Delta\phi_w^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_w^* = \frac{3\phi_P^* - 2\phi_w^* - \phi_{ww}^*}{8} \quad (\text{A.4.63})$$

Substituindo as Eqs.(A.4.62) e (A.4.63) na Eq.(A.4.61), e deixando na forma gen3rica da Eq.(A.4.1), temos os seguintes coeficientes e termo fonte para o n3 P=N:

$$\begin{aligned} a_E &= 0 & a_w &= 4 + 3 \cdot Pe \cdot \Delta x \\ a_P &= 12 & b_P &= 8 + \frac{3 \cdot Pe \cdot \Delta x}{8} \cdot (3\phi_P^* - 2\phi_w^* - \phi_{ww}^* - 8) \end{aligned} \quad (\text{4.64})$$

A.4.9.5 N3s P=0 e P=N+1

E finalmente para os n3s P=0 e P=N+1, temos os coeficientes dados pelas rela33es das Eqs.(A.4.4) e (A.4.5) respectivamente.

A.4.10 QUICK / CDS-4

Consideraremos neste caso a FI QUICK para o termo advectivo e CDS-4 para o termo difusivo.

A.4.10.1 N3s P=3 a P=N-2

Considerando corre333o adiada:

$$\phi_e = \phi_P + \Delta\phi_e^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_e^* = \frac{3.\phi_E^* - 2.\phi_P^* - \phi_W^*}{8} \quad (\text{A.4.65})$$

$$\phi_w = \phi_W + \Delta\phi_w^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_w^* = \frac{3.\phi_P^* - 2.\phi_W^* - \phi_{WW}^*}{8} \quad (\text{A.4.66})$$

E considerando ainda as aproximações CDS-4 para os termos difusivos:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{27.\phi_E - 27.\phi_P + \phi_W - \phi_{EE}}{24.\Delta x} = \frac{27}{24} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_e' \quad (\text{A.4.67})$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \frac{27.\phi_P - 27.\phi_W + \phi_{WW} - \phi_E}{24.\Delta x} = \frac{27}{24} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_w' \quad (\text{A.4.68})$$

Sendo que:

$$\Delta\phi_e' = \frac{\phi_W^* - \phi_{EE}^*}{24.\Delta x} \quad (\text{A.4.69})$$

$$\Delta\phi_w' = \frac{\phi_{WW}^* - \phi_E^*}{24.\Delta x} \quad (\text{A.4.70})$$

Fazendo a discretização:

$$Pe \left[(\phi_P + \Delta\phi_e^*) - (\phi_W + \Delta\phi_w^*) \right] - \left[\left(\frac{27}{24} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_e' \right) - \left(\frac{27}{24} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_w' \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.71})$$

Substituindo as relações dadas pelas Eqs.(A.4.65), (A.4.66), (A.4.69) e (A.4.70) em (A.4.71) e deixando na forma genérica da Eq.(A.4.1) para obtenção dos coeficientes e termo fonte para os nós de P=3 a P=N-2, temos:

$$a_E = \frac{27}{24} \quad b_P = \frac{Pe.\Delta x}{8} \cdot (5.\phi_P^* - \phi_W^* - \phi_{WW}^* - 3.\phi_E^*) + \left(\frac{\phi_W^* + \phi_E^* - \phi_{WW}^* - \phi_{EE}^*}{24} \right)$$

$$a_W = Pe.\Delta x + \frac{27}{24} \quad a_P = a_P + a_P = Pe.\Delta x + \frac{27}{24} \quad (\text{A.4.72})$$

A.4.10.2 Nós $P=1$

Analisando agora para o nó $P=1$, temos, com correção adiada:

$$\phi_e = \phi_P + \Delta\phi_e^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_e^* = \frac{3\phi_E^* - \phi_P^*}{8} \quad (\text{A.4.73})$$

$$\phi_w = 0 \quad (\text{A.4.74})$$

E considerando ainda as aproximações DCDS-3 para o termo difusivo face leste, e a aproximação DDS-3 para o termo difusivo face oeste:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{70}{60} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_e' \quad (\text{A.4.75})$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \left(\frac{225\phi_P - 41\phi_E - 184\phi_w}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_w' \quad (\text{A.4.76})$$

Sendo que:

$$\Delta\phi_e' = \frac{8\phi_w - 5\phi_P^* - 3\phi_{EE}^*}{60\Delta x} \rightarrow \phi_w = 0 \Rightarrow \frac{-5\phi_P^* - 3\phi_{EE}^*}{60\Delta x} \quad (\text{A.4.77})$$

$$\Delta\phi_w' = \frac{9}{6} \left(\frac{\phi_{EE}^* - \phi_E^*}{\Delta x} \right) \quad (\text{A.4.78})$$

Discretizando a Eq.(A.3.3), temos:

$$Pe \cdot [(\phi_P + \Delta\phi_e^*) - (\phi_w)] - \left[\left(\frac{70}{60} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_e' \right) - \left(\left(\frac{225\phi_P - 41\phi_E - 184\phi_w}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_w' \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.79})$$

Fazendo as substituições das relações dadas pelas Eqs.(A.4.73), (A.4.74), (A.4.77) e (A.4.78) em (A.4.79), e deixando na forma genérica da Eq.(A.4.1), obtemos os seguintes coeficientes e termo fonte:

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{111}{60} & b_P &= \frac{Pe\Delta x}{8} (\phi_P^* - 3\phi_E^*) + \left(\frac{9\phi_E^* - 5\phi_P^* - 12\phi_{EE}^*}{60} \right) \\ a_W &= 0 & a_P &= Pe\Delta x + \frac{295}{60} \end{aligned} \quad (\text{A.4.80})$$

A.4.10.3 N3 P=2

Analisando agora para o n3 P=2, temos, com corre33o adiada:

$$\phi_e = \phi_p + \Delta\phi_e^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_e^* = \frac{3.\phi_E^* - 2.\phi_P^* - \phi_W^*}{8} \quad (\text{A.4.81})$$

$$\phi_w = \phi_w + \Delta\phi_w^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_w^* = \frac{3.\phi_P^* - \phi_W^*}{8} \quad (\text{A.4.82})$$

E considerando ainda as aproxima33es CDS-4 para o termo difusivo face leste, e a aproxima33o DCDS-3 para o termo difusivo face oeste:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{27.\phi_E - 27.\phi_P + \phi_W - \phi_{EE}}{24.\Delta x} = \frac{27}{24} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_e' \quad (\text{A.4.83})$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \frac{70}{60} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_w' \quad (\text{A.4.84})$$

Sendo que:

$$\Delta\phi_e' = \frac{\phi_W^* - \phi_{EE}^*}{24.\Delta x} \quad (\text{A.4.85})$$

$$\Delta\phi_w' = \frac{8.\phi_{ww} - 5.\phi_W^* - 3.\phi_E^*}{60.\Delta x} \rightarrow \phi_{ww} = 0 \Rightarrow \frac{-5.\phi_W^* - 3.\phi_E^*}{60.\Delta x} \quad (\text{A.4.86})$$

Discretizando a Eq.(A.3.3), temos:

$$Pe. \left[(\phi_p + \Delta\phi_e^*) - (\phi_w) \right] - \left[\left(\frac{27}{24} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_e' \right) - \left(\frac{70}{60} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_w' \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.87})$$

Fazendo as substitui33es das rela33es dadas pelas Eqs.(A.4.81), (A.4.82), (A.4.85) e (A.4.86) em (A.4.87), e deixando na forma gen33rica da Eq.(A.4.1), obtemos os seguintes coeficientes e termo fonte:

$$a_E = \frac{27}{24} \quad b_P = \frac{Pe.\Delta x}{8} (5.\phi_P^* - 3.\phi_E^*) + \left(\frac{15.\phi_{ww}^* - 6.\phi_E^* - 5.\phi_{EE}^*}{120} \right)$$

$$a_w = Pe.\Delta x + \frac{70}{60} \quad a_p = Pe.\Delta x + \frac{275}{120} \quad (\text{A.4.88})$$

A.4.10.4 N3 P=N-1

Analisando agora para o n3 P=N-1, temos, com corre33o adiada:

$$\phi_e = \phi_p + \Delta\phi_e^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_e^* = \frac{3.\phi_E^* - 2.\phi_P^* - \phi_W^*}{8} \quad (\text{A.4.89})$$

$$\phi_w = \phi_w + \Delta\phi_w^* \quad \text{onde} \quad \Delta\phi_w^* = \frac{3.\phi_P^* - \phi_W^* - \phi_{WW}^*}{8} \quad (\text{A.4.90})$$

E considerando ainda as aproxima33es UCDS-3 para o termo difusivo face leste, e a aproxima33o CDS-4 para o termo difusivo face oeste:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{70}{60} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_e' \quad (\text{A.4.91})$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \frac{27}{24} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_w' \quad (\text{A.4.92})$$

Sendo que:

$$\Delta\phi_e' = \frac{5.\phi_E^* - 3.\phi_W^* - 8.\phi_{EE}^*}{60.\Delta x} \quad (\text{A.4.93})$$

$$\Delta\phi_w' = \frac{\phi_{WW}^* - \phi_E^*}{24.\Delta x} \quad (\text{A.4.94})$$

Discretizando a Eq.(A.3.3), temos:

$$Pe. \left[(\phi_p + \Delta\phi_e^*) - (\phi_w) \right] - \left[\left(\frac{70}{60} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_e' \right) - \left(\frac{27}{24} \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right) + \Delta\phi_w' \right) \right] = 0 \quad (\text{A.4.95})$$

Fazendo as substitui33es das rela333es dadas pelas Eqs.(A.4.89), (A.4.90), (A.4.93) e (A.4.94) em (A.4.95), e deixando na forma gen33rica da Eq.(A.4.1), obtemos os seguintes coeficientes e termo fonte:

$$a_E = \frac{70}{60} \quad b_P = \frac{Pe \cdot \Delta x}{8} \cdot (5 \cdot \phi_P^* - \phi_W^* - \phi_{WW}^* - 3 \cdot \phi_E^*) + \left(\frac{15 \cdot \phi_E^* - 6 \cdot \phi_W^* - 5 \cdot \phi_{WW}^* - 16}{120} \right)$$

$$a_W = Pe \cdot \Delta x + \frac{27}{24} \quad a_P = Pe \cdot \Delta x + \frac{275}{120} \quad (\text{A.4.96})$$

A.4.10.5 Nós P=N

Analisando agora para o nó P=N, temos, com correção adiada:

$$\phi_e = 1 \quad (\text{A.4.97})$$

$$\phi_w = \phi_w + \Delta \phi_w^* \quad \text{onde} \quad \Delta \phi_w^* = \frac{3 \cdot \phi_P^* - 2 \cdot \phi_W^* - \phi_{WW}^*}{8} \quad (\text{A.4.98})$$

E considerando ainda as aproximações UDS-3 para o termo difusivo face leste, e a aproximação UCDS-3 para o termo difusivo face oeste:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \left(\frac{184 \cdot \phi_e - 225 \cdot \phi_P + 41 \cdot \phi_w}{60 \cdot \Delta x} \right) + \Delta \phi_e' \rightarrow \phi_e = 1 \Rightarrow \left(\frac{184 - 225 \cdot \phi_P + 41 \cdot \phi_w}{60 \cdot \Delta x} \right) + \Delta \phi_e' \quad (\text{A.4.99})$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \frac{70}{60} \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_w}{\Delta x} \right) + \Delta \phi_w' \quad (\text{A.4.100})$$

Sendo que:

$$\Delta \phi_e' = \frac{9}{60} \cdot \left(\frac{\phi_w^* - \phi_{WW}^*}{\Delta x} \right) \quad (\text{A.4.101})$$

$$\Delta \phi_w' = \frac{5 \cdot \phi_P^* + 3 \cdot \phi_{WW}^* - 8 \cdot \phi_e}{60 \cdot \Delta x} \rightarrow \phi_e = 1 \Rightarrow \frac{5 \cdot \phi_P^* + 3 \cdot \phi_{WW}^* - 8}{60 \cdot \Delta x} \quad (\text{A.4.102})$$

Discretizando a Eq.(3.3), temos:

$$Pe \cdot \left[(1 - (\phi_w - \Delta \phi_w^*)) - \left[\left(\left(\frac{184 - 225 \cdot \phi_P + 41 \cdot \phi_w}{60 \cdot \Delta x} \right) + \Delta \phi_e' \right) - \left(\frac{70}{60} \cdot \left(\frac{\phi_P - \phi_w}{\Delta x} \right) + \Delta \phi_w' \right) \right] \right] = 0 \quad (\text{A.4.103})$$

Fazendo as substituições das relações dadas pelas Eqs.(A.4.98), (A.4.99), (A.4.101) e (A.4.102) em (A.4.103), e deixando na forma genérica da Eq.(A.4.1), obtemos os seguintes coeficientes e termo fonte:

$$a_E = 0 \quad b_P = \frac{Pe.\Delta x}{8} \cdot (3.\phi_P^* - 2.\phi_W^* - \phi_{WW}^*) - Pe.\Delta x + \frac{184}{60} + \left(\frac{9.\phi_W^* + 8 - 12.\phi_W^* - 5.\phi_P^*}{120} \right)$$

$$a_W = Pe.\Delta x + \frac{111}{60} \quad a_P = \frac{295}{60} \quad (A.4.104)$$

A.4.10.6 Nós $P=0$ e $P=N+1$

E finalmente para os nós $P=0$ e $P=N+1$, temos os coeficientes dados pelas relações das Eqs.(A.4.4) e (A.4.5) respectivamente.

APÊNDICE B – Análise *a priori* do erro de discretização

B.1 DADOS DO PROBLEMA

- Modelo Matemático: $Pe \cdot \frac{d\phi}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2}$
- Condições de Contorno de Dirichlet: $\phi(0) = 0$ $\phi(1) = 1$
- Método de Discretização das Equações: Volumes Finitos
- Nós das fronteiras: tratados como volumes fictícios
- Volumes Reais: "1" a "N"
- Volumes Fictícios: "0" e "N+1"
- Velocidade do escoamento é positiva, ou seja, $u > 0$.
- Erro de Discretização = Erro de Truncamento

B.2 DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO

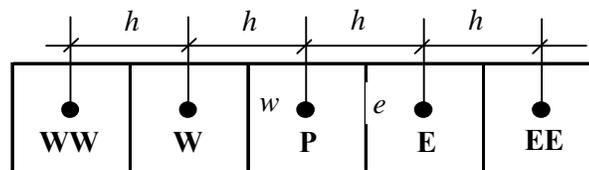


Figura B.2.1 – Volume genérico “P” e seus vizinhos no domínio discreto unidimensional

B.3 MODELO NUMÉRICO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

Valor central da variável com número ímpar de volumes de controle:

$$\lambda(1/2) = \lambda_p \quad \text{sendo que} \quad P = \frac{N}{2} + 1 \quad \text{sendo } N \text{ inteiro} \quad (\text{B.3.1})$$

Valor médio da variável com a regra do retângulo:

$$\bar{\lambda} = h \cdot \sum_{p=1}^N \lambda_p \quad (\text{B.3.2})$$

Derivada de primeira ordem da variável com UDS-2:

$$\lambda_{x=1}^i = \frac{8.\lambda_{x=1} - 9.\lambda_N + \lambda_{N-1}}{3.h} \quad (\text{B.3.3})$$

Média da Norma l_1 :

$$\bar{l}_1 = \frac{1}{N} \cdot \sum_1^N |\Lambda_p - \lambda_p| \quad (\text{B.3.4})$$

Onde " Λ_p " é o valor analítico da variável no ponto "P", e " λ_p " é o valor numérico da variável no ponto "P", obtida pelo método numérico.

B.4 ANÁLISE A *PRIORI* DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO

Consideraremos nesta seção que o símbolo " Λ " representa o valor analítico da variável em determinado ponto, e " λ " o valor numérico neste mesmo ponto. Mudaremos ainda nossa representação para o tamanho dos nós da malha, que mudamos nossa nomenclatura usual de Δx passaremos a chamá-lo de h .

Para análise dos erros, levaremos em consideração que o valor analítico da variável (Λ) será igual ao seu valor numérico (λ) acrescido de seu erro de discretização (E):

$$\Lambda = \lambda + E(\lambda) \quad (\text{B.4.1})$$

Uma de nossas premissas do trabalho é que somente o erro de truncamento será relevante na formação do erro de discretização, ou seja, no desenvolvimento das simulações resulta que o erro de truncamento é o erro de discretização:

$$\varepsilon(\lambda) = E(\lambda) \quad (\text{B.4.2})$$

Substituindo a Eq.(B.4.2) em (B.4.1) e fazendo as movimentações necessárias:

$$\varepsilon(\lambda) = \Lambda - \lambda \quad (\text{B.4.3})$$

No desenrolar do trabalho consideraremos como a equação geral do erro de truncamento (MARCHI, 2001):

$$\varepsilon(\lambda) = c_1.h^{p_1} + c_2.h^{p_2} + c_3.h^{p_3} + \dots \quad (\text{B.4.4})$$

E a equação geral do erro de discretização (MARCHI, 2001):

$$E(\lambda) = C_1.h^{p_1} + C_2.h^{p_2} + C_3.h^{p_3} + \dots \quad (\text{B.4.5})$$

B.5 DESENVOLVIMENTO EM SÉRIE DE TAYLOR

Desenvolvendo as séries de Taylor (KREYSZIG, 1999),

$$\Lambda_x = \Lambda_j + \Lambda_j^i.(x - x_j) + \Lambda_j^{ii}.\frac{(x - x_j)^2}{2!} + \Lambda_j^{iii}.\frac{(x - x_j)^3}{3!} + \dots + \Lambda_j^M.\frac{(x - x_j)^M}{M!} \quad (\text{B.5.1})$$

sendo que $h = x - x_j$, e " Λ " representa o valor analítico da variável de interesse.

Tendo como base a Fig.B.2.1 vemos que os centros dos nós estão distantes das faces do volume de controle ao qual pertencem por uma distância $h/2$. Considerando agora que nosso objetivo é obtermos expressões que relacionem os valores nodais com valores nas faces dos volumes de controle, desenvolveremos algumas séries de Taylor onde $x - x_j = h/2$.

Poderia-se questionar, do por quê não usar a notação de $x - x_j$ sendo igual a h , que facilitaria muito o desenvolvimento da série. A resposta é que, neste caso, o tamanho do volume de controle seria $2h$, tornando incômodo o restante do processo de discretização. Fazemos então este espaçamento ser igual a $h/2$ para relacionar os valores dos nós e faces, em que h é o tamanho do volume de controle.

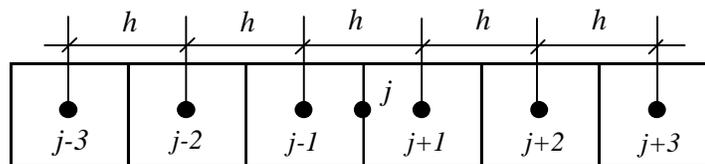


Figura B.5.1 – Face genérica “j” e suas relações nodais nas vizinhanças mais próximas

Com base na Fig.B.6.1, podemos desenvolver as seguintes relações:

$$\Lambda_{j+3} = \Lambda_j + \Lambda_j^i.\frac{5.h}{2} + \Lambda_j^{ii}.\frac{25.h^2}{8} + \Lambda_j^{iii}.\frac{125.h^3}{48} + \Lambda_j^{iv}.\frac{625.h^4}{384} + \Lambda_j^v.\frac{3125.h^5}{3840} \dots \quad (\text{B.5.2})$$

$$\Lambda_{j+2} = \Lambda_j + \Lambda_j^i.\frac{3.h}{2} + \Lambda_j^{ii}.\frac{9.h^2}{8} + \Lambda_j^{iii}.\frac{27.h^3}{48} + \Lambda_j^{iv}.\frac{81.h^4}{384} + \Lambda_j^v.\frac{243.h^5}{3840} \dots \quad (\text{B.5.3})$$

$$\Lambda_{j+1} = \Lambda_j + \Lambda_j^i \cdot \frac{h}{2} + \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{8} + \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^3}{48} + \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{h^4}{384} + \Lambda_j^v \cdot \frac{h^5}{3840} \dots \quad (\text{B.5.4})$$

$$\Lambda_{j-1} = \Lambda_j - \Lambda_j^i \cdot \frac{h}{2} + \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{8} - \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^3}{48} + \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{h^4}{384} - \Lambda_j^v \cdot \frac{h^5}{3840} \dots \quad (\text{B.5.5})$$

$$\Lambda_{j-2} = \Lambda_j - \Lambda_j^i \cdot \frac{3h}{2} + \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{9h^2}{8} - \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{27h^3}{48} + \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{81h^4}{384} - \Lambda_j^v \cdot \frac{243h^5}{3840} \dots \quad (\text{B.5.6})$$

$$\Lambda_{j-3} = \Lambda_j - \Lambda_j^i \cdot \frac{5h}{2} + \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{25h^2}{8} - \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{125h^3}{48} + \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{625h^4}{384} - \Lambda_j^v \cdot \frac{3125h^5}{3840} \dots \quad (\text{B.5.7})$$

B.6 ANÁLISE A PRIORI DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICAS DAS FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO

B.6.1 CDS-2 / CDS-2

B.6.1.1 Aproximação do Termo Difusivo - Derivada Primeira da Variável na Face do Volume com CDS-2

Considerando a obtenção da derivada de primeira ordem na face leste, neste caso, o nó “j” na Fig.B.5.1 toma o valor da variável nesta face. Devemos lembrar que a derivada primeira corresponde à aproximação do termo difusivo. Desta forma, obteremos o valor de sua derivada primeira subtraindo a Eq.(B.5.5) da Eq.(B.5.4), resultando,

$$\Lambda_j^i = \frac{\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1}}{h} - \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^2}{24} - \Lambda_j^v \cdot \frac{h^4}{1920} - \Lambda_j^{vi} \cdot \frac{h^6}{322560} \dots \quad (\text{B.6.1})$$

Onde $j+1$ corresponde ao nó “E” e $j-1$ corresponde ao nó “P”, se considerarmos a malha mostrada na Fig.B.2.1. Importante notar que se considerarmos “j” sendo a face oeste, a expressão acima irá relacionar os nós “P” e “W”, porém, o erro de truncamento será o mesmo, motivo pela qual faremos a análise considerando só uma das faces. Substituindo agora a Eq.(B.4.1) em (B.6.1), temos que,

$$\Lambda_j^i = \left(\frac{\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}}{h} \right) + \left(\frac{E_{j+1} - E_{j-1}}{h} \right) + \left(-\Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^2}{24} - \Lambda_j^v \cdot \frac{h^4}{1920} + \Lambda_j^{vi} \cdot \frac{h^6}{322560} \dots \right) \quad (\text{B.6.2})$$

que pode ser reescrita da forma,

$$\Lambda_j^i = (\lambda_j^i)_{CDS-2} + \varepsilon(\lambda_j^i)_{CDS-2} + e(\lambda_j^i)_{CDS-2} \quad (\text{B.6.3})$$

Ou seja, o valor da derivada primeira aproximada com CDS-2 é a soma do valor numérico da derivada primeira, com o erro de truncamento, mais o erro de poluição, "carregado" pelo valor numérico da derivada numérica nos nós subsequentes. Temos então que a aproximação numérica da derivada primeira na face é representada por,

$$(\lambda_j^i)_{CDS-2} = \frac{\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}}{h} \quad (\text{B.6.4})$$

O erro de poluição (e) é dado por:

$$e(\lambda_j^i)_{CDS-2} = \frac{E_{j+1} - E_{j-1}}{h} \quad (\text{B.6.5})$$

E finalmente, o erro de truncamento é representado por:

$$\varepsilon(\lambda_j^i)_{CDS-2} = -\Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^2}{24} - \Lambda_j^v \cdot \frac{h^4}{1920} - \Lambda_j^{vi} \cdot \frac{h^6}{322560} \dots \quad (\text{B.6.6})$$

Para o desenvolvimento do trabalho, consideraremos para este caso que a equação geral do erro de truncamento dada pela Eq.(B.4.4), terá aqui seus coeficientes dados por “ d ”, ficando então:

$$\varepsilon(\lambda_j^i)_{CDS-2} = d_1 \cdot h^2 + d_2 \cdot h^4 + d_3 \cdot h^6 + \dots \quad (\text{B.6.7})$$

Comparando as Eqs.(B.6.6) e (B.6.7) temos os seguintes coeficientes:

$$d_1 = -\frac{\Lambda_j^{iii}}{24} \quad d_2 = -\frac{\Lambda_j^v}{1920} \quad d_3 = \frac{\Lambda_j^{vi}}{322560}, \quad \text{etc.} \quad (\text{B.6.8})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6,\dots$ (B.6.9)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.6.10)

B.6.1.2 Aproximação do Termo Advectivo - Valor de "Λ" na Face com CDS-2

Para achar o valor da variável "T" na face usando o CDS-2, somaremos as Eqs. (B.5.4) e (B.5.5), e reorganizamos de modo que,

$$\Lambda_j = \frac{\Lambda_{j+1} + \Lambda_{j-1}}{2} - \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{4} - \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{h^4}{192} - \Lambda_j^{vi} \cdot \frac{h^6}{23040} \dots \quad (\text{B.6.11})$$

Como considerado no ítem anterior, se considerarmos "j" a face leste, "j+1" é o valor do nó "E" e "j-1" o valor do nó "P". Se for a oeste, teremos "W" e "P", sempre de acordo com a Fig.B.2.1. Lembrando ainda que, independente de que face considerarmos, o erro de truncamento é o mesmo. Substituindo agora a Eq.(B.4.1) em (B.6.11), temos que:

$$\Lambda_j = \left(\frac{\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}}{2} \right) + \left(\frac{E_{j+1} - E_{j-1}}{2} \right) + \left(-\Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{4} - \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{h^4}{192} - \Lambda_j^{vi} \cdot \frac{h^6}{23040} \dots \right) \quad (\text{B.6.12})$$

que pode ser reescrita da forma:

$$\Lambda_j = (\lambda_j)_{CDS-2} + \varepsilon(\lambda_j)_{CDS-2} + e(\lambda_j)_{CDS-2} \quad (\text{B.6.13})$$

Ou seja, o valor da variável na face é a soma do valor numérico da variável na face, com o erro de truncamento, mais o erro de poluição "carregado" pelo valor numérico da derivada numérica nos nós subsequentes. Temos então que a aproximação numérica da variável na face é representada por,

$$(\lambda_j)_{CDS-2} = \frac{\lambda_{j+1} + \lambda_{j-1}}{2} \quad (\text{B.6.14})$$

O erro de poluição (e) é dado por:

$$e(\lambda_j)_{CDS-2} = \frac{E_{j+1} + E_{j-1}}{2} \quad (\text{B.6.15})$$

E finalmente, o erro de truncamento é representado por:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{CDS-2} = -\Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{8} - \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{h^4}{384} - \Lambda_j^{vi} \cdot \frac{h^6}{46080} \dots \quad (\text{B.6.16})$$

Para o desenvolvimento do trabalho, consideraremos para este caso que a equação geral do erro de truncamento dada pela Eq.(B.4.4), terá aqui seus coeficientes dados por “ e ”, ficando então:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{CDS-2} = e_1.h^2 + e_2.h^4 + e_3.h^6 + \dots \quad (B.6.17)$$

Comparando as Eqs.(B.6.16) e (B.6.17), podemos definir os coeficientes como:

$$e_1 = -\frac{\Lambda_j^{ii}}{8} \quad e_2 = -\frac{\Lambda_j^{iv}}{384} \quad e_3 = \frac{\Lambda_j^{vi}}{46080}; \text{ etc.} \quad (B.6.18)$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6,\dots$ (B.6.19)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.6.20)

B.6.2 UDS / CDS-2

Devido ao fato de já termos descrito no ítem B.6.1 o processo de aproximação e análise *a priori* da aproximação do termo difusivo com CDS-2, suprimiremos aqui esta demonstração, relacionando resultados do ítem já mencionado quando necessário.

Para achar o valor da variável “ Λ ” na face usando o UDS, simplesmente reorganizaremos a Eq. (B.5.5) deixando na seguinte forma:

$$\Lambda_j = \Lambda_{j-1} + \Lambda_j^i \cdot \frac{h}{2} - \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{8} + \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^3}{48} - \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{h^4}{384} + \Lambda_j^v \cdot \frac{h^5}{3840} \dots \quad (B.6.21)$$

Consideraremos o índice “ j ” para a face leste, “ $j+1$ ” é o valor do nó “P”. Se for a oeste, teremos “E”, sempre de acordo com a Fig.B.2.1. Lembrando ainda que, independente de que face considerarmos, o erro de truncamento é o mesmo. Substituindo agora a Eq.(B.4.1) em (B.6.21), temos,

$$\Lambda_j = \lambda_{j-1} + E_{j-1} + \left(\Lambda_j^i \cdot \frac{h}{2} - \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{8} + \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^3}{48} - \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{h^4}{384} + \Lambda_j^v \cdot \frac{h^5}{3840} \dots \right) \quad (B.6.22)$$

Que pode ser reescrita da forma:

$$\Lambda_j = (\lambda_j)_{UDS} + \varepsilon(\lambda_j)_{UDS} + e(\lambda_j)_{UDS} \quad (B.6.23)$$

Ou seja, o valor da variável na face é a soma do valor numérico da variável na face, com o erro de truncamento, mais o erro de poluição "carregado" pelo valor numérico da derivada numérica nos nós subsequentes.

Temos então que a aproximação numérica da variável na face é representada por:

$$(\lambda_j)_{UDS} = \lambda_{j-1} \quad (B.6.24)$$

O erro de poluição (e) é dado por:

$$e(\lambda_j)_{UDS} = E_{j-1} \quad (B.6.25)$$

E finalmente, o erro de truncamento é representado por:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{UDS} = \Lambda_j^i \cdot \frac{h}{2} - \Lambda_j^{ii} \cdot \frac{h^2}{8} + \Lambda_j^{iii} \cdot \frac{h^3}{48} - \Lambda_j^{iv} \cdot \frac{h^4}{384} + \Lambda_j^v \cdot \frac{h^5}{3840} \dots \quad (B.6.26)$$

Para o desenvolvimento do trabalho, consideraremos para este caso que a equação geral do erro de truncamento dada pela Eq.(B.4.4), terá aqui seus coeficientes dados por "o", ficando então:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{UDS} = o_1 \cdot h + o_2 \cdot h^2 + o_3 \cdot h^3 + \dots \quad (B.6.27)$$

Comparando as Eqs.(B.6.26) e (B.6.27), podemos definir os coeficientes como:

$$o_1 = \frac{\Lambda_j^i}{2} \quad o_2 = -\frac{\Lambda_j^{ii}}{8} \quad o_3 = \frac{\Lambda_j^{iii}}{48} \quad ; \text{ etc.} \quad (B.6.28)$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 1,2,3,4,\dots$ (B.6.29)

- Ordem assintótica $p_L = 1$ (B.6.30)

B.6.3 UDS-2 / CDS-2

Por já termos descrito no item B.6.1 o processo de aproximação e análise *a priori* do termo difusivo, com CDS-2, suprimiremos aqui esta demonstração, relacionando resultados do ítem já mencionado quando necessário.

Para achar o valor da variável " Λ " na face usando o UDS-2, multiplicaremos a Eq.(B.5.5) por (3) e subtrairemos a Eq.(B.5.6), resultando:

$$\Lambda_j = \frac{3\Lambda_{j-1} - \Lambda_{j-2}}{2} + \frac{3}{4}\Lambda_j^{ii}.h^2 - \frac{1}{2}\Lambda_j^{iii}.h^3 + \frac{13}{64}\Lambda_j^{iv}.h^4 - \frac{1}{16}\Lambda_j^v.h^5 \dots \quad (\text{B.6.31})$$

Consideraremos o índice “ j ” para a face leste, “ $j-1$ ” é o valor do nó “P”, e “ $j-2$ ” é o valor do nó “W”. Se for a oeste, teremos “W” e “WW”, sempre de acordo com a Fig.B.2.1. Lembrando ainda que, independente de que face considerarmos, o erro de truncamento é o mesmo.

Substituindo agora a Eq.(B.4.1) em (B.6.31), temos que:

$$\Lambda_j = \left(\frac{3\lambda_{j-1} - \lambda_{j-2}}{2} \right) + \left(\frac{3E_{j-1} - E_{j-2}}{2} \right) + \left(\frac{3}{8}\Lambda_j^{ii}.h^2 - \frac{1}{4}\Lambda_j^{iii}.h^3 + \frac{13}{128}\Lambda_j^{iv}.h^4 - \frac{1}{32}\Lambda_j^v.h^5 \dots \right) \quad (\text{B.6.32})$$

Que pode ser reescrita da forma:

$$\Lambda_j = (\lambda_j)_{UDS-2} + \varepsilon(\lambda_j)_{UDS-2} + e(\lambda_j)_{UDS-2} \quad (\text{B.6.33})$$

Ou seja, o valor da variável na face é a soma do valor numérico da variável na face, com o erro de truncamento, mais o erro de poluição "carregado" pelo valor numérico da derivada numérica nos nós subsequentes.

Temos então que a aproximação numérica da variável na face é representada por:

$$(\lambda_j)_{UDS-2} = \frac{3\lambda_{j-1} - \lambda_{j-2}}{2} \quad (\text{B.6.34})$$

O erro de poluição (e) é dado por:

$$e(\lambda_j)_{UDS-2} = \frac{3E_{j-1} - E_{j-2}}{2} \quad (\text{B.6.35})$$

E finalmente, o erro de truncamento é representado por:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{UDS-2} = \frac{3}{4}\Lambda_j^{ii}.h^2 - \frac{1}{2}\Lambda_j^{iii}.h^3 + \frac{13}{64}\Lambda_j^{iv}.h^4 - \frac{1}{16}\Lambda_j^v.h^5 \dots \quad (\text{B.6.36})$$

Para o desenvolvimento do trabalho, consideraremos para este caso que a equação geral do erro de truncamento dada pela Eq.(B.4.4), terá aqui seus coeficientes dados por “ p ”, ficando então:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{UDS-2} = p_1.h^2 + p_2.h^3 + p_3.h^4 + \dots \quad (\text{B.6.37})$$

Comparando as Eqs.(B.6.26) e (B.6.27), podemos definir os coeficientes como:

$$p_1 = \frac{3}{4}\Lambda_j^{ii} \quad p_2 = -\frac{1}{2}\Lambda_j^{iii} \quad p_3 = \frac{13}{64}\Lambda_j^{iv} \quad ; \text{ etc.} \quad (\text{B.6.38})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,3,4,\dots$ (B.6.39)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.6.40)

B.6.4 WUDS

B.6.4.1 Aproximação do Termo Advectivo

Para achar o valor da variável " λ " na face usando o WUDS consideraremos:

$$c_P = \frac{1}{2} + \alpha_e \quad (\text{B.6.41})$$

$$c_E = \frac{1}{2} - \alpha_e \quad (\text{B.6.42})$$

$$c_E + c_P = 1 \quad (\text{B.6.43})$$

$$c_E - c_P = -2.\alpha_e \quad (\text{B.6.44})$$

Multiplicaremos agora a Eq.(B.5.5) por " c_P " e a Eq.(B.5.6) por " c_E " e somaremos estas duas equações. Faremos já as considerações dadas pelas relações das Eqs.(B.6.43) e (B.6.44) para simplificações, resultando:

$$\Lambda_j = (c_{j-1}.\Lambda_{j-1} + c_{j+1}.\Lambda_{j+1}) + \alpha_j.\Lambda_j^i.h - \frac{1}{8}\Lambda_j^{ii}.h^2 + \frac{\alpha_j}{24}\Lambda_j^{iii}.h^3 - \frac{1}{384}\Lambda_j^{iv}.h^4 + \frac{\alpha_j}{1920}\Lambda_j^v.h^5 \dots \quad (\text{B.6.45})$$

Consideraremos o índice j para a face leste, $j-1$ é o valor do nó "P", e $j+1$ é o valor do nó "E". Se for a oeste, teremos "W" e "P", sempre de acordo com a Fig.B.2.1. Lembrando ainda que, independente de que face considerarmos, o erro de truncamento é o mesmo.

Substituindo agora a Eq.(B.4.1) em (B.6.45), temos que:

$$\Lambda_j = (c_{j-1}.\lambda_{j-1} + c_{j+1}.\lambda_{j+1}) + (c_{j-1}.E_{j-1} + c_{j+1}.E_{j+1}) + \left(\alpha_j.\Lambda_j^i.h - \frac{1}{8}\Lambda_j^{ii}.h^2 + \frac{\alpha_j}{24}\Lambda_j^{iii}.h^3 - \frac{1}{384}\Lambda_j^{iv}.h^4 + \dots \right) \quad (\text{B.6.46})$$

Que pode ser reescrita da forma:

$$\Lambda_j = (\lambda_j)_{WUDS} + \varepsilon(\lambda_j)_{WUDS} + e(\lambda_j)_{WUDS} \quad (\text{B.6.47})$$

Ou seja, o valor da variável na face é a soma do valor numérico da variável na face, com o erro de truncamento, mais o erro de poluição "carregado" pelo valor numérico da derivada numérica nos nós subsequentes.

Temos então que a aproximação numérica da variável na face é representada por:

$$(\lambda_j)_{WUDS} = c_{j-1}.\lambda_{j-1} + c_{j+1}.\lambda_{j+1} \quad (\text{B.6.48})$$

O erro de poluição (e) é dado por:

$$e(\lambda_j)_{WUDS} = c_{j-1}.E_{j-1} + c_{j+1}.E_{j+1} \quad (\text{B.6.49})$$

E finalmente, o erro de truncamento é representado por:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{WUDS} = \alpha_j.\Lambda_j^i.h - \frac{1}{8}\Lambda_j^{ii}.h^2 + \frac{\alpha_j}{24}\Lambda_j^{iii}.h^3 - \frac{1}{384}\Lambda_j^{iv}.h^4 + \frac{\alpha_j}{1920}\Lambda_j^v.h^5 \dots \quad (\text{B.6.50})$$

Se considerarmos que:

$$\alpha_j = \frac{(Pe.h)^2}{10 + 2.(Pe.h)^2} \quad (\text{B.6.51})$$

Podemos ter duas situações:

$$\alpha_j = 0 \quad (\text{B.6.52})$$

$$\alpha_j \neq 0 \quad (\text{B.6.53})$$

Para a situação dada pela relação da Eq.(B.6.53) o erro de truncamento é dado pela Eq.(B.6.50), e a ordem assintótica é 1. Para o caso dado pela Eq.(B.6.52), onde alfa é nulo, temos um novo erro de truncamento dado por:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{WUDS} = -\frac{1}{8}\Lambda_j^{ii}.h^2 - \frac{1}{384}\Lambda_j^{iv}.h^4 - \frac{1}{46080}\Lambda_j^{vi}.h^6 \dots \quad (\text{B.6.54})$$

Como refinaremos a malha tanto quanto possível, e considerando esta situação na Eq.(B.6.51), teremos:

$$\alpha_j = \lim_{h \rightarrow 0} \left[\frac{(Pe.h)^2}{10 + 2.(Pe.h)^2} \right] \Rightarrow \alpha_j = 0 \quad (\text{B.6.55})$$

Ou seja, para nosso caso no trabalho, a aproximação do termo advectivo pela FI WUDS, considerando a equação geral do erro de truncamento dada pela Eq.(B.4.4), terá aqui seus coeficientes dados por “ q ”, ficando então:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{WUDS} = q_1.h^2 + q_2.h^4 + q_3.h^6 + \dots \quad (\text{B.6.56})$$

Comparando as Eqs.(B.6.54) e (B.6.56), podemos definir os coeficientes como:

$$q_1 = -\frac{1}{8}\Lambda_j^{ii} \quad p_2 = -\frac{1}{384}\Lambda_j^{iv} \quad p_3 = \frac{1}{16080}\Lambda_j^{vi} \quad ; \text{ etc.} \quad (\text{B.6.57})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6\dots$ (B.6.58)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.6.59)

B.6.4.2 Aproximação do Termo Difusivo

Iniciaremos esta análise considerando que a aproximação para o termo difusivo com o WUDS é dado pela seguinte relação:

$$\Lambda_j^i = \beta_j \cdot \left(\frac{\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1}}{h} \right) \quad (\text{B.6.60})$$

Para achar o valor da variável " λ_j^i " na face usando o WUDS somaremos as Eqs.(B.5.5) e a Eq.(B.5.6), resultando:

$$\Lambda_j^i = \left(\frac{\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1}}{h} \right) - \frac{1}{24}\Lambda_j^{iii}.h^2 + \frac{1}{1920}\Lambda_j^v.h^4 - \frac{1}{322560}\Lambda_j^{vii}.h^6 \dots \quad (\text{B.6.61})$$

Consideraremos o índice j para a face leste, $j-1$ é o valor do nó “P”, e $j+1$ é o valor do nó “E”. Se for a oeste, teremos “W” e “P”, sempre de acordo com a Fig.B.2.1. Lembrando ainda que, independente de que face considerarmos, o erro de truncamento é o mesmo.

Substituiremos agora as Eqs.(B.6.60) e (B.6.61) em Eq.(B.4.3):

$$\varepsilon(\lambda_j^i)_{WUDS} = (1 - \beta_j) \left(\frac{\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1}}{h} \right) - \frac{1}{24} \Lambda_j^{iii} . h^2 + \frac{1}{1920} \Lambda_j^v . h^4 - \frac{1}{322560} \Lambda_j^{vii} . h^6 \dots \quad (\text{B.6.62})$$

Se considerarmos que:

$$\beta_j = \frac{1 + 0,005.(Pe)^2}{1 + 0,05.(Pe)^2} \quad (\text{B.6.63})$$

Podemos ter duas situações:

$$\beta_j = 1 \quad (\text{B.6.64})$$

$$\beta_j \neq 1 \quad (\text{B.6.65})$$

Para a situação dada pela relação da Eq.(B.6.65) o erro de truncamento é dado pela Eq.(B.6.62), e a ordem assintótica é -1. O caso dado pela Eq.(B.6.65), onde beta tem valor um, ocorre quando h tende a zero, ou seja, com o refinamento da malha neste caso temos um novo erro de truncamento dado por:

$$\varepsilon(\lambda_j^i)_{WUDS} = -\frac{1}{24} \Lambda_j^{iii} . h^2 - \frac{1}{1920} \Lambda_j^v . h^4 - \frac{1}{322560} \Lambda_j^{vii} . h^6 \dots \quad (\text{B.6.66})$$

Desta forma, para nosso caso no trabalho, a aproximação do termo difusivo pela FI WUDS, considerando a equação geral do erro de truncamento dada pela Eq.(B.4.4), terá aqui seus coeficientes dados por “ r ”, ficando então:

$$\varepsilon(\lambda_j^i)_{WUDS} = r_1 . h^2 + r_2 . h^4 + r_3 . h^6 + \dots \quad (\text{B.6.67})$$

Comparando as Eqs.(B.6.66) e (B.6.67), podemos definir os coeficientes como:

$$r_1 = -\frac{1}{24} \Lambda_j^{iii} \quad r_2 = \frac{1}{1920} \Lambda_j^v \quad p_3 = \frac{1}{322560} \Lambda_j^{vii} \quad ; \text{ etc} \quad (\text{B.6.68})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6\dots$ (B.6.69)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.6.70)

B.6.5 ALFA

Por já termos descrito no ítem B.6.1 o processo de aproximação e análise *a priori* do termo difusivo com CDS-2, suprimiremos aqui esta demonstração, relacionando resultados do ítem já mencionado quando necessário.

Para achar o valor da variável " λ " na face usando o ALFA, consideraremos o valor de alfa fixo e:

$$\alpha_j = 0,05 \quad (\text{B.6.71})$$

A demonstração do erro *a priori* desta aproximação para o termo advectivo segue exatamente o mesmo roteiro exposto no ítem B.6.4.1, de forma que não faremos o desenvolvimento novamente, indicando somente que é relativo à Eq.(B.6.50), que resulta em:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{ALFA} = s_1.h^1 + s_2.h^2 + s_3.h^3 + \dots \quad (\text{B.6.72})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 1,2,3,4,\dots$ (B.6.73)

- Ordem assintótica $p_L = 1$ (B.6.74)

B.6.6 ADS

Por já termos descrito no ítem B.6.1 o processo de aproximação e análise *a priori* do termo difusivo com CDS-2, suprimiremos aqui esta demonstração, relacionando resultados do ítem já mencionado quando necessário.

A demonstração do erro *a priori* desta aproximação para o termo advectivo segue exatamente o mesmo roteiro exposto no ítem B.6.4.1, de forma que não faremos o desenvolvimento novamente, indicando somente que é relativo à Eq.(B.6.50). Tendo isto como base, precisamos saber que valor o coeficiente alfa irá assumir, para daí então definirmos a ordem *a priori* desta aproximação.

Podemos ver em Marchi (1993) que, para problemas advectivos-difusivos em regime permanente verificamos que se:

$$Pe.h \leq 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha_j^L \leq 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_j = 0 \quad (\text{B.6.75})$$

Consideramos na Eq.(B.6.75) o termo “ $Pe.h$ ” menor ou igual a um, pois com o refino da malha este termo tende a zero.

Desta forma temos o mesmo caso do WUDS para alfa nulo, ou seja:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{ADS} = t_1.h^2 + t_2.h^4 + t_3.h^6 + \dots \quad (\text{B.6.76})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6,\dots$ (B.6.77)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.6.78)

B.6.7 TVD

Por já termos descrito no ítem B.6.1 o processo de aproximação e análise *a priori* do termo difusivo com CDS-2, suprimiremos aqui esta demonstração, relacionando resultados do ítem já mencionado quando necessário.

A demonstração do erro *a priori* desta aproximação para o termo advectivo segue exatamente o mesmo roteiro exposto no ítem B.6.4.1, de forma que não faremos o desenvolvimento novamente, indicando somente que é relativo à Eq.(B.6.50).

Tendo isto como base, precisamos saber que valor o coeficiente alfa irá assumir, para daí então definirmos a ordem *a priori* desta aproximação.

Podemos ver em Marchi (1993) que temos as seguintes possibilidades:

$$-0,5 \leq \alpha_j \leq 0,5 \quad (\text{B.6.79})$$

Este valor depende da seguinte relação:

$$r_j = \frac{\lambda_p^* - \lambda_w^*}{\lambda_E^* - \lambda_p^*} \quad (\text{B.6.80})$$

Sabendo que:

$$Pe = \frac{\rho u h}{\Gamma} \quad (\text{B.6.81})$$

Vemos facilmente que, com o refino da malha o valor de Pe tende a zero, e tendemos a um reforço do efeito difusivo. Isto nos leva a considerar que o termo r_j tenda à unidade, uma

vez que a difusão tende a tornar a distribuição da variável λ linear. Além disto, não existindo gradientes expressivos da variável podemos fazer:

$$\lim_{r_j \rightarrow 1} \Psi_j = \lim_{r_j \rightarrow 1} \text{MAX}[0; \text{MIN}(2.r_j; 1); \text{MIN}(r_j; 2)] \Rightarrow \Psi_j = 1 \quad (\text{B.6.81})$$

Considerando este resultado em:

$$\alpha_j = \frac{1}{2}(1 - \Psi_j) \Rightarrow \alpha_j = 0 \quad (\text{B.6.82})$$

Desta forma temos o mesmo caso do WUDS para alfa nulo, ou seja:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{TVD} = u_1.h^2 + u_2.h^4 + u_3.h^6 + \dots \quad (\text{B.6.83})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2, 4, 6, \dots$ (B.6.84)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.6.85)

B.6.8 PLDS

Consideraremos para aproximação com o PLDS o exposto por Patankar (1980), onde:

$$Pe.h \underbrace{(\Lambda_P - \Lambda_W)}_{UDS} = \underbrace{(\Lambda_E - 2.\Lambda_P + \Lambda_W)}_{CDS-2} . A(|Pe.h|) \quad (\text{B.6.86})$$

Sendo que:

$$A(|Pe.h|) = \left(1 - \frac{|Pe.h|}{10}\right)^5 = \left(1 - \frac{Pe.h}{10}\right)^5 \quad \text{para } 0 \leq Pe.h \leq 10 \quad (\text{B.6.87})$$

$$A(|Pe.h|) = 1 - \frac{Pe}{2}.h + \frac{Pe^2}{10}.h^2 - \frac{Pe^3}{100}.h^3 + \frac{Pe^4}{2000}.h^4 - \frac{Pe^5}{10000}.h^5 \quad (\text{B.6.88})$$

Caso a malha seja refinada com o tamanho do volume de controle tendendo a zero:

$$\lim_{h \rightarrow 0} A(|Pe.h|) = 1 \Rightarrow CDS - 2 \quad (\text{B.6.89})$$

Desta forma temos as seguintes possibilidades de ordens verdadeira e assintótica. Se $h \neq 0$ as ordens verdadeiras são representadas pela Eq.(B.6.73), e tem valores, 1, 2, 3....Caso

contrário, se refinarmos a malha indefinidamente, que é o nosso caso, teremos a aproximação tendendo para o CDS-2 resultando:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6,\dots$ (B.6.90)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.6.91)

B.6.9 QUICK / CDS-2

Por já termos descrito no ítem B.6.1 o processo de aproximação e análise *a priori* da aproximação do termo difusivo com CDS-2, suprimiremos aqui esta demonstração, relacionando resultados do ítem já mencionado quando necessário.

Para obtenção da aproximação QUICK, multiplicaremos a Eq.(B.5.5) por 6/8, a Eq.(B.5.4) por (-1/8) e a Eq.(B.5.6) por (3/8). Somamos os resultados destas operações obtendo:

$$\Lambda_j = \frac{6}{8}\Lambda_{j-1} + \frac{3}{8}\Lambda_{j+1} - \frac{1}{8}\Lambda_{j-2} - \frac{1}{16}\Lambda_j^{iii}.h^3 + \frac{3}{128}\Lambda_j^{iv}.h^4 - \frac{1}{128}\Lambda_j^v.h^5 + \dots \quad (\text{B.6.92})$$

Consideraremos o índice j para a face leste, $j-1$ é o valor do nó "P", e $j-2$ é o valor do nó "W", e $j+1$ é o valor no nó "E".

Substituindo agora a Eq.(B.4.1) em (B.6.31), temos que:

$$\Lambda_j = \left(\frac{6}{8}\lambda_{j-1} + \frac{3}{8}\lambda_{j+1} - \frac{1}{8}\lambda_{j-2} \right) + \left(\frac{6}{8}E_{j-1} + \frac{3}{8}E_{j+1} - \frac{1}{8}E_{j-2} \right) + \left(-\frac{1}{16}\Lambda_j^{iii}.h^3 + \frac{3}{128}\Lambda_j^{iv}.h^4 - \frac{1}{128}\Lambda_j^v.h^5 + \dots \right) \quad (\text{B.6.93})$$

Que pode ser reescrita da forma:

$$\Lambda_j = (\lambda_j)_{\text{QUICK}} + \varepsilon(\lambda_j)_{\text{QUICK}} + e(\lambda_j)_{\text{QUICK}} \quad (\text{B.6.94})$$

Ou seja, o valor da variável na face é a soma do valor numérico da variável na face, com o erro de truncamento, mais o erro de poluição "carregado" pelo valor numérico da derivada numérica nos nós subsequentes. Temos então que a aproximação numérica da variável na face é representada por:

$$(\lambda_j)_{\text{QUICK}} = \frac{6}{8}\lambda_{j-1} + \frac{3}{8}\lambda_{j+1} - \frac{1}{8}\lambda_{j-2} \quad (\text{B.6.95})$$

O erro de poluição (e) é dado por:

$$e(\lambda_j)_{QUICK} = \frac{6}{8}E_{j-1} + \frac{3}{8}E_{j+1} - \frac{1}{8}E_{j-2} \quad (\text{B.6.96})$$

E finalmente, o erro de truncamento é representado por:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{QUICK} = -\frac{1}{16}\Lambda_j^{iii}.h^3 + \frac{3}{128}\Lambda_j^{iv}.h^4 - \frac{1}{128}\Lambda_j^v.h^5 + \dots \quad (\text{B.6.97})$$

Para o desenvolvimento do trabalho, consideraremos para este caso que a equação geral do erro de truncamento dada pela Eq.(B.4.4), terá aqui seus coeficientes dados por “ u ”, ficando então:

$$\varepsilon(\lambda_j)_{QUICK} = u_1.h^3 + u_2.h^4 + u_3.h^5 + \dots \quad (\text{B.6.98})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 3,4,5,\dots$ (B.6.99)

- Ordem assintótica $p_L = 3$ (B.6.100)

B.6.10 QUICK / CDS-4

Por já termos descrito no ítem B.6.9 o processo de aproximação e análise *a priori* da aproximação do termo advectivo com QUICK, suprimiremos aqui esta demonstração, relacionando resultados do ítem já mencionado quando necessário.

Para obtenção da aproximação CDS-4 para o termo difusivo faremos as multiplicações da Eq.(B.5.5) por (-27), a Eq.(B.5.6) por (27), a Eq.(B.5.7) por (-1), e faremos a soma destes resultados com a Eq.(B.5.4), obtendo:

$$\Lambda_j^i = \frac{27.\Lambda_{j+1} - 27.\Lambda_{j-1} + \Lambda_{j-2} - \Lambda_{j+2}}{24.h} + \frac{232}{92160}\Lambda_j^v.h^4 + O(h^6) \quad (\text{B.6.101})$$

Consideraremos o índice j para a face leste, $j-1$ é o valor do nó “P”, e $j-2$ é o valor do nó “W”, $j+1$ é o valor no nó “E”, e $j+2$ é o valor no nó “EE”.

Substituindo agora a Eq.(B.4.1) em (B.6.101), temos que:

$$\Lambda_j^i = \left(\frac{27\lambda_{j+1} - 27\lambda_{j-1} + \lambda_{j-2} - \lambda_{j+2}}{24h} \right) + \left(\frac{27E_{j+1} - 27E_{j-1} + E_{j-2} - E_{j+2}}{24h} \right) + \left(\frac{232}{92160} \Lambda_j^v h^4 + O(h^6) \right) \quad (\text{B.6.102})$$

Que pode ser reescrita da forma:

$$\Lambda_j^i = (\lambda_j^i)_{CDS-4} + \varepsilon(\lambda_j^i)_{CDS-4} + e(\lambda_j^i)_{CDS-4} \quad (\text{B.6.103})$$

Ou seja, o valor da variável na face é a soma do valor numérico da variável na face, com o erro de truncamento, mais o erro de poluição "carregado" pelo valor numérico da derivada numérica nos nós subsequentes.

Temos então que a aproximação numérica da variável na face é representada por:

$$(\lambda_j^i)_{CDS-4} = \frac{27\lambda_{j+1} - 27\lambda_{j-1} + \lambda_{j-2} - \lambda_{j+2}}{24h} \quad (\text{B.6.104})$$

O erro de poluição (e) é dado por:

$$e(\lambda_j^i)_{CDS-4} = \frac{27E_{j+1} - 27E_{j-1} + E_{j-2} - E_{j+2}}{24h} \quad (\text{B.6.105})$$

E finalmente, o erro de truncamento é representado por:

$$\varepsilon(\lambda_j^i)_{CDS-4} = \frac{232}{92160} \Lambda_j^v h^4 + O(h^6) \quad (\text{B.6.106})$$

Para o desenvolvimento do trabalho, consideraremos para este caso que a equação geral do erro de truncamento dada pela Eq.(B.4.4), terá aqui seus coeficientes dados por "z", ficando então:

$$\varepsilon(\lambda_j^i)_{CDS-4} = z_1 h^4 + z_2 h^6 + \dots \quad (\text{B.6.107})$$

Sendo as ordens de seus erros as seguintes:

- Ordens verdadeiras $p_V = 4, 6, \dots$ (B.6.108)

- Ordem assintótica $p_L = 4$ (B.6.109)

B.7 ANÁLISE A *PRIORI* DO ERRO DE TRUNCAMENTO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

B.7.1 PRIMEIRA VARIÁVEL DE INTERESSE – VALOR DE “ Λ ” CENTRAL (N ÍMPAR)

Para obtenção do erro de discretização da primeira variável de interesse, consideraremos somente o erro de truncamento das funções de interpolação envolvidas na obtenção da solução numérica. Isto se explica pelo fato de considerarmos este valor como o valor localizado no centro do volume de controle.

Com isto, deixaremos para apresentar estas ordens mais à frente, quando mostrarmos o valor do erro de truncamento de cada caso estudado no trabalho.

B.7.2 SEGUNDA VARIÁVEL DE INTERESSE – VALOR DE “ Λ ” MÉDIO (REGRA DO RETÂNGULO)

A segunda variável de interesse sofrerá o impacto do erro de truncamento da função de interpolação utilizada na obtenção da solução numérica, assim como o erro de truncamento gerado pela relação numérica utilizada para obtenção da variável, que neste caso está representada pela Eq.(B.3.2).

Iniciaremos a demonstração do erro de discretização da variável pela integral numérica.

B.7.2.1 Resolução da Integral Numérica

Podemos definir a integral analítica sobre um volume “P” qualquer como:

$$I_p = \int_{.xw}^{.xe} \Lambda(x).dx \quad (B.7.1)$$

Fazendo o desenvolvimento desta integral com a série de Taylor entre as faces “w” e “e”, temos como resultado:

$$I_p = \Lambda_p \cdot h + \frac{\Lambda_p''}{24} \cdot h^3 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} \cdot h^5 + \frac{\Lambda_p^{IV}}{322560} \cdot h^7 + \dots \quad (\text{B.7.2})$$

Considerando que a integral numérica sobre um volume de controle “P” é definida por:

$$i_p = \Lambda_p \cdot h \quad (\text{B.7.3})$$

Temos então, substituindo (B.7.3) em (B.7.2):

$$I_p = i_p + \frac{\Lambda_p''}{24} \cdot h^3 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} \cdot h^5 + \frac{\Lambda_p^{IV}}{322560} \cdot h^7 + \dots \quad (\text{B.7.4})$$

Levando em conta que:

$$I_p = i_p + \varepsilon(i_p) \quad (\text{B.7.5})$$

Finalmente, podemos concluir que, o erro de truncamento da integração num volume “P” genérico é:

$$\varepsilon(i_p) = \frac{\Lambda_p''}{24} \cdot h^3 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} \cdot h^5 + \frac{\Lambda_p^{IV}}{322560} \cdot h^7 + \dots \quad (\text{B.7.6})$$

Deixando em sua forma genérica:

$$\varepsilon(i_p) = g_1 \cdot h^3 + g_2 \cdot h^5 + g_3 \cdot h^7 + \dots \quad (\text{B.7.7})$$

B.7.2.2 Demonstração do Valor Médio (Regra do Retângulo)

Iniciando com o valor médio analítico no volume de controle:

$$\bar{\Lambda} = \frac{1}{L} \int_{xw}^{xe} \Lambda(x) \cdot dx \quad (\text{B.7.8})$$

Considerando a equação (B.7.8), e fazendo a integração no domínio, ao invés do volume “P”, temos:

$$\bar{\Lambda} = \frac{1}{L} \int_0^L \Lambda(x) \cdot dx \quad \Rightarrow \quad \bar{\Lambda} = \frac{1}{L} \sum_{p=1}^N I_p \quad (\text{B.7.9})$$

Substituindo a eq. (B.7.2) em (B.7.9), temos:

$$\begin{aligned}\bar{\Lambda} &= \frac{1}{L} \sum_{p=1}^N \left(\Lambda_p . h + \frac{\Lambda_p''}{24} . h^3 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} . h^5 + \frac{\Lambda_p^{IV}}{322560} . h^7 + \dots \right) \\ \bar{\Lambda} &= \frac{h}{L} \sum_{p=1}^N \left(\Lambda_p + \frac{\Lambda_p''}{24} . h^2 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} . h^4 + \frac{\Lambda_p^{IV}}{322560} . h^6 + \dots \right) \\ \bar{\Lambda} &= \frac{h}{L} \sum_{p=1}^N (\Lambda_p) + \frac{h}{L} \sum_{p=1}^N \left(\frac{\Lambda_p''}{24} . h^2 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} . h^4 + \frac{\Lambda_p^{IV}}{322560} . h^6 + \dots \right)\end{aligned}\quad (B.7.10)$$

Substituindo agora a Eq.(B.4.1) em (B.7.10), temos que:

$$\bar{\Lambda} = \frac{h}{L} \sum_{p=1}^N (\lambda_p) + \frac{h}{L} \sum_{p=1}^N (E_p) + \frac{h}{L} \sum_{p=1}^N \left(\frac{\Lambda_p''}{24} . h^2 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} . h^4 + \frac{\Lambda_p^{IV}}{322560} . h^6 + \dots \right) \quad (B.7.11)$$

Considerando que:

$$L = N . h \quad (B.7.12)$$

Podendo reescrever a Eq.(B.7.11) ficando na forma:

$$\bar{\Lambda} = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N (\lambda_p) + \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N (E(\lambda)_p) + \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N \left(\frac{\Lambda_p''}{24} . h^2 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} . h^4 + \frac{\Lambda_p^{IV}}{322560} . h^6 + \dots \right) \quad (B.7.13)$$

Que pode ser representada por:

$$\bar{\Lambda} = \bar{\lambda} + e(\bar{\lambda}) + \varepsilon(\bar{\lambda}) \quad (B.7.14)$$

Ou seja, o valor da média da variável é a soma do valor numérico da média da variável, com o erro de truncamento, mais o erro de poluição "carregado" pelo valor numérico da derivada numérica nos nós subsequentes.

Temos então que a aproximação numérica da média da variável é representada por:

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N (\lambda_p) \quad (B.7.15)$$

O erro de poluição (e) é o erro de discretização trazido pela resolução numérica da variável, e é dado por:

$$e(\bar{\lambda}) = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N (E(\lambda)_p) \quad (B.7.16)$$

E o erro de truncamento dado por:

$$\varepsilon(\bar{\lambda}) = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N \left(\frac{\Lambda_p''}{24} . h^2 + \frac{\Lambda_p'''}{1920} . h^4 + \frac{\Lambda_p^{iv}}{322560} . h^6 + \dots \right) \quad (\text{B.7.17})$$

Temos então que o erro de truncamento toma a forma:

$$\varepsilon(\bar{\lambda}) = \frac{\Lambda''}{24} . h^2 + \frac{\Lambda'''}{1920} . h^4 + \frac{\Lambda^{IV}}{322560} . h^6 + \dots \quad (\text{B.7.18})$$

E deixando na forma genérica:

$$\varepsilon(\bar{\lambda}) = i_1 . h^2 + i_2 . h^4 + i_3 . h^6 + \dots \quad (\text{B.7.19})$$

Ou seja, o erro de truncamento da solução numérica para a média da variável obtida com a regra do retângulo, tem como ordem assintótica e ordens verdadeiras os valores:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2, 4, 6, \dots$ (B.7.20)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.7.21)

B.7.3 TERCEIRA VARIÁVEL DE INTERESSE $\Lambda_{x=1}^i$

Com a terceira variável de interesse ocorre o mesmo fenômeno ocorrido com a segunda, ou seja, ela sofrerá o impacto do erro de truncamento da função de interpolação utilizada na obtenção da solução numérica, assim como o erro de truncamento gerado pela relação numérica utilizada para obtenção da variável, que neste caso está representada pela Eq.(B.3.3).

Para acharmos o erro de truncamento, e conseqüentemente o erro de discretização da aproximação, para obtenção da derivada primeira da variável em $x = 1$, temos que multiplicar a Eq.(B.5.5) por (-9) e somar o resultado à Eq.(B.5.6). Consideraremos para este caso os seguintes características:

$$j = e \quad j - 1 = P \quad j - 2 = W$$

Resultando então:

$$\Lambda_e^i = \frac{8.\Lambda_e - 9.\Lambda_P + \Lambda_W}{3.h} + \frac{3}{8} . \Lambda_e^{iii} . h^2 + \frac{72}{384} . \Lambda_e^{iv} . h^3 - \frac{234}{3840} . \Lambda_e^v . h^4 \dots \quad (\text{B.7.22})$$

Utilizando a relação da Eq.(B.4.1) na Eq.(B.6.15) obtemos:

$$\Lambda_e^i = \left(\frac{8.\lambda_e - 9.\lambda_p + \lambda_w}{3.h} \right) + \left(\frac{8.E_e - 9.E_p + E_w}{3.h} \right) + \left(\frac{3}{8}.\Lambda_e^{iii}.h^2 + \frac{72}{384}.\Lambda_e^{iv}.h^3 - \frac{234}{3840}.\Lambda_e^v.h^4 \dots \right) \quad (\text{B.7.23})$$

Podemos reescrever a Eq.(B.6.15) da seguinte forma:

$$\Lambda_e^i = \lambda_e^i + e(\lambda_e^i) + \varepsilon(\lambda_e^i) \quad (\text{B.7.24})$$

Onde o valor numérico da derivada primeira com UDS-2 é dada por:

$$(\lambda_e^i)_{UDS-2} = \frac{8.\lambda_e - 9.\lambda_p + \lambda_w}{3.h} \quad (\text{B.7.25})$$

O erro de poluição, que é o erro de discretização da variável que vem carregado para compor o erro de discretização total desta variável:

$$e(\lambda_e^i)_{UDS-2} = \frac{8.E_e - 9.E_p + E_w}{3.h} \quad (\text{B.7.26})$$

E finalmente, o erro de truncamento da aproximação para obtenção da variável primeira em $x=1$ é dada por:

$$\varepsilon(\lambda_e^i)_{UDS-2} = \frac{6}{48}.\Lambda_e^{iii}.h^2 + \frac{24}{384}.\Lambda_e^{iv}.h^3 - \frac{76}{3840}.\Lambda_e^v.h^4 \dots \quad (\text{B.7.27})$$

E deixando na forma genérica:

$$\varepsilon(\lambda_e^i)_{UDS-2} = k_1.h^2 + k_2.h^3 + k_3.h^4 + \dots \quad (\text{B.7.28})$$

Ou seja, o erro de truncamento da solução numérica para a média da variável obtida com a regra do retângulo, tem como ordem assintótica e ordens verdadeiras os valores:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,3,4,\dots$ (B.7.29)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.7.30)

B.7.4 QUARTA VARIÁVEL DE INTERESSE – MÉDIA DA NORMA (\bar{l}_1):

Para acharmos o erro de truncamento e conseqüentemente o erro de discretização do valor da média da norma \bar{l}_1 , temos considerar inicialmente que a equação que nos dá esta variável é,

$$\bar{l}_1 = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N |\Lambda_p - \lambda_p| \quad (\text{B.7.31})$$

Considerando a Eq.(B.7.31) podemos ver que o erro de discretização desta variável dependerá da solução numérica da variável λ_p , ou seja, o erro de discretização desta variável será dada pelos erros definidos pela variável I. Desta forma, o que foi comentado para a variável I, em relação aos erros de truncamento dos termos advectivos e difusivos, vale também para a variável IV.

B.8 ANÁLISE A *PRIORI* DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA DA VARIÁVEL I

Iniciaremos a análise a *priori* da variável I com a aproximação CDS-2 para os termos advectivo e difusivo. Para as demais funções de interpolação somente indicaremos suas ordens seguindo o mesmo raciocínio do esquema CDS-2 a seguir.

Finalmente, após analisarmos os erros de truncamento envolvidos na obtenção da solução numérica com as funções de interpolação CDS-2, para a derivada primeira na face (termo difusivo) e para a variável na face (termo advectivo), podemos calcular o erro de discretização total para a primeira variável.

Aplicando à Eq.(A.3.3) os erros analisados para as aproximações e representados pelas Eqs.(B.6.3) e (B.6.13), obtemos a Eq.(B.8.1) como segue:

$$Pe \left[(\lambda_{CDS-2})_j + \varepsilon (\lambda_{CDS-2})_j + e (\lambda_{CDS-2})_j \right] - \left[(\lambda_{CDS-2}^i)_j + \varepsilon (\lambda_{CDS-2}^i)_j + e (\lambda_{CDS-2}^i)_j \right] = 0 \quad (\text{B.8.1})$$

Aplicando ainda o operador diferencial:

$$d(\lambda) = Pe (\lambda_{CDS-2})_j - (\lambda_{CDS-2}^i)_j = 0 \quad (\text{B.8.2})$$

Substituindo a Eq.(B.8.2) em (B.8.1), temos:

$$Pe \left[\varepsilon(\lambda_{CDS-2})_j + e(\lambda_{CDS-2})_j \right] - \left[\varepsilon(\lambda_{CDS-2}^i)_j + e(\lambda_{CDS-2}^i)_j \right] = 0 \quad (B.8.3)$$

Substituindo na Eq.(B.8.3) os erros de poluição dados pelas Eqs.(B.6.5) e (B.6.15), e os erros de truncamento dados pelas Eqs.(B.6.6) e (B.6.16) respectivamente, resulta:

$$Pe \left[(E_j - E_{j-1})_{\lambda_{CDS-2}} + (-\Lambda_j^{ii} \frac{h^2}{4} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^4}{192} - \Lambda_j^{vi} \frac{h^6}{23040} \dots) \right] - \left[(E_j - E_{j-1})_{\lambda_{CDS-2}^i} + (-\Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{24} - \Lambda_j^v \frac{h^4}{1920} + \Lambda_j^{vi} \frac{h^6}{322560} \dots) \right] = 0 \quad (B.8.4)$$

Que é a equação nodal do erro de discretização, ou seja, é a equação que relaciona o erro de discretização (E), com o erro de truncamento (ε). Podemos reescrevê-la ainda no formato abaixo:

$$E_j = E_{j-1} - \frac{1}{Pe-1} \left[\left(Pe \frac{\Lambda_j^{ii}}{4} - \frac{\Lambda_j^{iii}}{24} \right) h^2 + \left(Pe \frac{\Lambda_j^{iv}}{192} - \frac{\Lambda_j^v}{1920} \right) h^4 + \left(Pe \frac{\Lambda_j^{vi}}{23040} - \frac{\Lambda_j^{vi}}{322560} \right) h^6 + \dots \right] \quad (B.8.5)$$

sendo que na equação acima, devemos considerar os erros de discretização “ E_j ” e “ E_{j-1} ” como a soma dos respectivos erros de discretização dos termos advectivos e difusivos, presentes na Eq.(B.8.4).

Se considerarmos, a partir da Eq.(B.8.5), com o erro de discretização do nó “ j ” analisado, somente a influência do erro de truncamento, desconsiderando o erro de discretização do nó vizinho, teremos então a *equação de discretização local*, dada pela Eq. (B.8.6).

$$E_j \propto - \frac{1}{Pe-1} \left[\left(Pe \frac{\Lambda_j^{ii}}{4} - \frac{\Lambda_j^{iii}}{24} \right) h^2 + \left(Pe \frac{\Lambda_j^{iv}}{192} - \frac{\Lambda_j^v}{1920} \right) h^4 + \left(Pe \frac{\Lambda_j^{vi}}{23040} - \frac{\Lambda_j^{vi}}{322560} \right) h^6 + \dots \right] \quad (B.8.6)$$

Deixando a Eq.(B.8.6) na forma geral do erro de discretização dada pela Eq.(B.4.5), temos:

$$E(\lambda) = F_1 \cdot h^2 + F_2 \cdot h^4 + F_3 \cdot h^6 + \dots \quad (B.8.7)$$

Que nos leva a concluir que as ordens verdadeiras e assintótica da variável, obtida com aproximação CDS-2 tanto para o termo advectivo quanto para o termo difusivo, são dadas por:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6 \dots$ (B.8.8)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.8.9)

Conforme dito anteriormente, para as outras funções de interpolação seguiremos o mesmo procedimento executado com a aproximação CDS-2/CDS-2, motivo pelo qual achamos desnecessário fazer esta demonstração para cada FI. Ficou demonstrado que as ordens verdadeiras da variável I nada mais é que a soma das equações gerais do erro de truncamento, representada pela Eq.(B.4.4), dos termos advectivos e difusivos.

Apesar de já demonstrado, incluiremos na tabela as ordens do esquema CDS-2/CDS-2 como forma de realçar todas as FI's utilizadas, não correndo o risco de ser suprimida em futuras consultas ao trabalho.

Tabela B.1 – Ordens verdadeiras e assintótica do erro de discretização da variável I

Funções de Interpolação	Ordens Verdadeiras Termo Difusivo	Ordens Verdadeiras Termo Advectivo	Ordens Verdadeiras da Variável I	Ordem Assintótica da Variável I
CDS-2 / CDS-2	2, 4, 6	2, 4, 6	2, 4, 6,	2
UDS / CDS-2	2, 4, 6	1, 2, 3,	1, 2, 3,	1
UDS-2 / CDS-2	2, 4, 6	2, 3, 4	2, 3, 4	2
WUDS	2, 4, 6	2, 4, 6	2, 4, 6	2
PLDS	2, 4, 6	2, 4, 6	2, 4, 6	2
ALFA / CDS-2	2, 4, 6	1, 2, 3,	1, 2, 3,	1
ADS / CDS-2	2, 4, 6	2, 4, 6	2, 4, 6	2
TVD / CDS-2	2, 4, 6	2, 4, 6	2, 4, 6	2
QUICK / CDS-2	2, 4, 6	3, 4,5.	2, 3, 4	2
QUICK / CDS-4	4, 6	3, 4,5.	3, 4, 5.	3

B.9 ANÁLISE A *PRIORI* DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA DA VARIÁVEL II

B.9.1 CDS-2/CDS-2

Para obtenção, a *priori*, da ordem do erro de discretização da média da variável, teremos inicialmente que voltar a considerar a Eq.(B.7.14), que nos dá a composição do erro de discretização da média da variável. Através deste equação, podemos ver que o valor exato da média da variável é a soma de seu valor numérico, mais o erro de truncamento da

aproximação para obtenção deste valor numérico, mais um erro de poluição, que na verdade é o erro de discretização carregado pela obtenção do valor nodal da variável.

Desta forma, o valor do erro de truncamento da 2ª variável será a soma do erro de truncamento da solução numérica da variável, adicionado do erro de truncamento da variável, que neste caso resulta da soma das Eqs.(B.7.19) com a Eq.(B.8.7).

Representaremos o resultado desta soma, deixando na forma genérica como:

$$E(\bar{\lambda}) = G_1.h^2 + G_2.h^4 + G_3.h^6 + \dots \quad (\text{B.9.1})$$

Sendo que, cada coeficiente G, é a soma dos coeficientes “i” da Eq.(B.7.19) mais o coeficiente “F” da Eq.(B.8.7). Portanto, as ordens verdadeiras e assintóticas desta variável com esta FI resulta:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6,\dots$ (B.9.2)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.9.3)

Conforme dito anteriormente, para as outras funções de interpolação seguiremos o mesmo procedimento executado com a aproximação CDS-2/CDS-2, motivo pelo qual achamos desnecessário fazer esta demonstração para cada FI, uma vez que ficou claro que as ordens verdadeiras da variável II nada mais é que a soma das equações gerais do erro de truncamento, representada pela Eq.(B.4.4), da variável I e da aproximação da variável II.

Apesar de já demonstrado, incluiremos na tabela as ordens do esquema CDS-2/CDS-2 como forma de realçar todas as FI's utilizadas, não correndo o risco de ser suprimida em futuras consultas ao trabalho.

Tabela B.2 – Ordens verdadeiras e assintótica do erro de discretização da variável II

Funções de Interpolação	Ordens Verdadeiras Variável I	Ordens Verdadeiras Variável II	Ordens Verdadeiras Total Variável II	Ordem Assintótica da Variável II
CDS-2 / CDS-2	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
UDS / CDS-2	1, 2, 3,	2, 4, 6,	1, 2, 3,	1
UDS-2 / CDS-2	2, 3, 4	2, 4, 6,	2, 3, 4	2
WUDS	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
PLDS	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
ALFA / CDS-2	1, 2, 3,	2, 4, 6,	1, 2, 3,	1
ADS / CDS-2	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
TVD / CDS-2	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
QUICK / CDS-2	2, 3, 4,	2, 4, 6,	2, 3, 4	2
QUICK / CDS-4	3, 4, 5,	2, 4, 6,	2, 3, 4,	2

B.10 ANÁLISE A PRIORI DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICAS DA VARIÁVEL III

B.10.1 CDS-2 / CDS-2

Para obtenção, *a priori*, da ordem do erro de discretização da derivada primeira da variável em $x=1$ com UDS-2, teremos inicialmente que voltar a considerar a Eq.(B.7.24), que nos dá a composição do erro de discretização da média da variável. Através deste equação, podemos ver que o valor exato da derivada primeira da variável em $x=1$ com UDS-2 é a soma de seu valor numérico, mais o erro de truncamento da aproximação para obtenção deste valor numérico, mais um erro de poluição, que na verdade é o erro de discretização carregado pela obtenção do valor nodal da variável.

Desta forma, o valor do erro de truncamento da 3ª variável será a soma do erro de truncamento da solução numérica da variável, adicionado pelo erro de truncamento da variável, que neste caso resulta da soma das Eqs.(B.7.28) com a Eq.(B.8.7).

Representaremos o resultado desta soma, deixando na forma genérica como:

$$E(\bar{\lambda}) = M_1.h^2 + M_2.h^3 + M_3.h^4 + \dots \quad (\text{B.10.1})$$

Sendo que, cada coeficiente “M”, quando tem índice par, é a soma dos coeficientes “k” da Eq.(B.7.19) mais o coeficiente “F” da Eq.(B.8.7), quando tem índice ímpar é igual ao coeficiente “k” da Eq.(B.7.19).

Portanto, as ordens verdadeiras e assintóticas desta variável com esta FI resulta:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,3,4,\dots$ (B.10.2)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.10.3)

Conforme dito anteriormente, para as outras funções de interpolação seguiremos o mesmo procedimento executado com a aproximação CDS-2/CDS-2, motivo pelo qual achamos desnecessário fazer esta demonstração para cada FI, uma vez que ficou claro que as ordens verdadeiras da variável III nada mais é que a soma das equações gerais do erro de truncamento, que tem a forma da Eq.(B.4.4), da variável I e da aproximação da variável III.

Apesar de já demonstrado, incluiremos na tabela as ordens do esquema CDS-2/CDS-2 como forma de realçar todas as FI's utilizadas, não correndo o risco de ser suprimida em futuras consultas ao trabalho.

Tabela B.3 – Ordens verdadeiras e assintóticas do erro de discretização da variável III

Funções de Interpolação	Ordens Verdadeiras Variável I	Ordens Verdadeiras Variável III	Ordens Verdadeiras Total - Variável III	Ordem Assintótica da Variável III
CDS-2 / CDS-2	2, 4, 6,	2, 3, 4,	2, 3, 4,	2
UDS / CDS-2	1, 2, 3,.....	2, 3, 4,	1, 2, 3,	1
UDS-2 / CDS-2	2, 3, 4	2, 3, 4,	2, 3, 4	2
WUDS	2, 4, 6,	2, 3, 4,	2, 3, 4	2
PLDS	2, 4, 6,	2, 3, 4,	2, 3, 4	2
ALFA / CDS-2	1, 2, 3,.....	2, 3, 4,	1, 2, 3,	1
ADS / CDS-2	2, 4, 6,	2, 3, 4,	2, 3, 4	2
TVD / CDS-2	2, 4, 6,	2, 3, 4,	2, 3, 4	2
QUICK / CDS-2	2, 3, 4	2, 3, 4,	2, 3, 4	2
QUICK / CDS-4	3, 4, 5.	2, 3, 4,	2, 3, 4	2

B.11 ANÁLISE A *PRIORI* DAS ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA DA VARIÁVEL IV

B.11.1 CDS-2 / CDS-2

Conforme já comentado anteriormente, a relação numérica (Eq.(B.7.31)) utilizada para obtenção da variável IV não influenciará no erro de discretização final da variável, que será dada pelo erro de discretização resultante da obtenção da variável I.

Podemos demonstrar isto se considerarmos inicialmente a Eq.(B.7.31) e substituímos nela a Eq.(B.4.1), que relaciona o valor analítico da variável Λ_p , com seu valor numérico λ_p , resultando,

$$\bar{l}_1 = \frac{1}{N} \cdot \sum_1^N |(\lambda_p - E(\lambda_p) - \lambda_p)| \quad (\text{B.11.1})$$

e fazendo as simplificações possíveis resulta,

$$\bar{l}_1 = \frac{1}{N} \cdot \sum_1^N |E(\lambda_p)| \quad (\text{B.11.2})$$

Como $E(\lambda_p)$ é o erro de discretização da variável I, obtido com CDS-2/CDS-2, para este caso, representado pela Eq.(B.8.6), a equação geral do erro de discretização para a variável IV, quando utilizado os esquemas CDS-2/CDS-2 resulta:

$$E(\bar{\lambda}) = N_1.h^2 + N_2.h^4 + N_3.h^6 + \dots \quad (\text{B.11.3})$$

Portanto, as ordens verdadeiras e assintóticas desta variável com esta FI resulta:

- Ordens verdadeiras $p_V = 2,4,6,\dots$ (B.11.4)

- Ordem assintótica $p_L = 2$ (B.11.5)

Conforme dito anteriormente, para as outras funções de interpolação seguiremos o mesmo procedimento executado com a aproximação CDS-2/CDS-2, motivo pelo qual achamos desnecessário fazer esta demonstração para cada FI, uma vez que ficou claro que as ordens verdadeiras da variável IV nada mais é que o erro de truncamento da variável I.

Apesar de já demonstrado, incluiremos na tabela as ordens do esquema CDS-2/CDS-2 como forma de realçar todas as FI's utilizadas, não correndo o risco de ser suprimida em futuras consultas ao trabalho.

Tabela B.4 – Ordens verdadeiras e assintótica do erro de discretização da variável IV

Funções de Interpolação	Ordens Verdadeiras Variável I	Ordens Verdadeiras Variável IV	Ordens Verdadeiras Total Variável IV	Ordem Assintótica da Variável IV
CDS-2 / CDS-2	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
UDS / CDS-2	1, 2, 3,.....	1, 2, 3,.....	1, 2, 3,.....	1
UDS-2 / CDS-2	2, 3, 4	2, 3, 4	2, 3, 4	2
WUDS	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
PLDS	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
ALFA/ CDS-2	1, 2, 3,.....	1, 2, 3,.....	1, 2, 3,.....	1
ADS / CDS-2	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
TVD / CDS-2	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2, 4, 6,	2
QUICK / CDS-2	2, 3, 4	2, 3, 4	2, 3, 4	2
QUICK / CDS-4	3, 4, 5.	3, 4, 5.	3, 4, 5.	3

This document was created with Win2PDF available at <http://www.win2pdf.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.
This page will not be added after purchasing Win2PDF.