

ARILEIDE CRISTINA ALVES

**VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA EQUAÇÃO DE
LAPLACE 2D COM MALHAS TRIANGULARES
E MÚLTIPLAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR, na área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi
Co-orientador: Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki

CURITIBA

2010

TERMO DE APROVAÇÃO

ARILEIDE CRISTINA ALVES

VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA EQUAÇÃO DE LAPLACE 2D COM MALHAS TRIANGULARES E MÚLTIPLAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON

Tese aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica, área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos, do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná.

BANCA EXAMINADORA

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

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

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

Prof. Cristovão V. S. Fernandes, PhD
Depto. Hidraulica e Saneamento, UFPR

Prof. Dr. Nathan Mendes
Centro de Ciências Exatas e Tecnologia, PUCPR

*São fúteis e cheias de erros as ciências
que não nasceram da experimentação,
mãe de todo conhecimento.*

Leonardo da Vinci

AGRADECIMENTOS

A Deus, pelo milagre que é a vida. Aos meus pais, pela minha vida, e pelos constantes cuidados com ela. Ao amor incondicional da minha amada família e preciosos amigos.

Agradeço, imensamente, à estimada pessoa e ao Professor Dr. Carlos Henrique Marchi, por organizar minhas idéias; por orientar os caminhos necessários para cumprimento deste trabalho; por ser um exemplo excelente de conduta acadêmica e postura profissional; e pela sua contribuição maior, conduzir-me na conquista de um sonho pessoal. Agradeço a oportunidade de convivência, os conhecimentos transmitidos, toda ajuda fornecida, o acompanhamento paciente e dedicado da pessoa e do Professor Dr. Luciano Kiyoshi Araki. Serão sempre meus modelos de excelência.

Aos colegas do curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PGMEC), em especial à Roberta e à Simone; esse trabalho foi, sem dúvida, enriquecido com suas contribuições. Agradeço por ter a oportunidade de pertencer ao Departamento de Engenharia Mecânica (DEMEC) da Universidade Federal do Paraná, mais especificamente ao PGMEC; por ter as portas do Laboratório de Experimentação Numérica (LENA) sempre abertas; pelo convívio com os colegas: Professor Dr. Márcio, Cosmo, Leandro, Fabiane e Fabiana, que, de uma forma ou outra, com sugestões, referências ou companhia no percurso, auxiliaram no cumprimento dessa tarefa.

Agradeço ainda, aos membros participantes da banca examinadora: Professor Dr. Nathan Mendes, Professor Dr. Cristóvão Vicente Scapulatempo Fernandes, Professor Dr. João Flávio Vieira de Vasconcellos e Professor Dr. Antônio Fábio Carvalho da Silva, por sugestões valiosas que ajudaram a aprimorar teórica e esteticamente este trabalho.

Muito obrigada!

RESUMO

O objetivo principal deste trabalho é verificar soluções numéricas para o problema da condução de calor bidimensional, cuja equação governante é a Equação de Laplace. O erro numérico, ou de discretização, é causado apenas por erros de truncamento; não são considerados os erros de arredondamento, de iteração e de programação. As soluções numéricas são obtidas com o Método dos Volumes Finitos (MVF) e o erro de discretização é reduzido com o Método das Múltiplas Extrapolações de Richardson (MER). O problema é linear, com condições de contorno de Dirichlet. A aplicação das condições de contorno é feita por meio de volumes fictícios, em um domínio de cálculo quadrangular de lado unitário, discretizado com malhas triangulares e quadrangulares, refinadas sistematicamente em um sistema de coordenadas cartesianas. As funções de interpolação usadas do tipo CDS-2, UDS-1 para os fluxos e integração numérica via regra do retângulo. A razão de refino entre malhas foi considerada constante e igual a 2. Para acelerar a convergência na obtenção das soluções numéricas é aplicado o *Algebraic Multigrid* (AMG) em malhas triangulares e o *Geometric Multigrid* (GMG) em malhas quadrangulares. Verificou-se que para todas as variáveis de interesse, a ordem assintótica estimada *a priori* foi confirmada pelo experimento numérico; MER é eficiente na redução do erro de discretização em malhas triangulares e que o desempenho do modelo numérico proposto foi melhor em malhas quadrangulares. O cálculo do erro numérico foi possível devido ao fato das soluções analíticas de todas as variáveis serem conhecidas.

Palavras-chave: Método dos Volumes Finitos. Malhas Triangulares. Múltiplas Extrapolações de Richardson.

ABSTRACT

The main purpose of this work is to verify numerical solutions for the constant properties two-dimensional steady state heat transfer problem, without heat generation which governing differential equation is the Laplace one. The numerical error, or discretization error, is just caused by truncation errors; the round-off, iteration and programming errors are not considered. The numerical solutions are obtained with the Finite Volume Method (FVM) and the discretization error is reduced with the Multiple Richardson's Extrapolations (MRE). The problem is linear, with Dirichlet boundary conditions. All the boundary conditions defined in the mathematical model are approached by ghost volumes, in a two-dimensional calculation domain, a square of unitary side, discretized with triangular and quadrangular grids, systematically refined in the Cartesian coordinates system. The interpolation functions used were the CDS-2 and UDS-1 for the fluxes, while for the numerical integration was used the rectangle rule. The grid refinement ratio was considered constant and equals to 2. To accelerate the convergence during the obtainment of the numerical solutions, the Algebraic Multigrid is applied (AMG) in triangular grids and Geometric Multigrid (GMG) in quadrangular grids. It was verified, for all variables of interest, that the a priori asymptotic order was confirmed by numeric experiments; MRE is efficient in the reduction of the discretization errors in triangular grids and the performance of the proposed numeric model was better in quadrangular grids. The estimative of the numerical error was possible because the exact analytical solutions of all the variables were known.

Keywords: Finite Volumes Method. Triangular Grids, Multiple Richardson's Extrapolation.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1.1: ABORDAGEM DE UM PROBLEMA REAL	17
FIGURA 1.2: ERROS ENVOLVIDOS NA RESOLUÇÃO DE UM PROBLEMA	19
FIGURA 1.3: TIPOS DE MALHAS PARA DISCRETIZAÇÃO DE DOMÍNIOS	21
FIGURA 1.4: TG E DISTÂNCIA ENTRE OS NÓS	26
FIGURA 1.5: QG E DISTÂNCIA ENTRE NÓS	26
FIGURA 2.1(a): DIAGRAMA DE VORONOI	37
FIGURA 2.1(b): TRIANGULAÇÃO DE DELAUNAY	37
FIGURA 2.2: MALHA 1D UNIFORME DE NÓS-CENTRADOS ENTRE FACES.....	42
FIGURA 2.3: FRONTEIRA NÃO-ALINHADA.....	47
FIGURA 3.1: REPRESENTAÇÃO GEOMÉTRICA DO DOMÍNIO.....	66
FIGURA 3.2 (a): PRIMEIRA MALHA, 4 ELEMENTOS TRIANGULARES	70
FIGURA 3.2 (b): SEGUNDA MALHA, 16 ELEMENTOS TRIANGULARES	70
FIGURA 3.3: MALHA TRIANGULAR MAIS GROSSA.....	72
FIGURA 3.4: ELEMENTO PARA CÁLCULO DE VETORES NORMAIS	73
FIGURA 3.5: VOLUME INTERNO COM TRÊS VIZINHOS REAIS	74
FIGURA 3.6: VOLUME DE CONTROLE FICTÍCIO AO NORTE	81
FIGURA 3.7: REGRA DO RETÂNGULO	82
FIGURA 3.8: VOLUMES DE CONTROLE PARA ESTIMATIVA <i>A PRIORI</i>	85
FIGURA 3.9: CONTORNO LESTE.....	88
FIGURA 3.10: OSCILAÇÃO DO ERRO PARA MALHA COM 100 ELEMENTOS.....	93
FIGURA 3.11: OSCILAÇÃO DO ERRO PARA MALHA COM 25 ELEMENTOS.....	94
FIGURA 4.1: ERROS T_c	100
FIGURA 4.2: ORDENS DO ERRO DE T_c (TG)	102
FIGURA 4.3: ORDENS DO ERRO DE T_c (QG).....	103
FIGURA 4.4: ERROS T_m	104
FIGURA 4.5: ORDENS DO ERRO DE T_m (TG)	105
FIGURA 4.6: ORDENS DO ERRO DE T_m (QG).....	106
FIGURA 4.7: ERROS q_e	107
FIGURA 4.8: ORDENS DO ERRO DE q_e (TG)	107
FIGURA 4.9: ORDENS DO ERRO DE q_e (QG).....	108
FIGURA 4.10: ERROS L	109

FIGURA 4.11: ORDENS DO ERRO DE L (TG).....	110
FIGURA 4.12: ORDENS DO ERRO DE L (QG).....	111
FIGURA 4.13: NÓS ENVOLVIDOS NO CÁLCULO DE T_c COM QG NÍVEL 1.....	112
FIGURA 4.14: NÓS ENVOLVIDOS NO CÁLCULO DE T_c COM QG NÍVEL 2.....	113
FIGURA 4.15: NÓS ENVOLVIDOS NO CÁLCULO DE T_c COM TG NÍVEL 1.....	114
FIGURA 4.16: NÓS ENVOLVIDOS NO CÁLCULO DE T_c COM TG NÍVEL 2.....	114
FIGURA 4.17: ERROS T_c VIA MÉDIA ARITMÉTICA.....	116
FIGURA 4.18: ORDENS APARENTES T_c (TG).....	116
FIGURA 4.19: ORDENS APARENTES T_c (QG).....	117
FIGURA B1: MALHA CARTESIANA BIDIMENSIONAL.....	135
FIGURA B2: GRÁFICO DA MALHA TRIANGULAR.....	136
FIGURA B3: VETOR COM INCLINAÇÃO DA RETA SUPORTE NEGATIVA.....	137
FIGURA B4: ELEMENTO PARA O CÁLCULO DE VETORES NORMAIS.....	138
FIGURA C1: VOLUME DE CONTROLE FICTÍCIO AO LESTE.....	142
FIGURA C2: VOLUME DE CONTROLE FICTÍCIO AO SUL.....	143
FIGURA C3: VOLUME DE CONTROLE FICTÍCIO AO OESTE.....	144
FIGURA D1: MALHA PARA DEDUÇÃO DAS APROXIMAÇÕES.....	145
FIGURA D2: REPRESENTAÇÃO DO CONTORNO LESTE.....	150
FIGURA E1: ERROS q_n	165
FIGURA E2: ORDENS DO ERRO DE q_n (TG).....	165
FIGURA E3: ORDENS DO ERRO DE q_n (QG).....	166
FIGURA E4: ERROS q_w	166
FIGURA E5: ORDENS DO ERRO DE q_w (TG).....	167
FIGURA E6: ORDENS DO ERRO DE q_w (QG).....	167
FIGURA E7: ERROS q_s	168
FIGURA E8: ORDENS DO ERRO DE q_s (TG).....	168
FIGURA E9: ORDENS DO ERRO DE q_s (QG).....	169
FIGURA A1: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL T_c (AMG).....	169
FIGURA A2: LOG MÓDULO DE ERROS VARIÁVEL T_c (AMG).....	174
FIGURA A3: MÓDULO DE (E) E (U) VARIÁVEL T_c (AMG).....	174

LISTA DE TABELAS

TABELA 1.1 COMPARAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS DE SOLUÇÃO.....	18
TABELA 1.2 COORDENADAS E DISTÂNCIAS ENTRE CENTRÓIDES NA TG	26
TABELA 1.3 COORDENADAS E DISTÂNCIAS ENTRE CENTRÓIDES NA QG.....	27
TABELA 3.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE.....	69
TABELA 3.2 DADOS SOBRE AS MALHAS UTILIZADAS	71
TABELA 3.3 ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICAS DO ERRO - TG	89
TABELA 3.4 NOTAÇÃO ADOTADA PARA Eq.(3.53) e Eq.(3.54)	90
TABELA 3.5 EXTRAPOLAÇÃO m NA MALHA g ($T_{g,m}$)	91
TABELA 3.6 <i>MULTIGRID</i> ALGÉBRICO E GEOMÉTRICO	95
TABELA 3.7: ENTRADAS PARA O ANALISADOR RICHARDSON_3P0	97
TABELA 4.1: T_c ANALÍTICA	115
TABELA A1: DADOS GERAIS DA MALHA MAIS GROSSA	133
TABELA A2: COORDENADAS DOS NÓS DA MALHA MAIS GROSSA.....	133
TABELA A3: CENTRÓIDES DA MALHA MAIS GROSSA	134
TABELA A4: CONECTIVIDADE DA MALHA MAIS GROSSA	134
TABELA B1: ELEMENTOS DA MALHA E SEUS BARICENTROS	136
TABELA B2: MATRIZ DE COEFICIENTES DO SISTEMA ALGÉBRICO	141
TABELA D1: ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICAS DO ERRO.....	151
TABELA E1: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL TC (AMG).....	152
TABELA E2: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL TC (GMG).....	151
TABELA E3: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL TC (AMG).....	153
TABELA E4: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL TC (GMG).....	153
TABELA E5: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL TC (AMG).....	154
TABELA E6: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL TM (GMG)	154
TABELA E7: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL TM (AMG).....	155
TABELA E8: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL TM (GMG).....	155
TABELA E9: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL Q_E (AMG).....	156
TABELA E10: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL Q_E (GMG).....	156
TABELA E11: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL Q_E (AMG).....	157
TABELA E12: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL Q_E (GMG).....	157
TABELA E13: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL Q_N (AMG).....	158

TABELA E14: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL Q_N (GMG).....	158
TABELA E15: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL Q_N (AMG).....	159
TABELA E16: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL Q_N (GMG).....	159
TABELA E17: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL Q_W (AMG)	160
TABELA E18: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL Q_W (GMG)	160
TABELA E19: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL Q_W (AMG)	161
TABELA E20: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL Q_W (GMG)	161
TABELA E21: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL Q_S (AMG)	162
TABELA E22: ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL Q_S (GMG)	162
TABELA E23: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL Q_S (AMG)	163
TABELA E24: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL Q_S (GMG)	163
TABELA E25: ERRO PARA VARIÁVEL L (AMG E GMG)	164
TABELA E26: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL L (AMG)	164
TABELA E27: ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL L (GMG)	165

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AMG	<i>Algebraic Multigrid</i>
BITS	<i>Binary digits</i>
CDS-2	<i>Central Differencing Scheme</i> de 2ª ordem
CFD	Computational Fluid Dynamics
CHT	Computational Heat Transfer
CPU	Central Processing Unit
EDP	Equação Diferencial Parcial
EDPs	Equações Diferenciais Parciais
Eq.	Equação
Fig.	Figura
GB	Unidade de medida da informação na memória (<i>GigaByte</i>)
GCI	<i>Grid Convergence Index</i>
GHz	Velocidade do processador (<i>GigaHertz</i>)
GMG	<i>Geometric Multigrid</i>
LENA	Laboratório de Experimentação Numérica
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MER	Múltiplas Extrapolações de Richardson
MVF	Método dos Volumes Finitos
QG	<i>Quadrangular Grid</i> (malha quadrangular)
Tab.	Tabela
TG	<i>Triangular Grid</i> (malha triangular)
VC	Volume de controle

LISTA DE SÍMBOLOS

dA	elemento de área de superfície
dV	elemento de volume
e	face ao leste do volume de controle com centróide em P
E	centróide do volume de controle ao leste de P
h	métrica da malha
h_1	distância entre P e V_1 nas malhas triangulares
h_2	distância entre P e V_2 nas malhas triangulares
h_3	distância entre P e V_3 nas malhas triangulares
k	condutividade térmica
L^0	norma do resíduo na iteração zero
L^n	norma do resíduo na iteração n
L	comprimento do domínio de cálculo
L	média da Norma L_1 do Erro de Discretização
l_q	distância do nó da malha ao centro do domínio em QG para T_c
l_t	distância do nó da malha ao centro do domínio em TG para T_c
M	número de malhas nas múltiplas extrapolação de Richardson
n	face ao norte do volume de controle principal
N	número de volumes de controle na malha
N	centróide do volume de controle norte de P
M, N	vetor e matriz associados ao sistema algébrico de equações discretizadas
P	centróide do volume de controle principal
PE	ordem aparente do erro numérico
PL	ordem assintótica do erro numérico
PU	ordem aparente do erro numérico
PU(Tbi_PU)	ordem aparente da terceira ordem verdadeira
PU(Th)	ordem aparente da primeira ordem verdadeira
PU(Ti_PU)	ordem aparente da segunda ordem verdadeira
PV	ordem verdadeira do erro numérico
\vec{q}	vetor fluxo de calor
q_e	taxa de transferência de calor ao leste

q_n	taxa de transferência de calor ao norte
q_s	taxa de transferência de calor ao sul
q_w	taxa de transferência de calor ao oeste
s	face ao sul do volume de controle principal
R^n	resíduo na iteração n
S^ϕ	termo fonte
S	centróide do volume de controle ao sul de P
T	campo de temperaturas
T_c	temperatura no centro do domínio
T_m	temperatura média no domínio
Tol	tolerância admitida para interromper o processo iterativo
\vec{V}	vetor de velocidade na dimensão considerada
V_1	centróide do primeiro vizinho do volume de controle principal
V_2	centróide do segundo vizinho do volume de controle principal
V_3	centróide do terceiro vizinho do volume de controle principal
w	face ao oeste do volume de controle com centróide em P
W	centróide do volume de controle ao oeste de P
x	coordenada espacial
y	coordenada espacial

Letras gregas

λ^n	solução numérica da variável de interesse na iteração n .
Γ	coeficiente de difusão
ρ	massa específica do fluido
ϕ_∞	estimativa da solução analítica exata obtida por extrapolação
∇	operador vetorial <i>nabla</i>
Φ	solução analítica exata de uma variável de interesse
ϕ	solução numérica de uma variável de interesse
$\phi_{g,m}$	solução numérica na malha g com m extrapolações de Richardson
Δx	tamanho do volume de controle

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	16
1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO	16
1.2 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA	24
1.3 IMPORTÂNCIA DO PROBLEMA	27
1.4 OBJETIVOS DO TRABALHO	30
1.5 ESTRUTURA DO TRABALHO	31
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	32
2.1 DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL	32
2.2 DISCRETIZAÇÃO DE DOMÍNIOS	35
2.3 DISCRETIZAÇÃO DE EQUAÇÕES	38
2.4 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS	41
2.5 ERRO NUMÉRICO	44
2.6 ESTIMATIVAS DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO	49
2.6.1 Estimativas <i>a priori</i>	51
2.6.2 Estimativas <i>a posteriori</i>	53
2.7 ESTIMADOR DE RICHARDSON	53
2.8 MÉTODO DAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON.....	57
2.9 <i>MULTIGRID</i>	62
3. METODOLOGIA.....	64
3.1 PROBLEMA DA CONDUÇÃO DE CALOR	64
3.2 MODELO MATEMÁTICO	65
3.3 VARIÁVEIS DE INTERESSE	66
3.4 MODELO NUMÉRICO.....	69
3.4.1 Geração da malha	69
3.4.2 Discretização da equação - MVF.....	72
3.4.3 Discretização das variáveis de interesse	81
3.4.4 Análise do erro de discretização <i>a priori</i>	84
3.4.5 Múltiplas extrapolações de richardson	89
3.4.6 <i>Multigrid</i>	91
3.5 ASPECTOS GERAIS DA IMPLEMENTAÇÃO	96

4. RESULTADOS	99
4.1 TEMPERATURA NO CENTRO DO DOMÍNIO (T_c).....	99
4.2 TEMPERATURA MÉDIA (T_m).....	104
4.3 TAXA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NA FACE LESTE (q_e)	105
4.4 MÉDIA DA NORMA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO (L).....	109
4.5 OBSERVAÇÕES GERAIS PARA TODAS AS VARIÁVEIS AVALIADAS	110
4.6 ENSAIO DE ANÁLISE DO DESEMPENHO DAS MALHAS	111
5. CONCLUSÃO	118
5.1 ESCOPO DO TRABALHO	118
5.2 CONCLUSÃO GERAL	119
5.3 CONTRIBUIÇÕES	120
5.4 TRABALHOS FUTUROS	121
REFERÊNCIAS	122
APÊNDICE A DADOS SOBRE MALHAS	133
APÊNDICE B APLICAÇÕES DO MVF	135
B1 APLICAÇÃO DO MVF EM MALHA QUADRANGULAR.....	135
B2 APLICAÇÃO DO MVF EM MALHA TRIANGULAR	136
APÊNDICE C DISCRETIZAÇÃO EM VOLUMES DE CONTROLE FICTÍCIOS	142
APÊNDICE D ANÁLISE A PRIORI EM MALHAS QUADRANGULARES	145
APÊNDICE E TABELAS E GRÁFICOS DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE	152
ANEXOS	170
A1 MODELO NUMÉRICO DO PROGRAMA RICHARDSON_ 3p0	170
A2 DADOS DE SAIDA DO RICHARDSON_ 3p0 PARA T_c	172

1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo, é feita uma contextualização para o problema abordado, incluindo breve discussão sobre Dinâmica dos Fluidos Computacional e verificação de soluções numéricas. Além disso, há considerações referentes aos métodos mais comumente empregados tanto para a discretização de domínios, quanto para a discretização das equações diferenciais que modelam matematicamente um problema físico. São apresentadas a definição e forma global do problema abordado. Com base na literatura, é justificada a realização deste trabalho, destacando-se tanto a relevância quanto as oportunidades de contribuição. Os objetivos são geral e especificamente expostos, bem como a descrição sintética da metodologia empregada. A estrutura do trabalho é apresentada na última seção do capítulo.

1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO

Durante as últimas três décadas, a simulação numérica vem assumindo um papel crescentemente importante na análise e *design* da criação de produtos e processos na engenharia (MINKOWYCZ et al., 2006). Tais aplicações são factíveis devido ao vertiginoso desenvolvimento de computadores de alta velocidade e grande capacidade de armazenamento. Outros fatores motivadores são a versatilidade e generalidade dos métodos numéricos para simulação de problemas, bem como a relativa simplicidade de aplicação das técnicas.

Na resolução de um problema de engenharia, duas abordagens são possíveis: a que utiliza métodos teóricos (analíticos ou numéricos) e a que utiliza métodos experimentais. A Fig. 1.1 esboça as ferramentas disponíveis (MALISKA, 2004) para projeto ou análise de um problema real.

Na prática, a diferença entre os métodos analíticos e numéricos está na complexidade das equações diferenciais que modelam o problema físico a ser resolvido. As soluções analíticas são de grande importância, pois, são utilizadas na verificação numérica e auxiliam no desenvolvimento de sua robustez. Quando satisfatória e suficiente, isto é, dentro dos níveis de precisão e exigência necessários, a solução analítica deve ser preferida à numérica. Isso corrobora com a regra básica da engenharia que prima por adequar o uso da ferramenta às dimensões do problema abordado. No entanto, o fato de não haver solução analítica conhecida para a maioria das equações diferenciais, justifica a abordagem experimental, sempre que apropriado, ou a computacional, através de métodos numéricos.

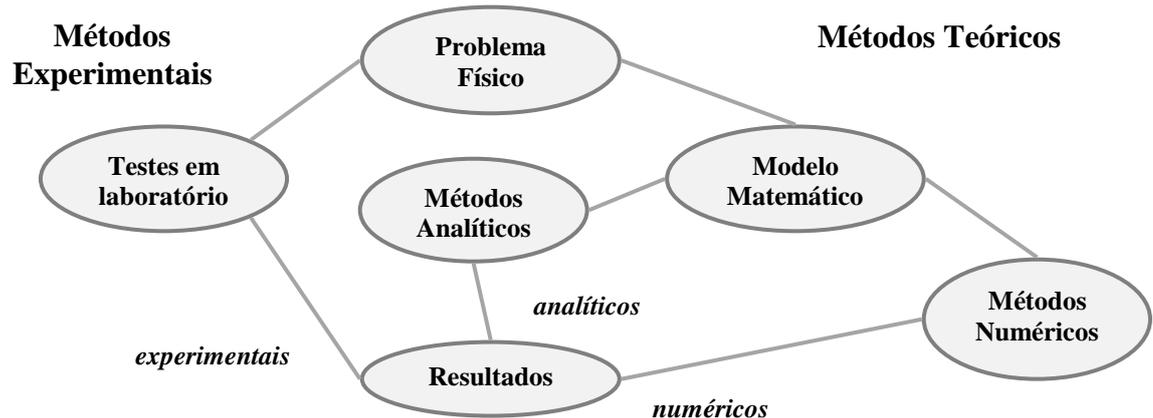


FIGURA 1.1 - ABORDAGEM DE UM PROBLEMA REAL

Os métodos experimentais levam a vantagem de tratar com a configuração real do problema. Em Coleman e Steele (1999, p. 5-15) há uma avaliação da abordagem experimental de um fenômeno físico por etapas, incluindo desde o planejamento do experimento até a análise dos resultados. Em algumas situações, como na ausência de modelos matemáticos e para geometrias extremamente complexas, métodos experimentais podem representar a única forma de abordagem possível. Em casos passíveis de outras possibilidades, isso seria desejável (COLEMAN e STERN, 1997), considerando-se dificuldades em relação a altos custos, reprodução de condições reais e até mesmo questões de segurança envolvidas na abordagem experimental.

A experimentação (simulação) numérica praticamente não apresenta restrições. Nela podem ser avaliados problemas complexos com condições de contorno gerais. O caminho da engenharia moderna tem a simulação numérica desempenhando um papel decisivo nos custos e qualidade de projetos, interagindo com a experimentação em laboratórios.

O analista térmico industrial, por exemplo, faz uso da *Computational Fluid Dynamics* (CFD) (Dinâmica dos Fluidos Computacional), da *Computational Heat Transfer* (CHT) (Transferência de Calor Computacional) e suas técnicas preliminares em aplicações tão diversas quanto resfriamento de componentes eletrônicos, indústria automotiva, processo de fabricação de vidro, indústria de alimentos, farmacêutica e química, dentre outras.

Com relação às possíveis abordagens para um problema em engenharia, a Tab. 1.1, adaptada de Tannehill et al (1997) estabelece uma sucinta comparação.

Neste texto, a subárea de Fenômenos de Transporte que estuda métodos computacionais para simulação de fenômenos que envolvem fluidos em movimento será chamada CFD. Na área numérica, os dois volumes de Fletcher (1992) trazem uma coletânea das principais técnicas de CFD até o final da década de 1980. O conjunto é uma enciclopédia,

que mostra vários aspectos relevantes à simulação de escoamentos, como discretizações e métodos numéricos apropriados a diferentes classes de escoamentos.

TABELA 1.1 - COMPARAÇÃO ENTRE MÉTODOS DE SOLUÇÃO

Método	Vantagens	Desvantagens
Experimental	- possibilidade de tratar o fenômeno real;	- equipamento exigido; - erros experimentais; - dificuldades de medição; - custo operacional.
Analítico	- representação matemática do fenômeno real; - forma fechada; - mais geral.	- restrita a geometria e problemas simples e lineares; - erros de modelagem.
Numérico	- não há restrição à linearidade; - não há restrição a geometrias e processos complicados; - evolução temporal do processo.	- erros de truncamento; - erros de modelagem; - custo computacional.

FONTE: TANNEHILL et al., (1997)

Por ter sua importância reconhecida, a CFD foi incluída no programa *Grand Challenges* (Grandes Desafios) do governo dos Estados Unidos da América. Esse programa definiu problemas em diversas áreas da ciência e tecnologia, cujas soluções têm grande impacto econômico e científico. A característica comum das questões tratadas nesse programa é que, além de envolverem vários centros de pesquisa, apresentam uma forte demanda por recursos computacionais, principalmente devido às simulações numéricas necessárias. Dentre esses problemas podem ser citados: modelagem atmosférica, oceânica, de escoamentos multifásicos, mapeamento de regiões do cérebro humano e um modelo para o sistema cardiovascular humano (DEVLIN, 2004; TENTNER, 2010).

Além da adaptabilidade e vantagens da aplicação das técnicas numéricas de CFD, é importante que tal ferramenta seja adequada e confiável. A propósito, as duas principais metas em CFD são obter soluções numéricas acuradas e confiáveis (SHYY et al., 2002). Ambas dependem da estimativa do erro numérico. Toda solução numérica contém erro; portanto, é importante estimá-lo porque quando o erro é maior do que o aceitável a confiabilidade do uso da solução numérica fica comprometida. A Fig. 1.2 indica os erros cometidos em cada um dos métodos citados, a saber:

- Nos resultados experimentais: erros experimentais;

- Nas soluções analíticas: erros de modelagem e
- Nas soluções numéricas: erros de modelagem e erros numéricos.

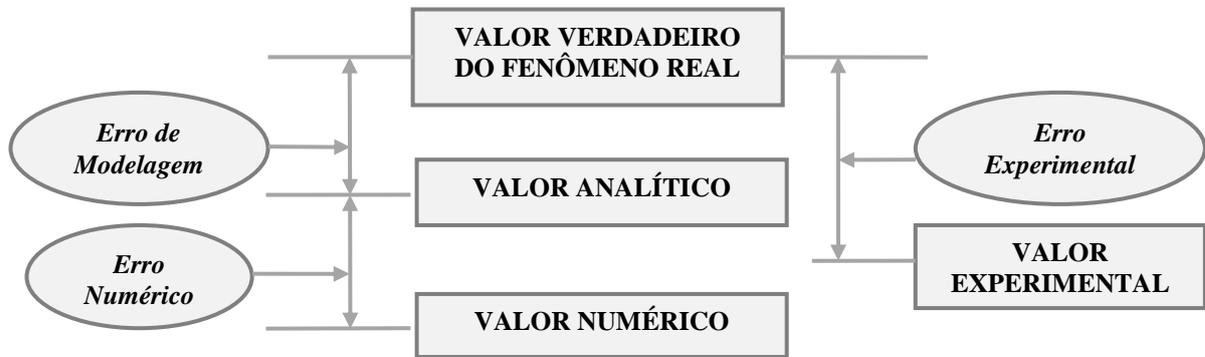


FIGURA 1.2 - ERROS ENVOLVIDOS NA RESOLUÇÃO DE UM PROBLEMA
adaptada de MARCHI e SCHNEIDER (2002)

O **erro experimental** é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e o seu resultado experimental. **Erro de modelagem** é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e a sua solução analítica exata (FERZIGER e PERIC, 2002). É causado pelas simplificações feitas sobre o fenômeno real na concepção do modelo matemático. Os erros de modelagem afetam tanto as soluções analíticas quanto as numéricas, porque ambas se baseiam em modelos matemáticos.

O **erro numérico** (E) é a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ) (FERZIGER e PERIC, 2002). A Eq.(1.1) define matematicamente o erro numérico:

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

Portanto, a solução numérica ideal é igual à solução analítica exata do problema, ou seja, é aquela em que o erro numérico é nulo. O erro numérico é causado por quatro fontes (FERZIGER e PERIC, 1996; 2002): erros **de discretização**, definidos como a diferença entre a solução exata das equações diferenciais parciais contínuas que modelam matematicamente o problema em consideração e o sistema de equações algébricas obtido após a discretização dessas; erro **de iteração**, definido como a diferença entre a solução iterada e a exata para o sistema algébrico de equações; erro **de arredondamento**, que ocorre devido à representação aritmética finita dos computadores digitais; e erro **de programação**, gerado na

implementação do modelo numérico em um programa computacional e pela utilização do mesmo para obtenção da solução numérica (ROY, 2005).

O procedimento que confere credibilidade a um modelo numérico ou demonstra quanto uma equação diferencial parcial foi resolvida corretamente através de um determinado modelo numérico, é denominado **verificação** (MEHTA, 1996; OBERKAMPF e BLOTTNER, 1998; ROACHE, 1998; AIAA, 1998; KNUPP e SALARI, 2002).

O valor do erro numérico de uma variável de interesse em um determinado modelo matemático pode ser avaliado apenas quando a sua solução analítica é conhecida. Isto quer dizer que, em termos práticos, não é possível calcular o erro numérico. Nestes casos, é necessário estimar um valor para a solução analítica. Então, em vez do erro numérico, calcula-se o erro numérico estimado. O erro numérico estimado de uma variável de interesse é avaliado pela diferença entre a sua solução analítica estimada e a própria solução numérica, indicado na Eq.(1.2):

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

onde ϕ indica a solução numérica, ϕ_{∞} a solução analítica estimada e $U(\phi)$ indica o erro numérico estimado, ou incerteza numérica, que é normalmente calculado com os chamados estimadores de erro.

Para um dado problema, modelado matematicamente e para o qual o modelo numérico resolvido não contém erros de iteração (por se realizarem tantas quantas são exigidas para se atingir o erro da máquina), nem erros de arredondamento ou erros de programação, o erro numérico passa a chamar-se **erro de discretização** (MARCHI e SILVA, 2002). A seguir, é apresentada uma descrição sucinta das etapas de simulações numéricas, seguindo os passos aplicados para o problema abordado neste trabalho.

A simulação numérica envolve basicamente dois passos: a definição de um modelo matemático que descreve claramente um problema físico de interesse e a implementação de técnicas numéricas para que tal modelo matemático seja resolvido computacionalmente. Ambos geralmente introduzem aproximações nas simulações, o que resulta em erros que podem ser analisados e quantificados (JAMESON e MARTINELLI, 1998).

Para resolver um problema numericamente, a metodologia a ser seguida inclui as seguintes etapas: definição do problema; solução analítica (necessária para análise do erro numérico real); discretização do domínio de cálculo e das equações governantes, obtenção da

solução numérica; verificação das ordens práticas da solução numérica; estimativa do erro de discretização da solução numérica; apresentar o erro numérico estimado.

Quando se usam métodos numéricos para resolver equações diferenciais parciais (EDPs), a região do domínio não é tratada como contínua, devido aos infinitos pontos. Por esse motivo, o domínio é discretizado, isto é, dividido em pontos ou células. Somente nesses pontos é que as soluções numéricas são obtidas. O conjunto finito de pontos ou células é denominado **malha**. A escolha e geração da malha fazem parte da definição do modelo numérico. Existem dois tipos de malhas frequentemente utilizadas no desenvolvimento de um modelo numérico: a malha estruturada e a não estruturada. A Fig. 1.3 mostra exemplos de malhas que podem ser usadas na discretização de domínios de cálculo.

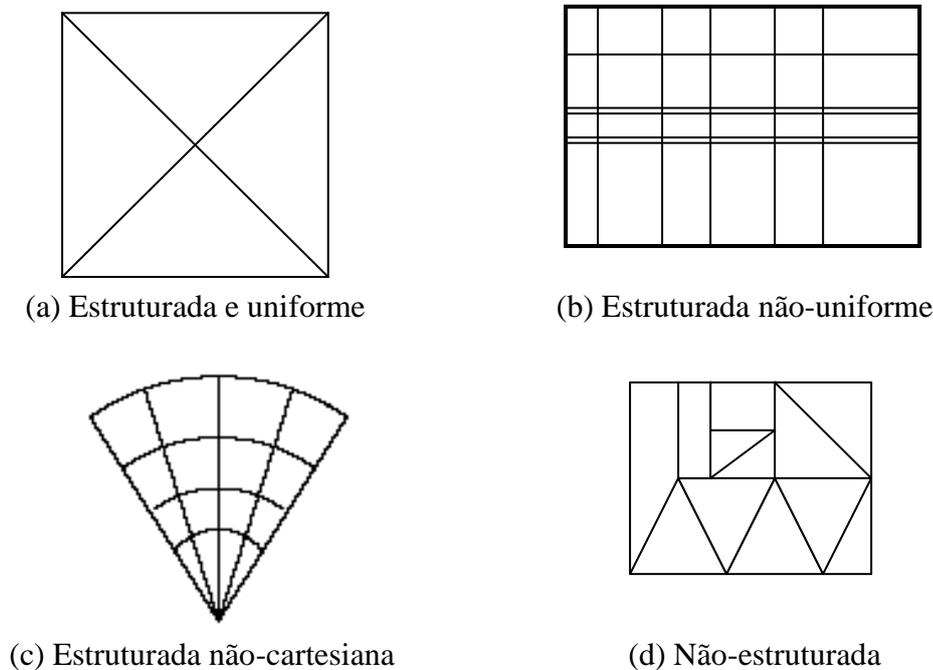


FIGURA 1.3– TIPOS DE MALHAS PARA DISCRETIZAÇÃO DE DOMÍNIOS

A principal característica da malha estruturada é que cada volume de controle interno tem sempre o mesmo número de vizinhos e a ordenação deles segue uma sequência natural (MALISKA, 2004); em malhas não estruturadas não existe uma lei de formação para ordenação dos volumes de controle. Portanto, varia a banda da matriz de coeficientes do sistema algébrico resultante da discretização das EDPs envolvidas, que deverá ser resolvido

com uma técnica numérica, o que faz aumentar em complexidade os algoritmos de solução dos sistemas de equações discretizadas.

Em problemas com geometria complexa, é vantajoso o uso de malhas não estruturadas, uma vez que possibilitam acompanhar os contornos da geometria, facilitando o refinamento da malha em regiões de interesse. Para entender a importância de como o tipo de refinamento de uma malha afeta a interpretação de uma solução numérica, sugere-se, por exemplo, uma análise sobre razão de refino em malhas unidimensionais não uniformes, que pode ser vista em Schneider e Marchi (2004).

Além de dividir o domínio de cálculo em unidades finitas, um modelo numérico exige que as EDPs envolvidas assumam também domínio discreto, a fim de que possa haver avaliação computacional. Para discretização das equações diferenciais que modelam um problema físico, isto é, para tornar possível a abordagem computacional do problema, muitas técnicas numéricas são encontradas na literatura, por exemplo: Método das Diferenças Finitas (MDF), que consiste basicamente na substituição do operador diferencial pelo seu correspondente numérico; Método dos Elementos Finitos (MEF), que apesar do tratamento de problemas com domínios de geometria complexa, não é aplicável a problemas advectivos (MALISKA, 2004); e Método dos Volumes Finitos (MVF), cuja característica principal é ser conservativo em nível discreto, isto é, satisfazer a conservação de propriedades físicas em nível de volumes elementares quando da obtenção das equações aproximadas (SHIH, 1985; SANTOS et al., 1996; AINSWORTH e ODEN, 1997; MALISKA, 2004).

Atualmente, o MVF e o MEF têm muita semelhança, porém, no contexto de pacotes comerciais, o MVF ainda é o mais empregado, em função da robustez e características conservativas em nível discreto (MALISKA, 2004). Este trabalho utiliza o MVF para discretização da equação diferencial parcial que modela o problema avaliado, a saber, a condução de calor bidimensional, em regime permanente, sem geração de calor e em um meio com propriedades constantes.

O MVF é uma classe de esquema de discretização extensivamente popular em mecânica de fluidos, meteorologia, eletromagnetismo, modelos de processos biológicos, simulação de dispositivos semicondutores, opções de estimativas financeiras e outras áreas que são governadas por sistemas conservativos que podem ser escritos na forma integral de volume de controle. A Lei da Conservação Integral assegura que a taxa de variação de uma substância com determinada densidade em um volume de controle fixo é igual ao fluxo da substância pela fronteira do volume (BARTH, 2003).

Depois de discretizada, uma equação diferencial “gera” um sistema de equações algébricas, que deve ser resolvido por uma técnica numérica. Para alguns problemas de Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor, a aplicação de métodos numéricos é praticamente inviável, devido ao grande número de equações a serem iterativamente resolvidas e ao custo computacional advindo. Ainda, em vários problemas de computação científica, quando do uso de métodos iterativos, se identifica o seguinte fenômeno: após algumas iterações, o erro é suavizado, mas não necessariamente menor (CARVALHO e GRATTON, 2009).

Várias técnicas numéricas têm sido estudadas para resolver o sistema algébrico já citado com o menor custo computacional, obtendo-se a solução a mais próxima possível da exata (PINTO e MARCHI, 2006). A resolução por métodos diretos não é recomendável, visto que na prática, a matriz dos coeficientes é muito grande e o custo da inversão da matriz é alto (GOLUB e VAN LOAN, 1989); para problemas de grande porte os métodos iterativos são mais adequados (BURDEN e FAIRES, 2003).

A maior parte dos métodos iterativos padrão (por exemplo, o método de Gauss-Seidel) apresenta propriedades de suavização de erros locais de alta frequência (componentes oscilatórias do erro), enquanto as baixas frequências são mantidas praticamente inalteradas. Deste modo as primeiras iterações deste processo têm rápida convergência, caracterizando a presença de modos oscilatórios de erro. Porém, após algumas iterações o processo torna-se lento, sinalizando a predominância de modos suaves (BRIGGS, 2000).

A ideia do método *multigrid* é cobrir um espectro maior de comprimentos de onda através da iteração não apenas em uma única malha, mas em uma sequência de malhas cada vez mais grossas, onde suavizam-se as componentes do erro e o problema é novamente transferido para uma malha ainda mais grossa, até chegar à malha mais grossa estabelecida inicialmente ou na mais grossa possível. Com esse procedimento, a iteração torna-se mais barata e a convergência é acelerada.

Se o problema original é definido em uma malha que foi obtida através de vários passos de refinamento, pode-se usar uma hierarquia entre as malhas para se definir operadores de transferência entre malhas mais finas e mais grossas, nesse caso o método é denominado *Multigrid* Geométrico. Se, no entanto, uma hierarquia não é definida, os operadores de transferência podem ser construídos algebricamente, a partir da matriz do sistema, essa abordagem chama-se *Multigrid* Algébrico (CARVALHO e GRATTON, 2009).

Observou-se (BRIGGS et al., 2000) que, no início do processo a taxa de convergência é alta, passando a decair sensivelmente à medida que o processo iterativo avança. Alguns

trabalhos cujo objetivo é melhorar a taxa de convergência dos métodos numéricos, presentes na literatura corrente são: MARCHI et al. (2008), com a utilização de técnicas como o *Multigrid* Geométrico, e SUERO (2008) com a utilização de técnicas como o *Multigrid* Algébrico. Princípios básicos sobre a técnica *multigrid* são amplamente encontrados na literatura (GHIA et al., 1982; STÜBEN, 2001; TROTTEBERG et al., 2001; WESSELING e OOSTERLEE, 2001). Uma vez solucionado o sistema de equações proveniente do processo de discretização, deve-se responder à seguinte questão: a solução obtida é representativa para o problema em estudo? Para respondê-la, são empregadas ferramentas da verificação numérica.

Aplicando-se as técnicas de discretização de domínio e de equações ao modelo físico da condução do calor bidimensional, resolvendo-se o sistema algébrico resultante da discretização da EDP governante, é possível avaliar o efeito da aplicação do método das Múltiplas Extrapolações de Richardson (MER) na redução do erro de discretização. MER é uma técnica de aproximação numérica, usada tanto para aproximação de integrais quanto para determinação de soluções para equações diferenciais (BURDEN e FAIRES, 2003).

A integração numérica tem, por ideia básica, aproximar uma função cuja primitiva seja de difícil obtenção, ou mesmo inexistente, por um polinômio. Uma vez estabelecida uma aproximação polinomial, a integração torna-se fácil. As fórmulas de integração são somatórios discretos, calculados em convenientes pontos de integração. No caso de serem pontos igualmente espaçados em determinado intervalo, são denominadas fórmulas de Newton-Cotes.

A Extrapolação de Richardson é uma combinação das fórmulas de Newton-Cotes cujo objetivo é melhorar a aproximação da integração numérica. Essa técnica é usada, por exemplo, em problemas de fluxo turbulento (CELIK e ZHANG, 1993; 1995); em malhas não uniformes (CELIK e KARATEKIN, 1997). O MER baseia-se nas Extrapolações de Richardson e é descrito no Capítulo 3.

1.2 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

O foco principal deste trabalho é verificar soluções numéricas para o problema da condução de calor bidimensional, cuja equação governante é a Equação de Laplace, usando para discretização do domínio de cálculo malhas cujos elementos (neste texto, elemento de malha é considerado sinônimo de volume de controle) são triângulos retângulos isósceles (malha triangular) ou quadrados (malha quadrangular); para discretização da EDP envolvida

será utilizado o MVF e, para redução do erro de discretização, o MER. O processo de aceleração na obtenção das soluções numéricas será realizado pela técnica *multigrid*, algébrico em malhas triangulares e *multigrid* geométrico em malhas quadrangulares. Detalhes do modelo matemático e do modelo algébrico são considerados no Capítulo 3.

A motivação para esta pesquisa surgiu da expectativa de que, em malhas triangulares, o desempenho do modelo numérico adotado fosse melhor do que para malhas ortogonais de mesma dimensão (quadrangulares). Em se tratando de malhas não estruturadas, há na literatura o emprego de malhas do tipo triangular, em domínios complexos; mas, até a conclusão deste documento, não foi encontrada uma justificativa para utilização destas em vez de malhas quadrangulares, ou, mais especificamente, um comparativo entre elas. Para certas geometrias, é muito difícil ou quase impossível trabalhar com malhas quadrangulares. Neste trabalho, o que se procura estudar é se a utilização de malhas triangulares deve ser preferida para todos os casos, inclusive aqueles nos quais as quadrangulares são adequadas. Espera-se, portanto, com a realização deste trabalho, mostrar que o desempenho das malhas triangulares seja melhor do que o das quadrangulares no que diz respeito à redução do erro de discretização, com e sem MER.

Neste trabalho, a sigla TG é usada para representar uma malha do tipo triangular e a sigla QG será usada para representar uma malha do tipo quadrangular. Será feito um comparativo entre as mesmas. É de se esperar que para o tipo TG o erro de discretização talvez seja menor. Um dos motivos para tal expectativa é o fato de que as aproximações numéricas em malhas quadrangulares, aplicadas a um ponto P genérico da malha, são unidirecionais em cada face de volume de controle que discretiza o domínio de cálculo. Além disso, a soma das distâncias entre os nós da malha são menores na malha triangular, portanto, espera-se que o erro de discretização seja menor em malhas triangulares, para o domínio de cálculo considerado (quadrangular unitário).

A Fig. 1.4 mostra uma malha TG com seus nós, os centróides dos volumes de controle, P e seus contíguos. Nessa malha, as aproximações são bidirecionais. Na Fig. 1.5, está a malha QG correspondente, ou seja, com o mesmo número de elementos. A Tab. 1.2 mostra as coordenadas de todos os centróides relacionados ao nó P e as respectivas distâncias entre os mesmos, para a TG e a Tab. 1.3, para a QG.

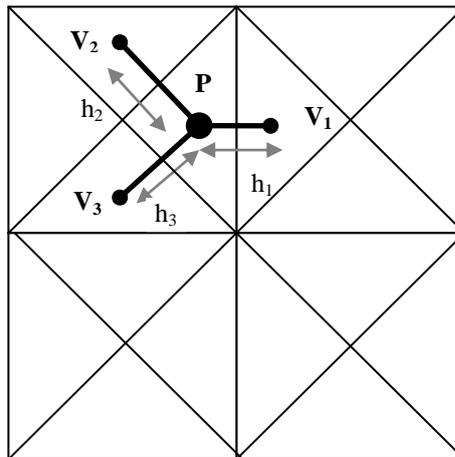


FIGURA 1.4 – TG E DISTÂNCIA ENTRE NÓS

TABELA 1.2 – COORDENADAS E DISTÂNCIAS ENTRE CENTROIDES NA TG

Coordenadas	Coordenadas	Distância
$P \left(\frac{5}{12}, \frac{3}{4} \right)$	$V_1 \left(\frac{7}{12}, \frac{3}{4} \right)$	$h_1 = d(P, V_1) = \frac{1}{6}$
$P \left(\frac{5}{12}, \frac{3}{4} \right)$	$V_2 \left(\frac{1}{4}, \frac{11}{12} \right)$	$h_2 = d(P, V_2) = \frac{\sqrt{2}}{6}$
$P \left(\frac{5}{12}, \frac{3}{4} \right)$	$V_3 \left(\frac{1}{4}, \frac{7}{12} \right)$	$h_3 = d(P, V_3) = \frac{\sqrt{2}}{6}$

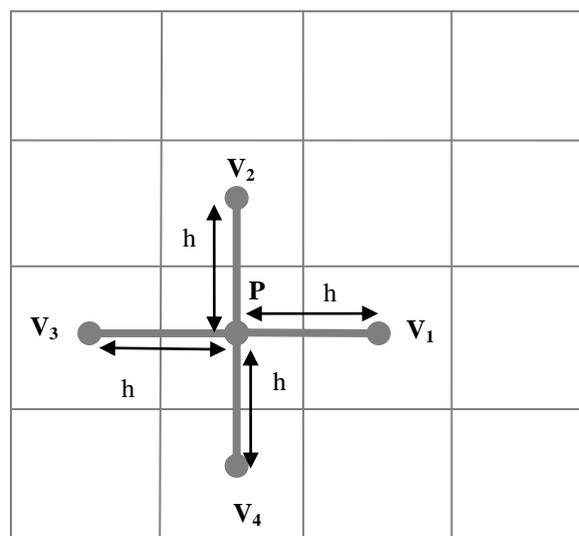


FIGURA 1.5 – QG E DISTÂNCIA ENTRE NÓS (h)

TABELA 1.3 – COORDENADAS E DISTÂNCIAS ENTRE CENTROIDES NA QG

Coordenadas	Coordenadas	Distância
$\mathbf{P} \left(\frac{3}{8}, \frac{3}{8} \right)$	$\mathbf{V}_1 \left(\frac{5}{8}, \frac{3}{8} \right)$	$h = d(\mathbf{P}, \mathbf{V}_1) = \frac{1}{4}$
$\mathbf{P} \left(\frac{3}{8}, \frac{3}{8} \right)$	$\mathbf{V}_2 \left(\frac{3}{8}, \frac{5}{8} \right)$	$h = d(\mathbf{P}, \mathbf{V}_2) = \frac{1}{4}$
$\mathbf{P} \left(\frac{3}{8}, \frac{3}{8} \right)$	$\mathbf{V}_3 \left(\frac{1}{8}, \frac{3}{8} \right)$	$h = d(\mathbf{P}, \mathbf{V}_3) = \frac{1}{4}$
$\mathbf{P} \left(\frac{3}{8}, \frac{3}{8} \right)$	$\mathbf{V}_4 \left(\frac{3}{8}, \frac{1}{8} \right)$	$h = d(\mathbf{P}, \mathbf{V}_4) = \frac{1}{4}$

1.3 IMPORTÂNCIA DO PROBLEMA

Os processos de verificação de soluções numéricas são feitos de formas distintas e estão em níveis diferentes de desenvolvimento (MARCHI, 2001). Existe padronização, aceita e publicada, para os métodos experimentais (ISO, 1993; AIAA, 1994; HOLMAN, 1994; STERN et al., 1999), seja em Dinâmica dos Fluidos ou outras áreas do conhecimento. Como exemplo, note-se que a divulgação de resultados de pesquisas de opinião pública em geral é acompanhada de uma margem de erro ou incerteza.

Por outro lado, em CFD não se relatam as incertezas de soluções numéricas (CELIK e ZHANG, 1993; COLEMAN e STEELE, 1999; MINKOWYCZ et al., 2006); outro exemplo do cotidiano, que emprega métodos numéricos, é a previsão meteorológica diária, que nem sempre é acompanhada de suas incertezas (OBERKAMPF e ROY, 2010); ainda, segundo Marchi (2001), não existem padrões aceitos para efetuar o processo de **verificação** (METHA, 1996; MAVRIPLIS, 1997; OBERKAMPF e BLOTTNER, 1998), o que existe apenas são propostas iniciais pouco testadas (ASME, 1994; AIAA, 1998); há discordância de nomenclaturas, de acordo com Celik e Zhang (1995), vistos pela utilização de termos distintos em Blottner (1990), Rudy et al. (1991), Oreskes et al. (1994), Mehta (1996), Rizzi e Voss (1998), Roache (1998), AIAA(1998) e Maliska (2004). Evidentemente, podem ser encontrados trabalhos (ERTURK et al., 2005; OZTURK e AYDIN, 2009) que procuram seguir critérios já existentes. Uma referência atual abordando tais critérios, é Celik et al. (2008).

Várias taxonomias de erros dadas na literatura são inadequadas e confusas. Nem toda lista representa uma taxonomia. Por exemplo, a lista “flora, fauna, mamíferos, cães” não é uma taxonomia biológica adequada. Mamíferos não estão separados da fauna, fazem parte dela, como os cães. Esse tipo de falsa taxonomia freqüentemente ocorre em CFD (ROACHE, 1997). Por exemplo, erros de geração de malhas não podem ser separados dos erros de discretização.

Malhas que não sejam bem adaptadas ao problema podem incrementar erros de discretização. Isso não significa que há malhas melhores que outras ou que determinada malha não sirva para quantificar erros, antes, que erros de geração de malhas não precisam ser considerados separadamente do erro de discretização em um teste de convergência (FERZIGER e PERIC, 2002). Há na literatura, revisões sobre verificação, validação, taxonomia de erros, estimativa de erros e taxas de convergência (ROACHE, 1997). Em resumo, dentre tópicos em aberto, pode-se citar que em CFD:

- há discordância de nomenclatura;
- faz-se uso de malhas únicas para obtenção de soluções numéricas;
- é necessário que se entenda a respeito dos efeitos multidimensionais e do uso de malhas triangulares sobre erros numéricos;
- há real necessidade de avaliação quanto ao desempenho dos estimadores de erro (de Richardson e seus variantes) nestes casos;
- de acordo com a literatura (MARCHI e SILVA, 2000), quando se empregam malhas uniformes com o esquema de diferença central, a ordem teórica do erro de truncamento de problemas difusivos é igual a dois e degenera para a unidade em malhas não-uniformes; entretanto, em experimentos numéricos não ocorre essa degeneração de ordem.

Uma tendência em CFD é o emprego de malhas não-estruturadas para discretização de domínios com geometria complexa e irregular, cada vez mais comuns nos problemas de engenharia (VENKATAKRISHAN, 1996). O motivo, de acordo com Maliska (2004, p.322) é a “maior versatilidade na discretização de domínios complexos, pois a adaptação e o refinamento em regiões específicas do domínio são alcançados com maior facilidade.”

A aplicação de malhas não-estruturadas no âmbito do MVF tem aparecido em quantidades crescentes na literatura. Por exemplo, em Marcondes (1996), malhas do tipo

Voronoi, são usadas em problemas de Mecânica de Fluidos e Transferência de Calor, pelo fato de serem localmente ortogonais, ou seja, a interface entre dois volumes de controle é ortogonal à linha que une os centros de dois volumes contíguos. Além disso, esta linha é dividida ao meio pela interface, o que contribui para a precisão de derivadas numéricas ao longo da face.

Neste trabalho, a discretização do domínio de cálculo, quadrangular unitário, no caso de malhas triangulares, será feita através de volumes de controle (elementos) do tipo triângulo retângulo isósceles. A primeira malha possui 4 elementos reais delimitados pelas diagonais do quadrilátero que define o domínio de cálculo. Nela, as faces dos volumes são perpendiculares ao segmento de reta que une dois centroides e, além disso, tal segmento corta a face ao meio, características de uma malha do tipo Voronoi (SCHNEIDER e MALISKA, 2002; MALISKA, 2004).

Com relação às condições de contorno do problema, o MVF pode ter, pelo menos, quatro abordagens distintas nos problemas de engenharia (PATANKAR, 1980; MALISKA, 2004): integração das condições de contorno nos volumes de fronteira; com volumes fictícios; com meio-volume e com volume de espessura zero. É importante avaliar qual das formas é mais adequada toda vez que se analisa um problema, pois, segundo Maliska (2004), um procedimento para aplicação das condições de contorno inconveniente, acarreta obstáculos que influenciam na veracidade da solução do problema. Em Giacomini (2009), há um comparativo entre as quatro formas possíveis e seus respectivos erros, empregando o método dos volumes finitos para problemas unidimensionais que representam fenômenos de caráter difusivo e advectivo com equações lineares e não-lineares.

Obviamente, o vantajoso custo competitivo de simulações em laboratórios de experimentação numérica deve impulsionar o estabelecimento de diretrizes de padronização para o ato de avaliar incerteza numérica em CFD. Nesse intuito, em setembro de 1993, foi publicada uma lista composta de 10 itens para a comunidade ativa em CFD. Dentre outros tópicos, em seus trabalhos, os pesquisadores precisam (FREITAS, 1993; CELIK et al., 2008):

- descrever, de forma detalhada, o método numérico utilizado;
- obter soluções numéricas em múltiplas malhas;
- usar estimadores de erros baseado em métodos como a extrapolação de Richardson ao demonstrar a acurácia das soluções;
- em caso de problemas transientes, demonstrar a acurácia temporal;

- definir claramente métodos usados na implementação de condições de contorno e iniciais;
- quando usar um código ou algoritmo de outrem, este deve ser citado ou referenciado;
- explicar precisamente critérios de parada quando da obtenção de soluções numéricas.

Avaliar correta, padronizada e numericamente os diversos parâmetros relevantes a um problema físico complementa as análises teóricas e os ensaios experimentais, de forma mais conveniente e a custos e tempos reduzidos. Portanto, é extremamente necessário que as simulações numéricas tenham credibilidade, para possibilitar *validação* (MARVIN, 1995) e *verificação* de modelos, a fim de que a CFD se confirme como uma ferramenta geral e completa para *design* e simulação em engenharia (DOUGLASS e RAMSHAW, 1994; MEHTA, 1996).

1.4 OBJETIVOS DO TRABALHO

O foco deste trabalho é **verificar soluções numéricas** para o problema da condução de calor bidimensional, em regime permanente, sem geração de calor e com propriedades constantes, cuja equação governante é a Equação de Laplace, usando o MVF e MER. O problema é linear, com condição de Dirichlet em todos os contornos, sendo nula em todos exceto no contorno norte, que apresenta temperatura prescrita senoidal (GREENBERG, 1998).

Todas as condições de contorno definidas no modelo matemático do problema são abordadas por volumes fictícios, em um domínio de cálculo bidimensional, quadrangular de lado unitário, discretizado por malhas uniformes triangulares do tipo Voronoi e quadrangulares regulares, refinadas sistematicamente em um sistema de coordenadas cartesianas, uma vez que a utilização destas favorece o desaparecimento de erros (SANTOS et al., 1996).

Para acelerar a convergência das soluções numéricas é aplicado o *Algebraic Multigrid* (*Multigrid* Algébrico, AMG) em malhas triangulares e o *Geometric Multigrid* (*Multigrid* Geométrico, GMG) em malhas quadrangulares. As variáveis de interesse são: a temperatura no centro do domínio, a média do campo de temperaturas (temperatura média), a taxa de

transferência de calor em cada um dos contornos e a média da norma do erro de discretização. Os objetivos específicos são:

- deduzir a ordem assintótica e verdadeira do erro de discretização para malhas com elementos triangulares, utilizando a série de Taylor;
- verificar o erro de discretização, com e sem MER, e as ordens efetiva e aparente em função do número de volumes de controle ou em várias malhas;
- para malhas quadrangulares e triangulares, comparar os resultados obtidos para o erro de discretização, com e sem MER.

1.5 ESTRUTURA DO TRABALHO

Este trabalho está dividido em cinco capítulos, um apêndice e anexos. O Capítulo 2 é destinado à Fundamentação Teórica, onde são citados livros e artigos com detalhes e teoria suportes para o desenvolvimento da pesquisa. No Capítulo 3, são apresentados o modelo matemático do problema físico envolvido e o modelo numérico empregado na obtenção das soluções numéricas. É apresentada a estimativa *a priori* do erro de discretização de cada variável de interesse envolvida, que, pretende-se confirmar no capítulo de Resultados (Capítulo 4), que contém as respectivas estimativas *a posteriori*. No Capítulo 4 são exibidos gráficos, mostrando os resultados obtidos e análise dos mesmos, após tratamento numérico do modelo. O Capítulo 5 é destinado às conclusões, com um resumo sobre quais diretrizes foram seguidas para cumprimento da proposta, os objetivos atingidos e pontos em que é possível aprimorar e enriquecer as investigações apresentadas. Na seqüência do documento, estão listadas as referências bibliográficas de todos os documentos utilizados ao longo do trabalho. O Apêndice contém material adicional, complementar ao texto do Capítulo 3. Nele é aplicada a metodologia proposta, de forma explícita e detalhada, à Equação de Laplace bidimensional em uma malha cartesiana ortogonal e também em uma malha cartesiana triangular. Além disso, contém a discretização das variáveis de interesse e tabelas que deram origem aos gráficos que ilustram os resultados obtidos. No Anexo A, há material adicional e explicativo, sobre o modelo numérico do programa analisador de erros utilizado após a obtenção das soluções numéricas.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo aborda definições e conceitos empregados no decorrer deste trabalho. São apresentados aspectos gerais sobre Dinâmica dos Fluidos Computacional. Citam-se trabalhos com diferentes formas de discretização de domínios, ou diferentes malhas. São apresentados aspectos sobre o MDF, MEF e MVF, que se constituem métodos de discretização de equações. Há uma discussão sobre erros numéricos e a técnica utilizada neste trabalho para reduzir o erro de discretização, MER. Além disso, é abordada a técnica *multigrid*, utilizada para acelerar a convergência na obtenção de soluções numéricas.

2.1 DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

Fluidos em movimento estão presentes em toda a natureza: no corpo humano, na forma da circulação sanguínea; na atmosfera, como o vento; e nos oceanos e mares, como as correntes e marés. O estudo do movimento dos fluidos é uma atividade que vem sendo desenvolvida há muitos séculos. Egípcios usavam relógios de água; Arquimedes definiu as condições para que um corpo, quando mergulhado em um fluido, flutuasse ou não; os romanos construíram aquedutos para transportar água para suas cidades; Leonardo da Vinci, no século XV, sugeriu, entre outras coisas, formas que reduziam o arrasto de barcos na água. É fácil ver que, historicamente, a preocupação em estudar o comportamento dos fluidos era inicialmente experimental e não matemática.

A descrição matemática do comportamento dos fluidos ganhou espaço a partir do século XIX, com os franceses Claude Navier, no trabalho “*Memoire sur les lois du mouvement des fluides*”, onde são descritas equações para o movimento de fluidos, que permitem relacionar campos de velocidade e pressão (NAVIER, 1822); Simeon Poisson, no trabalho “*Mémoire sur les équations générales de l'équilibre et du mouvement des corps solides élastiques et des fluides*”, relacionando o equilíbrio de sólidos elásticos e correntes de fluidos compressíveis (POISSON, 1829) e o inglês George Stokes em seu trabalho “*On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums*” (STOKES, 1850) no qual é publicada a versão definitiva das equações de Navier-Stokes, utilizando-se o parâmetro de viscosidade dinâmica.

Dependendo das propriedades do fluido e do escoamento, as equações de Navier-Stokes podem ser escritas de muitas formas. Soluções analíticas para tais equações só foram determinadas para alguns poucos casos (FORTUNA, 2000). A dificuldade de se encontrar

soluções analíticas decorre do fato de que as equações de Navier-Stokes são Equações Diferenciais Parciais (EDPs) não-lineares, e a teoria matemática dessa classe de equações ainda não está suficientemente desenvolvida para permitir a obtenção de soluções analíticas em regiões arbitrárias com condições de contorno gerais. Por essa razão é que, no estudo do movimento de fluidos e de seus efeitos, são utilizados ensaios experimentais.

Devido às limitações de custo, tempo e equipamento, é comum haver medições apenas em alguns dos pontos da região onde ocorrem fenômenos de interesse. Por exemplo, a pressão e as velocidades do escoamento sobre a fuselagem de um avião são determinadas apenas em alguns pontos. Portanto, nem sempre os métodos analíticos e experimentais são satisfatórios. Fundamentalmente, são duas as razões para isso: (a) o fenômeno em estudo nem sempre é passível de reprodução em laboratório, mesmo em escala reduzida e (b) o custo e o tempo de montagem experimental podem ser proibitivos.

O advento do computador forneceu uma terceira alternativa para a análise do movimento dos fluidos: a simulação numérica. Essa área do conhecimento complementa as análises teóricas e as técnicas experimentais da mecânica dos fluidos. O uso de métodos numéricos de forma alguma implica que a mecânica dos fluidos experimental e as análises teóricas estejam sendo postas de lado; antes, as três técnicas se complementam. Nesse contexto, com grande destaque, está obviamente inclusa a resolução computacional de equações que governam a dinâmica dos fluidos, a ponto de, segundo Ferziger e Peric (2002), envolver cerca de um terço dos pesquisadores da área de CFD.

Em CFD, para obter uma solução numérica aproximada, inicialmente o fenômeno real é modelado matematicamente de forma adequada, ou seja, são definidas equações apropriadas, as condições de contorno e as condições iniciais, a geometria do domínio de cálculo e as propriedades dos meios sólidos e fluidos envolvidos no problema. Em seguida, define-se o modelo numérico. Este inclui o tipo de malha (discretização do domínio), o método numérico, as aproximações numéricas (discretização das equações), as variáveis de interesse, o algoritmo de solução do sistema de equações, os critérios de convergência do processo iterativo, os estimadores de erro, o *hardware*, o algoritmo do programa computacional e o *software* a serem utilizados (MARCHI e SCHNEIDER, 2002).

Uma tendência em CFD é o emprego de malhas não-estruturadas para discretização de domínios com geometria complexa e irregular, cada vez mais comuns nos problemas de engenharia (VENKATAKRISHAN, 1996). A discretização de domínios irregulares em uma malha única e de qualidade, porém, é um dos desafios na utilização dos métodos numéricos e pode representar uma dificuldade a mais no processo de obtenção de uma solução numérica;

por essa razão, não se recomenda o uso indiscriminado de malhas não-estruturadas, principalmente nos casos de domínios regulares (SCHNEIDER, 2007). Este, dentre outros, é um dos motivos para que se iniciem estudos relativos à verificação numérica em malhas não-estruturadas triangulares ou quadrangulares nos casos bidimensionais bem como em malhas não-estruturadas tetraédricas ou hexaédricas, nos casos tridimensionais.

Para discretização das EDPs envolvidas, existem na literatura pelo menos três métodos com ampla utilização:

- Elementos finitos (HUGHES, 2000; REDDY e GARTLING, 1994)
- Diferenças finitas (FORTUNA, 2000; TANNEHILL et al., 1997)
- Volumes finitos (MALISKA, 2004; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007)

Outros métodos podem ser vistos em Cunha (2003). A aplicação de qualquer método numérico que resulte numa solução numérica conterà erro. Por isso, depois de aplicados os métodos numéricos e obtida uma solução numérica, a mesma deverá ser analisada para que se verifique se está correta. O processo associado a esta análise é chamado por Roache (1998) de **verificação**. A **verificação** é um exercício matemático, da Análise Numérica, que consiste em avaliar quão corretamente as equações do modelo numérico, associado ao modelo matemático que representa o problema físico envolvido, foram resolvidas. Somente depois são extraídas informações aplicáveis ao modelo físico, processo esse, denominado **validação** (ROACHE, 1998; AIAA, 1998). Uma variação de nomenclatura pode ser vista em Maliska (2004), onde a qualidade do método numérico é atestada em dois níveis: no processo chamado **validação numérica**, que consiste em comparar soluções numéricas com soluções analíticas e no processo chamado **validação física**, que se preocupa com a fidelidade do modelo matemático em relação ao problema físico. Por conseguinte, a ferramenta numérica é adequada e confiável quando se está de posse de um método numérico que resolve corretamente as equações diferenciais de um modelo matemático, que representa com fidelidade determinado fenômeno físico.

As atividades de pesquisa em CFD procuram estabelecer padrões para o procedimento de **verificação** de soluções numéricas. Recomendações que atendem a esse intuito figuram em revistas especializadas como o *Journal of Heat Transfer* (ASME, 1994), *International Journal for Numerical Methods in Fluids* (GRESHO e TAYLOR, 1994), *AIAA Journal* (AIAA, 1994), *Journal of Fluids Engineering* (FREITAS, 1993; ROACHE et al, 1986). Alguns tópicos essenciais para o processo de verificação de soluções numéricas são sugeridos

em “Protocolo para Estimar Erros de Discretização em CFD: versão 1.1” (MARCHI, 2005). Vale destacar que, dentro dessas considerações, uma solução numérica verificada com a solução analítica, não estará necessariamente validada, a menos que o modelo matemático não possua erro em relação à solução verdadeira do fenômeno.

2.2 DISCRETIZAÇÃO DE DOMÍNIOS

Para estudar numericamente um fenômeno físico qualquer, é necessário um modelo matemático para o problema. A verificação da qualidade desse modelo é obtida através de um modelo e métodos numéricos, nos quais as equações e a região (domínio) em que elas são válidas devem ser expressas de forma adequada.

Quando se usam métodos numéricos para resolver EDPs, a região do domínio não é tratada como contínua, antes, como um conjunto finito de pontos ou células denominado *malha* (FORTUNA, 2000). Portanto, escolha e geração da malha fazem parte da definição do modelo numérico. Existem dois tipos de malhas frequentemente utilizadas no desenvolvimento de um modelo numérico: a malha estruturada e a não-estruturada.

Para um domínio regular, não se justifica o emprego de malhas não-estruturadas, sob pena de um aumento considerável da capacidade computacional requerida para a obtenção da solução numérica. Antes de se empregar diretamente uma malha não-estruturada, é necessário verificar se o problema pode ser bem resolvido empregando-se uma malha regular. Assim, as malhas estruturadas e uniformes devem ser preferidas às malhas não-uniformes e/ou não-estruturadas, pois, para um mesmo método numérico, os algoritmos empregados no primeiro caso consomem menos recursos computacionais (SCHNEIDER, 2007).

Em problemas com geometria complexa, é vantajoso o uso de malhas não-estruturadas, uma vez que possibilitam acompanhar os contornos da geometria, facilitando o refinamento da malha em regiões de interesse. A importância de como o tipo de refinamento de uma malha afeta a interpretação de uma solução numérica, pode ser vista através do trabalho de Schneider e Marchi (2004), onde foram estudados os efeitos da razão de refino em malhas unidimensionais não-uniformes.

Um dos trabalhos pioneiros utilizando o MVF em malhas triangulares é o de Winslow (1966). Para Marini (2008), a ortogonalidade das malhas é um parâmetro de importância quando da aplicação do MVF. Em Marques et al (2002), surge a necessidade do desenvolvimento de uma nova geometria de malha, mais adequada ao estudo de configurações supersônicas, envolvendo corpos hemisférico-cilíndricos, em contraste com as

malhas computacionais tradicionalmente usadas nas simulações de código em CFD, axissimétricas bidimensionais em forma de C.

Neste trabalho, será utilizado um domínio bidimensional quadrangular, e malhas triangulares e quadrangulares. Sobre malhas triangulares, a bibliografia indica que alguns requisitos devem ser satisfeitos. Isto é, uma malha triangular deve possuir determinadas propriedades para que a solução numérica tenha qualidade. As propriedades de uma malha são definidas pelo número, forma e tamanho de seus elementos (MALISKA, 2004). O tempo de processamento ou Tempo de CPU (que é o tempo necessário para que o processador realize as operações matemáticas necessárias e apresente um resultado numérico final) e a memória utilizada para a geração da malha também são importantes. Satisfazer aos critérios de boa qualidade de malha e minimizar a memória e o tempo de processamento são processos contrários, pois melhorar a qualidade de uma malha significa, quase sempre, aumentar o esforço computacional. Outra importante propriedade de uma malha é a sua coincidência com a fronteira, pois disso depende a correta aplicação de condições de contorno. O controle do tamanho dos elementos é um parâmetro mais acessível que o controle da forma do elemento.

Em caso de malha com elementos triangulares, por exemplo, cada triângulo deve ser o mais próximo do equilátero possível, pois isso permite que as funções de interpolação representem bem as variáveis dentro do triângulo, com pesos semelhantes para os três pontos nodais. Se o elemento triangular de uma malha tem forma isósceles, isso equivale, em malhas de elementos quadriláteros, a um elemento com razão de aspecto muito alta. Isto causa anisotropia nos coeficientes, baixando a taxa de convergência do processo de solução do sistema linear oriundo da discretização das EDPs envolvidas no modelo matemático (CORDAZZO, 2006).

Para geração de uma malha triangular, é necessária uma triangulação. A triangulação fornece uma estrutura combinatória a um conjunto de pontos, neste caso, três. Um algoritmo de triangulação fornece regras para conectar pontos próximos. A Triangulação de Delaunay conecta pontos baseando-se nos seguintes critérios (MALISKA, 2004):

- a) Maximização do mínimo ângulo interno dos triângulos;
- b) Minimização do máximo circuncírculo das arestas; e
- c) Minimização do máximo mínimo círculo de contenção das arestas.

Esses três critérios em conjunto garantem a geração de “boas” malhas tanto para os métodos numéricos que empregam o próprio elemento como volume de controle quanto para

aqueles que empregam o dual (Diagrama de Voronoi) da triangulação. Dado um conjunto de pontos do plano, este é dividido em polígonos de Voronoi, associados a cada ponto. O conjunto de todos os polígonos forma o Diagrama (Tesselação) de Voronoi (SANTOS et al., 1996).

A Triangulação de Delaunay, como dual do Diagrama de Voronoi, consiste na interligação, através de segmentos de reta, dos pontos cujos polígonos de Voronoi são adjacentes. A Fig. 2.1 apresenta o Diagrama de Voronoi e a Triangulação de Delaunay, para o mesmo conjunto de pontos.

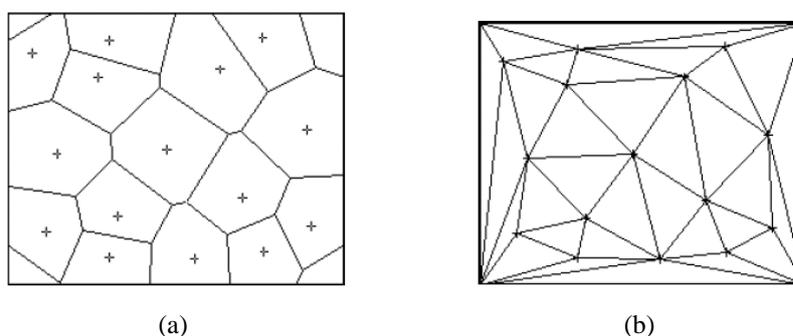


FIGURA 2.1 – (a) DIAGRAMA DE VORONOI
(b) TRIANGULAÇÃO DE DELAUNAY

FONTE: SANTOS et al., (1996)

Em Santos et al. (1996), a utilização de Diagramas de Voronoi, conjuntamente com o MVF na resolução de um problema de condução de calor, é comparada com a sua solução analítica. É apresentada uma análise sobre a origem dos erros numéricos. Infere-se que o desaparecimento dos erros parece ter forte ligação com a regularidade da malha.

Sugestões, incluindo algoritmos para geração de malhas não estruturadas, podem ser encontradas em Tannehill et al. (1997). Em Maliska (2004), é tratado o melhoramento e adaptatividade de malhas, após o processo de geração.

Melhorar ou refinar uma malha (não estruturada) significa buscar melhorar ângulos, formas e áreas dos elementos a fim de suavizar a malha e aumentar sua qualidade sem alterar o número de elementos. Contudo, a distinção entre refino e a adaptação de uma malha não é clara na literatura.

De acordo com a revisão bibliográfica, um grande esforço de pesquisa vem sendo feito quanto ao desenvolvimento de métodos numéricos para escoamento de fluidos nos quais malhas não estruturadas são usadas juntamente com o Método dos Volumes Finitos (FAZENDA, 2002; SCHNEIDER e MALISKA, 2002; ARAÚJO, 2004; SCHNEIDER e

MARCHI, 2004, ESTÁCIO, 2004; CASTELO, 2006; GONÇALVES, 2007). Uma denominação adequada para tais métodos seria EbFVM – *Element-based Finite Volume Methods*, pelo uso de malhas não estruturadas triangulares que dão origem aos volumes finitos, também denominados volumes de controle e pelos passos seguidos na formulação, semelhantes aos da formulação clássica de elementos finitos (MALISKA, 2004). Em Cordazzo (2006), pode ser vista uma aplicação do EbFVM à simulação de reservatórios de petróleo.

2.3 DISCRETIZAÇÃO DE EQUAÇÕES

Após a discretização do domínio de cálculo (geração da malha), um método numérico tem como tarefa resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita. Esse processo é chamado discretização das equações. Para tanto, conforme já comentado, existem técnicas como MDF, MEF e MVF, entre outras.

Historicamente, o MDF foi sempre empregado na área de mecânica dos fluidos, enquanto o MEF o foi para área estrutural na solução de problemas de elasticidade. Obviamente, do ponto de vista físico, tais problemas são completamente diferentes, uma vez que escoamentos envolvem não linearidades e os de elasticidade têm características lineares. Devido às dificuldades no tratamento das não linearidades e o árduo problema de acoplamento entre equações, no MDF foi deixado em segundo plano o tratamento de geometrias complexas. Por esse motivo, muitos equivocadamente vinculam o método com os sistemas de coordenadas ortogonais, como o cartesiano, o cilíndrico e o esférico, quando na verdade, ele pode ser aplicado a qualquer tipo de malha, mesmo não estruturada (MALISKA, 2004).

Por outro lado, o MEF emprega malhas não estruturadas (inclusive de tipo triangular), o que permite resolver problemas em geometrias complexas. Segundo Maliska (2004), até o início da década de 1970, tinha-se, portanto, o MDF com grande aplicabilidade na área de fluidos, mas sem habilidades no tratamento de geometrias complexas, enquanto que o MEF, hábil no tratamento das geometrias complexas, não possuía ferramentas para tratar os termos advectivos presentes nas equações do movimento. Para atenuar tal dificuldade, o Método de Garlekin passou a ser utilizado em elementos finitos para problemas de advecção, sem muito sucesso, uma vez que o mesmo é adequado apenas para problemas puramente difusivos. Descobriu-se que o uso do Método de Garlekin em elementos finitos, é equivalente ao uso das

diferenças centrais em MDF, ambos produzindo instabilidades em problemas de advecção dominante.

Esses e outros problemas motivaram pesquisas para que se aprimorasse o MVF, no qual as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação no volume elementar, o que torna o método conservativo em nível discreto. Devido à possibilidade de associar interpretação física à matemática, a utilização do MVF é tendência em CFD (ARAÚJO, 2004; NORILER et al., 2004; OLIVEIRA, 2005; LACERDA et al., 2009).

A técnica dos volumes finitos vale para qualquer sistema coordenado, desde que sejam respeitadas as peculiaridades de cada sistema. O sistema de coordenadas cartesianas, apesar da simplicidade, é bastante limitado. Quando o interesse for abordar problemas reais de engenharia, nos quais quase sempre a geometria é irregular, deve-se optar pelo sistema de coordenadas que melhor se adapte.

Um breve comparativo entre os diferentes métodos de discretização de equações é apresentado por Silva (2010). Por exemplo, para o autor, MDF, MEF e MVF consistem basicamente no seguinte:

O MDF descreve as incógnitas do problema por meio de valores pontuais nos pontos nodais de uma malha estruturada. As derivadas que aparecem nas equações de transporte são substituídas pelas diferenças finitas, levando a um conjunto de equações algébricas, uma para cada ponto de uma determinada malha.

O MEF utiliza funções simples (por exemplo, lineares ou quadráticas) para descrever as variáveis a serem calculadas dentro de cada elemento. Estas funções simples são nulas fora do elemento considerado. Somando-se as aproximações para todos os elementos obtém-se uma aproximação funcional para cada variável em todo o domínio de cálculo. As equações de transporte são plenamente satisfeitas pela solução exata do problema. Quando as funções aproximadas para as variáveis são substituídas nas equações de transporte, elas deixam de ser exatas e cada uma delas tem um resíduo que pode ser usado para medir o erro da aproximação. Cada equação aproximada é multiplicada por um conjunto de funções peso e integrada no domínio de cálculo. Como resultado, obtém-se um sistema de equações algébricas para determinar os coeficientes de cada uma das aproximações funcionais.

O MVF é a técnica de CFD mais bem estabelecida e usada para propósitos gerais. Esta técnica parte da integração formal das equações de transporte que regem o escoamento do fluido em todos os volumes de controle obtidos pela discretização do domínio. Nesta integração, a forma conservativa de cada equação é usada para que seja possível transformar as integrais de volume dos divergentes dos fluxos advectivos e difusivos em integrais de área dos fluxos, normais à superfície dos volumes de controle, através da aplicação do Teorema da Divergência de Gauss. A acurácia destas aproximações e da representação obtida para os fluxos através das superfícies dos volumes de controle são os aspectos mais importantes no MVF. Como os outros métodos, as equações finais levam a um sistema algébrico de equações. A integração da equação em cada volume de controle diferencia o método dos volumes finitos de todas as outras técnicas numéricas de CFD (SILVA, 2010).

O MVF utiliza o conceito de fluxo entre regiões ou volumes adjacentes chamados volumes de controle. Pode-se definir fluxo de uma grandeza como a quantidade dessa grandeza que atravessa uma fronteira com área A ou uma fronteira com volume V , por unidade de tempo. No MVF, o fluxo de uma grandeza Λ , que atravessa as fronteiras do volume de controle ν por unidade de tempo, é calculado por integração, sobre essas fronteiras, da diferença entre os fluxos que entram e os que saem de ν . Esses fluxos são, basicamente, de dois tipos (FORTUNA, 2000):

- Fluxos Advectivos: devido à velocidade do fluido;
- Fluxos Difusivos: causados pela não uniformidade da distribuição espacial de Λ . Considerando Λ como temperatura, surge um fluxo de calor em certa direção quando há um gradiente de temperatura presente nessa direção. Fluxos difusivos podem existir independentemente de haver ou não escoamento, ou seja, mesmo que a velocidade do fluido seja nula.

O fato de o fluxo ser avaliado na face de um volume de controle pode trazer dificuldades no tratamento de volumes que estejam nos contornos de um domínio. Um dos tratamentos possíveis para estes últimos é considerar o ponto central do volume de controle sobre a fronteira. Segundo Maliska (2004) isso origina dois problemas: nos casos bidimensionais e tridimensionais pode haver volumes inteiros, meios-volumes, quarto de volumes e oitavo de volumes e, em uma estrutura computacional mais geral, esse fato traz problemas para a uniformidade das sub-rotinas de cálculo dos coeficientes; o segundo problema aparece quando a propriedade de fronteira é conhecida, pois, nesse caso, não havendo necessidade de se criar uma equação para os volumes de fronteira, perde-se a característica conservativa do método para os mesmos.

Na tentativa de solucionar esses problemas, e fazer valer a conservação nos contornos, são sugeridos por Maliska (2004) os **volumes fictícios** e, preferencialmente, devido ao embasamento físico e à possibilidade de generalização para sistemas coordenados mais complexos, o **balanço para os volumes de fronteira**. Um exemplo de aplicação do MVF à solução da equação da pressão, usando o método das medianas, no qual os volumes de controle são gerados por uma triangulação de Delaunay, pode ser visto em Estácio (2004).

2.4 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Após a definição da malha adequada, para que seja possível tratar numericamente uma EDP, esta deve ser expressa na forma de operações aritméticas que o computador possa executar. Essencialmente, as EDPs são substituídas por expressões algébricas, ou seja, são discretizadas. Tais equações discretizadas é que são utilizadas na resolução numérica aproximada do problema.

O procedimento para obtenção da versão discreta da EDP que modela o problema avaliado neste trabalho é o MVF, intrinsecamente ligado ao conceito de fluxo entre volumes adjacentes. No método, a quantidade de determinada grandeza que atravessa as fronteiras do volume de controle por unidade de tempo é calculada pela integração, sobre essas fronteiras, da diferença entre os fluxos que entram e os que saem do volume. O resultado dessa integração, mais a produção do volume, isto é, a diferença entre a geração e o consumo de fluxo dentro do volume é igual à variação temporal do fluxo dentro do volume.

Em suma, o MVF realiza um balanço de conservação da propriedade para cada volume de controle elementar para obter a correspondente equação aproximada (MALISKA, 2004). A interpretação física direta das equações resultantes da aplicação do MVF, bem como a possibilidade de aplicá-lo diretamente sobre malhas com espaçamentos não uniformes, são duas razões que podem explicar sua popularidade, comprovada pelo fato de ser usado na maioria dos códigos comerciais de CFD (SILVA, 2010). Por exemplo, o trabalho de O'Callaghan et al. (2003) faz um comparativo, avaliando o fluxo de sangue em uma artéria femural, entre dois pacotes comerciais de softwares disponíveis: o Adina 7.5 que utiliza o MEF e o Fluent Europe 6.0 que utiliza o MVF. O software baseado no MVF provê resultados mais precisos, mas requer mais memória e tem maior custo computacional.

Cumprida a etapa de discretização das equações, o próximo passo para obtenção das soluções numéricas é resolver o sistema de equações algébricas resultante, através de técnicas de solução numérica. Neste trabalho, foi usado o método iterativo Gauss-Seidel como *solver*, e a técnica *multigrid* algébrico (AMG), para acelerar a convergência das soluções (PINTO e MARCHI, 2006) em malhas triangulares; para as quadrangulares, a técnica aplicada foi o *multigrid* geométrico (GMG). Além disso, é utilizada a técnica de Múltiplas Extrapolações de Richardson (MER).

Basicamente, a aplicação do MVF a um modelo matemático é feita em quatro etapas: discretização do domínio com volumes de controle, discretização da equação governante,

$$\iiint_{VC} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \phi) dV = \iiint_{VC} \vec{\nabla} \cdot (\Gamma \vec{\nabla} \phi) dV + \iiint_{VC} S \phi dV \quad (2.1)$$

onde

dV = elemento de volume para o VC

Na terceira etapa, é aplicado o Teorema da Divergência de Gauss. Ele estabelece (BAJPAI et al., 1980; SWOKOWSKI, 1994; STWART, 2009) o fluxo de um campo vetorial sobre uma superfície fechada (S), fronteira de uma região do espaço tridimensional (Q). Admitindo-se que a região Q do espaço seja tal que as integrais triplas possam ser calculadas e que as integrais de superfície possam ser calculadas sobre a fronteira S em questão, enuncia-se que:

$$\iint_S \vec{F} \cdot \vec{n} dA = \iiint_Q \vec{\nabla} \cdot \vec{F} dV \quad (2.2)$$

onde:

\vec{F} = função vetorial dotada de derivadas parciais contínuas em Q

dA = elemento de área da superfície do elemento de volume dV

\vec{n} = vetor normal unitário exterior a S em um ponto $P \in S$

Como se nota, a integral de volume se transforma em uma integral de superfície. Aplicando o Teorema da Eq. (2.2) à Eq. (2.1), obtém-se:

$$\iint_A (\rho \vec{v} \phi) \cdot \vec{n} dA = \iint_A (\Gamma \vec{\nabla} \phi) \cdot \vec{n} dA + \iiint_{VC} S \phi dV \quad (2.3)$$

Note-se que, até esta etapa, nenhuma aproximação numérica foi usada. Isso ocorre apenas na quarta etapa, na qual as funções de interpolação (ou esquemas numéricos) são usadas, conectando o nó P genérico aos seus vizinhos, para que seja resolvida a Eq. (2.3). As funções de interpolação têm objetivo de avaliar o valor de uma propriedade genérica ϕ na interface do volume de controle, bem como suas derivadas.

Tradicionalmente o MVF utiliza duas funções de interpolação para tal tarefa: uma para determinação dos valores das derivadas de ϕ e outra para determinação dos valores de ϕ nas interfaces de integração. Normalmente, na avaliação das derivadas é suficiente o uso de um

esquema de diferenças centrais e na avaliação de ϕ , emprega-se algum mecanismo que considere os efeitos convectivos do problema. Existem diversos esquemas para a aproximação de derivadas. Em Schneider e Maliska (2002) é apresentada uma metodologia usando malhas não-estruturadas e formada por elementos unidirecionais, cujo esquema de interpolação segue a direção média do escoamento calculado entre dois pontos. Neste trabalho, a função de interpolação utilizada para aproximação das variáveis é linear do tipo diferença central para a temperatura e as taxas de transferência de calor (CDS-2); para a variável Temperatura Média, a aproximação usada foi a integração numérica por meio da regra do retângulo. No apêndice A, há exemplos de aplicação do MVF, incluindo as aproximações, em malha quadrangular e triangular.

2.5 ERRO NUMÉRICO

Vários tipos de erros estão, em geral, associados à modelagem e à solução numérica das EDPs que representam um fenômeno físico. Nem sempre esses erros são fáceis de identificar; em geral se misturam, podendo ou não haver algum cancelamento.

É importante que se saiba da existência desses erros para que se faça uma análise realística da qualidade da solução numérica obtida. Na prática, o valor verdadeiro da solução analítica exata é desconhecido e, portanto, consegue-se apenas estimar o valor do erro numérico. Este valor estimado é denominado **erro numérico estimado**. Os processos para estimar cada tipo de erro são a **análise da incerteza** (ABNT, 1997), para erros experimentais; a **validação**, para erros de modelagem e a **verificação**, para erros numéricos.

Conforme AIAA (1998), a **verificação** ou **validação numérica** (MALISKA, 2004) determina quanto um modelo numérico, aplicado a um modelo matemático representativo de um problema real, foi corretamente implementado, ou, é o processo que demonstra quão corretamente um modelo numérico resolve a EDP governante de um modelo matemático (KNUPP e SALARI, 2002). Isso é factível quando se comparam soluções numéricas obtidas às soluções consideradas “de referência” que podem analíticas, numéricas ou mesmo experimentais (FORTUNA, 2000), que não levam em conta quanto o modelo numérico resolvido é representativo do fenômeno real. A **validação** ou **validação física** (MALISKA, 2004), avalia quanto o modelo matemático se aproxima do fenômeno real em consideração, através de comparações com dados experimentais. Pode-se concluir, portanto, que a verificação é uma atividade matemática, relacionada à Análise Numérica, e que, a validação, é uma atividade de engenharia. Em CFD, a incerteza é definida como “a *deficiência de*

potencial em qualquer fase ou atividade do processo de modelagem que é devido à falta de conhecimento” e erro como “reconhecida deficiência em qualquer fase ou atividade de modelagem e simulação que não é devida à falta de conhecimento” (OBERKAMPF e BLOTTER, 1998, apud PERES, 2008, p.12). Neste trabalho, considera-se que o Erro Numérico é composto por quatro fontes distintas (TANNEHILL et al., 1997):

1. Erro de truncamento – origina-se das aproximações numéricas, advindas da Série de Taylor, empregadas na discretização de um modelo matemático (FERZIGER e PERIC, 2002);
2. Erro de iteração – é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração (FERZIGER e PERIC, 2002). As equações discretizadas resultam das aproximações numéricas feitas sobre um modelo matemático. De forma geral, o erro de iteração diminui com o aumento do número de iterações;
3. Erro de arredondamento – ocorre devido à representação finita dos números reais nas computações, ou seja, o truncamento de um valor em uma quantidade limitada de dígitos. Ele aumenta com a redução do tamanho dos elementos da malha, isto é, com o aumento do número de nós, elementos ou volumes da malha. É possível mitigar os efeitos do erro de arredondamento usando um número maior de dígitos significativos na computação (ROY, 2005);
4. Erro de programação – é inerente ao programador e à utilização do código implementado, incluindo basicamente (ROACHE, 1998): os erros resultantes do uso incorreto de um modelo numérico na aproximação de um modelo matemático, os erros gerados na implementação do modelo numérico em um programa computacional e os erros cometidos no uso do programa computacional durante a obtenção da solução numérica.

A discordância de nomenclaturas (CELIK e ZHANG, 1995) percebidas pela utilização de termos distintos (ROACHE, 1998, AIAA, 1998 e MALISKA, 2004) e o fato de não existirem padrões para efetuar o processo de **verificação** (METHA, 1996; OBERKAMPF e BLOTTNER, 1998) ficam novamente visíveis na consideração de Fortuna (2000) a respeito das fontes do erro numérico (5 e não 4!). São elas:

1. Erros de modelagem – cometidos na elaboração do modelo matemático que representa o fenômeno físico. Incluem as simplificações feitas, como, por exemplo, supor que coeficientes são constantes ou que determinados termos possam ser desprezados. O resultado é que a solução numérica fornecida pela implementação do modelo, em geral, apresenta diferenças em relação à solução analítica do problema físico. Dependendo da magnitude dessas diferenças, a solução numérica obtida pode não ser representativa do fenômeno físico.
2. Erros geométricos – quando o sistema de coordenadas não está alinhado com a fronteira de domínio computacional, muitas vezes é necessária a realização de algum tipo de interpolação das condições de fronteira (ou contorno). A Fig. 2.3 mostra uma fronteira F não alinhada com o sistema coordenado adotado. Neste caso, por exemplo, o cálculo do fluxo de calor q normal à F perto do ponto P exige interpolações. Essas interpolações utilizam valores da temperatura em pontos adjacentes a P , introduzindo imprecisões que podem afetar negativamente a qualidade da solução numérica. Em geral, esse erro pode ser reduzido com o refinamento da malha, o que aumenta o custo computacional da solução numérica por exigir, por exemplo, um sistema de coordenadas generalizadas.
3. Erros de discretização – é o erro local de truncamento. Surge devido ao truncamento das séries de Taylor empregadas nas aproximações das derivadas por expressões algébricas. É passível de redução ao se utilizar um aumento da ordem de discretização, o que, no entanto, não melhora a qualidade de uma solução numérica. Aliás, quanto maior a ordem de discretização, mais sujeito a instabilidades é o método numérico que a utiliza. O erro de discretização é preferivelmente amenizado quando se faz refinamento de malhas.
4. Erros de convergência – quando se usa um método iterativo (como Gauss Seidel) de solução, deve-se escolher um critério de parada ou convergência para encerrar os cálculos. Se o critério for número de iterações, devido à arquitetura dos computadores modernos, esse erro pode ser praticamente eliminado, efetuando-se tantas iterações quantas se queira.
5. Erros de arredondamento – oriundos da representação finita de números no computador. Não pode ser evitado, mas, pela utilização de precisão dupla (e até mesmo quádrupla, para computadores cujo *hardware*, sistema operacional e compilador sejam do tipo 64 *bits*) nas operações aritméticas e na representação dos números pelo computador, pode ter seus efeitos atenuados.

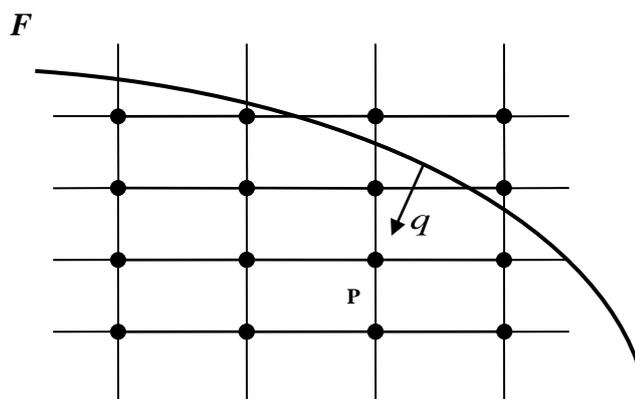


FIGURA 2.3 – FRONTEIRA NÃO-ALINHADA
(adaptada de FORTUNA, 2000)

A magnitude aceitável para o erro numérico depende da finalidade da solução numérica, dos recursos financeiros, do tempo para realizar as simulações e dos recursos computacionais disponíveis. A principal meta para pesquisadores em CFD é definir condições suficientes para estimar erros de discretização com acurácia e confiabilidade. Estes dois termos são assim definidos:

uma estimativa de erro é acurada quando a razão entre incerteza (U) e erro exato (E) é aproximadamente igual à unidade; enquanto que, uma estimativa de erro é confiável quando a razão entre incerteza (U) e erro exato (E) é maior ou igual à unidade. Evidentemente, estas duas definições só podem ser empregadas se for conhecida a solução analítica exata da variável de interesse. (MARCHI e SILVA, 1999, p. 3)

Quando o erro numérico é maior do que o aceitável, fica comprometida a confiabilidade da utilização da solução numérica. Se por outro lado for menor do que o necessário, há desperdício de recursos. O erro numérico deve ser menor que o erro de modelagem quando se trata da validação de modelos matemáticos, como no caso de escoamentos turbulentos. A qualidade de uma estimativa de erro pode ser avaliada através da razão entre o erro estimado (U) e o erro verdadeiro (E) (MARCHI, 2001). Quanto mais próximo da unidade estiver esta razão, mais acurada é a estimativa do erro. Quando esta razão é maior ou igual à unidade, a estimativa de erro é considerada confiável.

É possível minimizar os efeitos de algumas das fontes de erro numérico. Por exemplo, o erro de iteração pode ser minimizado quando se aumenta o número de iterações em um experimento numérico; o erro de arredondamento pode ser reduzido ao se utilizar um número maior de dígitos significativos na computação e o erro de programação pode ser mitigado ao

serem feitas várias revisões em um código. Neste caso, a tarefa de avaliar o erro numérico resume-se a se avaliar apenas o erro de truncamento; então, o erro numérico passa a ser denominado **erro de discretização**, que segundo Ferziger e Peric (2002), pode ser estimado pela comparação entre soluções numéricas em múltiplas malhas, sistematicamente refinadas. Para Ferziger e Peric (1996) o erro de discretização é a diferença entre a solução convergida proveniente de equações discretizadas e a solução exata do problema em domínio contínuo.

Quando se resolve uma EDP numericamente, é natural que se questione se a solução calculada se aproxima da solução real (analítica) da EDP. Isso depende da consistência, estabilidade e convergência do esquema numérico empregado. Um método numérico é **estável** quando os erros ou perturbações na solução não são amplificados sem limite.

A **consistência** de um esquema reside na proximidade entre as equações discretizadas e suas respectivas equações diferenciais parciais em domínio contínuo. Quando o tamanho dos elementos do domínio discreto ($\Delta x, \Delta y$, etc) tende a zero, isto é: sendo ϕ uma variável dependente de x e $\Delta x \rightarrow 0$, o erro de discretização tende a zero e a EDP é recuperada, ou seja (HIRSCH, 1988):

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x)}{\Delta x} = \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.4)$$

A consistência de uma discretização pode ser verificada por se substituir as expansões da Série de Taylor na equação de volumes finitos (válido também no MDF, onde é, inclusive, mais fácil verificar a consistência), fazendo com que o tamanho dos elementos tenda a zero. Esse é, essencialmente, o caminho inverso da discretização. Embora possa parecer óbvio que toda discretização seja consistente com a EDP original, algumas delas não o são, ou o são em apenas alguns casos. Um exemplo disso é a discretização de DuFort-Frankel aplicada à equação transiente de difusão (TANNEHILL et al., 1997), cuja consistência é condicional. É importante que se verifique se uma discretização é consistente ou não; caso contrário, a solução numérica obtida não seria representativa da solução da EDP.

Em caso de **consistência** comprovada, a próxima etapa é verificar a **convergência** do esquema numérico. Caso a mesma se aproxime da solução analítica da EDP, diz-se que o método adotado é convergente. Em verdade, a **convergência** é resultante de **consistência** aliada à **estabilidade** do esquema. Como afirma Fletcher (1992), o conceito de estabilidade está relacionado ao crescimento, ou à diminuição dos erros introduzidos nos cálculos; um método estável é aquele que não diverge conforme as iterações progredem, ou seja, fornece

resultados que se aproximam cada vez mais da solução numérica real do sistema de equações. Pode-se mensurar a convergência de um esquema numérico estimando-se o erro de discretização cometido nas equações.

A concepção de padrões de análise de erro só é segura se verificada em modelos matemáticos com solução analítica conhecida, pois, neste caso, é possível mensurar exatamente qual o erro numérico cometido e compará-lo com as incertezas calculadas pelos estimadores de erros a serem empregados. Para o cumprimento da proposta deste trabalho, descrita na Seção 1.4, os modelos obedecem tal premissa e, além disso, contêm efeitos advectivos e/ou difusivos usualmente presentes nos problemas de CFD.

2.6 ESTIMATIVAS DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Com relação à proposta desta tese, presume-se que não existirão erros de programação na obtenção das soluções numéricas. Além disso, para cada modelo numérico a ser implementado empregar-se-á precisão adequada das variáveis para obtenção das soluções, isto é, os erros de arredondamento serão muito menores do que os erros de truncamento. Para que os erros de iteração sejam minimizados, um bom critério de convergência segundo Roy (2005), é não apenas avaliar a diferença entre sucessivas iterações, antes, avaliar o resíduo a cada iteração, que, segundo Ferziger e Peric (2002) é definido genericamente por:

$$R^n = M - N\lambda^n \quad (2.5)$$

onde:

R^n = resíduo na iteração n M , N = vetor e matriz, respectivamente, associados ao sistema algébrico de equações discretizadas que representa as EDPs do modelo matemático.

λ^n = solução numérica da variável de interesse na iteração n .

O critério para se interromper o processo iterativo com base no resíduo das equações é:

$$\frac{l^n}{l^0} \leq Tol \rightarrow \text{parar} \quad (2.6)$$

em que:

l^n = norma do resíduo na iteração n

l^0 = norma do resíduo na iteração zero, isto é, antes de se iniciar o processo iterativo; neste caso, o resíduo é calculado com base na estimativa inicial da solução

Tol = tolerância admitida para interromper o processo iterativo, em geral, 10^{-4} ou 10^{-5}

São usadas, geralmente, as normas (KREYSZIG, 1999) l_1, l_2 e l_3 . No caso da primeira,

$$l_1^n = \sum_{p=1}^N |R_p^n| \quad (2.7)$$

para P (notação para um nó genérico da malha) variando de 1 até N .

Portanto, o foco primário deste trabalho será estimar erros de soluções numéricas causados pelos erros de truncamento e, conforme já citado, o erro numérico passa a ser chamado erro de discretização. A equação geral do erro de discretização é dada genericamente pela Eq.(2.8) (RICHARDSON, 1910; ROACHE, 1998; FERZIGER e PERIC, 2002; MARCHI, 2001):

$$E(\phi) = C_1 h^{PL} + C_2 h^{P2} + C_3 h^{P3} + \dots \quad (2.8)$$

onde:

C_1, C_2, C_3, \dots = Coeficientes numéricos que independem de h ;

$PL, P2, P3, \dots$ = ordens verdadeiras de $E(\phi)$; números inteiros positivos;

PL = ordem assintótica de $E(\phi)$; $PL \geq 1$; indica a inclinação da curva do erro em um gráfico $\log(|E|)$ versus $\log(h)$ para $h \rightarrow 0$;

ϕ = variável de interesse;

h = tamanho dos elementos da malha.

As ordens verdadeiras (PV) são os expoentes de h dos termos não-nulos na equação do erro de discretização. No caso da Eq.(2.8) são dadas por PL , $P1$, $P2$ e $P3$. As ordens verdadeiras seguem a relação $PL < P1 < P2 < P3 < \text{etc.}$ São números inteiros positivos que em geral constituem uma série aritmética. Para um caso geral, o número de ordens verdadeiras é infinito. O menor expoente de h na equação geral do erro de truncamento é chamado de ordem assintótica (PL). Quando o tamanho dos elementos da malha tende a zero, tem-se que o primeiro termo da Eq.(2.8) é o principal componente, isto é, domina o valor total do erro de discretização. Conhecer a ordem do erro numérico cometido em uma solução numérica permite a avaliação da redução do erro em função do tamanho h dos elementos da malha. Há dois tipos de estimativas do erro de discretização: *a priori* e *a posteriori* das soluções numéricas (MARCHI, 2001).

2.6.1 ESTIMATIVAS A PRIORI

Segundo Roache (1997), podem ser definidos três tipos de ordem de convergência para soluções numéricas: teórica, aparente e assintótica. A ordem de convergência da solução numérica é um parâmetro que influencia diretamente o uso do estimador de Richardson, cujo objetivo é estimar o erro de discretização ou avaliar a incerteza de soluções numéricas. Em Marchi e Silva (1999), essas ordens são assim definidas:

- A **ordem teórica** é obtida a partir da análise da discretização do modelo matemático empregada, usando, por exemplo, a série de Taylor. Para o caso do esquema CDS-2, é igual a 2.
- A **ordem aparente** é calculada com base em três soluções numéricas obtidas em três malhas diferentes (para esta tese, o analisador Richardson 3.0 faz esses cálculos).
- A **ordem assintótica** é o valor para o qual converge a ordem aparente quando a malha é refinada.

O objetivo de uma estimativa *a priori* é obter a ordem assintótica da equação diferencial discretizada. No caso de $h \rightarrow 0$, a Eq. (2.8) se transforma na Eq. (2.9):

$$E(\phi) = C_1 h^{PL} \quad (2.9)$$

Assim, antes de se obter qualquer solução numérica é possível prever o comportamento assintótico do erro de discretização com relação a h e PL . Da Eq. (2.9) é possível concluir que quando $h \rightarrow 0$, $E(\phi) \rightarrow 0$. Tanto o valor C_1 quanto o valor PL dependem das aproximações numéricas empregadas. Não é possível obter o valor de $E(\phi)$ porque C_1 é um valor desconhecido. Porém, conhecendo-se PL e duas soluções numéricas em malhas diferentes (1 \rightarrow sub-índice indicando a malha fina; 2 \rightarrow sub-índice indicando a malha grossa; isto é: $h_1 < h_2$) faz-se a seguinte análise:

$$E(\phi_1) = C_1 h_1^{PL} \quad (2.10)$$

$$E(\phi_2) = C_1 h_2^{PL} \quad (2.11)$$

portanto,

$$\frac{E(\phi_1)}{E(\phi_2)} = \frac{C_1 h_1^{PL}}{C_1 h_2^{PL}} = \left(\frac{h_1}{h_2} \right)^{PL} \quad (2.12)$$

Isto é, quanto maior é o PL , maior é a redução do erro à medida que h é reduzido. Para o caso de $h_1 = \frac{h_2}{2}$ e $PL = 2$, tem-se:

$$\frac{E(\phi_1)}{E(\phi_2)} = \left(\frac{h_2}{2} \right)^2 = \left(\frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{4} \quad (2.13)$$

Ou seja, a redução à metade do tamanho dos elementos da malha reduziu a $\frac{1}{4}$ o erro de discretização da malha grossa.

2.6.2 ESTIMATIVAS A POSTERIORI

As estimativas do erro *a posteriori* são usadas para estimar efetivamente a magnitude do erro de discretização. Existem vários métodos que podem ser empregados. Eles podem ser divididos em dois grandes conjuntos, conforme aplicabilidade:

- $E(\phi)$ é baseado na solução numérica obtida numa única malha. Em geral o MEF (ZHU e ZIENKIEWICZ, 1990) se enquadra neste conjunto;
- $E(\phi)$ é baseado nas soluções numéricas obtidas em múltiplas malhas. Em geral o MDF e MVF se enquadram neste conjunto. Alguns estimadores deste tipo são: de Richardson, GCI e Multicoeficientes (ROACHE, 1998; MARCHI, 2001).

Praticamente todos os estimadores existentes são alguma variação do estimador de Richardson.

2.7 ESTIMADOR DE RICHARDSON

Apresentam-se nesta seção conceitos e expressões para o cálculo da ordem efetiva do erro de discretização e ordem aparente do erro numérico estimado. Estes dois novos tipos de ordens permitem verificar *a posteriori* das soluções numéricas se a ordem assintótica dos erros de truncamento é atingida, lembrando-se que esta ordem é um resultado teórico, obtido *a priori* das soluções numéricas. Essas verificações só são possíveis de se realizar quando as demais fontes de erro numérico são muito menores do que os erros de truncamento. A ordem aparente e a ordem efetiva são usadas no estimador de Richardson. Considere-se, inicialmente, o estimador de Richardson baseado na ordem assintótica.

O erro numérico estimado (U) de uma solução numérica (ϕ), segundo o estimador de Richardson (ROACHE, 1994) é obtido admitindo-se que:

$$U_{RI}(\phi) = K_U h^{PL} \quad (2.14)$$

onde:

K_U = coeficiente que independe de h ;

h = tamanho dos elementos da malha;

PL = ordem assintótica dos erros de truncamento.

Aplicando-se o estimador de Richardson e substituindo a Eq. (2.14) na Eq. (1.2), tem-se que:

$$\phi_\infty - \phi = K_U h^{PL} \quad (2.15)$$

Aplicando-se a Eq. (2.15) a duas malhas diferentes ($h_1 \rightarrow$ malha fina e $h_2 \rightarrow$ malha grossa) cujas soluções numéricas são ϕ_1 e ϕ_2 , obtém-se:

$$\phi_\infty - \phi_1 = K_U h_1^{PL} \quad (2.16)$$

$$\phi_\infty - \phi_2 = K_U h_2^{PL} \quad (2.17)$$

Nas Eq. (2.16) e Eq. (2.17) são conhecidos os valores de ϕ_1 , ϕ_2 , h_1 , h_2 e PL . As incógnitas são ϕ_∞ e K_U . A solução para ϕ_∞ é dada pela Eq. (2.18):

$$\phi_\infty(\phi_1, \phi_2, PL) = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{PL} - 1)} \quad (2.18)$$

onde a razão de refino de malha (q) é dada por:

$$q = \frac{h_2}{h_1} \quad (2.19)$$

A Eq. (2.18) representa a extrapolação de Richardson (ROACHE, 1994) baseada na ordem assintótica (PL). Com sua substituição na Eq. (1.2), o erro numérico de discretização

estimado, segundo o estimador de Richardson, para a solução numérica ϕ_1 na malha fina (h_1) é dado pela Eq. (2.20).

$$U_{RI}(\phi_1, PL) = \frac{\phi_1 - \phi_2}{q^{PL} - 1} \quad (2.20)$$

Deve-se perceber que o erro numérico estimado dado pela Eq. (2.20) tem sinal, que pode ser negativo ou positivo. Na sequência, é considerado o estimador de Richardson baseado na ordem aparente.

De acordo com Marchi (2001), a ordem aparente (PU) é definida como a inclinação local da curva do erro numérico estimado *versus* o tamanho (h) dos elementos da malha em um gráfico logarítmico. A ordem aparente é baseada em três soluções numéricas em malhas diferentes (SCHNEIDER, 2007). Seu cálculo permite verificar na prática, isto é, *a posteriori* das soluções numéricas, se à medida que h é reduzido, a ordem do erro numérico estimado das soluções numéricas tende à ordem assintótica dos erros de truncamento, ordem esta que é um resultado teórico, obtido *a priori* das soluções numéricas. Reescrevendo a Eq. (2.15) para a ordem aparente, tem-se:

$$\phi_\infty - \phi = K_U h^{PU} \quad (2.21)$$

Aplicando-se a Eq. (2.21) para três soluções numéricas (ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3) obtidas em três malhas diferentes, (h_1 , h_2 e h_3), chega-se a:

$$\phi_\infty - \phi_1 = K_U h_1^{PU} \quad (2.22)$$

$$\phi_\infty - \phi_2 = K_U h_2^{PU} \quad (2.23)$$

$$\phi_\infty - \phi_3 = K_U h_3^{PU} \quad (2.24)$$

Nas Equações (2.22), (2.23) e (2.24) são conhecidos os valores ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 , h_1 , h_2 e h_3 , e as incógnitas são ϕ_∞ , K_U e PU . Para razão de refino (q) constante entre as malhas h_1 , h_2 e h_3 , isto é:

$$q = \frac{h_3}{h_2} = \frac{h_2}{h_1} \quad (2.25)$$

a solução das Equações (2.22), (2.23) e (2.24) resulta em:

$$\phi_\infty(\phi_1, \phi_2, \phi_3, PU) = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{PU} - 1)} \quad (2.26)$$

onde:

$$PU = \frac{\log\left(\frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2}\right)}{\log(q)} \quad (2.27)$$

A Eq. (2.26) representa a extrapolação de Richardson com base na ordem aparente (PU). Com a Eq. (2.26) é possível verificar que se $h \rightarrow 0$, $PU \rightarrow PL$, sem qualquer solução analítica, empregando apenas soluções numéricas. Com a substituição da Eq. (2.26) na Eq. (1.2), tem-se:

$$U_{RI}(\phi_1, \phi_2, PU) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{PU} - 1)} \quad (2.28)$$

que é o erro numérico estimado da solução numérica (ϕ_1) na malha fina (h_1). O estimador de Richardson só fornece o valor correto do erro, isto é,

$$U_{RI}(PL) = U_{RI}(PU) = E(\phi_1) \quad (2.29)$$

em dois casos:

1. no caso-limite de $h \rightarrow 0$; e
2. quando a equação do erro de discretização, Eq. (2.8), é composta apenas pelo primeiro termo. Em geral, nenhuma dessas duas situações ocorre na prática e assim,

$$U_{RI}(PL) \neq U_{RI}(PU) \neq E(\phi_1) \quad (2.30)$$

Apesar disso, pode-se demonstrar (MARCHI e SILVA, 2002) que:

$$\frac{U_{RI}(PL)}{E} < 1 < \frac{U_{RI}(PU)}{E} \quad (2.31)$$

quando $PU \rightarrow PL$ monotonicamente com valores inferiores a PL . No caso inverso, isto é, quando $PU \rightarrow PL$ monotonicamente com valores superiores a PL , tem-se:

$$\frac{U_{RI}(PU)}{E} < 1 < \frac{U_{RI}(PL)}{E} \quad (2.32)$$

Além disso, só faz sentido empregar U_{RI} , Eq. (2.14), quando $PU > 0$. Conforme Marchi e Silva (1999), uma solução numérica é acurada quando $\frac{U}{E} \approx 1$; além disso, uma solução numérica é confiável quando $\frac{U}{E} > 1$. Portanto, as inequações representadas pelas Eq.(2.31) e Eq.(2.32) mostram um intervalo de confiança para soluções numéricas avaliadas pelo estimador de Richardson.

2.8 MÉTODO DAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON

A Extrapolação de Richardson é utilizada para gerar resultados com alta precisão, ainda que sejam utilizadas fórmulas de baixa precisão. De acordo com a literatura, “o nome dado ao método refere-se a um documento escrito por Richardson e Gaunt (1927), porém, a ideia por trás da técnica é mais antiga” (BURDEN e FAIRES, 2003, p. 158). Um artigo

interessante relacionado à história e à aplicação da Extrapolação de Richardson, contendo extensa bibliografia, foi escrito por Joyce (1971).

A extrapolação pode ser aplicada sempre que se saiba que uma técnica de aproximação tem um termo indicativo de erro de forma previsível, uma forma que dependa de um parâmetro, normalmente o tamanho do elemento de malha (h). Supondo que para cada valor $h \neq 0$ tenha-se uma fórmula $N(h)$ que aproxime um valor desconhecido M e que o erro de truncamento envolvido com a aproximação tenha a forma que se segue, para uma coleção de constantes conhecidas $k_1, k_2, k_3, k_4, \dots$

$$M - N(h) = k_1 h + k_2 h^2 + k_3 h^3 + k_4 h^4 + \dots \quad (2.33)$$

Na medida em que o erro de truncamento é $O(h)$ (isto é: primeira ordem), pode-se esperar, por exemplo, que:

$$M - N(0,1) \approx 0,1k_1, \quad M - N(0,01) \approx 0,01k_1, \quad (2.34)$$

e, em geral, $M - N(h) \approx k_1 h$, a menos que haja uma grande variação na magnitude das constantes $k_1, k_2, k_3, k_4, \dots$

O objeto da extrapolação é encontrar uma maneira fácil de combinar as melhores aproximações $O(h)$ que não sejam tão precisas, de modo a se produzir fórmulas com um erro de truncamento de ordem mais elevada. Supondo, por exemplo, que se possam combinar as fórmulas $N(h)$ de modo a produzir uma fórmula de aproximação, da forma $O(h^2)$, $\hat{N}(h)$ para M com:

$$M - \hat{N}(h) = \hat{k}_2 h^2 + \hat{k}_3 h^3 + \hat{k}_4 h^4 + \dots \quad (2.35)$$

para toda, ainda desconhecida, coleção de constantes $\hat{k}_2, \hat{k}_3, \hat{k}_4, \dots$. Então tem-se que:

$$M - \hat{N}(0,1) \approx 0,1 \hat{k}_2, \quad M - \hat{N}(0,01) \approx 0,01 \hat{k}_2, \quad (2.36)$$

e assim por diante. Se as constantes k_1 e k_2 são aproximadamente da mesma magnitude, então as aproximações $\hat{N}(h)$ devem ser muito melhores do que as aproximações $N(h)$ correspondentes. A extrapolação continua combinando o $\hat{N}(h)$ de modo a produzir fórmulas com erro de truncamento $O(h^3)$, e assim por diante. Para constatar especificamente como gerar essas fórmulas mais elevadas e aplicação da Extrapolação de Richardson, considere-se Burden e Faires (2003).

A técnica de Múltiplas Extrapolações de Richardson (MER) consiste na aplicação sucessiva da Extrapolação de Richardson com o objetivo de reduzir o erro de discretização de soluções numéricas (SHYY, 2002). Para usar MER é necessário ter a solução numérica da variável de interesse em três ou mais malhas com número de nós diferentes. MER baseia-se na Extrapolação de Richardson, que é mais usada como um estimador do erro de discretização, ou é a base para outros estimadores, como o *Grid Convergence Index* (GCI) de Roache (1994). A estimativa quantitativa do erro numérico é um dever dos analistas de CFD (OBERKAMPF e TRUCANO, 2002). A seguir, são citados alguns trabalhos envolvendo a Extrapolação de Richardson em diversas áreas do conhecimento científico.

Miranda et al. (2000), fazem um estudo de simulação numérica do escoamento de um fluido Newtoniano numa bifurcação. Trata-se de uma etapa de um trabalho mais global de modelagem computacional do escoamento do sangue no sistema circulatório humano, com principal incidência nos fenômenos decorrentes da presença de bifurcações nos vasos sanguíneos. Perante a dificuldade em se obter resultados experimentais pormenorizados no sistema circulatório humano *in loco*, constrói-se um modelo físico-matemático com implementação computacional que simula com suficiente precisão o referido escoamento. São usadas três malhas do tipo semiestruturado, adequado a um domínio não retangular, no caso, uma bifurcação em T; o refinamento aplicado permite a aplicação da técnica de extrapolação de Richardson, com o objetivo de quantificar a incerteza dos resultados.

Em Mioralli (2005), foi realizada a análise térmica de um regenerador rotativo, no qual o processo de transferência de calor foi investigado numericamente. O efeito de vazamento nos valores de temperatura média de mistura na saída de cada escoamento é investigado. Utiliza-se um *software* comercial, e, através de uma extrapolação de Richardson, foi possível obter uma correlação de Nusselt em função de Reynolds para canais corrugados com o tipo de ondulação da matriz sólida do regenerador estudado.

Mercado de opções é o mercado onde se negociam opções, que são instrumentos financeiros utilizados no mercado financeiro. Uma opção confere, ao titular, o direito de comprar ou de vender um determinado ativo por um valor determinado. Em Marinho e Rincon (2006), um método numérico é desenvolvido para se encontrar o valor de uma opção de venda americana, baseado em um modelo matemático cuja EDP governante foi desenvolvida no início da década de 1970. Sua solução determina o valor de uma opção européia. A condição de fronteira determina o tipo de opção (compra ou venda). A solução dessa EDP utiliza a Extrapolação de Richardson. O método é comparado com métodos da integração numérica e da aproximação binomial e conclui-se, através do experimento numérico e das devidas comparações, que, apesar de não haver uma solução analítica, o modelo numérico adotado, encontra valores bem próximos dos valores encontrados pelos outros métodos, com a vantagem de facilidade de implementação e rapidez computacional.

Em Marchi et al. (2008), pode ser vista uma avaliação, aperfeiçoamento e generalização do uso de MER para reduzir e estimar o erro de discretização. Mostra-se que o MER é extremamente efetivo na redução do erro e que pode ser usado de duas formas: a primeira, para obter o mesmo erro de discretização com uma malha que tem menor quantidade de nós, resultando na redução do esforço computacional (memória e tempo de CPU); a segunda, para redução do erro de discretização em uma malha com igual quantidade de nós, resultando em erros menores e maior confiabilidade da solução, forma indicada especialmente para obter *benchmarks*. É considerado um problema de condução de calor governado pela equação de Laplace bidimensional (2D), que é resolvida através do MDF.

A solução numérica (ϕ) para qualquer variável de interesse na malha g , com m extrapolações de Richardson, é dada por (MARCHI et al., 2008):

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_m} - 1} \quad (2.37)$$

A Eq. (2.37) 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 (ϕ) sem qualquer extrapolação; g representa cada uma das malhas; $g = 1$ é a malha mais grossa do conjunto de malhas, isto é, aquela na qual a distância h entre dois nós consecutivos tem o maior valor; $g = M$ é a malha mais fina do conjunto de malhas, isto é, aquela na qual a distância h entre dois nós consecutivos tem o menor valor; $r = h_{g-1}/h_g$ é a

razão de refino de malha; para $m = 0$ tem-se a solução numérica (ϕ) sem qualquer extrapolação; e p_m são as ordens verdadeiras.

Nota-se, que o erro de soluções numéricas obtidas com múltiplas extrapolações é muito mais reduzido quando se usa precisão quádrupla do que dupla. Isso se deve ao fato de que o erro de arredondamento não contamina tanto as soluções com MER e precisão quádrupla quanto com MER e precisão dupla. Dentre outros aspectos, o trabalho mostra que MER é extremamente eficiente na redução do erro de discretização e que o estimador de erro de Richardson funciona para resultados numéricos obtidos com MER. Fica claro que resultados mais efetivos com MER são obtidos ao se usar precisão quádrupla nos cálculos, maior número de extrapolações, maior número de malhas e ordens corretas do erro.

Oliveira (2009) apresenta uma comparação das precisões das soluções numéricas entre as malhas para equações de Navier-Stokes em escoamentos incompressíveis em regime permanente. São resolvidos os problemas bidimensionais do escoamento em cavidade quadrada cuja tampa possui velocidade uniforme, da cavidade hidrodinâmica quadrada na forma regularizada sem descontinuidade na velocidade da tampa e do degrau. É empregada a metodologia da extrapolação de Richardson para estimar a solução correta nos casos que não possuem solução de referência.

Em Marchi e Germer (2009), avalia-se o efeito de aproximações numéricas sobre a redução do erro de discretização de soluções obtidas com MER para a equação de advecção-difusão unidimensional com o MVF. O domínio de cálculo tem comprimento unitário e é discretizado com malhas uniformes. O modelo matemático é a equação da advecção-difusão unidimensional com condições de contorno de Dirichlet, comumente utilizado em testes de novos modelos matemáticos e funções de interpolação. O modelo numérico usa o MVF (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). São testados 10 diferentes esquemas de aproximação nas faces de cada volume de controle, com distintas ordens de acurácia. As variáveis de interesse avaliadas são: temperatura no meio do domínio, temperatura média, a derivada de primeira ordem da temperatura no contorno leste e a média da norma do erro de discretização. As soluções numéricas são obtidas com precisão quádrupla, em 15 níveis de malha, com $N = 5, 15, 45, \dots$ até 23.914.854 nós. De forma geral, é verificado que o MER é extremamente eficiente na redução do erro de discretização para todas as variáveis testadas e que a redução do erro é diretamente proporcional ao número de nós da malha e ao número de extrapolações. Além disso, conclui-se que o erro de arredondamento, limitante na redução do erro com uso de MER, pode ser atenuado por se usar precisão quádrupla. Como fator mais

significativo quanto à contribuição para motivação deste trabalho, destaca-se que em geral, o esquema **CDS-2** é o que tem **melhor desempenho** com MER.

Reatores de leito fixo são bastante utilizados na indústria química, particularmente para as reações que ocorrem em fase gasosa, permitindo um bom compromisso entre o custo e a quantidade produzida. A maioria destas reações é altamente exotérmica, obrigando à necessidade de controle rígido de todas as variáveis no processo, quer por razões de segurança, quer por razões econômicas. A eficiência desse controle está diretamente relacionada com a capacidade de previsão do comportamento do sistema em face de perturbações exteriores, o que justifica a importância da simulação computacional. Os modelos matemáticos são complexos, muitas vezes com EDPs não lineares com termos convectivos dominantes. Apesar de ser bastante importante a determinação melhor possível da solução do problema, é bastante importante levar em consideração o tempo envolvido. Métodos como o MEF em malhas adaptativas, baseados em uma extrapolação de Richardson, têm sido testados e segundo Guiné (2009), verificou-se que as soluções assim obtidas são satisfatórias e permitem economia de tempo de computação.

2.9 *MULTIGRID*

Várias técnicas numéricas têm sido estudadas para resolver o sistema de equações algébricas, oriundo da discretização das EDPs de um modelo matemático, com o menor custo computacional e a solução o mais próxima possível da exata, isto é, sem erros de iteração (FERZIGER e PERIC, 2002). As matrizes obtidas com a aplicação de métodos numéricos são, em geral, bastante esparsas, e, por serem também de grande tamanho, as operações realizadas no processo de inversão, em caso de um método direto, exigem grande esforço computacional; métodos diretos de solução de sistemas lineares são, portanto, descartados no contexto de CFD. Desse modo, os métodos iterativos são mais adequados (BURDEN e FAIRES, 2003; TANNEHILL, et al., 1997).

Neste trabalho, avalia-se um problema físico em regime estacionário, ou seja, no qual as propriedades de interesse não se alteram com passar do tempo. O problema será modelado matematicamente pela equação de Laplace (diferencial parcial elíptica) e, para esta, a técnica *multigrid* é indicada (STÜBEN, 2001). A técnica *multigrid*, (da qual podem ser citados dois tipos: o geométrico e o algébrico) implica na aplicação de três passos: suavização, restrição e correção (CHANG et al., 1996; BRIGGS et al., 2000; FALGOUT, 2006). Existem muitas variações de algoritmos de *multigrid*. A característica mais representativa e comum a todos os

algoritmos é que existe uma hierarquia de malhas. O Método Multigrid Algébrico é utilizado em malhas não estruturadas e o Geométrico em malhas estruturadas.

O método *multigrid* algébrico é dividido em duas etapas: fase *setup*, na qual são geradas as malhas e são construídos os operadores de restrição e prolongação; e a fase de solução, na qual se emprega o que foi definido na fase de *setup* para se resolver o problema, com o uso de malhas auxiliares mais grossas, visitadas conforme um ciclo previamente determinado. Neste trabalho, a fim de acelerar a convergência na obtenção das soluções numéricas, para malhas quadrangulares foi usado o *multigrid* geométrico e para triangulares, o *multigrid* algébrico.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo é definido o problema físico da condução bidimensional do calor, em regime permanente, sem geração de calor e com propriedades térmicas constantes. São apresentados para o modelo matemático: equação governante, condições de contorno, definição do domínio de cálculo e qualquer outra consideração pertinente. As demonstrações são feitas usando figuras de triângulos genéricos. São considerados, para o modelo numérico empregado, os métodos de discretização de domínio e equações, variáveis de interesse bem como toda e qualquer consideração necessária para obtenção das soluções numéricas que deram origem às análises que compõem o capítulo seguinte, de resultados.

3.1 PROBLEMA DA CONDUÇÃO DE CALOR

Em regime permanente (estado estacionário), sem geração interna, o problema da condução do calor bidimensional fica modelado matematicamente pela seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.1)$$

onde T é o campo de temperaturas; k a condutividade térmica; x e y constituem o sistema de coordenadas cartesianas ortogonais. A Eq.(3.1) representa a aplicação da Primeira Lei da Termodinâmica (conservação da energia) juntamente com a Lei de Fourier,

$$\vec{q} = -k \vec{\nabla} T \quad (3.2)$$

onde \vec{q} é o vetor fluxo de calor e $\vec{\nabla} T$ é o gradiente da temperatura. O sinal negativo de k é devido ao fato do calor ser transferido na direção de decréscimo de temperatura (da parte mais quente para a parte mais fria).

3.2 MODELO MATEMÁTICO

A equação de Laplace, dada por:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (3.3)$$

modela diferentes fenômenos físicos ligados à Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor. Para este trabalho, a variável dependente é a temperatura (T), portanto, a partir deste ponto, a Eq. (3.3) passa a ser definida conforme a Eq. (3.4):

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad (3.4)$$

O domínio de cálculo utilizado no modelo é definido como um quadrado de dimensão unitária, ou seja: $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq y \leq 1$. As condições de contorno para abordagem do problema são: $T(x, 0) = T(0, y) = T(1, y) = 0$, $T(x, 1) = \text{sen}(\pi x)$. Nessas condições, a solução analítica é dada (MALISKA, 2004) por:

$$T(x, y) = \text{sen}(\pi x) \frac{\text{senh}(\pi y)}{\text{senh}(\pi)} \quad (3.5)$$

Tal solução é obtida com a técnica de solução por separação de variáveis para as equações diferenciais parciais elípticas (GREENBERG, 1998). A Figura 3.1 é uma representação do domínio de cálculo e condições de contorno empregadas neste trabalho.

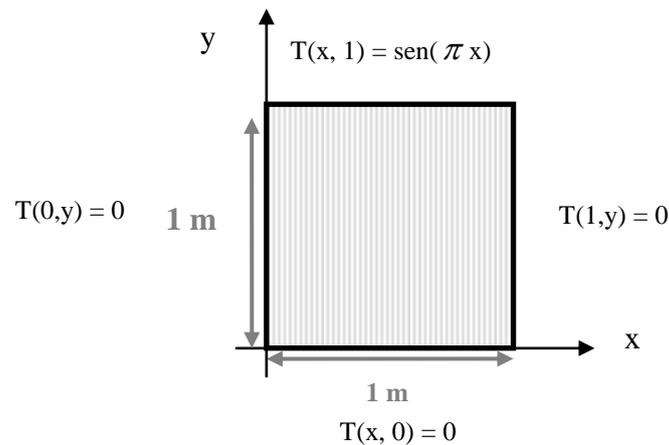


FIGURA 3.1 – REPRESENTAÇÃO GEOMÉTRICA DO DOMÍNIO

3.3 VARIÁVEIS DE INTERESSE

Neste trabalho, foram avaliadas as seguintes variáveis: temperatura no meio do domínio de cálculo que é do tipo local, primária e dependente; temperatura média do tipo global (porque seus valores correspondem ao domínio de cálculo inteiro) secundária, média da variável dependente; taxas de transferência de calor ao leste, norte, oeste e sul, variáveis de tipo local (porque seus valores dependem de cada coordenada), secundárias, obtidas a partir das derivadas da variável primária dependente. Seguem as definições (MARCHI et al., 2008) de cada uma dessas variáveis e suas soluções analíticas do problema definido no modelo matemático, com o objetivo de estimar o erro de discretização, uma vez que este erro é a diferença entre a solução analítica e a solução numérica. Considere-se k como sendo a condutividade térmica.

Variável 1 - Temperatura no meio do domínio (T_c)

Utilizando a Eq.(3.5) no meio do domínio onde $x = y = \frac{1}{2}$, tem-se que:

$$T\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \text{sen}\left(\frac{\pi}{2}\right) \frac{\text{senh}\left(\frac{\pi}{2}\right)}{\text{senh}(\pi)} = \frac{\text{senh}\left(\frac{\pi}{2}\right)}{\text{senh}(\pi)} \quad (3.6)$$

Variável 2 - Temperatura Média (T_m)

Definição:
$$T_m = \int_0^1 \int_0^1 T(x, y) dx dy \quad (3.7)$$

Solução analítica:
$$T_m = \frac{2}{\pi^2 \sinh(\pi)} (\cosh(\pi) - 1) \quad (3.8)$$

Variável 3 - Taxa de transferência de calor ao leste (q_e)

Definição:
$$q_e = -k \int_0^1 \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=1} dy \quad (3.9)$$

Solução analítica:
$$q_e = \frac{k}{\sinh(\pi)} [\cosh(\pi) - 1] \quad (3.10)$$

Variável 4 - Taxa de transferência de calor ao norte (q_n)

Definição:
$$q_n = -k \int_0^1 \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=1} dy \quad (3.11)$$

Solução analítica:
$$q_n = -2k \cotgh(\pi) \quad (3.12)$$

Variável 5 - Taxa de transferência de calor ao oeste (q_w)

Definição:
$$q_w = -k \int_0^1 \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} dy \quad (3.13)$$

Solução analítica:
$$q_w = -\frac{k}{\sinh(\pi)} [\cosh(\pi) - 1] \quad (3.14)$$

Variável 6 - Taxa de transferência de calor ao sul (q_s)

Definição:
$$q_s = -k \int_0^1 \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} dy \quad (3.15)$$

Solução analítica:
$$q_s = -\frac{2k}{\sinh(\pi)} \quad (3.16)$$

Variável 7 - Média da norma L1 do Erro Numérico (L)

Definição:
$$L = \frac{\sum_{p=1}^N |T_p^{\text{analítico}} - T_p^{\text{numérico}}|}{N} \quad (3.17)$$

onde P representa cada um dos N centróides (dos volumes de controle reais) da malha.

Solução analítica: zero.

As soluções analíticas são de fonte própria e seus resultados numéricos obtidos com auxílio do *software* MAPLE 12, com 40 algarismos significativos, no Hewlett-Packard HP Pavilion dv2600 INTEL CORE 2 DUO, 2GB de memória RAM, sistema operacional Windows Vista, de 32 Bits. A Tab. 3.1 apresenta as respostas numéricas para a solução analítica de cada uma das variáveis de interesse.

TABELA 3.1 – SOLUÇÃO ANALÍTICA DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

NÚMERO DA VARIÁVEL	SÍMBOLO DA VARIÁVEL	VALOR DA SOLUÇÃO ANALÍTICA
1	T_c	0,1992684076691933402168112706421715848530
2	T_m	0,1858539204602858370542788438036086397811
3	q_e	0,9171523356672743463730929214426187753683
4	q_n	-2,007483746394642576403105382389600034926
5	q_w	-0,9171523356672743463730929214426187753683
6	q_s	-0,1731790750600938836569195395043624841891

3.4 MODELO NUMÉRICO

Nessa seção é definido o modelo numérico empregado na obtenção de cada variável de interesse, por se especificarem métodos, esquemas e procedimentos. O detalhamento é feito em ordem lógica de necessidades.

3.4.1 GERAÇÃO DA MALHA

Para tratar um modelo matemático computacionalmente, é necessário expressar de forma adequada as equações e a região (domínio) em que elas são válidas. Como não é possível obter soluções numéricas sobre uma região contínua, devido aos infinitos pontos da mesma, inicialmente o domínio de cálculo é discretizado.

Neste trabalho, o domínio de cálculo (quadrangular unitário) foi discretizado em plano cartesiano, através de malhas com elementos triangulares e com elementos quadrangulares; porém, a discretização será apresentada apenas para as malhas com elementos triangulares. Os triângulos são retângulos e isósceles.

Inicialmente, o domínio de cálculo é dividido em quatro triângulos retângulos isósceles, através das diagonais do quadrado original. Para o refinamento, em cada um dos lados dos triângulos é marcado o ponto médio. Deve-se então unir os pontos por segmentos de reta, dividindo cada triângulo original em quatro novos triângulos. Esse procedimento é repetido até o nível de malha desejado.

A Fig. 3.2 ilustra a primeira e a segunda malha que foram utilizadas. Todas as soluções numéricas foram obtidas utilizando-se somente malhas cuja quantidade de elementos é representada por uma potência de base dois e expoente par (2^{2n} , sendo n o nível da malha),

com objetivo de possibilitar que a razão de refino fosse constante de um nível de malha para outro (MARCHI e SILVA, 2002).

Por exemplo, para o nível 1, tem-se $2^{2.1} = 4$ elementos triangulares; para o nível 2, tem-se $2^{2.2} = 16$ e assim sucessivamente, até que se atinja o nível mais elevado (malha mais fina), com $n = 12$. Portanto, a malha mais grossa tem 4 elementos triangulares reais e a malha mais fina tem 16.777.216 elementos triangulares reais.

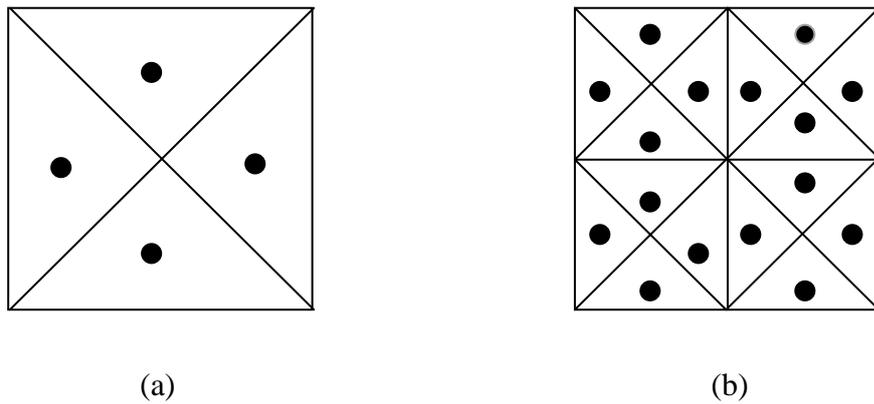


FIGURA 3.2 – (a) PRIMEIRA MALHA, COMPOSTA POR 4 ELEMENTOS TRIANGULARES
(b) SEGUNDA MALHA COMPOSTA POR 16 ELEMENTOS TRIANGULARES

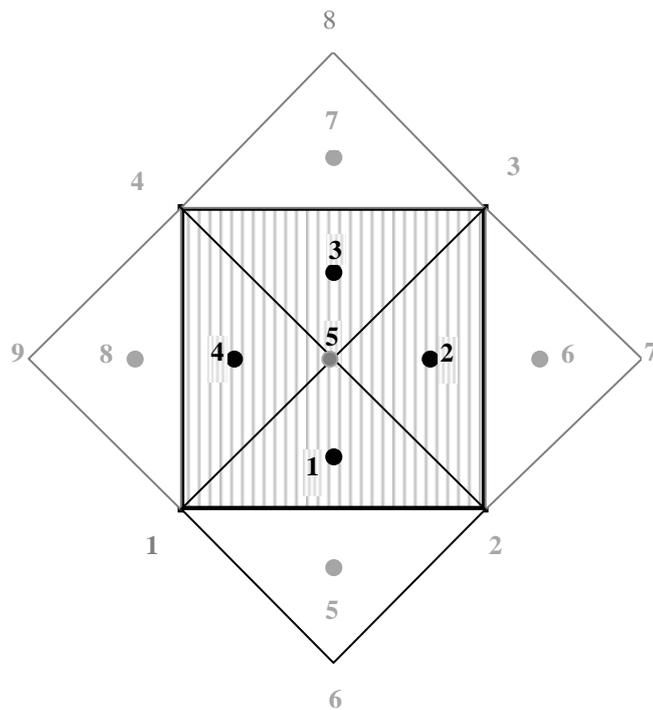


FIGURA 3.3 – MALHA TRIANGULAR MAIS GROSSA

A Fig. 3.3 ilustra o nível mais elementar das malhas, com os nós reais e fictícios, volumes de controle reais e fictícios e seus centroides com número do elemento (coincide com o número do centroide). Os pontos em negrito representam centroides dos elementos reais, e os demais, os centroides dos elementos fictícios.

O programa gerador das malhas tem como saídas dados como nível da malha, número de volumes reais e fictícios, número de nós da malha, reais e fictícios e tempo de processamento. Além disso, há informações sobre as coordenadas dos baricentros dos elementos triangulares, nos quais a temperatura será avaliada e a matriz de conectividade entre volumes e dados sobre as coordenadas de todos os pontos envolvidos no processo. Para cada centroide, devido ao fato do volume de controle ter três arestas, haverá possibilidade de três conexões, para o caso de volumes de controle reais; para volumes de controle fictícios, a conexão é única. Todos esses dados podem ser vistos no Apêndice B.

A Tabela 3.2 indica dados relativos a todas as malhas utilizadas no trabalho, tais como a quantidade de volumes de controle reais, a quantidade de volumes de controle fictícios, a quantidade de nós (reais e fictícios) e o tempo de CPU gastos na geração de tais dados.

TABELA 3.2 – DADOS SOBRE AS MALHAS UTILIZADAS

N	NER	NEF	NNR	NNF	TCPU [s]
1	$2^{2n} = 2^{2 \cdot 1} = 4$	4	5	4	0,0000E+00
2	$2^{2n} = 2^4 = 16$	8	13	8	0,0000E+00
3	$2^{2n} = 2^6 = 64$	16	41	16	0,0000E+00
4	$2^{2n} = 2^8 = 256$	32	145	32	0,0000E+00
5	$2^{2n} = 2^{10} = 1024$	64	545	64	0,0000E+00
6	$2^{2n} = 2^{12} = 4096$	128	2113	128	0,0000E+00
7	$2^{2n} = 2^{14} = 16384$	256	8321	256	1,6000E-02
8	$2^{2n} = 2^{16} = 65536$	512	33025	512	0,0000E+00
9	$2^{2n} = 2^{18} = 262144$	1024	131585	1024	3,1000E-02
10	$2^{2n} = 2^{20} = 1048576$	2048	525313	2048	1,0900E-01
11	$2^{2n} = 2^{22} = 4194304$	4096	2099201	4096	2,5000E-01
12	$2^{2n} = 2^{24} = 16777216$	8192	83927505	8192	$\approx 1,2000E+02$

Legenda:

N - nível da malha;

NER - número de volumes reais da malha em consideração;

NEF - número de volumes fictícios da malha em consideração;

NNR - número de nós reais da malha em consideração;

NNF - número de nós fictícios da malha em consideração;

TCPU - tempo de CPU, em segundos, para gerar arquivos de dados e gráficos da malha

3.4.2 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO - MVF

Nesta seção, é apresentada com detalhes a aplicação do MVF à equação governante do modelo matemático proposto neste trabalho, dada pela Eq. (3.4). As considerações necessárias são:

- malha triangular;
- o método de discretização da equação é o MVF;
- as condições de contorno são do tipo Dirichlet; e
- a aproximação numérica para derivada de primeira ordem do tipo CDS-2.

A forma geral da Eq.(3.4) é:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma^T \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma^T \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.18)$$

Mas,

\vec{J} é o vetor fluxo da variável dependente T isto é:

$$\vec{J} = \Gamma^T \vec{\nabla} T \quad (3.19)$$

E, portanto, a equação (da difusão bidimensional) assume a forma:

$$\vec{\nabla} T \cdot \vec{J} = 0 \quad (3.20)$$

Integrando-se a Eq.(3.20), sobre um volume de controle, obtém-se:

$$\int_{vc} \vec{\nabla} (\Gamma^T \vec{\nabla} T) dV = 0 \quad (3.21)$$

Aplicando o Teorema da Divergência de Gauss à Eq. (3.21), tem-se:

$$\sum_i (\vec{J} \cdot \vec{n}) dS = 0 \quad (3.22)$$

O somatório na Eq. (3.22) passa a ser discreto. O produto escalar indicado na Eq.(3.22) resulta em uma derivada direcional, e a equação discretizada da Eq.(3.4) é dada por:

$$\sum_i \left(\Gamma^T \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \right)_{PI} \cdot \Delta S = 0 \quad (3.23)$$

onde PI indica o ponto de integração na malha. Aplicando-se a Eq.(3.23) a um volume de controle triangular, tal qual o ilustrado na Fig. (3.4), considerando Γ^ϕ constante, a Eq. (3.23) para o volume P assume a forma:

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{n}_1 + \vec{J}_2 \cdot \vec{n}_2 + \vec{J}_3 \cdot \vec{n}_3 = 0 \quad (3.24)$$

Cada elemento (volume de controle) da malha tem três faces. A Fig. 3.4 apresenta um elemento triangular genérico, bem como seu baricentro, faces e vetores normais. O procedimento é análogo para os elementos triangulares usados neste trabalho. Para cada face de cada elemento real há um vetor normal, a ser obtido pela Eq.(3.25).

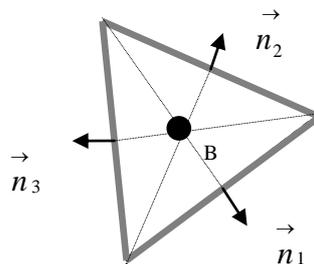


FIGURA 3.4- ELEMENTO PARA CÁLCULO DE VETORES NORMAIS

Ao percorrer a malha, deve ser respeitado um sentido único de integração. Para cada malha utilizada, foi usado o anti-horário e a direção do vetor normal de “dentro” para “fora” do elemento em consideração. Sejam:

\vec{n} → vetor normal à face em questão;

Δx → variação entre as abcissas dos vértices que formam a face em questão do triângulo;

Δy → variação entre as ordenadas dos vértices que formam a face em questão do triângulo;
assim:

$$\vec{n} = \Delta y \vec{i} - \Delta x \vec{j} \quad (3.25)$$

Para a equação de Laplace bidimensional, o Apêndice A1 contém aplicação detalhada do MVF a uma malha com volumes quadrangulares e o Apêndice A2, uma aplicação detalhada em uma malha com volumes triangulares. A seguir, todos os passos para discretização da Eq.(3.4) com elementos triangulares utilizados neste trabalho estão detalhados, genericamente. Dois casos são considerados: volumes reais internos com três vizinhos reais e volumes fictícios (nos contornos leste, norte, oeste e sul), com um vizinho real. O primeiro caso, volume interno com três vizinhos reais, é ilustrado pela Fig. 3.5:

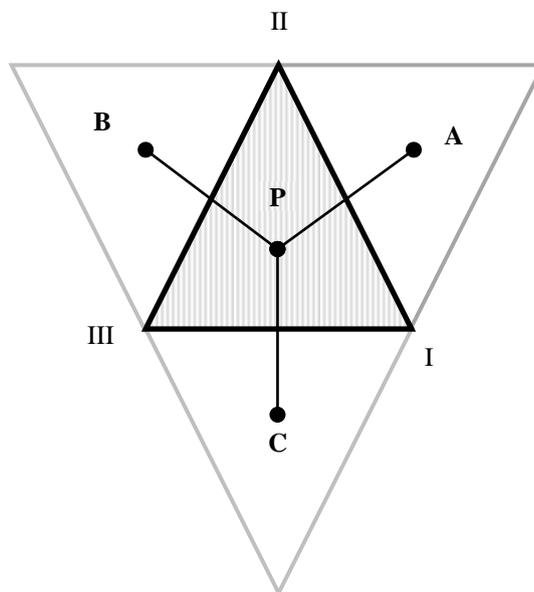


FIGURA 3.5 – VOLUME INTERNO COM TRÊS VIZINHOS REAIS

Considere-se:

Elemento (volume de controle): I – II – III

Centróide do elemento em consideração: P

Coordenadas de P: (x_P, y_P)

Vértices do elemento em consideração: I (x_a, y_a) ; II (x_b, y_b) ; III (x_c, y_c)

Centróides dos vizinhos reais do elemento em consideração:

V1 → vizinho real 1;

V2 → vizinho real 2;

V3 → vizinho real 3;

Sejam:

$$V1 = A (x_{v_1}, y_{v_1})$$

$$V2 = B (x_{v_2}, y_{v_2})$$

$$V3 = C (x_{v_3}, y_{v_3})$$

Seguem os passos da discretização.

Passo 1 – Faces do volume de controle e vetores normais

$$\text{Face 1 - } II - I \quad \therefore \vec{n}_1 = (y_b - y_a) \vec{i} - (x_b - x_a) \vec{j}$$

$$\text{Face 2 - } III - II \quad \therefore \vec{n}_2 = (y_c - y_b) \vec{i} - (x_c - x_b) \vec{j}$$

$$\text{Face 3 - } I - III \quad \therefore \vec{n}_3 = (y_a - y_c) \vec{i} - (x_a - x_c) \vec{j}$$

$$\text{Logo: } \vec{n}_1 = (y_b - y_a, x_a - x_b); \quad \vec{n}_2 = (y_c - y_b, x_b - x_c); \quad \vec{n}_3 = (y_a - y_c, x_c - x_a)$$

Passo 2 – Distância entre baricentros

$$d_1 = d_{Pv_1} = \sqrt{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2}$$

$$d_2 = d_{Pv_2} = \sqrt{(x_P - x_{v_2})^2 + (y_P - y_{v_2})^2}$$

$$d_3 = d_{Pv_3} = \sqrt{(x_P - x_{v_3})^2 + (y_P - y_{v_3})^2}$$

Passo 3 – Vetor unitário da direção de fluxo

(respeitando o sentido de fora para dentro do volume de controle)

$\vec{v}_1 \rightarrow$ vetor da direção de fluxo do vizinho 1 para P;

$\vec{v}_2 \rightarrow$ vetor da direção de fluxo do vizinho 2 para P;

$\vec{v}_3 \rightarrow$ vetor da direção de fluxo do vizinho 3 para P;

$\vec{u}_1 \rightarrow$ unitário do vetor \vec{v}_1 ;

$\vec{u}_2 \rightarrow$ unitário do vetor \vec{v}_2 ;

$\vec{u}_3 \rightarrow$ unitário do vetor \vec{v}_3 ;

$$\vec{v}_1 = \vec{AP} = P - A = (x_P - x_{v_1}) \vec{i} + (y_P - y_{v_1}) \vec{j}$$

$$\vec{v}_2 = \vec{BP} = P - B = (x_P - x_{v_2}) \vec{i} + (y_P - y_{v_2}) \vec{j}$$

$$\vec{v}_3 = \vec{CP} = P - C = (x_P - x_{v_3}) \vec{i} + (y_P - y_{v_3}) \vec{j}$$

Portanto:

$$\vec{u}_1 = \frac{(x_P - x_{v_1})}{\sqrt{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2}} \vec{i} + \frac{(y_P - y_{v_1})}{\sqrt{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2}} \vec{j}$$

$$\vec{u}_2 = \frac{(x_P - x_{v_2})}{\sqrt{(x_P - x_{v_2})^2 + (y_P - y_{v_2})^2}} \vec{i} + \frac{(y_P - y_{v_2})}{\sqrt{(x_P - x_{v_2})^2 + (y_P - y_{v_2})^2}} \vec{j}$$

$$\vec{u}_3 = \frac{(x_P - x_{v_3})}{\sqrt{(x_P - x_{v_3})^2 + (y_P - y_{v_3})^2}} \vec{i} + \frac{(y_P - y_{v_3})}{\sqrt{(x_P - x_{v_3})^2 + (y_P - y_{v_3})^2}} \vec{j}$$

Passo 4 – Vetor de fluxo

Os vetores fluxo (\vec{J}) da variável de interesse T para cada face serão calculados com a aproximação numérica para a derivada de primeira ordem com o esquema CDS:

$$\vec{J} = \frac{T_{nó} - T_{nó\ adjacente}}{d} \vec{u} \quad (3.26)$$

Onde:

$d \rightarrow$ é a distância entre o baricentro do elemento e os baricentros reais adjacentes;

$\vec{u} \rightarrow$ é o vetor unitário do vetor cuja extremidade inicial é o baricentro do elemento e a extremidade final é o baricentro do elemento adjacente.

Considere-se:

$T_i \rightarrow$ temperatura no nó (baricentro) conectado

$T_{i-1} \rightarrow$ temperatura no nó em consideração

$\vec{u}_i \rightarrow$ vetor unitário da direção de fluxo

$d_i \rightarrow$ distância entre baricentros

Então:

$$\vec{J}_1 = J_{AP} = \frac{(T_A - T_P)}{d_1} \vec{u}_1$$

$$\vec{J}_1 = \frac{(T_A - T_P)(x_P - x_{v_1})}{\sqrt{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2}} \left(\frac{x_P - x_{v_1}}{\sqrt{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2}} \vec{i} + \frac{y_P - y_{v_1}}{\sqrt{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2}} \vec{j} \right)$$

$$\vec{J}_1 = \frac{(T_A - T_P)(x_P - x_{v_1})}{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2} \vec{i} + \frac{(T_A - T_P)(y_P - y_{v_1})}{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2} \vec{j}$$

Analogamente:

$$\vec{J}_2 = \frac{(T_B - T_P)(x_P - x_{v_2})}{(x_P - x_{v_2})^2 + (y_P - y_{v_2})^2} \vec{i} + \frac{(T_B - T_P)(y_P - y_{v_2})}{(x_P - x_{v_2})^2 + (y_P - y_{v_2})^2} \vec{j}$$

$$\vec{J}_3 = \frac{(T_C - T_P)(x_P - x_{v_3})}{(x_P - x_{v_3})^2 + (y_P - y_{v_3})^2} \vec{i} + \frac{(T_C - T_P)(y_P - y_{v_3})}{(x_P - x_{v_3})^2 + (y_P - y_{v_3})^2} \vec{j}$$

Passo 5 – Produto escalar entre fluxo e normal

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{n}_1 = \frac{(T_A - T_P)(x_P - x_{v_1})}{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2} (y_b - y_a) + \frac{(T_A - T_P)(y_P - y_{v_1})}{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2} (x_a - x_b)$$

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{n}_1 = \frac{(T_A - T_P)}{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2} [(x_P - x_{v_1})(y_b - y_a) + (y_P - y_{v_1})(x_a - x_b)]$$

Analogamente:

$$\vec{J}_2 \cdot \vec{n}_2 = \frac{(T_B - T_P)}{(x_P - x_{v_2})^2 + (y_P - y_{v_2})^2} [(x_P - x_{v_2})(y_c - y_b) + (y_P - y_{v_2})(x_b - x_c)]$$

$$\vec{J}_3 \cdot \vec{n}_3 = \frac{(T_C - T_P)}{(x_P - x_{v_3})^2 + (y_P - y_{v_3})^2} [(x_P - x_{v_3})(y_a - y_c) + (y_P - y_{v_3})(x_c - x_a)]$$

Sabe-se que $\sum_i \vec{J}_i \cdot \vec{n}_i = 0$, ou, neste caso:

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{n}_1 + \vec{J}_2 \cdot \vec{n}_2 + \vec{J}_3 \cdot \vec{n}_3 = 0 \quad (3.27)$$

$$\frac{(T_A - T_P)}{(x_P - x_{v_1})^2 + (y_P - y_{v_1})^2} [(x_P - x_{v_1})(y_b - y_a) + (y_P - y_{v_1})(x_a - x_b)] +$$

$$\frac{(T_B - T_P)}{(x_P - x_{v_2})^2 + (y_P - y_{v_2})^2} [(x_P - x_{v_2})(y_c - y_b) + (y_P - y_{v_2})(x_b - x_c)] +$$

$$\frac{(T_C - T_P)}{(x_P - x_{v_3})^2 + (y_P - y_{v_3})^2} [(x_P - x_{v_3})(y_a - y_c) + (y_P - y_{v_3})(x_c - x_a)] = 0$$

Mas,

$$(y_b - y_a) = n_1 x \quad (\text{componente x do vetor normal à face 1})$$

$$(x_a - x_b) = n_1 y \quad (\text{componente y do vetor normal à face 1})$$

$$(y_c - y_b) = n_2 x \quad (\text{componente x do vetor normal à face 2})$$

$$(x_b - x_c) = n_2 y \quad (\text{componente y do vetor normal à face 2})$$

$$(y_a - y_c) = n_3 x \quad (\text{componente x do vetor normal à face 3})$$

$$(x_c - x_a) = n_3 y \quad (\text{componente y do vetor normal à face 3})$$

Daí:

$$\frac{(T_A - T_P)}{d_1^2} [(x_P - x_{v_1})n_1 x + (y_P - y_{v_1})n_1 y] + \frac{(T_B - T_P)}{d_2^2} [(x_P - x_{v_2})n_2 x + (y_P - y_{v_2})n_2 y] +$$

$$\frac{(T_C - T_P)}{d_3^2} [(x_P - x_{v_3})n_3 x + (y_P - y_{v_3})n_3 y] = 0$$

então:

$$T_A \left[\frac{x_P n_1 x}{d_1^2} - \frac{x_{v_1} n_1 x}{d_1^2} + \frac{y_P n_1 y}{d_1^2} - \frac{y_{v_1} n_1 y}{d_1^2} \right] + T_B \left[\frac{x_P n_2 x}{d_2^2} - \frac{x_{v_2} n_2 x}{d_2^2} + \frac{y_P n_2 y}{d_2^2} - \frac{y_{v_2} n_2 y}{d_2^2} \right] +$$

$$T_C \left[\frac{x_P n_3 x}{d_3^2} - \frac{x_{v_3} n_3 x}{d_3^2} + \frac{y_P n_3 y}{d_3^2} - \frac{y_{v_3} n_3 y}{d_3^2} \right] =$$

$$T_P \left[\frac{(x_P - x_{v_1})n_1 x}{d_1^2} + \frac{(x_P - x_{v_2})n_2 x}{d_2^2} + \frac{(x_P - x_{v_3})n_3 x}{d_3^2} + \frac{(y_P - y_{v_1})n_1 y}{d_1^2} + \frac{(y_P - y_{v_2})n_2 y}{d_2^2} + \frac{(y_P - y_{v_3})n_3 y}{d_3^2} \right]$$

Reordenando os termos da equação anterior na forma:

$$a_P T_P = v_1 T_A + v_2 T_B + v_3 T_C + b_P \quad (3.28)$$

tem-se:

$$a_p = \frac{(x_p - x_{v_1})n_1x + (y_p - y_{v_1})n_1y}{d_1^2} + \frac{(x_p - x_{v_2})n_2x + (y_p - y_{v_2})n_2y}{d_2^2} + \frac{(x_p - x_{v_3})n_3x + (y_p - y_{v_3})}{d_3^2} \quad (3.29)$$

$$v_1 = \frac{(x_p - x_{v_1})n_1x + (y_p - y_{v_1})n_1y}{d_1^2} \quad (3.30)$$

$$v_2 = \frac{(x_p - x_{v_2})n_2x + (y_p - y_{v_2})n_2y}{d_2^2} \quad (3.31)$$

$$v_3 = \frac{(x_p - x_{v_3})n_3x + (y_p - y_{v_3})}{d_3^2} \quad (3.32)$$

$$b_p = 0 \quad (3.33)$$

As Equações (3.29) a (3.33) correspondem aos coeficientes e termos fontes das equações do sistema algébrico a ser resolvido, para o caso de volumes de controle internos. Na sequência, é considerado o caso no qual são determinados os coeficientes para um volume de controle fictício. A Fig. 3.6 ilustra a situação para o contorno norte.

Considere-se:

Elemento (volume de controle): I – II – III

Centróide do elemento em consideração: P

Coordenadas de P: (x_p, y_p)

Elemento real contíguo ao contorno (norte): N (x_n, y_n) (note-se que $x_n = x_p$)

De acordo com as condições de contorno do tipo Dirichlet (temperatura prescrita):

$$\frac{T_p + T_N}{2} = \text{sen}(\pi(x_p))$$

Daí: $T_p = 2 \text{sen}(\pi x_p) - T_N$

Então:

$$\begin{aligned}
 a_p &= 1 \\
 v_1 &= -1 \\
 v_2 &= 0 \\
 v_3 &= 0 \\
 b_p &= 2\text{sen}(\pi(x_p))
 \end{aligned}
 \tag{3.34}$$

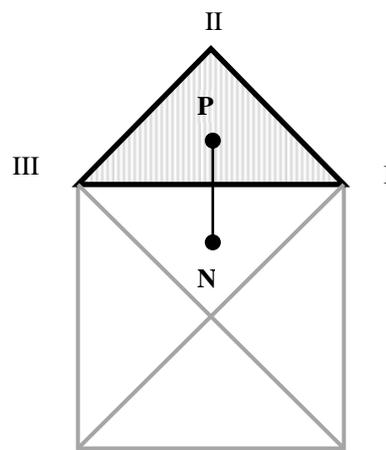


FIGURA 3.6 – VOLUME DE CONTROLE FICTÍCIO AO NORTE

As igualdades na Eq.(3.34) correspondem aos coeficientes das equações algébricas do sistema a ser resolvido para o caso de volumes fictícios localizados na fronteira norte do domínio de cálculo. A dedução para os coeficientes nos demais contornos pode ser vista no Apêndice C. Além da discretização para a variável dependente do problema nos três tipos de volume de controle possíveis neste trabalho, é necessária a discretização das taxas de transferência de calor ao leste, norte, oeste e sul, uma vez que nessas variáveis de interesse figuram derivadas da variável dependente.

3.4.3 DISCRETIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

Para discretização da variável de interesse dependente do modelo matemático, foi usado o MVF. Portanto, em conformidade com a definição (Eq.(3.6)), a variável T_c está discretizada. Para discretização da variável T_m , global, definida na Eq.(3.7), é utilizada a Regra do Retângulo. A fórmula de integração pela Regra do Retângulo é obtida subdividindo

o intervalo de integração ($0 \leq x \leq L$) em N subintervalos de igual comprimento (KREYSZIG, 1999), conforme ilustra a Fig. 3.7, em caso unidimensional. A partir disso, o somatório das áreas de todos os retângulos (cuja base é o comprimento total dividido pela quantidade N de subintervalos e cuja altura é uma aproximação da função) é igual, aproximadamente, ao valor da integral.

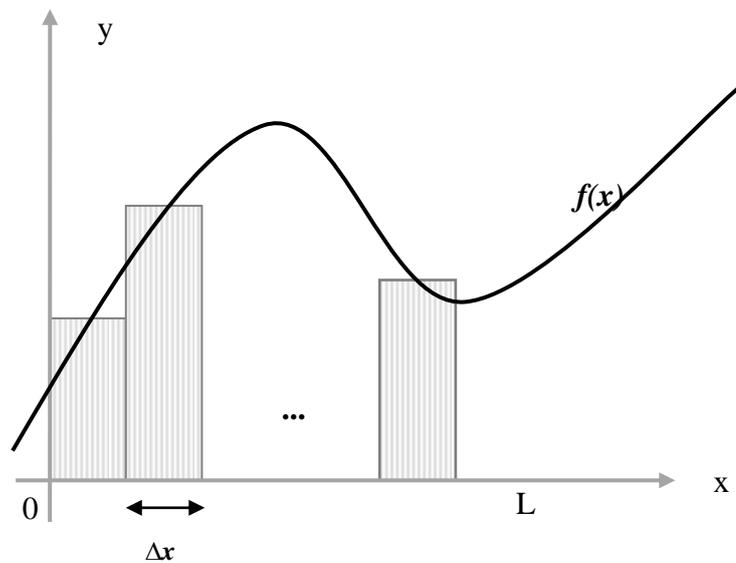


FIGURA 3.7 – A REGRA DO RETÂNGULO

Portanto, em conformidade com a Regra do Retângulo, e lembrando que o modelo matemático abordado neste trabalho é bidimensional, para o cálculo de Tm foi realizado o somatório do produto entre o valor numérico da função T no volume e a área do mesmo, para todos os volumes de controle reais do nível de malha em consideração.

Uma vez que nas taxas de transferência de calor nos contornos figuram derivadas da variável dependente, é também necessário discretizá-las. A fim de calcular numericamente cada uma das taxas, para cada contorno é necessário saber quantos e quais são seus volumes de controle contíguos, uma vez que todos precisam ser somados, de acordo com a aproximação proposta. Relembrando o domínio de cálculo, representado na Fig. 3.1 e as condições de contorno, considerando-se a condutividade térmica (k) unitária e utilizando uma aproximação do tipo UDS-1, para a taxa transferência de calor ao leste definida na Eq.(3.9), tem-se a aproximação:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=1} = \frac{T_e - T_P}{\Delta x} \rightarrow q_e = \sum_i \frac{T_e - T_P}{\Delta x_i} \Delta y \quad (3.35)$$

para a taxa de transferência de calor ao norte, definida na Eq.(3.11):

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{y=1} = \frac{T_n - T_P}{\Delta y} \rightarrow q_n = \sum_i \frac{T_n - T_P}{\Delta y_i} \Delta x \quad (3.36)$$

para a taxa de transferência de calor ao oeste, definida na Eq.(3.13):

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=0} = \frac{T_P - T_w}{\Delta x} \rightarrow q_w = \sum_i \frac{T_P - T_w}{\Delta x_i} \Delta y \quad (3.37)$$

e, para a taxa de transferência de calor ao sul, definida na Eq.(3.15):

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{y=0} = \frac{T_P - T_s}{\Delta y} \rightarrow q_s = \sum_i \frac{T_P - T_s}{\Delta y_i} \Delta x \quad (3.38)$$

onde:

- a notação $x = 1$ representa o contorno leste, $y = 1$ o contorno norte, $x = 0$ o contorno oeste e $y = 0$ o contorno sul;
- i representa cada um dos centroides dos volumes de controle reais da malha, contíguos aos contornos;
- Δx_i (Δy_i) são as distâncias entre o centroide e a face do contorno;
- Δx (Δy) é o comprimento do volume de controle na direção x (y), determinado, em cada malha, pelo quociente entre o comprimento do domínio na direção x (y) e a quantidade de volumes de controle reais contíguos ao contorno;
- P é o centroide de um volume de controle real contíguo à fronteira;
- e, w (n , s) representam pontos da fronteira que têm ordenadas (abscissas) iguais às ordenadas (abscissas) dos centroides de volumes de controle reais contíguos às

fronteiras leste, oeste, (norte e sul) do domínio de cálculo, respectivamente. Nestes pontos, valem as condições de contorno de Dirichlet.

3.4.4 ANÁLISE DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO A PRIORI

A fim de possibilitar a abordagem computacional de uma EDP é necessário que o modelo numérico utilize-se de *aproximações numéricas* para os termos que envolvem derivadas. Quando se usa uma aproximação, erros de truncamento são cometidos; estes podem ser detectados quando se utiliza a expansão da Série de Taylor em torno de um ponto, para obter as expressões numéricas das derivadas (TANNEHILL, et al., 1997; MALISKA, 2004). O erro de truncamento (ou discretização, neste trabalho), logicamente depende da ordem da aproximação escolhida para as derivadas. O conjunto de equações a partir da Eq. (3.39) até a Eq.(3.42) apresenta o Teorema de Taylor (BURDEN e FAIRES, 2003).

Teorema

Suponha que $f \in C^n [a, b]$, que f^{n+1} exista em $[a, b]$ e que $x_0 \in [a, b]$. Para todo $x \in [a, b]$ existe um número $\xi(x)$ entre x_0 e x com:

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x) \quad (3.39)$$

onde

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n \quad (3.40)$$

Ou:

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k \quad (3.41)$$

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1} \quad (3.42)$$

Aqui, o conjunto de todas as funções que têm n derivadas contínuas em dado intervalo é chamado C^n . O elemento $P_n(x)$ é chamado Polinômio de Taylor de enésimo grau para f centrado em x_0 , e $R_n(x)$ é chamado de resto (ou erro de truncamento) associado a $P_n(x)$. A série infinita obtida tomando-se o limite de $P_n(x)$ para n tendendo a infinito é chamada **Série de Taylor** para f centrada em x_0 . O erro de truncamento refere-se ao fato de que se incorre em erro quando se faz o somatório de termos de uma série finita, ou truncada, para se obter um resultado aproximado da soma dos termos de uma série infinita. O procedimento geral para prever a ordem do erro de truncamento é avaliar as aproximações numéricas nas faces dos volumes de controle (MARCHI e SILVA, 2000), usando a Série de Taylor (TANNEHILL, 1997).

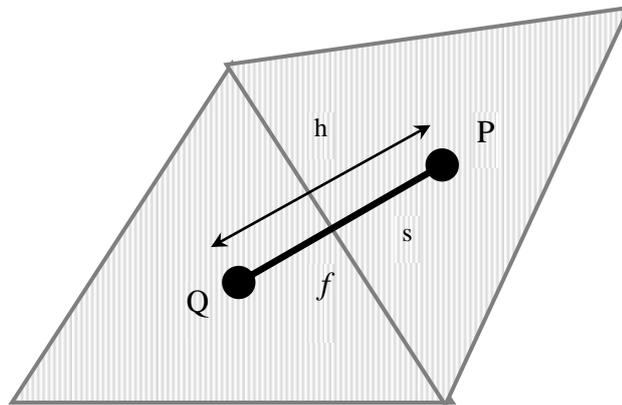


FIGURA 3.8 – VOLUMES DE CONTROLE PARA ESTIMATIVA A *PRIORI*

No Apêndice D pode ser vista a estimativa *a priori* do erro de discretização em malhas quadrangulares, para o modelo numérico empregado neste trabalho. A Fig. 3.8 será usada para apresentar a dedução da estimativa *a priori* do erro de discretização em malhas triangulares. Nela, estão indicados dois volumes de controle internos triangulares e seus respectivos centroides, **P** e **Q** (são os pontos onde se calcula o valor da variável dependente do modelo matemático, ou seja, os nós da malha). O segmento de reta que os une tem direção s . Será feita uma aproximação numérica do tipo CDS-2 em relação à face centrada f comum aos dois volumes, usando-se a Eq.(3.40). Considerando-se h o espaçamento da malha, e que a mesma é uniforme; assim, as distâncias de **P** e **Q** à face f são iguais a $\frac{h}{2}$. Portanto, a expansão da variável T , na direção s , para os volumes de controle cujos centroides são **P** e **Q** em torno da face centrada f é indicada por:

$$T_Q = T_f - \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial s} \Big|_f + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial s^2} \Big|_f - \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial s^3} \Big|_f + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial s^4} \Big|_f - \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial s^5} \Big|_f + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial s^6} \Big|_f + \dots \quad (3.43)$$

$$T_P = T_f + \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial s} \Big|_f + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial s^2} \Big|_f + \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial s^3} \Big|_f + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial s^4} \Big|_f + \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial s^5} \Big|_f + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial s^6} \Big|_f + \dots \quad (3.44)$$

O objetivo é encontrar uma aproximação para a variável, na direção s , na face centrada f ; portanto, subtraindo Eq.(3.43) da Eq.(3.44), obtém-se, onde se omite a notação f para as derivadas:

$$T_P - T_Q = h \frac{\partial T}{\partial s} + \frac{h^3}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial s^3} + \frac{h^5}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial s^5} + \frac{h^7}{322560} \frac{\partial^7 T}{\partial s^7} + \dots \quad (3.45)$$

Neste caso, para direção s , a variável com aproximação na face centrada f pode ser escrita como a Eq.(3.46):

$$\frac{\partial T}{\partial s} \Big|_f = \frac{T_P - T_Q}{h} - \left(\frac{h^2}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial s^3} + \frac{h^4}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial s^5} + \frac{h^6}{32250} \frac{\partial^7 T}{\partial s^7} + \dots \right) \quad (3.46)$$

Dessa forma, pode-se afirmar que, para a variável de interesse, a Eq.(3.47) é uma aproximação na face centrada f , com o esquema CDS-2.

$$\frac{\partial T}{\partial s} \Big|_f \approx \frac{T_P - T_Q}{h} \quad (3.47)$$

De acordo com Tannehill et al., (1997), a expressão entre parênteses na Eq.(3.46) é identificada como erro de truncamento das representações discretizadas da derivada primeira avaliada, usando esquema CDS-2, na direção s ; os expoentes de h nessa expressão são as ordens verdadeiras do erro de truncamento; portanto, $PV_s = 2, 4, 6, \dots$ e o menor deles indica a ordem assintótica (PL) do erro, neste caso, igual a dois, uma vez que se tem uma malha de faces centradas entre nós.

A aproximação numérica obtida na Eq.(3.47) é de segunda ordem do tipo CDS-2 (TANNEHILL et al., 1997; CUNHA, 2003; BURDEN e FAIRES, 2003; MINKOWYCZ et al., 2006) e figura na primeira variável de interesse, do tipo local. A segunda variável de interesse, Temperatura Média, é global, definida na Eq.(3.7) e é aproximada pela Regra do Retângulo. Para o caso unidimensional, as PVs para essa variável são 2, 4, 6,... (KOKHANOV e ANDREEVA, 1968; PLETSCHER, 2006; CHAPRA e CANALE, 2006; SPHAIER e ALVES, 2007; GIACOMINI, 2009) e $PL = 2$. No caso bidimensional, as ordens verdadeiras e a ordem assintótica do erro são as mesmas, uma vez que segundo Burden e Faires (2003), a integral dupla é dada por:

$$T_{média} = \int_0^1 \int_0^1 T(x, y) dA = \int_0^1 \left(\int_0^1 T(x, y) dy \right) dx \quad (3.48)$$

Para análise *a priori* do erro de discretização cometido nas taxas de transferência de calor nos contornos do domínio de cálculo, considere-se a Fig. 3.9. Um procedimento para aplicação das condições de contorno inconveniente acarreta obstáculos que influenciam na veracidade da solução de um problema (MALISKA, 2004).

O trabalho de Giacomini (2009) avalia quatro formas de aplicar condições de contorno (sem volumes fictícios, com volumes fictícios, com meio volume e com volume de espessura zero) e o desempenho de cada uma em três diferentes problemas. Foi constatado que entre as formas de aplicar as condições de contorno sem volumes fictícios, com volumes fictícios e com volume de espessura zero, as curvas dos erros de discretização tiveram um erro numérico igual ao analisar as variáveis de interesse. Além disso, Giacomini (2009) constatou que as ordens *a priori* e *a posteriori* obtidas para as variáveis de interesse em três equações governantes avaliadas, foram as mesmas dentre as quatro formas de aplicar as condições de contorno. Nas variáveis que avaliam a derivada de primeira ordem da propriedade de interesse a ordem degenerou quando utilizadas as formas de aplicar as condições de contorno sem volumes fictícios, com volumes fictícios e com volume de espessura zero. Porém com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume as ordens obtidas *a posteriori* tiveram os valores previstos *a priori*.

A forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume ficou com a curva do erro distante das demais. Com relação às ordens dos erros, concluiu-se que as ordens obtidas *a priori* e *a posteriori* foram as mesmas obtidas entre as quatro formas de aplicar as condições

de contorno. Neste trabalho, para discretização nos contornos foram usados volumes de controle fictícios e as condições de contorno de Dirichlet, descritas no modelo matemático.

Aplicando-se ao ponto P e ao ponto E da Fig. 3.9 a Eq. (3.40), em relação à face e , a expansão da variável T , na direção coordenada x , conclui-se, de acordo com Tannehill et al. (1997), que as ordens verdadeiras do erro de truncamento da representação discretizada da derivada primeira para o contorno leste são 1, 2, 3, ... e a ordem assintótica (PL) é igual a um.

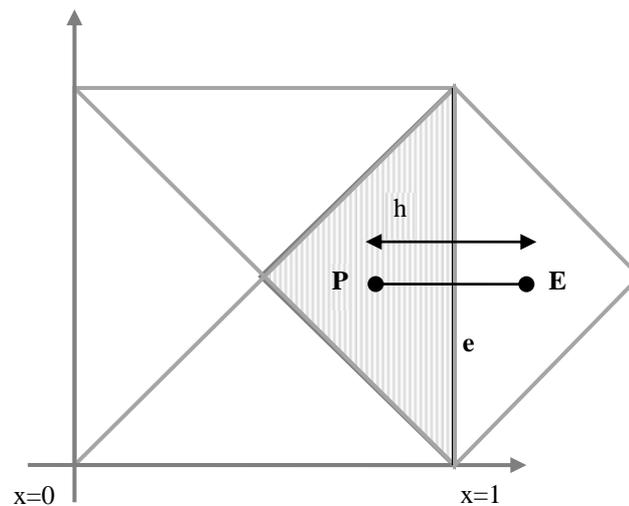


FIGURA 3.9 – CONTORNO LESTE

Para obtenção das ordens nos demais contornos, basta seguir um procedimento análogo, as conclusões serão idênticas. A Tab. 3.3 sintetiza a análise a priori do modelo numérico adotado. Independentemente da fronteira considerada, todas as taxas estão indicadas pelo símbolo q , uma vez que a ordem do erro de discretização é a mesma para todos os contornos. O Apêndice D contém a análise *a priori* para o modelo numérico considerado em malhas quadrangulares. Comparando-se a Tab. 3.3 à Tab. D.1, conclui-se que as ordens verdadeiras e assintóticas para todas as variáveis de interesse são iguais, nos dois tipos de malha utilizados neste trabalho.

É importante salientar que a ordem dos erros não é alterada em função do espaçamento da malha. Nesse caso, o que sofre alteração é apenas o valor numérico do erro. Esse fato será de importância quando na comparação de resultados entre malhas triangulares e quadrangulares, apresentada nas conclusões do trabalho.

TABELA 3.3 – ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICAS DO ERRO – TG

Variável	PVs	PL
Tc	2, 4, 6, ...	2
Tm	2, 4, 6, ...	2
q	1, 2, 3, ...	1

3.4.5 MÚLTIPLAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON

Na literatura, encontram-se exemplos de aplicação com o objetivo de avaliar, aperfeiçoar e generalizar o uso de Múltiplas Extrapolações de Richardson (MER) para reduzir e estimar o erro de discretização de soluções numéricas, considerando-se o problema da condução de calor bidimensional através do MDF (MARCHI et al., 2008); e para reduzir o erro de discretização na solução da equação da advecção-difusão unidimensional (MARCHI e GERMER, 2009). Essa seção tem por objetivo mostrar como é calculada a solução numérica para qualquer variável de interesse, usando as Múltiplas Extrapolações de Richardson.

No Capítulo 2 (seção 2.8), foram abordados detalhes sobre a Extrapolação de Richardson presentes na literatura. O objetivo é reduzir o erro de discretização de soluções numéricas (SHYY, 2002; CARNEIRO E RICCI, 2006). De forma genérica, para uma variável de interesse ϕ , a Extrapolação de Richardson é dada pela expressão indicada na Eq.(3.49) ou pela expressão indicada na Eq.(3.50). A diferença entre essas duas equações é que, na segunda, considera-se um nível de malha qualquer, no caso de um problema cuja abordagem envolva vários níveis de refinamento. A Múltipla Extrapolação de Richardson é definida na Eq.(3.51). Nessa equação, pode-se notar que em MER podem ser usados diversos níveis de malha e são feitas extrapolações de Richardson sucessivas. É possível perceber que, para cada extrapolação são necessárias duas soluções no nível anterior.

$$\phi_{\infty} = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(r^{PL} - 1)} \quad (3.49)$$

$$\phi_{g,\infty} = \phi_g + \frac{(\phi_g - \phi_{g-1})}{(r^{PL} - 1)}, \quad g = 2 \text{ a } G \quad (3.50)$$

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{(\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1})}{(r^{(PV)_{m-1}} - 1)}, \quad m = 1 \text{ a } G-1, \quad g = m+1 \text{ a } G \quad (3.51)$$

onde:

ϕ_{∞} = solução numérica extrapolada

ϕ_1 = solução numérica na malha fina h_1 , sem extrapolação

ϕ_2 = solução numérica na malha grossa h_2 , sem extrapolação

ϕ_g = solução numérica na malha fina h_1 , sem extrapolação

G = número total de malhas

g = número da malha, varia de 1(mais grossa) até G (mais fina)

$g - 1$ = número da malha imediatamente anterior a g

m = número de extrapolações: $m = 0$ não há extrapolação, $m = 1$, uma extrapolação, etc

r = razão de refino da malha, $r = \frac{h_{g-1}}{h_g}$

PL = ordem assintótica do erro de discretização

PV = ordem verdadeira do erro de discretização

A fim de sejam evitados quaisquer problemas na utilização das Eq.(3.54) e Eq.(3.55), a Tabela 3.4 esclarece a notação para cada uma delas.

TABELA 3.4 – NOTAÇÃO ADOTADA PARA Eq. (3.54) e Eq.(3.55)

	Eq.(3.54)	Eq.(3.55)
Malha Fina	índice 1	índice 2 (g)
Malha Grossa	índice 2	índice 1 ($g - 1$)

Neste trabalho, a variável dependente local de interesse foi denominada T e a quantidade total de malhas refinadas sistematicamente utilizadas (ou níveis), é iguais a 12, tanto para o tipo triangular, quanto para o tipo quadrangular. A Tabela 3.5 mostra as extrapolações feitas para variável de interesse, em função da quantidade G de malhas. Nessa tabela, cada "-" significa que não se aplica a multiextrapolação, uma vez que, para cada extrapolação, são necessárias duas soluções no nível de extrapolação $m - 1$. Além disso, sempre que $m = 0$, isso significa que não há extrapolação.

TABELA 3.5 - EXTRAPOLAÇÃO m NA MALHA g ($T_{g,m}$)

$g \backslash m$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	1,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2	2,0	2,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3	3,0	3,1	3,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
4	4,0	4,1	4,2	4,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-
5	5,0	5,1	5,2	5,3	5,4	-	-	-	-	-	-	-	-
6	6,0	6,1	6,2	6,3	6,4	6,5	-	-	-	-	-	-	-
7	7,0	7,1	7,2	7,3	7,4	7,5	7,6	-	-	-	-	-	-
8	8,0	8,1	8,2	8,3	8,4	8,5	8,6	8,7	-	-	-	-	-
9	9,0	9,1	9,2	9,3	9,4	9,5	9,6	9,7	9,8	-	-	-	-
10	10,0	10,1	10,2	10,3	10,4	10,5	10,6	10,7	10,8	10,9	-	-	-
11	11,0	11,1	11,2	11,3	11,4	11,5	11,6	11,7	11,8	11,9	11,10	-	-
12	12,0	12,1	12,2	12,3	12,4	12,5	12,6	12,7	12,8	12,9	12,10	12,11	-

3.4.6 MULTIGRID

Para reduzir o erro de discretização, são necessárias malhas muito refinadas quando se trata da solução de problemas na Engenharia, incluindo os de mecânica dos fluidos e transferência de calor. Usar métodos numéricos para cumprir esse objetivo, implica em alto custo computacional e por vezes, inviabilidade. O método *multigrid* (também iterativo) acelera a resolução dos sistemas lineares oriundos da discretização das equações diferenciais que modelam o problema, isto é, melhora a taxa de convergência das soluções (BRIGGS et al., 2000; OLIVEIRA et al., 2010). Os passos importantes para a técnica são:

- Suavização – redução de erros de alta frequência, por exemplo, através de algumas iterações do método de Gauss-Seidel ou Jacobi.
- Restrição – passagem do erro residual para uma malha mais grossa.

- Correção (prolongação) – interpolação de valores do resíduo calculados na malha mais grossa para uma malha mais fina.

Os resultados de Fedorenko (1964) mostram que a taxa de velocidade de convergência com o uso da técnica *multigrid* é muito melhor que a dos métodos iterativos puros. O objetivo do método *multigrid* é acelerar a convergência a fim de reduzir o tempo de CPU necessário à resolução do sistema algébrico em questão. Os melhores desempenhos do método *multigrid* são obtidos em problemas totalmente elípticos (WESSELING, 1992), ou seja, problemas dominados pela difusão; e os menores em problemas dominados pela advecção (FERZIGER e PERIC, 2002). O método *multigrid* pode ser aplicado a malhas estruturadas, conhecido como *multigrid* geométrico (WESSELING e OOSTERLEE, 2001), bem como a malhas não-estruturadas, conhecido como *multigrid* algébrico (STÜBEN, 2001).

A ideia central da técnica *multigrid* é a utilização de diversas malhas para aproximar de zero os elementos do vetor de erro e . Considere-se o sistema:

$$Au = f \quad (3.52)$$

onde A é a matriz $n \times n$ de coeficientes e u e f têm dimensão n . Denotando a solução exata da Eq. (3.52) por u e a solução numérica por v , então:

$$e = u - v \quad (3.53)$$

e o vetor resíduo,

$$r = f - Av \quad (3.54)$$

Como o erro, em muitos casos, é tão inacessível quanto a própria solução exata, usa-se o resíduo para fornecer uma noção da precisão da aproximação v . A relação entre o resíduo e o erro é comumente denominada equação residual, pois, a partir da Eq.(3.53) pode-se escrever:

$$\begin{aligned} Ae &= Au - Av \\ Ae &= f - Av \\ Ae &= r \end{aligned} \quad (3.55)$$

Dessa forma, fica definido o passo “correção”, que consiste em resolver a Eq.(3.55) e então corrigir a solução aproximada v , usando a Eq.(3.53). Na sequência, fica claro o que está envolvido nos passos “suavização” e “restrição”.

De acordo com Pinto e Marchi (2006), o método *multigrid*, proposto originalmente por Fedorenko (1964), é atualmente um método numérico muito usado para resolver iterativamente sistemas de equações algébricas. A ideia básica é usar um conjunto de malhas e executar alternativamente iterações em cada nível de malha e soluções aproximadas desta equação em malhas mais grossas (BRIGGS et al., 2000). São usados operadores para transferir informações da malha fina para a malha imediatamente mais grossa (processo chamado de restrição) e da malha grossa para a malha imediatamente mais fina (processo de prolongação). Em cada malha o sistema de equações é resolvido com um método iterativo com propriedades de reduzir rapidamente os erros oscilatórios (propriedades de suavização).

O princípio de suavização assegura que muitos métodos iterativos clássicos (Gauss-Seidel, por exemplo), quando aplicados apropriadamente a problemas elípticos discretos, têm um forte efeito de suavização sobre o erro de qualquer aproximação. O princípio de malha grossa afirma que, um termo de erro suave é bem aproximado em uma malha grossa. Um procedimento em malha grossa é muito mais barato que um procedimento em malha fina.

As Figs. (3.10) e (3.11), obtidas de Araki (2007) mostram o comportamento da suavização do erro em métodos iterativos. Na Fig. 3.10 tem-se uma malha de 100 elementos (101 nós) e na Fig. 3.11, uma malha de 25 elementos (26 nós). Em relação ao número de iterações, nota-se que em malha mais fina o comportamento é mais oscilatório do que para uma malha mais grossa.

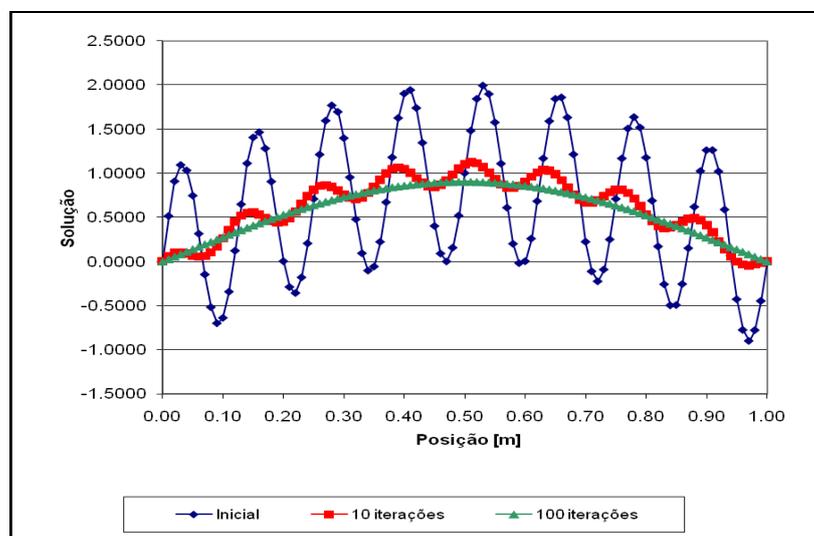


FIGURA 3.10 - OSCILAÇÃO DO ERRO PARA MALHA COM 100 ELEMENTOS

Comparando-se o comportamento do erro apresentado, conclui-se que para a malha mais fina (com mais elementos), o erro apresenta comportamento mais oscilatório que para uma malha mais grossa (com menos elementos). Um esquema iterativo apropriado em diferentes níveis de malha dá uma rápida redução das componentes de alta frequência correspondentes e, como este processo passa por todas as frequências, uma rápida redução do erro global pode ser alcançada. A taxa de convergência ideal (teórica) do método *multigrid* independe do tamanho da malha, ou seja, independe do número de pontos da malha (FERZIGER e PERIC, 2002; ROACHE, 1998).

Conforme Krechel e Stüben (1999), em qualquer abordagem *multigrid*, suavização e correção na malha grossa são usadas em conjunto para eliminar o erro. Isto requer que as componentes do erro que não podem ser corrigidas por um problema na malha grossa, podem ser eficientemente reduzidas por suavização. No método *multigrid* geométrico padrão, uma hierarquia de malhas e interpolação linear são usados, de forma que a relaxação pode ser escolhida de forma que suavize o erro na ideia geométrica usual. Abordagens mais robustas empregam componentes sofisticadas do *multigrid*, como suavizadores complexos, interpolação operador-dependente, operadores de Galerkin e/ou malhas com múltiplos semi-engrossamentos. A tentativa mais radical para se obter a robustez é a abordagem desses problemas com o *multigrid* algébrico. Um quadro comparativo entre os métodos *multigrid* geométrico e *multigrid* algébrico pode ser observado na Tab. 3.6.

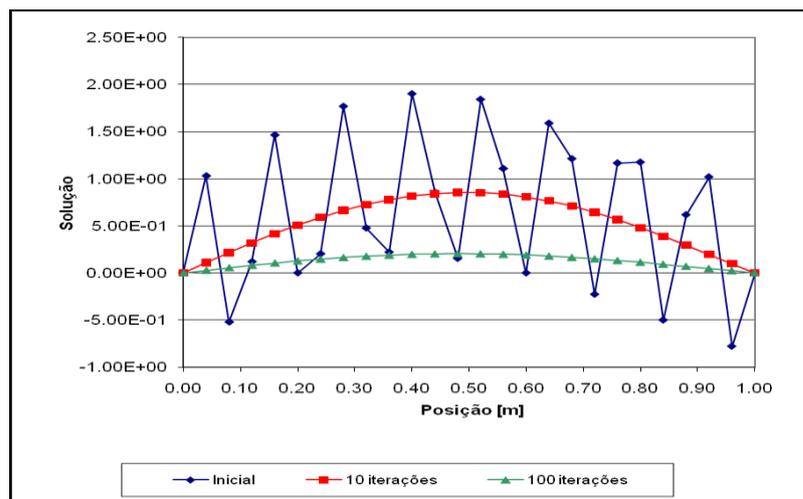


FIGURA 3.11 - OSCILAÇÃO DO ERRO PARA MALHA COM 25 ELEMENTOS

O Método *Multigrid* Geométrico (GMG) demanda a construção de uma hierarquia de malhas, que na prática, pode ser obtido por qualquer método de discretização, como o MDF,

MEF e MVF. Quando o domínio de cálculo é muito irregular, produzindo malhas de elementos não-estruturadas, busca-se aplicar, em contexto algébrico a mesma estratégia.

A principal diferença entre AMG e GMG é que a aproximação geométrica emprega uma hierarquia de malhas fixa e, uma interação entre suavização e correção da malha grossa é assegurada pela seleção apropriada do processo de suavização. Em contraste a isto, o AMG fixa o suavizador a algum esquema de relaxação simples, tal como relaxação Gauss-Seidel, e então é forçado a ter uma interação eficiente com a correção da malha grossa pela escolha do nível grosso e interpolação apropriada (TROTTEBERG et al., 2001).

Inicialmente, no AMG, é feita a seleção de um esquema de relaxação, que permite determinar a natureza do erro suave. Como não se tem acesso à malha física do problema, a ideia de suavização pode ser definida algebricamente. Erro suave (ou algebricamente suave) é qualquer erro que não é efetivamente reduzido por um método de relaxação (BRIGGS et al., 2000). Conforme Trottenberg et al. (2001), do ponto de vista algébrico, esta é uma questão importante para distinguir erros suaves de não suaves.

TABELA 3.6 – *MULTIGRID* ALGÉBRICO E GEOMÉTRICO

	<i>Multigrid</i> Geométrico	<i>Multigrid</i> Algébrico
Problema a ser resolvido	Problemas Contínuos	Sistemas lineares de equações algébricas
Informação usada	Estrutura geométrica do problema	Somente as entradas da matriz
Operador de suavização Programa	Varia para cada problema Programa composto para cada problema	Fixo Somente um programa para diferentes problemas
Eficiência	Muito boa	Boa

FONTE: Adaptada de CHANG et al., 1996.

O próximo passo é o uso desta ideia de suavização para selecionar as malhas grossas, que serão subconjuntos das incógnitas. É necessário fazer a escolha do operador de transferência entre as malhas que permite engrossamento efetivo. Conforme Briggs et al. (2000), depois de definido o esquema de relaxação, a malha grossa selecionada deve ser tal que as componentes suaves do erro sejam representadas acuradamente; o operador de interpolação deve ser definido de forma que as componentes suaves podem ser transferidas da malha grossa para a malha fina e, além disso, deve-se definir um operador de restrição e uma versão da malha grossa usando as propriedades variacionais. Finalmente, são selecionadas as

versões do operador da malha grossa, de forma que a correção da malha grossa tenha o mesmo efeito que no *multigrid* geométrico, ou seja, elimine as componentes de erro na variação do operador de interpolação.

Explicar matematicamente ou descrever algoritmos e operadores fogem ao escopo desse trabalho. Detalhes sobre as duas técnicas (geométrico e algébrico) podem ser encontrados nas referências bibliográficas (BRIGGS et al., 2000; STÜBEN, 2001; TROTTENBERG et al., 2001; WESSELING e OOSTERLEE, 2001; PEREIRA, 2007; SANTIAGO e MARCHI, 2007; SUERO, 2008; PEREIRA e NABETA, 2009).

3.5 ASPECTOS GERAIS DA IMPLEMENTAÇÃO

Para discretização das equações são aplicados o MVF e funções lineares unidimensionais do tipo CDS-2. Para a análise de erros aqui proposta, a condição de contorno prescrita na fronteira leva obviamente à dedução de que não há erro de discretização na mesma. Assim, em uma análise *a priori*, é possível manipular as equações de forma a explicitar nos demais elementos a ordem do erro de discretização.

Para resolução do sistema de equações lineares obtido da discretização do modelo matemático, foi usado o método *Gauss Seidel*, que pode ser visto como uma modificação no Método de Jacobi, com maiores detalhes em Cunha (2003).

Para obtenção dos resultados apresentados neste trabalho foram usados: um código gerador das malhas, implementado em linguagem Fortran 95, compilador Fortran Powerstation 4.0, precisão dupla; um código que resolve a equação de Laplace 2D em malhas triangulares, implementado em linguagem FORTRAN/95, compilador COMPAQ 6.6; um código que obtém resultados com *multigrid* algébrico, baseado no programa AMG1R6 (de RUGE e STÜBEN) acoplado aos anteriores em linguagem FORTRAN/95 compilador INTEL 9.1. Para malhas quadrangulares foi adaptado um código, implementado em linguagem FORTRAN/95 compilador INTEL 9.1, que utiliza o *multigrid* geométrico.

Os computadores empregados foram respectivamente: CFD-11 (2 processadores Intel Xeon QC, 4 núcleos por processador, 2.66 GHz, 32 GB RAM, SO: Windows XP 64 bits); Hewlett-Packard HP Pavilion dv2600 INTEL CORE 2 DUO, 2GB de memória RAM, sistema operacional Windows Vista de 32 Bits; CFD-9 (Processador Core2 Quad), 8GB de memória RAM e Core2 Duo, 2.66 GHz e 1 GB de RAM, Windows XP 64 bits.

Com relação à execução do programa, o procedimento geral foi, da malha mais grossa até a mais fina, executar até que se atinja o erro de máquina. Após a obtenção das soluções

numéricas do problema, os resultados das simulações são analisados por um programa analisador, intitulado `Richardson_3p0` que estima erros de discretização, com base na extrapolação de Richardson. Em resumo, `Richardson_3p0` faz extrapolações simples e múltiplas dos resultados numéricos obtidos de soluções em múltiplas malhas; calcula ordens efetiva e aparente de resultados extrapolados ou não e calcula o erro estimado de resultados numéricos com e sem extrapolações, usando estimadores de erro como Delta, Richardson, *Grid Convergence Index* (GCI), convergente e multicoeficientes (MARCHI, 2001).

A razão de refino usada pode ser constante ou variável. Em caso de razão de refino variável, o método da bisseção (CUNHA, 2003) é usado para obter as ordens aparentes. Depois da obtenção da solução numérica de um problema, é necessário que o código fonte inclua uma saída composta de dados de entrada para o analisador `Richardson_3p0`. No Anexo A, encontram-se alguns dados informativos a respeito do modelo numérico do programa `Richardson_3p0` e exemplos de dados de entrada e de saída para utilização do mesmo. A Tab.3.7 ilustra um arquivo de dados de entrada, inseridos no `Richardson_3p0` para o trabalho desenvolvido, no caso da malha mais grossa.

TABELA 3.7 – ARQUIVO DE ENTRADAS PARA O ANALISADOR `RICHARDSON_3p0`

	NOME DA VARIÁVEL	VALOR NUMÉRICO
	Métrica da malha	5,0000000000000000E-01
1	Temperatura em $x = y = \frac{1}{2}$	2,5000000000000000E-01
2	Temperatura Média	2,5000000000000000E-01
3	Taxa de Transferência de Calor ao Leste	7,5000000000000000E-01
4	Taxa de Transferência de Calor ao Norte	-1,7500000000000000E+00
5	Taxa de Transferência de Calor ao Oeste	-7,4999999999999990E-01
6	Taxa de Transferência de Calor ao Sul	-2,4999999999999990E-01
7	Média da Norma do Erro Numérico	7,868502751342730E-02

Neste trabalho, depois da geração dos 12 níveis de malhas que seriam analisados, bem como suas respectivas soluções numéricas, o programa `Richardson_3p0` foi alimentado e forneceu informações a respeito de cada variável de interesse. Para o código *multigrid* algébrico (AMG), que resolve a equação de Laplace bidimensional, com malhas triangulares, por exemplo, há no Anexo A, um dos típicos arquivos de saída do `Richardson_3p0`, incluindo gráficos e tabelas de dados. As malhas quadrangulares tiveram suas soluções com convergência acelerada pelo *multigrid* geométrico (GMG).

Uma vez analisadas as saídas do `Richardson_3p0`, foram construídos gráficos que são apresentados no próximo capítulo. O Apêndice F contém as tabelas de dados e os gráficos que

mostram os erros de discretização em função de h para malhas triangulares (AMG) e quadrangulares (GMG); além disso, há tabelas que contém os dados que deram origem aos gráficos das ordens assintóticas do erro de discretização, para cada uma das variáveis de interesse.

4 RESULTADOS

O objetivo deste Capítulo é apresentar os resultados da implementação do modelo numérico proposto para este trabalho. Para cada uma das variáveis de interesse, é apresentado um comparativo entre o módulo do erro de discretização cometido em malhas triangulares e quadrangulares, com e sem a utilização de MER. São exibidos os gráficos das ordens aparentes de cada variável, tanto para malhas triangulares quanto quadrangulares, o que permite verificar a estimativa *a priori* do comportamento assintótico do erro de discretização cometido no experimento numérico. Além disso, é apresentado um ensaio de análise do desempenho dos dois tipos de malhas empregadas. O Apêndice E contém todas as tabelas de dados que deram origem aos gráficos, informações e considerações deste Capítulo. Na primeira seção, onde é considerada a temperatura no centro do domínio, é definida a simbologia padrão adotada nas legendas dos gráficos, gerados pela utilização do *software* OriginPro 6.1.

4.1 TEMPERATURA NO CENTRO DO DOMÍNIO (T_c)

Para cada nível de malha que discretiza o domínio de cálculo existe uma métrica h que o representa. De acordo com Marchi e Silva (2005):

$$h = \left(\frac{D}{N} \right)^{\frac{1}{d}} \quad (4.1)$$

onde D representa o valor do comprimento, área ou volume do domínio discreto de cálculo do problema (1D, 2D ou 3D), no caso deste trabalho, área unitária; d é a dimensão do problema, nesse caso, 2; N é o número total de elementos ou volumes de controle reais que discretizam o domínio de cálculo.

As malhas triangulares são representadas pela sigla TG (*triangular grid*) e as quadrangulares, pela sigla QG (*quadrangular grid*). Neste trabalho, comparam-se erros de discretização cometidos em malhas triangulares com os erros de discretização cometidos em malhas quadrangulares que tenham a mesma métrica. Para facilitar a referência a esse fato, a partir desse ponto, usa-se no texto a expressão quadrangular (ou triangular) correspondente. Os símbolos E_{mer} e E_h , representam os módulos dos erros de discretização cometidos na

variável, com e sem a utilização de MER, respectivamente. Por exemplo, a notação $E_{mer}(QG)$, indica o erro de discretização com MER cometido em uma malha do tipo quadrangular.

A Fig. 4.1, cujos dados constam nas Tabs. E1 e E2, apresenta um comparativo entre o módulo do erro de discretização com e sem MER em malhas triangulares e quadrangulares correspondentes para T_c . Observando o gráfico, percebe-se que o erro de discretização é menor quando se utilizam malhas quadrangulares, com e sem MER.

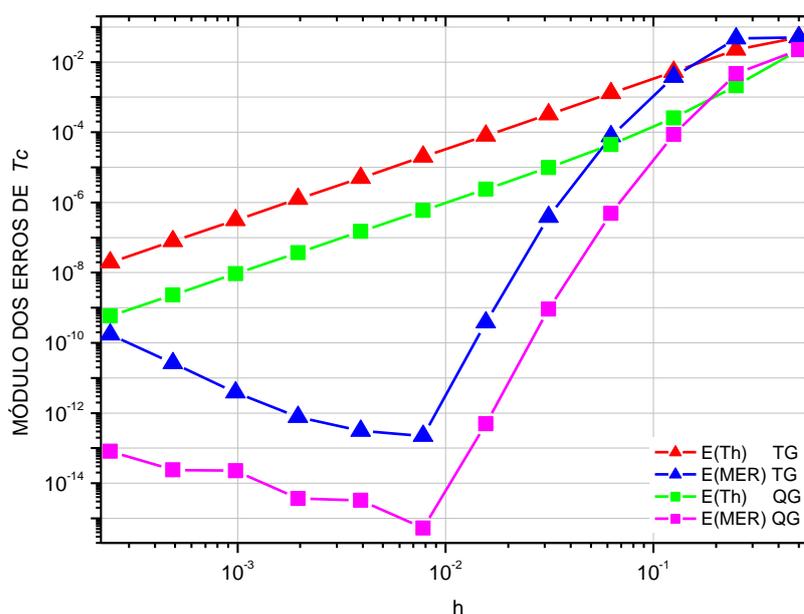


FIGURA 4.1 – ERROS: T_c

O melhor desempenho da utilização de MER pode ser quantitativamente avaliado. Considere-se, por exemplo, o erro de discretização de ordem 10^{-7} cometido quando se utiliza malhas triangulares na discretização do domínio de cálculo, e os dados da Tab. E1. Tal erro é atingido, sem o uso de MER na malha de nível 10; com o uso de MER, na malha de nível 5. Note-se que, a malha de nível 10 tem 1.048.576 volumes e a malha de nível 5, tem 1024 volumes. A razão entre o número de nós da malha 10 e da malha 5 e os dados da Tab.3.2, tornam possível extrair informações relativas ao nível de redução do esforço computacional (memória e tempo de CPU) entre usar ou não MER em malhas triangulares. Está claro que o esforço é menor com utilização de MER. Análise similar feita com relação a malhas uniformes unidimensionais e bidimensionais, incluindo considerações dos efeitos de precisão

e da quantidade de extrapolações e malhas utilizadas indica que o resultado obtido, já esperado, foi comprovado (MARCHI et al., 2008; MARCHI e GERMER, 2009).

Com o objetivo de avaliar a qualidade das soluções ao se considerar o tipo de malha utilizado na discretização do domínio de cálculo, pode-se calcular a razão aproximada entre as curvas que representam os erros de discretização em malhas triangulares e as quadrangulares correspondentes; esse número é um indicador de quanto o desempenho de malhas quadrangulares é melhor do que o das triangulares. A título de ilustração, considere-se a variável Tc e o nível de malha 9 (cujo h é da ordem 10^{-3}), uma vez que pode ocorrer oscilação do erro em malhas mais finas, devido a efeitos do erro de arredondamento. Observa-se, na Fig. 4.1 que o erro sem a utilização de MER é de ordem 10^{-6} na malha triangular e, na malha quadrangular correspondente, de ordem 10^{-8} (portanto, 100 vezes menor); nota-se também que o erro com a utilização de MER é de ordem 10^{-13} na malha triangular e, na malha quadrangular correspondente, de ordem 10^{-15} (igualmente, 100 vezes menor). Isso significa que a melhor qualidade da solução numérica da variável de interesse em malha quadrangular não depende, unicamente, da aplicação de MER. Evidentemente, os resultados com MER em malhas quadrangulares são melhores do que os resultados em malhas triangulares com MER porque já o são sem MER. O fato da solução com MER ser melhor era esperado. Porém, o resultado obtido em relação ao erro de discretização com relação ao tipo de malha empregado, não era, a princípio, esperado. Um ensaio e discussões para uma possível justificativa são apresentados (seção 4.8) neste capítulo.

A ordem aparente (PU) é definida como a inclinação local da curva de incerteza (U) da solução numérica (ϕ) versus o tamanho (h) dos elementos da malha num gráfico logarítmico (MARCHI, 2001). Seu cálculo permite verificar na prática, isto é, *a posteriori* da obtenção das soluções numéricas, se à medida que h é reduzido, a ordem da incerteza das soluções numéricas tende à ordem assintótica (PL) dos erros de truncamento, resultado teórico obtido nas análises *a priori*. A diferença entre PU e PL está diretamente relacionada à acurácia dos estimadores de erro do tipo Richardson. A simbologia utilizada para os gráficos que mostram o comportamento das ordens aparentes é a seguinte:

- PU(Th) - representa a ordem aparente do erro estimado da variável de interesse, utilizada para confirmar a primeira ordem verdadeira ou ordem assintótica na expressão do erro de discretização. Neste trabalho, conforme apresentado no Capítulo 3, a primeira ordem verdadeira estimada *a priori* é igual a 2, para todas as variáveis de interesse;

- $PU(Ti_PU)$ representa a ordem aparente do erro estimado da variável de interesse, utilizada para confirmar a segunda ordem verdadeira na expressão do erro de discretização. Neste trabalho, conforme apresentado no Capítulo 3, a segunda ordem verdadeira é igual a 4, para todas as variáveis de interesse;
- $PU(Tbi_PU)$ representa a ordem aparente do erro estimado da variável de interesse, utilizada para confirmar a terceira ordem verdadeira na expressão do erro de discretização. Neste trabalho, conforme apresentado no Capítulo 3, a terceira ordem verdadeira é igual a 6, para todas as variáveis de interesse.

As Figs. 4.2 e 4.3 mostram o comportamento das ordens aparentes do erro de discretização, cometido em malhas triangulares e quadrangulares, respectivamente, para a variável T_c . As tabelas com os dados que geraram tais gráficos estão no Apêndice E e são, respectivamente, as Tabs. E3 e E4.

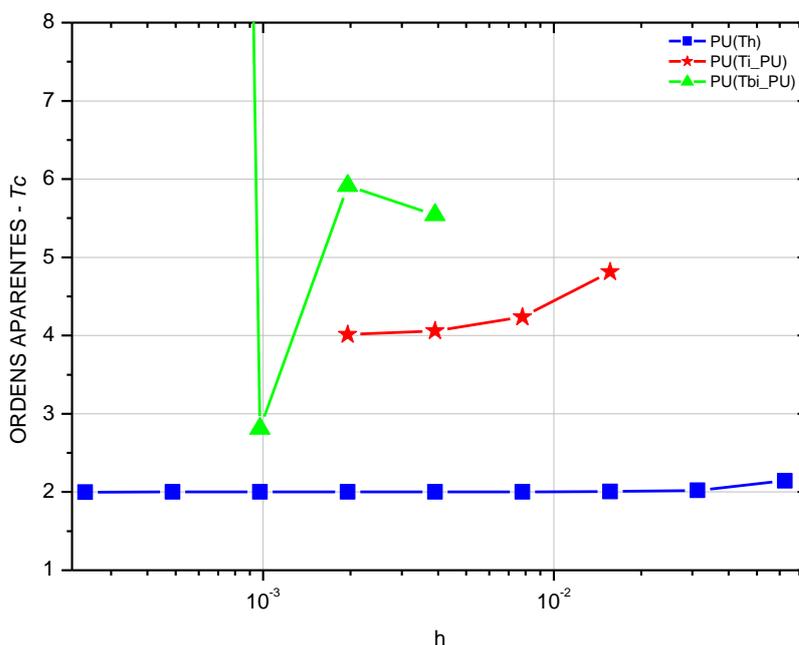


FIGURA 4.2 – ORDENS DO ERRO DE T_c (TG)

Nas figuras, observa-se que o valor das ordens aparentes converge monotonicamente para a ordem assintótica do erro de discretização, em determinado intervalo à medida que ocorre refino de malha, para os dois tipos de malha. A Fig. 4.2 mostra que em malhas triangulares mais grossas, para a variável T_c , os valores de PU são maiores do que PL, o que

justifica o nome intervalo superconvergente (MARCHI, 2001). Nas malhas quadrangulares, o intervalo superconvergente de PU tem maior amplitude, como se vê na Fig. 4.3.

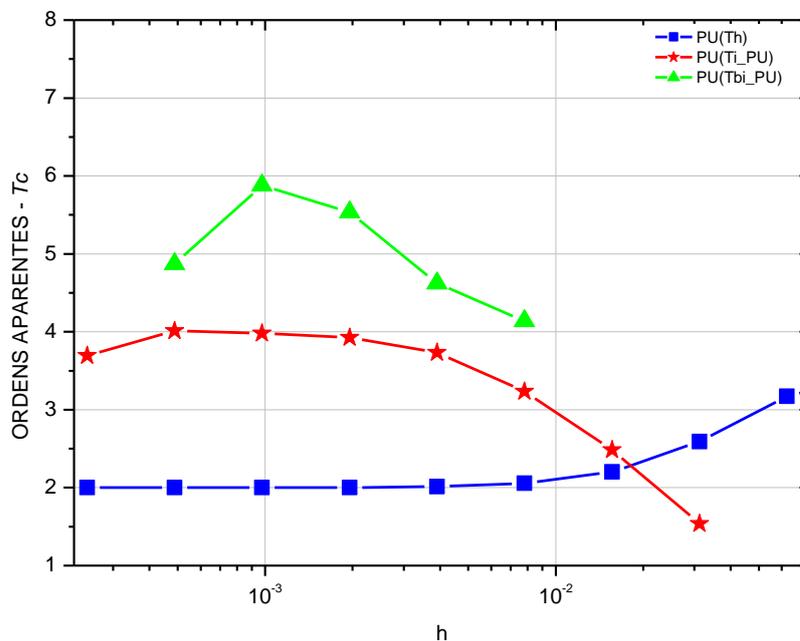


FIGURA 4.3 – ORDENS DO ERRO DE T_c (QG)

Os valores da ordem aparente PU (Ti_PU), em malhas triangulares são maiores do que o valor esperado (4), para malhas grossas; em malhas quadrangulares, menores do que o valor esperado, para malhas refinadas. Na medida em que a malha triangular é refinada, verifica-se que a ordem aparente PU(Tbi_PU), assume valores muito distantes (para maiores) de 6, valor esperado; isso não ocorre em malhas quadrangulares. Tais diferenças devem-se à forte influência do erro de arredondamento, presente nas malhas mais refinadas. De forma geral, para variável T_c , em um determinado intervalo, as ordens aparentes do erro estimado tendem à ordem assintótica do erro de discretização nas malhas triangular e quadrangular.

As Figs. 4.2 e 4.3 ajudam a explicar o comportamento da Fig. 1, pois se pode notar que as ordens do erro de T_c são as esperadas até determinada malha (mais precisamente, e de acordo com a Tabs. E1 e E2, a de nível nove, com 262.144 volumes de controle) e, a partir desta, o erro começa a aumentar. Ao se usar Extrapolações de Richardson, observa-se que as ordens (verdadeiras e aparentes) tendem a aumentar; deste modo, o erro numérico, devido à discretização diminui, o que permite a obtenção de soluções mais acuradas. Deve-se observar que esse fenômeno ocorre apenas enquanto o erro numérico é dominado pelo erro de discretização. Comportamento análogo é observado para as demais variáveis de interesse com aplicação de MER, conforme pode ser visto no decorrer desse Capítulo.

4.2 TEMPERATURA MÉDIA (T_m)

A Fig. 4.4 é um comparativo entre o módulo do erro de discretização com e sem MER em malhas triangulares e quadrangulares para a variável T_m . Observa-se que, para essa variável, o erro é menor quando se utilizam malhas do tipo quadrangular com e sem MER. Para ambos os tipos de malha, MER foi eficaz na redução do erro, um resultado esperado e verificado anteriormente (MARCHI et al., 2008; MARCHI e GERMER, 2009).

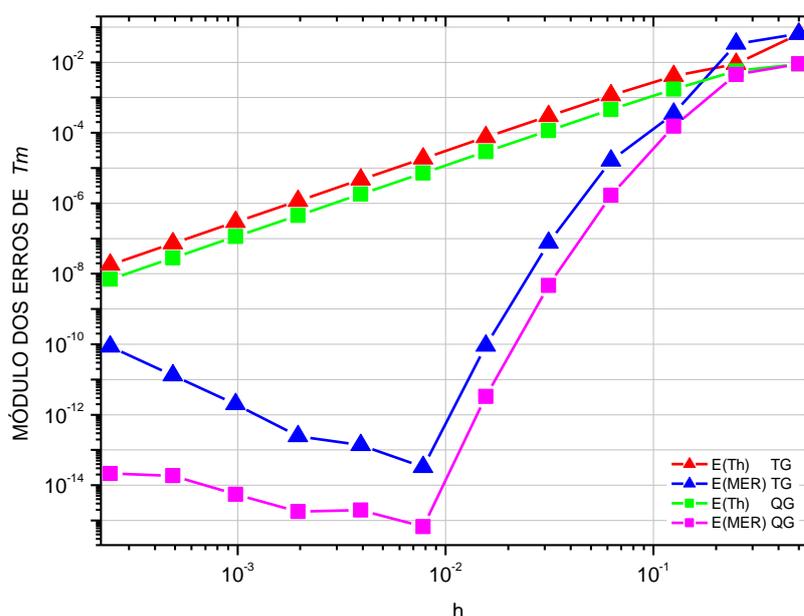


FIGURA 4.4 – ERROS: T_m

A Fig. 4.5 mostra o comportamento das ordens aparentes do erro de discretização em malhas triangulares, para variável T_m ; a Fig. 4.6 mostra o mesmo comportamento em malhas quadrangulares. Tais figuras foram obtidas usando os dados das Tabs. E7 e E8, respectivamente. É fácil ver que PU converge para PL, monotonicamente, em determinado intervalo, em malhas quadrangulares e triangulares.

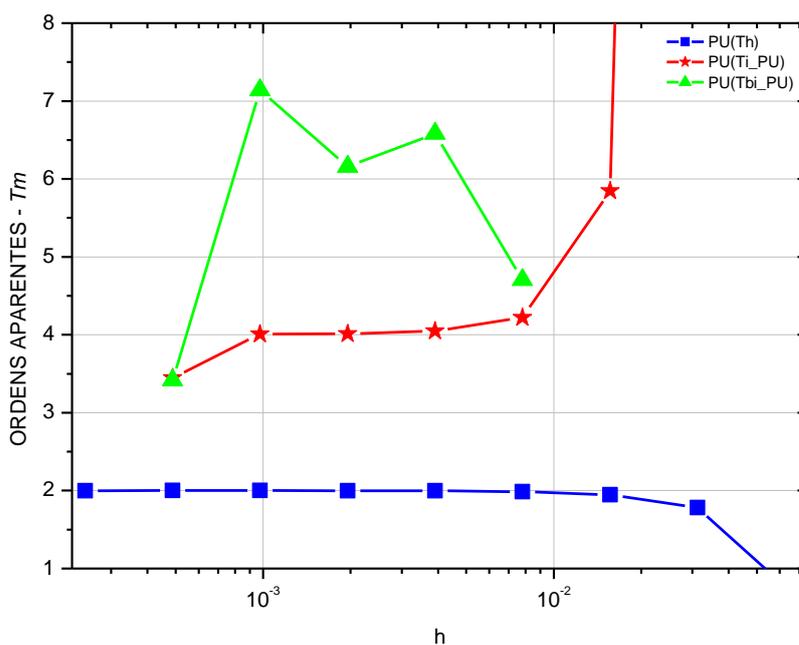


FIGURA 4.5 – ORDENS DO ERRO DE T_m (TG)

Para a ordem PU(Ti_PU), em malhas triangulares refinadas os valores ficam menores do que o esperado (4) e em malhas quadrangulares, maiores do que o esperado (4). Além disso, em malhas triangulares mais grossas esse valor é muito distante de 4, valor esperado, para maior. Observa-se, para a ordem PU(Tbi_PU), que em malhas refinadas quadrangulares, esse valor é menor do que o esperado (6). No caso do refinamento da malhas, o erro de arredondamento atua destacadamente e “gera” tais diferenças. Nas malhas triangulares, o valor esperado 6 é atingido, apenas nos níveis de malha 8 e 9, conforme a Tab. E7 do Apêndice E.

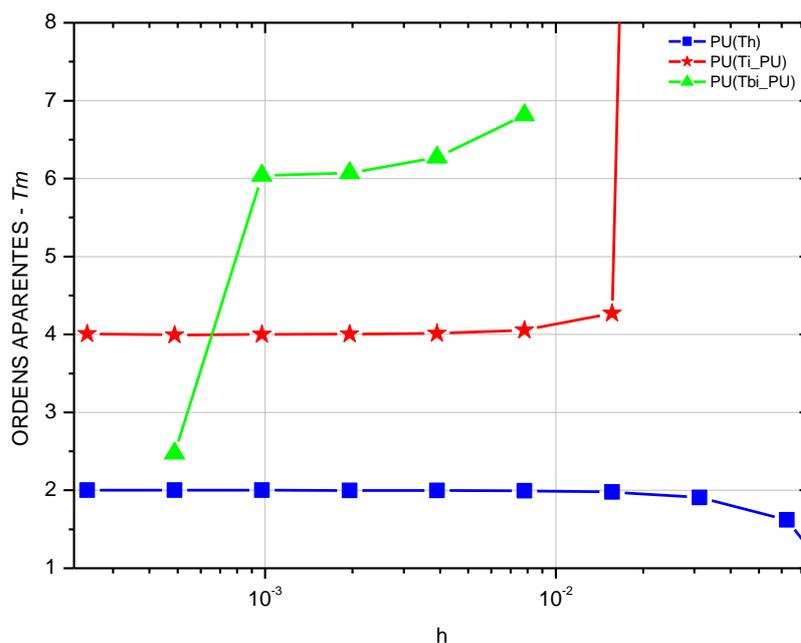
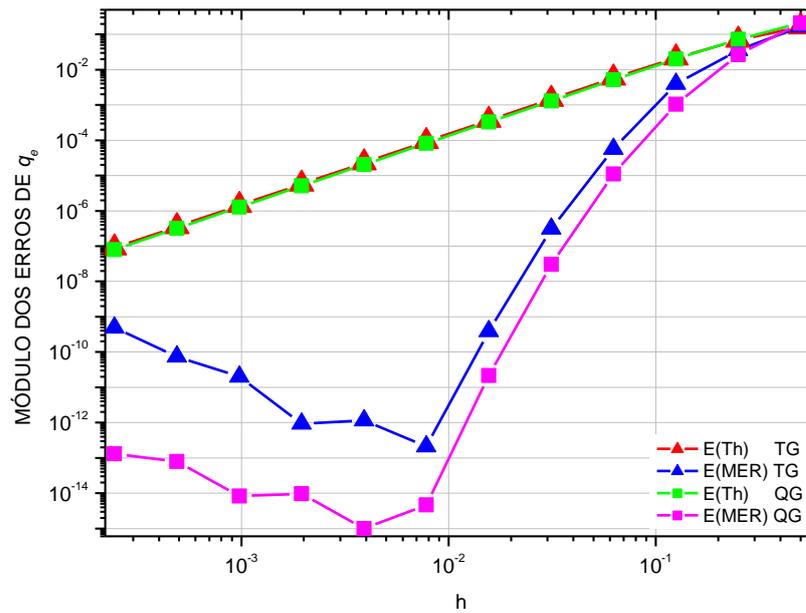
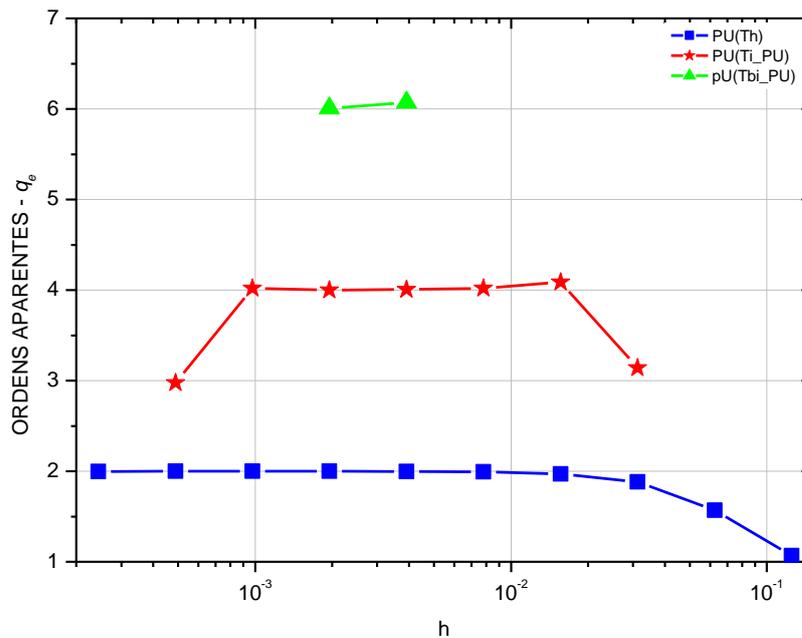


FIGURA 4.6 – ORDENS DO ERRO DE T_m (QG)

4.3 TAXA DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NA FACE LESTE (q_e)

A Fig. 4.7 é um comparativo entre o módulo do erro de discretização com e sem MER em malhas triangulares e quadrangulares para variável 3, q_e . Nota-se que os valores do erro de discretização sem MER são próximos para malhas triangulares e quadrangulares, porém, de acordo com as Tabs. E9 e E10 do Apêndice E, não possuem valores numéricos iguais. Levando-se em conta os 12 níveis de malha avaliados, pode-se dizer que os resultados do erro são menores nas malhas quadrangulares. Além disso, como resultado esperado e comprovado, o erro é reduzido quando se aplica MER, nos dois tipos de malha (MARCHI et al., 2008; MARCHI e GERMER, 2009).

FIGURA 4.7 – ERROS: q_e FIGURA 4.8 – ORDENS DO ERRO DE q_e (TG)

A Fig. 4.8 mostra o comportamento da ordem assintótica do erro de discretização cometido em malhas triangulares, para variável q_e ; a Fig. 4.9 mostra o mesmo comportamento em malhas quadrangulares. Os gráficos foram construídos com os dados das Tabs. E11 e E12, respectivamente. Nota-se que PU converge para PL, monotonicamente, em determinado intervalo, em malhas quadrangulares e triangulares.

Para a ordem PU(Ti_PU), em malhas triangulares refinadas e em malhas grossas, os valores ficam menores do que o esperado (4). Nas malhas quadrangulares, há convergência

para o valor esperado, 4. Observa-se, para a ordem PU(Tbi_PU), que em malhas triangulares esse valor é definido apenas para os níveis 8 e 9 de malha, convergindo para o resultado esperado, 6. Em malhas quadrangulares, esse valor não é definido para o nível de malha 11 e sofre uma queda brusca no nível de malha 12, devido à influência do erro de arredondamento.

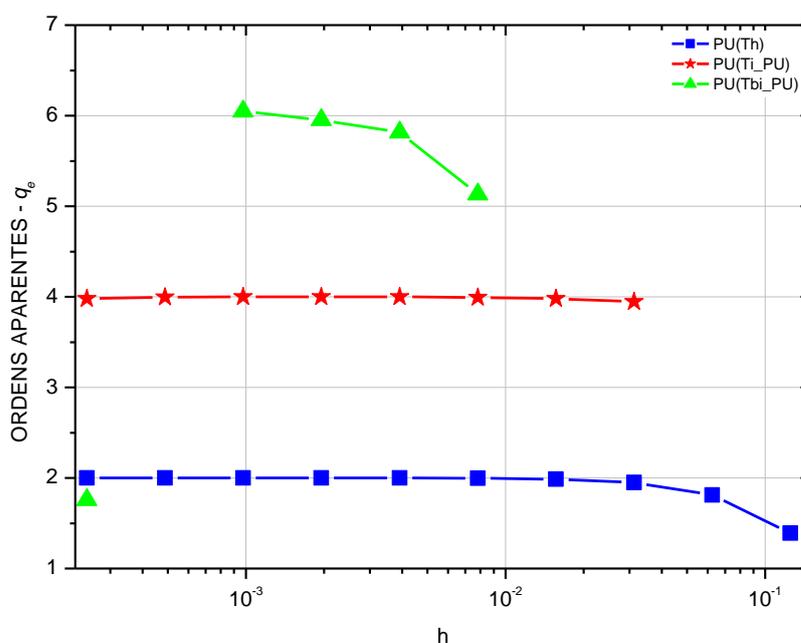


FIGURA 4.9 – ORDENS DO ERRO DE q_e (QG)

Com relação ao módulo do erro de discretização, com e sem MER, para as taxas ao norte (q_n), ao oeste (q_w) e ao sul (q_s), foi verificado comportamento semelhante ao da taxa ao leste, q_e , o que pode ser confirmado observando-se as Fig. E1, Fig. E4 e Fig. E7, respectivamente, no Apêndice E. Com relação às ordens do erro, verifica-se, nos dois tipos de malhas, que PU converge para PL, ocorrendo algumas ligeiras diferenças para as demais ordens:

- Para q_n , no caso da malha triangular, PU(Ti_PU) converge para o valor esperado 4, sendo definida a partir do quinto nível de malha. O valor de P(Tbi_PU) é definido apenas a partir do sétimo nível de malha e reduz-se bruscamente na malha de nível 10, influência do erro de arredondamento, que é maior em malhas mais finas. Nas malhas quadrangulares, PU(Ti_PU) tem comportamento similar e o valor de P(Tbi_PU) não é definido no nível de malha 10 (Fig. E2 e Fig. E3 do Apêndice E) ;
- Para q_w , a ordem PU(Ti_PU) tem comportamento similar ao da variável anterior. A ordem aparente PU(Tbi_PU) tende ao valor esperado nos níveis de malha 8 e 9 para

triangulares, sofrendo queda no nível 10 e aumento brusco nos níveis 11 e 12. No caso das malhas quadrangulares, verifica-se o valor esperado de $PU(Tbi_PU)$ nos níveis 7, 8 e 9 de malha (Fig. E5 e Fig. E6 do Apêndice E);

- Para q_s , a ordem $PU(Ti_PU)$ tem comportamento esperado para os dois tipos de malhas. A ordem aparente $PU(Tbi_PU)$ tende ao valor esperado nos níveis de malha 8 e 9 para triangulares, sofrendo queda brusca nos próximos níveis e tende ao esperado nos níveis 7, 8 e 9 nas malhas quadrangulares, sendo indefinida para os níveis 10 e 11 e bruscamente reduzida no nível 12 (Fig. E8 e Fig. E9 do Apêndice E);

4.4 MÉDIA DA NORMA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO (L)

Para variável L , não faria sentido utilizar a técnica MER, uma vez que o interesse é saber o comportamento do erro em si. Um comparativo de desempenho entre malhas triangulares e quadrangulares para os erros de discretização é indicado pela Fig. 4.10. Pode-se notar que o erro em malhas quadrangulares foi menor do que em malhas triangulares.

A Fig. 4.11 mostra o comportamento das ordens aparentes do erro de discretização cometido em malhas triangulares, para variável L ; a Fig. 4.12 mostra o mesmo comportamento em malhas quadrangulares.

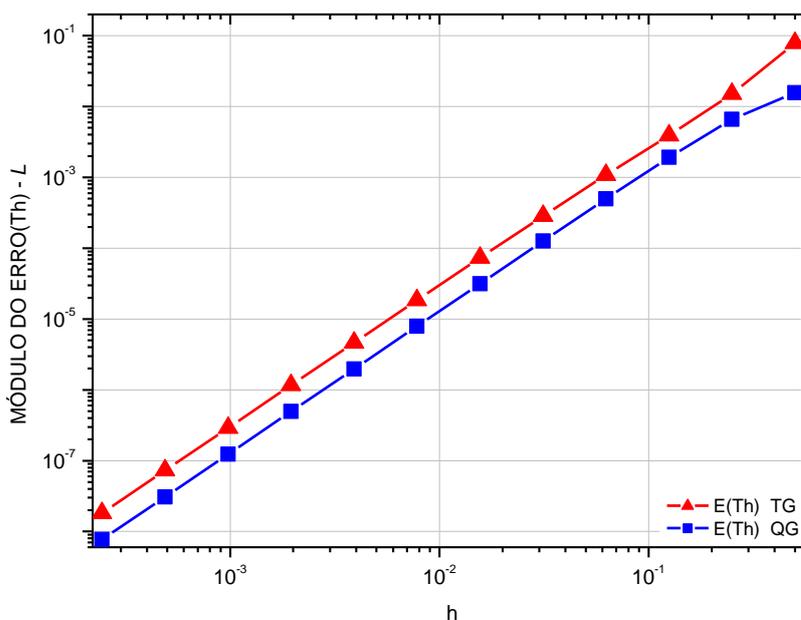


FIGURA 4.10 – ERROS: L

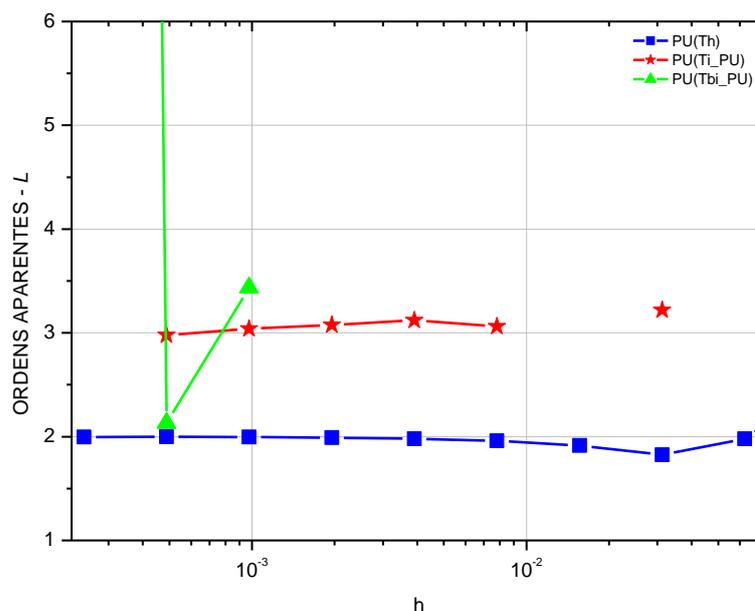


FIGURA 4.11 – ORDENS DO ERRO DE L (TG)

4.5 OBSERVAÇÕES GERAIS PARA TODAS AS VARIÁVEIS AVALIADAS

Observou-se que, para todas as variáveis, os valores de PU em geral convergem para PL em determinado intervalo tanto nas malhas quadrangulares quanto nas triangulares utilizadas. Fora desse intervalo, em malhas mais refinadas, observou-se que para as variáveis Tm , q_n , q_w e q_s em malhas triangulares, os valores de PU ficaram muito distantes de PL, para maiores. Nas malhas quadrangulares, para variáveis Tm , q_e e q_s os valores de PU ficaram distantes de PL para menores, e, na variável q_n , há um intervalo onde PU (Tbi_PU) não é definida. Em todos os casos, verificou-se que o erro de discretização é menor em malhas quadrangulares, para o domínio de cálculo estudado neste modelo numérico.

Nota-se que usar MER reduz o erro em malhas bidimensionais não ortogonais como, por exemplo, as triangulares avaliadas. Além disso, verificou-se que MER no esquema CDS-2 é extremamente eficiente na redução do erro de discretização para todas as variáveis, em determinado intervalo, tal qual esperado, de acordo com a literatura.

A redução do erro é diretamente proporcional ao número de nós da malha; quanto maior o número de nós e de extrapolações (neste trabalho, foram usadas 12), maior a redução. Isso acontece, de acordo com os gráficos, até certo ponto, uma vez que em malhas mais finas já há contaminação pelo erro de arredondamento, que fora do intervalo citado, talvez seja o limitante da redução do erro numérico; usar precisão quádrupla minimiza esse problema. Aliás, já no intervalo citado pode-se notar que o erro de arredondamento se faz importante.

Após a primeira malha o MER está atingindo o erro de arredondamento (erro de máquina) e não consegue melhorar os resultados. No domínio de cálculo proposto, verificou-se que as malhas quadrangulares tiveram melhor desempenho do que as triangulares sem MER, e, obviamente, com MER. Outro resultado digno de maiores e futuras análises, evidenciado nas Figs. 4.11 e 4.12 é a diferença entre a tendência de PU(Ti_PU) para 3 nas malhas triangulares e para 4 nas quadrangulares. Avaliar os resultados usando precisão quádrupla pode dar pistas sobre as divergências entre os resultados.

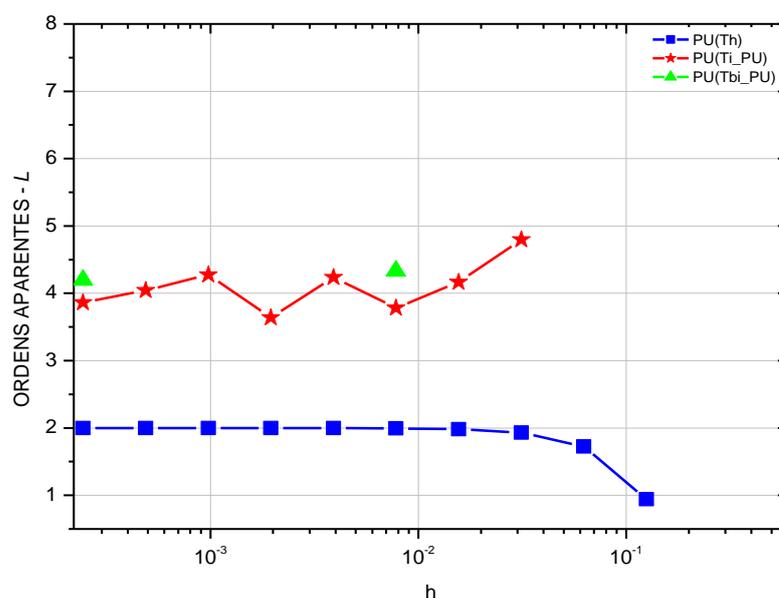


FIGURA 4.12 – ORDENS DO ERRO DE L (QG)

4.6 ENSAIO DE ANÁLISE DO DESEMPENHO DAS MALHAS

Neste Capítulo, ficou evidente o melhor desempenho das malhas quadrangulares quando da comparação do erro de discretização. É importante lembrar que o domínio de cálculo proposto no modelo numérico é do tipo quadrangular.

Uma possível tentativa de justificativa pode ser encontrada quando se observa a geometria do domínio de cálculo e outros fatores pertinentes, como por exemplo, a quantidade de elementos em cada tipo de malha para cada nível considerado.

De forma genérica, a quantidade de elementos nas malhas quadrangulares, por direção coordenada, é dada por 2^n como consequência, o número total de elementos é 2^{2n} . Para as malhas triangulares, o número de elementos por nível é também dado por 2^{2n} , onde $n \in T$, $T = \{n \in \mathbb{N} / 1 \leq n \leq 12\}$, indica cada um dos níveis de malha usados nas simulações.

A Fig. 4.13 ilustra a malha quadrangular de nível 1, o ponto do centro da geometria, e os pontos que participam na determinação da temperatura no centro, calculada com a média aritmética. A Fig. 4.14 ilustra a malha de nível 2.

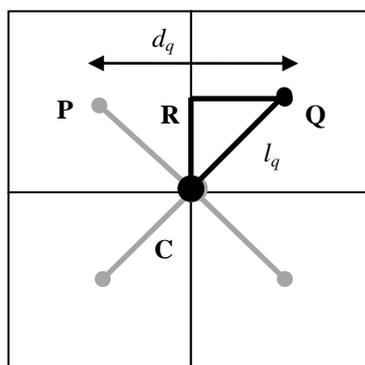


FIGURA 4.13 – NÓS ENVOLVIDOS NO CÁLCULO DE T_c COM QG NÍVEL 1

Para ambas, sejam: l_q a distância entre o centro do domínio C e o nó Q da malha; d_q a distância entre dois nós da malha (ou espaçamento da malha, que em uma QG é igual ao valor numérico da métrica da malha), por exemplo, P e Q; R o ponto de intersecção entre a face comum aos elementos que têm P e Q quais centróides e o segmento de reta que une os dois nós da malha e $\frac{d_q}{2}$ a distância entre R e Q. Para todos os níveis de QG, é fácil ver que são quatro nós envolvidos nessa média e que, para o triângulo PQR, retângulo em R, vale:

$$l_q = \frac{\sqrt{2}}{2} d_q \quad (4.2)$$

A Fig. 4.15 mostra a malha triangular de nível 2, o ponto do centro da geometria, e os pontos que participam na determinação da temperatura no centro, calculada com média aritmética. Sejam: l_t a distância entre o centro do domínio C e o nó Q da malha; d_t a distância entre dois nós da malha (nesse caso, um valor numérico diferente do valor numérico da métrica da malha), por exemplo, P e Q. Os nós reais P, Q, R e S são os vértices de um quadrado, de lado d_t . O apótema de um polígono regular é definido como o segmento que une o centro geométrico desse polígono a um de seus lados.

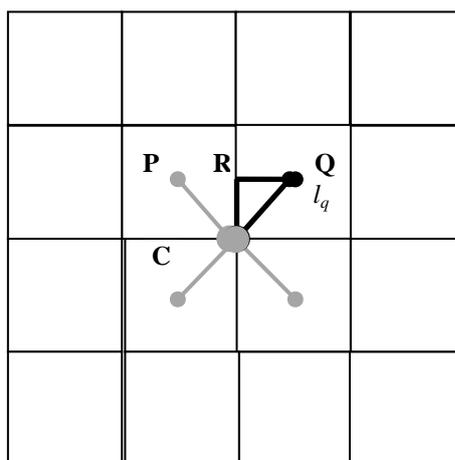


FIGURA 4.14 – NÓS ENVOLVIDOS NO CÁLCULO DE T_c COM QG NÍVEL 2

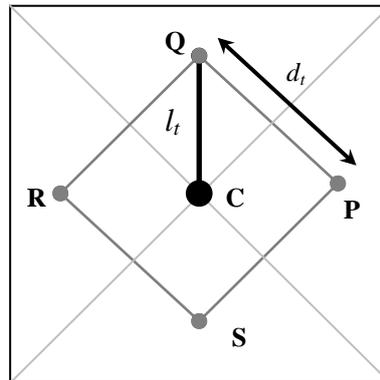
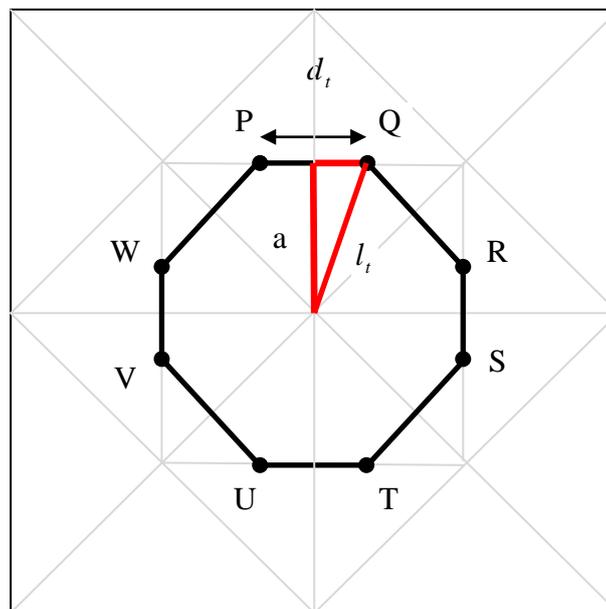
A medida desse segmento é numericamente igual à distância entre o centro e um dos lados do polígono. A medida l_t , para a malha representada na Fig. 4.15 é o apótema do quadrado de lado d_t e tem, portanto, valor numérico igual ao de l_q , indicado pela Eq.(4.2).

A Fig. 4.16 ilustra a malha triangular de nível 2. Seja l_t a distância entre o centro do domínio C e o nó Q da malha; d_t a distância entre dois nós da malha (nesse caso, um valor numérico diferente do valor numérico da métrica da malha), por exemplo, P e Q. Os oito nós reais que participam no cálculo da temperatura no centro do domínio: P, Q, R, S, T, U, V e W são os vértices de um octógono. O segmento a é o apótema desse octógono.

A medida desse segmento é numericamente igual à distância entre o centro e um dos lados do polígono. Portanto, a medida l_t , para a malha representada na Fig. 4.16 tem valor numérico igual ao indicado pela Eq.(4.3).

$$l_t = \frac{\sqrt{10}}{2} d_t \quad (4.3)$$

A partir do terceiro nível de malha, o comportamento geométrico para temperatura no centro é similar, isto é: oito pontos participam da média aritmética que determina a temperatura no centro do domínio e o valor numérico do apótema do octógono formado por eles, é o mesmo da Eq.(4.3).

FIGURA 4.15 – NÓS ENVOLVIDOS NO CÁLCULO DE T_c COM TG NÍVEL 1FIGURA 4.16 – NÓS ENVOLVIDOS NO CÁLCULO DE T_c COM TG NÍVEL 2

É possível avaliar a razão entre o erro cometido em malhas triangulares e erro cometido em malhas quadrangulares. Avaliando-se as expressões em Eq.(4.2) e Eq.(4.3), percebe-se, à medida que as malhas são sistematicamente refinadas, ou que $\frac{l_q}{l_t} \rightarrow 1$, que a razão entre as malhas triangulares e quadrangulares é igual a 1 para malha de nível 1, e igual a $\sqrt{5}$, um número maior do que a unidade ($\cong 2,236$) para os demais níveis. Neste caso, a expressão do erro numérico na Eq.(2.13) passa a depender fortemente dos coeficientes C_1, C_2 ,

$C_{3,\dots}$ Portanto, antes mesmo do cálculo da temperatura no centro do domínio, é possível prever que a magnitude do erro de discretização para T_c é maior em malhas triangulares. Outro fator que corrobora essa afirmação é que nas malhas triangulares de qualquer nível, é empregado o dobro de volumes, em relação às malhas quadrangulares, para o cálculo da temperatura no nó localizado no centro do domínio.

Essa avaliação pode ser feita também *a posteriori* das soluções numéricas. A Tab. 4.1 mostra o erro de discretização na variável T_c (Temperatura no Centro), para malhas triangulares e quadrangulares.

TABELA 4.1 – T_c ANALÍTICA

(valor de referência em $x = y = \frac{1}{2}$: 1,992684076691933402168112706421715848530E-01)

V			
Nv	H	Tc_Exata (TG)	Tc_Exata (QG)
1	5,000000000000000E-01	2,092604088914440E-01	1,866427751947630E-01
2	2,500000000000000E-01	2,003595813496350E-01	1,984786349073740E-01
3	1,250000000000000E-01	1,993366599088760E-01	1,992190442511970E-01
4	6,250000000000000E-02	1,992726736446530E-01	1,992653224453320E-01
5	3,125000000000000E-02	1,992686742934810E-01	1,992682148426620E-01
6	1,562500000000000E-02	1,992684243332140E-01	1,992683956175340E-01
7	7,812500000000000E-03	1,992684087106940E-01	1,992684069159640E-01
8	3,906250000000000E-03	1,992684077342870E-01	1,992684076221160E-01
9	1,953125000000000E-03	1,992684076732610E-01	1,992684076662510E-01
10	9,765625000000000E-04	1,992684076694470E-01	1,992684076690090E-01

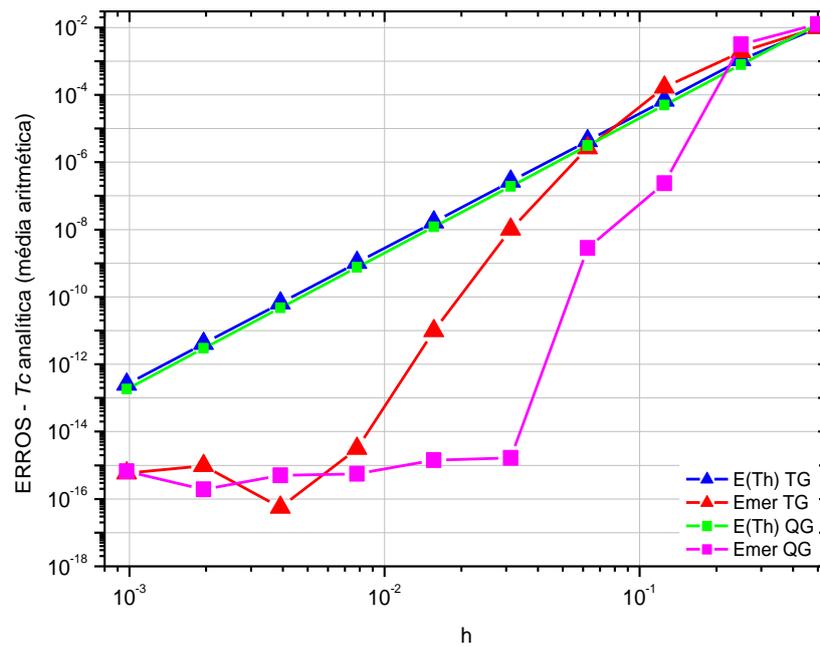
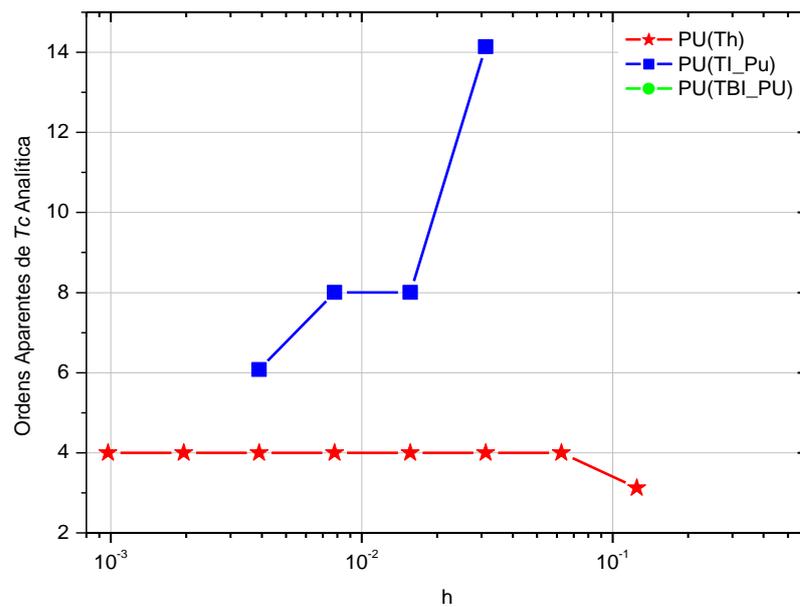
Nv – nível da malha

h – métrica da malha

N - quantidade de volumes de controle reais na malha (coincide com a quantidade de nós)

Tc_exata – Temperatura exata no nó da malha

As temperaturas são calculadas pela média aritmética da temperatura analítica dos pontos que participam em determinar T_c , tanto em malhas triangulares quanto em quadrangulares, para os dez primeiros níveis de malha. Essa tabela foi utilizada para obtenção da Fig. 4.17, que mostra o erro de discretização obtido como já citado com e sem MER. Nota-se que o desempenho das malhas quadrangulares é melhor do que o das triangulares, mesmo com temperaturas calculadas analiticamente.

FIGURA 4.17 – ERROS T_c VIA MÉDIA ARITMÉTICAFIGURA 4.18 – ORDENS APARENTES T_c (TG)

As Figs. 4.18 e 4.19 mostram as ordens aparentes do erro cometido. Não é apresentada PU (TBI_PU) devido ao fato do valor ser $-8.71488916209794E+01$ para malhas triangulares e $-8.74537462025078E+01$ para malhas quadrangulares. O motivo disso é que tais valores que não permitiriam perceber para que ordem os resultados tendem na escala utilizada. O fato de esses valores ficarem tão distantes do esperado é fonte para futuras investigações.

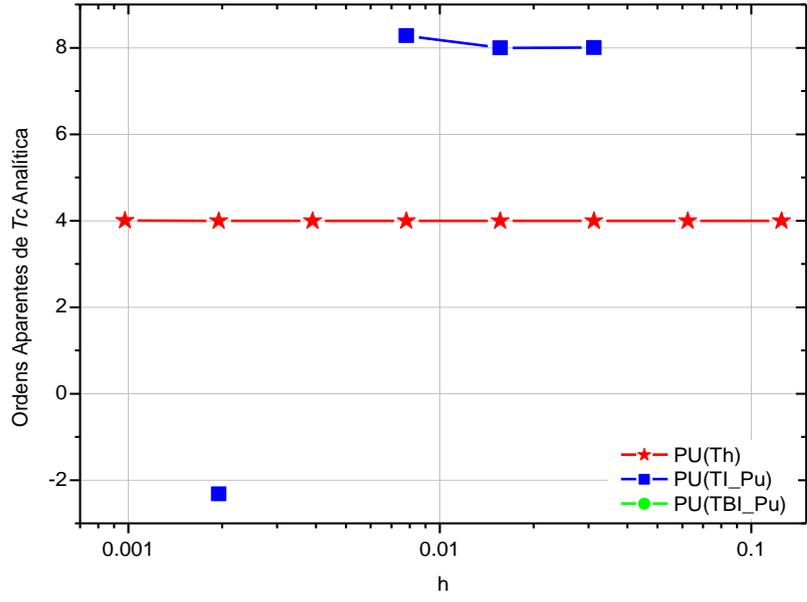


FIGURA 4.19 – ORDENS APARENTES T_c (QG)

5 CONCLUSÃO

A conclusão deste trabalho está dividida em quatro seções: escopo do trabalho, conclusão geral, contribuições e trabalhos futuros. Nestas seções pretende-se, respectivamente apresentar: um resumo sobre quais diretrizes foram seguidas para cumprimento da proposta; os resultados e objetivos atingidos e apontar pontos em que é possível aprimorar e/ou enriquecer as conclusões e investigações aqui apresentadas.

5.1 ESCOPO DO TRABALHO

O interesse deste trabalho era fazer a verificação de soluções numéricas para o problema da condução de calor bidimensional em regime permanente, sem geração de calor, com propriedades térmicas constantes. Isto é, foram verificadas soluções numéricas da Equação de Laplace 2D, utilizando 12 níveis diferentes de malhas, com utilização de MER, para redução do erro de discretização.

O domínio de cálculo, quadrangular unitário, foi discretizado por malhas triangulares e quadrangulares, com sistema de coordenadas cartesianas. Para os contornos, com condição de Dirichlet prescritas nulas exceto ao norte, cuja condição é do tipo senóide, foram usados volumes fictícios.

As funções de interpolação usadas para aproximação das variáveis foram do tipo CDS-2 para discretização. Para o pós-processamento dos fluxos, a aproximação usada foi do tipo UDS-1 e a regra do retângulo, para o pós-processamento das variáveis globais: taxas e temperatura média. A razão de refino entre malhas foi considerada constante e igual a dois, isto é, foram utilizadas apenas malhas cuja quantidade de elementos é dada por uma potência de base dois e expoentes pares. O número máximo de volumes reais foi de 16.777.216, nos dois tipos de malhas avaliados.

O *solver* numérico utilizado foi GAUSS-SEIDEL, aliado à técnica *multigrid* para acelerar a convergência dos resultados.

As variáveis de interesse avaliadas foram: temperatura no centro do domínio, temperatura média, taxa de transferência de calor nos contornos leste, norte, oeste e sul e norma L_1 (nesse trabalho foi chamada de L) da média do erro de discretização.

Os programas necessários para o cumprimento da proposta foram: Gerador de Malhas, Laplace_2D; AMG; GMG e Richardson_3p0. Em resumo, a função de cada um dos códigos era respectivamente: discretizar o domínio de cálculo; discretizar e resolver a equação de

Laplace, pelo método dos volumes finitos; acelerar a convergência das soluções numéricas nas malhas triangulares; acelerar a convergência de soluções numéricas nas malhas quadrangulares; analisar a convergência das ordens aparente dos erros. Todos os programas foram implementados em linguagem Fortran 95, precisão dupla.

A definição de métrica de malhas usada foi não-estruturada (é a mesma para malhas estruturadas). O cálculo do erro numérico foi possível devido ao fato das soluções analíticas de todas as variáveis serem conhecidas, calculadas usando-se o software Maple 12. O erro de iteração foi minimizado, uma vez que o processo de iteração atingiu o erro de arredondamento de máquina.

5.2 CONCLUSÃO GERAL

Foram deduzidas, através de estimativa *a priori*, as ordens assintóticas e verdadeiras do erro de discretização para todas as variáveis de interesse, com exceção dos fluxos, que tiveram aproximação usando-se o esquema UDS-1. Mostrou-se que as ordens verdadeiras encontradas para todas as variáveis foram: 2, 4, 6,...

Portanto, para todas as variáveis, a ordem assintótica é 2 (por definição a menor dentre as ordens verdadeiras). Após análise das soluções numéricas, verificou-se que as estimativas *a posteriori* coincidem com os resultados esperados, isto é, para as variáveis de interesse existe um intervalo convergente da ordem aparente quando h tende a zero, ou, à medida que a malha é refinada. Neste intervalo, mostrou-se a eficácia do estimador de Richardson, pois PU tende a PL, para todas as variáveis, tanto em malhas quadrangulares quanto em triangulares. Para as demais ordens, será necessário trabalhar com precisão quádrupla.

Fora desse intervalo, em malhas mais refinadas triangulares, observou-se que para as variáveis T_c , q_n , q_w e q_s (nas Figs. 4.2, E2, E5 e E8, respectivamente) os valores de PU (Tbi_PU) ficaram muito maiores do que os de PL, o que se justifica devido à influência do erro de arredondamento, que se acentua à medida que h tende a zero. Além disso, nas malhas quadrangulares mais refinadas, os valores de PU para as variáveis T_c , T_m e q_s (nas Figs. 4.3, 4.6 e E9, respectivamente) ficaram muito menores do que os de PL, e, para variável q_n , há um intervalo onde PU (Tbi_PU) não é definida (Fig. E3); todas essas diferenças são geradas pela influência do erro de arredondamento. A princípio, o tamanho do intervalo superconvergente ou subconvergente não é alterado substancialmente pela precisão dupla, mas pelos erros de discretização. A tendência, essa sim, pode ser mais facilmente vista mudando-se a precisão.

Verificou-se que MER no esquema CDS-2 é extremamente eficiente na redução do erro de discretização para todas as variáveis, para malhas triangulares e quadrangulares, em determinado intervalo, tal qual esperado, de acordo com a bibliografia. A redução do erro é diretamente proporcional ao número de nós da malha; quanto maior o número de nós e de extrapolações, maior a redução. Fora do intervalo citado, o erro de arredondamento talvez seja o limitante da redução do erro numérico; usar precisão quádrupla minimiza esse problema. No domínio de cálculo proposto, verificou-se que as malhas quadrangulares tiveram melhor desempenho do que as triangulares sem MER, e, obviamente, com MER.

Para a variável T_c , foi mostrado, para malhas correspondentes, que em malhas triangulares o erro é maior em magnitude. Um fator que contribui para essa conclusão é o cálculo dessa variável, no qual é necessária a média aritmética de temperaturas entre nós vizinhos do centro geométrico do domínio. Para uma malha triangular, essa quantidade de nós será sempre o dobro do que para uma malha quadrangular, em qualquer nível, excetuando-se o primeiro. Conclui-se, portanto, que o desempenho de um modelo numérico é também dependente da boa adaptação entre a geometria do domínio de cálculo e a discretização deste, ou, geração da malha.

Durante a fase de simulações verificou-se que, sem a técnica *multigrid* algébrico o custo computacional inviabilizava a obtenção de resultados da ordem de milhões de nós em malha. Esse fator foi decisivo para utilização da mesma.

5.3 CONTRIBUIÇÕES

- Para as sete variáveis de interesse foram deduzidas *a priori* as ordens do erro de discretização para malhas triangulares;
- Foram verificados os erros de discretização e suas ordens em malhas triangulares;
- Mostrou-se que o refinamento em malhas triangulares e quadrangulares não causa efeitos sobre a ordem do erro de discretização, apenas sobre sua magnitude, em conformidade com a teoria existente;
- Mostrou-se que MER é eficiente em malhas triangulares;
- Como contribuição não esperada em princípio, mostrou-se que o desempenho de malhas quadrangulares é superior ao de malhas triangulares, no caso do domínio de cálculo proposto neste trabalho e sob as condições dos modelos matemático e numérico utilizados.

5.4 TRABALHOS FUTUROS

Com a finalidade de expandir e complementar os estudos neste trabalho sugere-se alguns tópicos, como:

- Buscar justificativas teóricas que comprovem o experimento numérico realizado neste trabalho;
- Com relação à malha, fazer as mesmas análises em malhas triangulares não-estruturadas de fato, aplicando-se o MVF e usando MER para redução do erro, além disso, estendendo a análise para domínios de cálculo tridimensionais;
- Na literatura, há trabalhos que avaliam o efeito de diferentes esquemas de aproximações numéricas sobre a redução de erro de discretização de soluções obtidas com MER em domínio de cálculo unidimensional; fazer a mesma avaliação em domínios bidimensionais (e tridimensionais) é outra possibilidade de trabalho;
- Avaliar a influência de refinamentos de malha não-uniformes e a possibilidade de considerar a dimensão temporal;
- Verificar o erro numérico para outros modelos matemáticos de problemas de dinâmica dos fluidos, como por exemplo, escoamentos fluidos turbulentos, cujo modelo matemático tenha as equações de Navier-Stokes como governantes e outros, usando metodologia semelhante à apresentada nesse trabalho.

REFERÊNCIAS

ABNT, **Guia Para Expressão da Incerteza de Medição**. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Normas Técnicas, 1997.

AIAA, Editorial policy statement on numerical accuracy and experimental uncertainty, **American Institute of Aeronautics and Astronautics**, v. 32, n. 1, p. 3, 1994.

AIAA, Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations, **American Institute of Aeronautics and Astronautics**, G-077, p. 1-19, 1998.

AINSWORTH, M.; ODEN, J. T. A posteriori error estimation in finite element analysis. *Computational Methods Applied in Mechanical Engineering*. **Elsevier Science**, n. 142, p. 1-88, 1997.

ARAKI, K. L. Comunicação Pessoal a Arleide Cristina Alves, UFPR, 2007.

ARAÚJO, A. L. S. **Solução de Escoamentos de Fronteira Livre Usando Malhas Não-Estruturadas e Método dos Volumes Finitos Baseado em Elementos Finitos**. Tese de doutorado. UFPB, Paraíba, 2004.

ASME, Journal of heat transfer editorial policy statement on numerical accuracy, **ASME Journal of Heat Transfer**, v.116, p. 797-798, 1994.

BAJPAI, A.C.; MUSTOE, L. R.; WALKER, D. **Matemática Avançada para Engenharia**. São Paulo: Hemus, 1980.

BART, T.; OHLBERGER, M. **Finite Volume Methods: foundation and analysis**. Encyclopedia of Computational Mechanics. John Wiley & Sons, Ltda, 2004.

BARTH, T. Numerical Methods for Conservation Laws on Structured and Unstructured Meshes, March 2003. **Von Karmam Institute Lecture Series**, 2003.

BLOTTNER, F. G. Accurate Navier-Stokes results for the hypersonic flow over a spherical nose tip. **Journal of spacecraft and Rockets**, v. 27, n. 2, p. 113-122, 1990.

BRIGGS, W. L.; HENSON, V. E.; MCCORMICK, S. F. **A Multigrid Tutorial**. 2. ed. SIAM, EUA, 2000.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Análise Numérica**. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003.

CARNEIRO JR., D.P; RICCI, M. C. **Extrapolação de Richardson**. Seminário de Dinâmica Orbital I, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, INPE, 2006.

CARVALHO, L. M.; GRATTON, S. **Avanços em Métodos de Krylov para solução de sistemas lineares de grande porte**. Notas em matemática aplicada, v.42, Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, 2009.

CASTELO, A. F. **Geração de Malhas e Simulação Numérica de escoamento de Fluidos**. Projeto de Pesquisa do Laboratório de Computação de Alto Desempenho, Lcad. Financiado pela FAPESP, USP, 2006.

CELIK, I.; KARATEKIN, O. Numerical Experiments on Application of Richardson Extrapolation with nonuniform grids. **Transactions of ASME** v. 119, p.584-590, 1997.

CELIK, I.; ROACHE, P.; FREITAS, C.; COLEMAN, H. ; RAAD, P. Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications. **Journal of Fluids Engineering**. v.130, n. 7, 2008.

CELIK, I.; ZHANG, W. M. Application of Richardson Extrapolation to Some Simple Turbulent Flow Calculations. **Proceedings...** Symposium on Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics, p. 29, 1993.

CELIK, I.; ZHANG, W. M. Calculation of Numerical Uncertainty Using Richardson Extrapolation. Application to Some Simple Turbulent Flow Calculations. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 117, n 3, p. 439-445, 1995.

CHANG, Q., WONG, Y. S., FU, H. On the Algebraic *Multigrid* Method. **Journal of Computation Physics**, v. 125, p. 279-292, 1996.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Numerical methods for engineers**. 5 ed. Boston, McGraw-Hill Higher Education, 2006.

COLEMAN, H. W.; STEELE, Jr. W. G. **Experimentation and Uncertainty Analysis for Engineers**. EUA: John Wiley & Sons, 1999.

COLEMAN, H. W.; STERN, F. Uncertainties and CFD Code Validation. **Journal of Fluids Engineering, ASME**, v.119, p.795-803, 1997.

CORDAZZO, J. **Simulação de reservatórios de petróleo utilizando o método EbfVM e Multigrid Algébrico**. 2006. 272f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2006.

CUNHA, M. C. M. **Métodos Numéricos**. 2^a ed.rev. Campinas, SP: Editora da UNICAMP, 2003.

DEVLIN, K. **Os problemas do Milênio**. Rio de Janeiro: Editora Record, 2004.

DOUGLASS, R.W.; RAMSHAW, J.D. Perspective: Future Research Directions in Computational Fluid Dynamics. **Transactions of ASME**, v.116, p.212-215, 1994.

ERTURK, E.; CORKE, T. C.; GÖKÇÖL, C. Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 48, p. 747-774, 2005.

ESTÁCIO, K. C. **Simulação do Processo de Moldagem por injeção 2D usando malhas não-estruturadas**. Dissertação de Mestrado, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, ICMC/USP, USP, São Carlos, 2004.

FALGOUT, R. D. An Introduction to Algebraic *Multigrid*, Computing in Science and Engineering, Special Issue on Multigrid Computing. **UCRL-JRNL-** 220851, n. 8, p. 24-33, 2006.

FAZENDA, A. L. **Modelagem bidimensional de escoamentos Viscosos incompressíveis com malhas não Estruturadas utilizando a abordagem Baseada no circuncentro**. Tese de doutorado, em Computação Aplicada, INPE, São José dos Campos, 2002.

FEDORENKO, R. P. On the Speed of Convergence of an Iteration Process, **USSR Comput. Math. And Math. Phys.**, v.4, 1964.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational methods for Fluid Dynamics**. 3. ed. Berlin: Springer, 2002.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Further Discussion of Numerical Errors in CFD. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v.23, p. 1263-1274, 1996.

FLETCHER, C. A. J. **Computational Techniques for Fluid Flows**. Vols 1 e 2. 2 ed. Heidelberg: Springer-Verlag, 1992.

FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**. São Paulo: Edusp, 2000.

FREITAS, C. J. Journal of fluids engineering editorial policy statement on the control of numerical accuracy, **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 115, p. 339-340, 1993.

GHIA, U; GHIA, N; SHIN, C. T. High Re solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method. **Journal of Computational Physics**, v. 48, 1982.

GIACOMINI, F. F. **Verificação da forma de aplicar condições de contorno com o método dos volumes finitos**. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2009.

GOLUB, G. H. e VAN LOAN, C., **Matrix Computations**. 2 ed. Baltimore: Johns Hopkins Press, 1989.

GONÇALVES, N. D. F. **Método dos Volumes Finitos em Malhas não estruturadas**. Dissertação de Mestrado, Departamento de Matemática Aplicada/Matemática Pura, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, 2007.

GREENBERG, M. D. **Advanced Engineering Mathematics**, 2 ed. Prentice-Hall, 1998.

GRESHO, P. M., TAYLOR C. Editorial. **International Journal for Numerical Methods in Fluids** v. 19, n. 12, 1994.

GUINÉ, R. P. F; Refinamento espacial aplicado a um reator de leito fixo. **Revista do Instituto Superior Politécnico de Viseu**, n 37, novembro, 2009.

HIRSCH, C. **Numerical Computation of Internal and External Flows**. Chichester: Wiley, 1988.

HOLMAN, J. P. **Experimental methods for engineers**. New York: McGraw-Hill, 1994.

HUGHES, T. J. R. **The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis**. New York: Dover, 2000.

ISO, International Organization for Standardization, **Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement**, 1993.

JAMESON, A.; MARTINELLI, L. Mesh Refinement and Modeling Errors in Flow Simulation. **American Institute of Aeronautics and Astronautics**, v. 36, n. 5, p. 676-686, 1998.

JOYCE, D.C. Survey of extrapolation processes in Numerical Analysis. **Society for Industrial and Applied Mathematics**, v.13, n. 4, October, Philadelphia, 1971.

KNUPP, P.; SALARI, K. **Verification of Computer Codes in Computational Science and Engineering**. EUA: Ed. Chapman & Hall/CRC, 2002.

KOKHANOV, V. V.; ANDREEVA, T. M. **A method of increasing the accuracy and speed of a Digital Integrator**. Ed. Defense Technical Information Center, 1968.

KRECHEL, A., STÜBEN, K. **Operator Dependent Interpolation in Algebraic Multigrid**, Proceedings of Fifth European *Multigrid* Conference, 1999.

KREYSZIG, E. **Advanced Engineering Mathematics**, 8 ed. New York: Wiley, 1999.

LACERDA, W. M. JR; OLIVEIRA, J. E. M; PEREIRA, F. A. R.; ATAÍDE, C. H. **Fluxo helicoidal de lama de perfuração em região anular excêntrica**. Engenharia de Petróleo, UNIG, 2009.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

MARCHI, C. H. **Verificação de soluções numéricas unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos**. 2001. 289 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2001.

MARCHI, C. H. **Protocolo para Estimar Erros de Discretização em CFD: versão 1.1**, UFPR, Curitiba, 2005.

MARCHI, C. H.; GERMER, E. M. **Verificação de esquemas advectivos-difusivos 1D com e sem Múltiplas Extrapolações de Richardson**. In: Cilandce, 2009, Armação dos Búzios. XXX CILAMCE - Congresso Ibero Latino Americano de Métodos Computacionais em Engenharia - 2009, 2009.

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**. In: Cilandce, 2008, Maceió. XXIX CILAMCE - Congresso Ibero Latino Americano de Métodos Computacionais em Engenharia - 2008, 2008.

MARCHI, C. H.; SCHNEIDER, F. A. **Introdução à Mecânica Computacional**. Apostila. Curitiba, 2002.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. **Condições suficientes para estimar com acurácia e confiabilidade erros de discretização em CFD**. In: Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, 1999, São Paulo. XX CILAMCE, 1999.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. **Previsão de erros de truncamento de modelos numéricos em malhas não-uniformes**. Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional, Uberlândia, MG, pp. 481-488 maio de 2000.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Multi-dimensional Discretization Error Estimation for Convergent Apparent Order. **ABCM**, v. 27, n 4, October, 2005.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. **Numerical Heat Transfer**, Part B, Fundamentals, Philadelphia, v.42, n. 2, p. 167-188, 2002.

MARCONDES, F. **Solução Numérica Usando Métodos Adaptativos-Implicitos e Malhas de Voroni de Problemas de Reservatório de Petróleo**. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, 1996.

MARINI, F. **Simulação de um leito fluidizado aplicando a técnica CFD baseada na teoria cinética do escoamento granular**. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP. 13/02/2008. Campinas, São Paulo, 2008.

MARQUES, A.N; BARBOSA, J.R; AZEVEDO, J. L. F. **Validação de códigos de CFD para análise aerodinâmica de veículos lançadores e foguetes de sondagem.** VIII ENCITA, Encontro de Iniciação Científica e Pós-Graduação do ITA, 2002.

MARVIN, J. G. Perspective on Computational Fluid Dynamics Validation. **AIAA Journal**, vol.33, n°10, pp. 1778-1787, 1995.

MAVRIPLIS, D. J. Unstructured grid techniques. **Annu. Rev. Fluid. Mech.** p. 473-514, 1997.

MEHTA, U. B. Guide to Credible Computer Simulations of Fluid Flows. **Journal of Propulsion and Power**, v.12, n. 5, p. 940-947, 1996.

MINKOWYCZ, W. F., SPARROW, E. M., MURTHY, J. Y. **Handbook of numerical Heat Transfer.** 2 ed., John Wiley & Sons, INC, United States of America, 2006.

MIORALLI, P. C. **Análise térmica de um regenerador rotativo.** 21/02/2005. 201 f. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

MIRANDA, A. I. G. P.; OLIVEIRA, P. J.; PINHO, F. T. **Simulação numérica do escoamento de um fluido Newtoniano numa bifurcação com vista a aplicações hemodinâmicas.** VI Congresso Nacional de Mecânica Aplicada e Computacional, 2000.

NAVIER, C. L. M. H. **Memoire sur les lois du mouvement des fluids.** Mem. Acad. Sci. Inst. France, p. 389-340, 1822.

NORILER, D.; VEGINI, A. A.; MEIER, H. F. **Verificação e validação em CFD do escoamento giratório em ciclones a gás.** XXV Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, XXV CILAMCE, Recife, 2004.

O' CALLGHAN, S.; WALSH, M.; McGLOUGHLIN, T. **Comparison of Finite Volume, Finite Element and Theoretical predictions of blood flow through idealized femoral artery.** Summer Bioengineering Conference, Jun. 25-29, Florida, 2003.

OBBERKAMPF, W. L.; BLOTTNER, F. G. Issues in Computational Fluid Dynamics Code Verification and Validation. **American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal**, v. 36, n. 5, p. 687-695, 1998.

OBERKAMPF, W. L.; ROY, C.J. **Verification and Validation in Scientific Computing**. Cambridge University Press, 2010.

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

OLIVEIRA, F.; PINTO, M. A. V. ; MARCHI, C.H.; ARAKI, L. K. **Efeito de malhas anisotrópicas bidimensionais sobre o desempenho do método Multigrid Geométrico**. VI National Congress of Mechanical Engineering, VI CONEM, Campina Grande, 2010.

OLIVEIRA, P. J. **Avanços em reologia computacional com o método dos volumes finitos**. Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería, Granada, 2005.

ORESQUES, N.; FRECHETTE, K. S.; BELITZ, K. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the Earth sciences. **Science**, v. 263, p. 641-646, 1994.

OZTURK, M.; AYDIN, M. C. Verification of a 3-D model for spillway aerator. **Mathematical and Computational Applications**, v. 14, n 1, p. 21-30, 2009.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Washington: Taylor & Francis, 1980.

PEREIRA, F. H. **O método *multigrid* algébrico na resolução de sistemas lineares oriundos do Método dos Elementos Finitos**. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Escola Politécnica de São Paulo, USP, São Paulo, 2007.

PEREIRA, F. H.; NABETA, S. I. **Um estudo em métodos de suavização para *multigrid* algébrico baseado em wavelets**. *Exacta*, São Paulo, v.7, n.2, p.165-171, 2009.

PERES, R. A. **Uncertainty Analysis of Computational Fluid Dynamics Via Polynomial Chaos**. 136 f. Tese (Doutorado em Filosofia, Engenharia Aeroespacial) – Instituto Politécnico da Faculdade de Virgínia, Universidade da Virgínia, Blacksburg, Virginia, 2008.

PINTO, M. A. V.; MARCHI, C. H. 2006, Curitiba. Efeito de parâmetros do método multigrid cs e fas sobre o tempo de cpu para a equação de Laplace bidimensional. **Proceedings...** Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering. Curitiba, 2006.

PLETSCHER, P. **Introduction to Differential Equations: a really short summary of the lecture**. Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, SS06, 2006.

POISSON, S. D. **Mémoire sur les équations générales de l'équilibre et du mouvement des corps solides élastiques et des fluids**. l'Académie roy. des sciences, 1829.<<http://pagesperso-orange.fr/alta.mathematica/TABFERUSSAC.html>>. Data de acesso: 13/04/2010.

REDDY, J. N.; GARTLING, D. K. **The finite element method in heat transfer and fluid dynamics**. CRC Press, 1994.

RICHARDSON, L. F., The Approximate Numerical Solution by Finite Differences of Physical Problems involving Differential Equations, with an Application to the Stresses in a Masonry Dam, **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, Series A, Vol.210, pp. 307-357, 1910.

RIZZI, A.; VOSS, J. Toward establishing credibility in computational fluid dynamics simulations. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, p. 668-675, 1998.

ROACHE, P. J. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies. **Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME**, v. 116, p. 405-413, 1994.

ROACHE, P. J. Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics. **Annu. Rev. Fluid. Mech.**, p. 123-160, 1997.

ROACHE, P. J. **Verification and validation in computational science and engineering**. Albuquerque: Hermosa, 1998.

ROACHE, P. J.; GHIA, K. N.; WHITE, F. M. Editorial policy statement on the control of numerical accuracy, **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 108, p. 2, 1986.

ROY, C. J. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, EUA, n. 205, p. 131-156, 2005.

RUDY, D. H.; THOMAS, J. L.; KUMAR, A. GNOFFO, P.A.; CHAKRAVARTHY, S.R. Computation of laminar hypersonic compression-corner flows. **AIAA Journal**, v. 29, p. 1108-1113, 1991.

SANTIAGO, C. D.; MARCHI, C. H. **Optimum parameters of a Geometric Multigrid for a two-dimensional problem of two-equations**. XIX International Congress of Mechanical Engineering, COBEM, Brasília, DF, 2007.

SANTOS, L. A.; VASCONCELLOS, J. F. V.; MALISKA, C. R. Análise da acurácia de aproximação do laplaciano em volumes finitos usando diagramas de voronoi, **Proceedings... VI Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas**, Florianópolis, 1996.

SCHNEIDER, F. A. **Verificação de soluções numéricas em problemas difusivos e advectivos com malhas não uniformes**. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, UFPR, Curitiba, 2007.

SCHNEIDER, F. A.; MALISKA, C. R. **Solução numérica de problemas convectivos-difusivos bidimensionais pelo Método dos Volumes Finitos usando malhas não-estruturadas**. IX Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, ENCIT 2002, Caxambú, 2002.

SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. **Sobre a definição da razão de refino de malhas unidimensionais não uniformes**. XXV CILAMCE, Recife, 2004.

SHIH, T. M. A procedure to debug computer programs. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, EUA, v. 21, p. 1027-1037, 1985.

SHYY, W.; GARBEY, M.; APPUKATTAN, A.; WU, J. Evaluation of richardson extrapolation in computational fluid dynamics. **Numerical Heat Transfer**, Part B, v. 41, p. 139-164, 2002.

SILVA, L. F. R. **O coração de CFD; O coração de CFD II**. Blog de Notas em CFD. Disponível em < http://notasemcfd.blogspot.com/2007_07_01_archive.html >. Acesso em 21/04/2010.

SPHAIER, L. A., ALVES, L. S. B. **Métodos Computacionais com o Mathematica**. Material Interno, Departamento de Engenharia Mecânica, UFF e Departamento de Engenharia Mecânica e de Materiais, IME, 2007.

STERN, F.; MUSTE, M.; BENINATI, M.L.; EICHINGER, W. **IHR Technical Report**. Iowa City: Institute of Hydraulic Research. Faculdade de Engenharia; Universidade de Iowa; Julho de 1999. n. 406, 1999.

STOKES, G. On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums. **Transactions of the Cambridge Philosophical Society**, v. IX, 1850.

STÜBEN, K. A Review of Algebraic Multgrid. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 128, p. 281-309, 2001.

STWART, J. **Cálculo**. v. 2, 6 ed. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

SUERO, R. **Otimização do método Multigrid algébrico para problemas difusivos e advectivos 2D**. Projeto de tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, UFPR, Curitiba, 2008.

SWOKOWSKI, E. **Cálculo com Geometria Analítica**. v. 2, 2 ed. São Paulo: Makron Books, 1994.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. 2 ed. Washington: Taylor & Francis, 1997.

TENTNER, A. Computational Modeling of Blood Hydrodynamics and Blockage Formation Phenomena in the Human Cardiovascular System. **Journal of Medical Devices**, EUA, v. 4, n. 2, 2010.

TROTTEMBERG, U., OOSTERLEE, C., SCHÜLLER, A. **Multigrid**. Academic Press, 2001.

VENKATAKRISHNAN, V. Perspective on unstructure grid flow solvers, **AIAA Journal**, vol. 34, n.3, pp. 533-547, 1996.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics, the Finite Volume Method**. 2 ed. Pearson, 2007.

WESSELING, P. **An Introduction to Multigrid Methods**. John Wiley & Sons, 1992.

WESSELING, P.; OOSTERLEE, C. W. Geometric Multigrid with Applications to Computational Fluid Dynamics. **Journal of Computation and Applied Mathematics**, v. 128, p. 311-334, 2001.

WINSLOW, A. M. Numerical solution of the quasilinear Poisson equation in a nonuniform triangle mesh. **Journal of Computational Physics**, v. 1 p. 149-172, 1966.

ZHU, J. Z.; ZIEKIEWICZ, O. C. Superconvergence recovery technique and a posteriori error estimates, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 30, p. 1321-1339, 1990.

APÊNDICE A DADOS SOBRE MALHAS

O programa gerador das malhas tem como saída dados como o nível da malha, o número de volumes reais e fictícios, o número de nós da malha (reais e fictícios) e o tempo de processamento. Além disso, têm-se informações sobre as coordenadas dos baricentros dos elementos triangulares, que serão os nós onde se avalia a variável temperatura; a matriz de conectividade entre nós e dados sobre coordenadas de todos os pontos envolvidos no processo.

Por exemplo, para a malha de nível 1, representada pela Fig. 3.3, são obtidos os dados gerais, contidos na Tab. A1; os dados das coordenadas dos nós da malha, na Tab. A2; coordenadas dos centróides de cada volume de controle, na Tab. A3.

Para cada centróide, devido ao fato do volume de controle ter três arestas, haverá possibilidade de três conexões, para o caso de volumes de controle reais; para volumes de controle fictícios, a conexão é única, o que fica indicado pelo valor zero na Tab. A4, que apresenta a conectividade entre os centróides.

TABELA A1 – DADOS GERAIS DA MALHA MAIS GROSSA

Nível da malha: 1
Número de volumes reais: 4
Número de volumes fictícios: 4
Número de nós reais: 5
Número de nós fictícios: 4
Tempo de processamento [s]: 0.000000000E+00

TABELA A2 – COORDENADAS DOS NÓS DA MALHA MAIS GROSSA (reais e fictícios)

NÓ	COORDENADA X	COORDENADA Y
1	0, 000000000000000E+00	0, 000000000000000E+00
2	1, 000000000000000E+00	0, 000000000000000E+00
3	0, 000000000000000E+00	1, 000000000000000E+00
4	1, 000000000000000E+00	1, 000000000000000E+00
5	5, 000000000000000E-01	5, 000000000000000E-01
6	5, 000000000000000E-01	- 5, 000000000000000E-01
7	1, 500000000000000E+00	5, 000000000000000E-01
8	5, 000000000000000E-01	1, 500000000000000E+00
9	-5, 000000000000000E-01	5, 000000000000000E-01

TABELA A3 – CENTRÓIDES DA MALHA MAIS GROSSA (reais e fictícios)

VOLUME DE CONTROLE	COORDENADA X	COORDENADA Y
1	5,000000000000000E-01	1,666666666666667E-01
2	8,333333333333333E-01	5,000000000000000E-01
3	5,000000000000000E-01	8,333333333333333E-01
4	1,666666666666667E-01	5,000000000000000E-01
5	5,000000000000000E-01	- 1,666666666666667E-01
6	1,166666666666667E+00	5,000000000000000E-01
7	5,000000000000000E-01	1,166666666666667E+00
8	-1,666666666666667E-01	5,000000000000000E-01

TABELA A4 – CONECTIVIDADE DA MALHA MAIS GROSSA

VOLUME DE CONTROLE	CONEXÕES		
1	2	4	5
2	1	3	6
3	2	4	7
4	1	3	8
5	1	0	0
6	2	0	0
7	3	0	0
8	4	0	0

APÊNDICE B APLICAÇÕES DO MVF

B.1 APLICAÇÃO DO MVF EM MALHA QUADRANGULAR

Aplica-se a Eq.(3.25) a um volume de controle cartesiano, com seus volumes de controle e respectivos centróides e faces, como o indicado na Fig. B1, considerando-se $\Delta x = \Delta y$ constante e Γ^ϕ constante. Daí, usando-se uma aproximação do tipo CDS, a Eq. (3.25) para o volume P assume a forma da Eq.(B1):

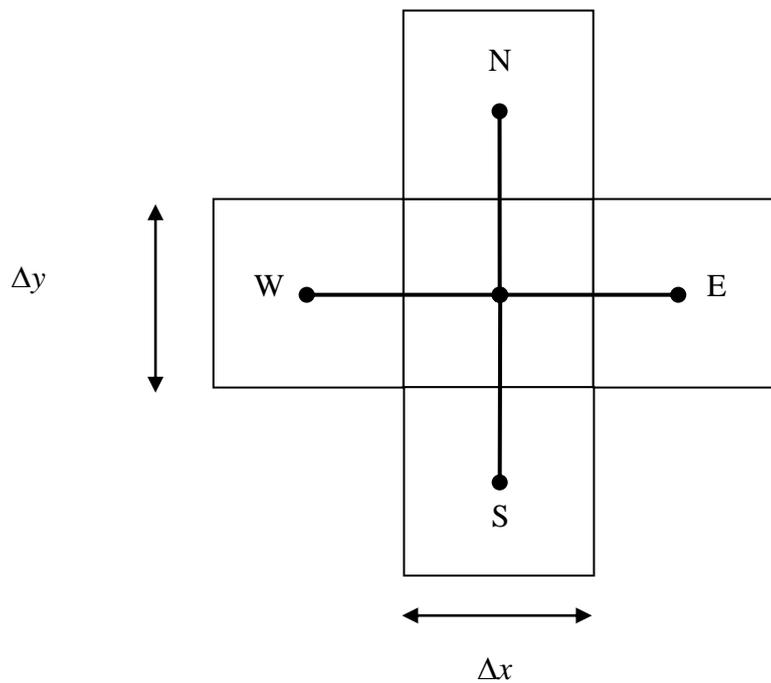


FIGURA B1 – MALHA CARTESIANA BIDIMENSIONAL

$$\Gamma^\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_e \cdot \Delta y + \Gamma^\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_{norte} \cdot \Delta x + \Gamma^\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_w \cdot \Delta y + \Gamma^\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_s \cdot \Delta x = 0 \quad (B1)$$

ou simplesmente:

$$\frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} \Delta y + \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta y} \Delta x + \frac{(\phi_W - \phi_P)}{\Delta x} \Delta y + \frac{(\phi_S - \phi_P)}{\Delta y} \Delta x = 0 \quad (B2)$$

ou ainda:

$$\phi_E + \phi_N + \phi_W + \phi_S - 4\phi_P = 0 \quad (B3)$$

E, portanto, para cada nó genérico P da malha vale:

$$\phi_P = \frac{\phi_E + \phi_N + \phi_W + \phi_S}{4} \quad (\text{B4})$$

B.2 APLICAÇÃO DO MVF EM MALHA TRIANGULAR

Os seis pontos que seguem são vértices de triângulos, volumes de controle de uma genérica malha-exemplo.

$$1(3, 3) \quad 2(6, 1) \quad 3(6, 5) \quad 4(9, 4) \quad 5(11, 1) \quad 6(8, 8)$$

A Tab. B1 apresenta cada elemento da malha e as coordenadas de seu baricentro e a Fig. B2 apresenta o gráfico da malha.

TABELA B1 - ELEMENTOS DA MALHA E SEUS BARICENTROS

Elemento	Vértices do elemento	Baricentro	Coordenadas do baricentro
I	123	A	(5, 3)
II	243	B	(7, 10/3)
III	254	C	(26/3, 2)
IV	346	D	(23/3, 17/3)

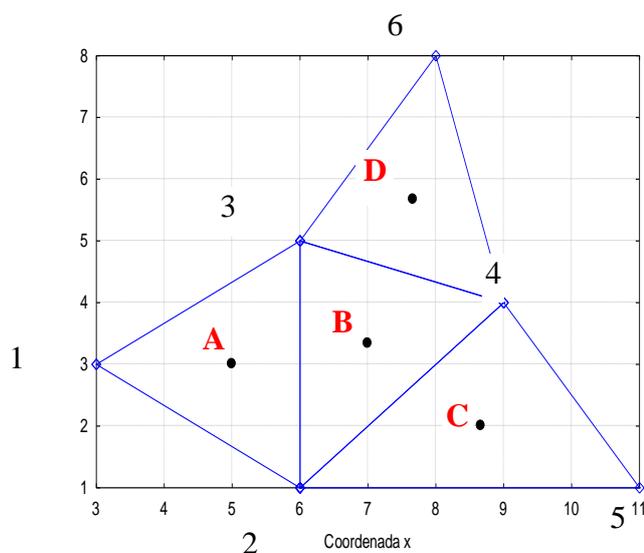


FIGURA B2 - GRÁFICO DA MALHA TRIANGULAR

Cada elemento (volume de controle) da malha tem três faces. Para cada face de cada elemento real há um vetor normal, a ser obtido pela Eq.(B5). Ao percorrer a malha, deve ser respeitado um sentido único de integração. Para a malha utilizada, foi usado o anti-horário e a direção de \vec{n} , de “dentro” para “fora” do elemento em consideração. Sejam:

\vec{n} → vetor normal à face em questão;

Δx → variação entre as abcissas dos baricentros de elementos vizinhos;

Δy → variação entre as ordenadas dos baricentros de elementos vizinhos;

assim:

$$\vec{n} = \Delta y \vec{i} - \Delta x \vec{j} \quad (\text{B5})$$

É fácil ver que a Eq.(B5) procede; será considerado o caso em que a inclinação da reta suporte dos pontos vértices de elemento (triângulo retângulo em B) é negativa, conforme a Fig. B3. O caso inclinação positiva é análogo.

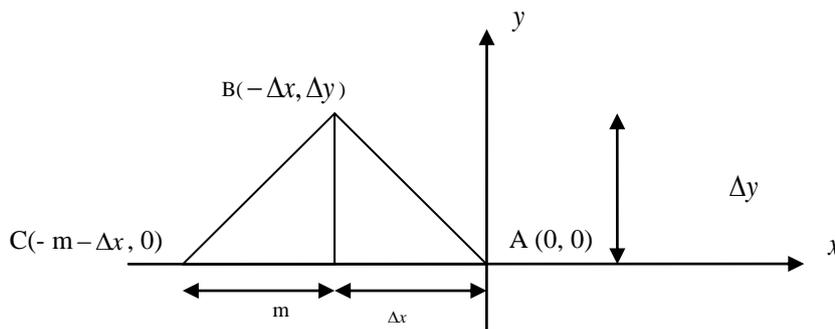


FIGURA B3 – VETOR COM INCLINAÇÃO DA RETA SUPORTE NEGATIVA

Para o triângulo ABC, considerando-se h a altura, tem-se que:

$$h^2 = \Delta x \cdot m \quad \text{então} \quad (\Delta y)^2 = m \cdot \Delta x \rightarrow m = \frac{(\Delta y)^2}{\Delta x} \quad (\text{B6})$$

Um vetor normal a \vec{AB} é:

$$\vec{BC} = C - B = (-\Delta x - m, 0) - (-\Delta x, \Delta y) = (-m, -\Delta y) = \left(\frac{(\Delta y)^2}{\Delta x}, -\Delta y \right) \quad (\text{B7})$$

E, portanto, um vetor normal nessa direção é dado, de fato, pela Eq.(B5). O próximo passo é calcular os vetores normais às faces do elemento II da malha-exemplo, que tem como vértices os pontos 2, 4 e 3 e cujo baricentro foi denominado B. A Fig. B4 apresenta o elemento com suas faces e vetores normais:

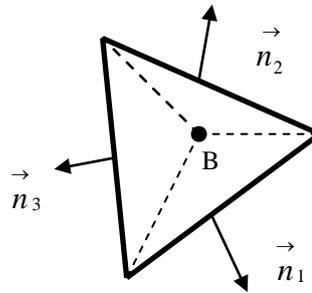


FIGURA B4 – ELEMENTO PARA O CÁLCULO DE VETORES NORMAIS

Utilizando-se a Eq.(B5) e os pontos mencionados, tem-se:

$$\vec{n}_1 = 3\vec{i} - 3\vec{j} = (3, -3) \quad (\text{B8})$$

$$\vec{n}_2 = 1\vec{i} + 3\vec{j} = (1, 3) \quad (\text{B9})$$

$$\vec{n}_3 = -4\vec{i} - 0\vec{j} = (-4, 0) \quad (\text{B10})$$

onde:

\vec{n}_1 = vetor normal à face do elemento formada pelos pontos 2 e 4

\vec{n}_2 = vetor normal à face do elemento formada pelos pontos 4 e 6

\vec{n}_3 = vetor normal à face do elemento formada pelos pontos 6 e 2

Os vetores fluxo (\vec{J}) da variável de interesse ϕ para cada face serão calculados com a aproximação numérica para derivada de primeira ordem com o esquema CDS:

$$\vec{J} = \frac{\phi_{nó} - \phi_{nó\ vizinho}}{d} \vec{u} \quad (\text{B.11})$$

Onde d é a distância entre o baricentro do elemento II e os baricentros adjacentes e \vec{u} é um vetor unitário do vetor cuja extremidade inicial é o baricentro do elemento II e a extremidade final é o baricentro do elemento adjacente. Nessa etapa, todos os baricentros conectados ao baricentro do elemento II são utilizados, uma vez que são os nós da malha, onde a propriedade ϕ é avaliada de forma discretizada. Para a malha-exemplo escolhida foram obtidos:

$$\vec{u}_1 = \frac{-5}{\sqrt{41}} \vec{i} + \frac{4}{\sqrt{41}} \vec{j} \quad (\text{B12})$$

$$\vec{u}_2 = \frac{-2}{\sqrt{53}} \vec{i} + \frac{7}{\sqrt{53}} \vec{j} \quad (\text{B13})$$

$$\vec{u}_3 = \frac{6}{\sqrt{37}} \vec{i} + \frac{1}{\sqrt{37}} \vec{j} \quad (\text{B14})$$

$$d_1 = \frac{\sqrt{41}}{3} \quad (\text{B15})$$

$$d_2 = \frac{\sqrt{53}}{3} \quad (\text{B16})$$

$$d_3 = \frac{\sqrt{37}}{3} \quad (\text{B17})$$

$$\vec{J}_1 = \frac{-15}{41} (\phi_C - \phi_B) \vec{i} + \frac{12}{41} (\phi_C - \phi_B) \vec{j} \quad (\text{B18})$$

$$\vec{J}_2 = \frac{-6}{53} (\phi_D - \phi_B) \vec{i} + \frac{21}{53} (\phi_D - \phi_B) \vec{j} \quad (\text{B19})$$

$$\vec{J}_3 = \frac{18}{37} (\phi_A - \phi_B) \vec{i} + \frac{3}{37} (\phi_A - \phi_B) \vec{j} \quad (\text{B20})$$

onde:

\vec{u}_1 = vetor unitário na direção \vec{BC}

\vec{u}_2 = vetor unitário na direção \vec{BD}

\vec{u}_3 = vetor unitário na direção \vec{BA}

d_1 = distância entre os baricentros B e C

d_2 = distância entre os baricentros B e D

d_3 = distância entre os baricentros B e A

\vec{J}_1 = vetor fluxo para a face do elemento formada pelos pontos 2 e 4

\vec{J}_2 = vetor fluxo para a face do elemento formada pelos pontos 4 e 6

\vec{J}_3 = vetor fluxo para a face do elemento formada pelos pontos 6 e 2

Portanto:

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{n}_1 = \frac{-81}{41}(\phi_C - \phi_B) \quad (\text{B21})$$

$$\vec{J}_2 \cdot \vec{n}_2 = \frac{63}{53}(\phi_D - \phi_B) \quad (\text{B22})$$

$$\vec{J}_3 \cdot \vec{n}_3 = \frac{-72}{37}(\phi_A - \phi_B) \quad (\text{B23})$$

Aplicando-se a Eq.(3.29) às Eq.(B21), Eq.(B22) e Eq.(B23), tem-se:

$$\frac{-81}{41}(\phi_C - \phi_B) + \frac{63}{53}(\phi_D - \phi_B) - \frac{72}{37}(\phi_A - \phi_B) = 0 \quad (\text{B24})$$

que resulta em:

$$\phi_B = 0,7 \phi_A - 0,4 \phi_B + 0,7 \phi_D \quad (\text{B25})$$

A Eq.(B25) fornece uma das linhas da matriz de coeficientes do sistema algébrico que representa as EPDs discretizadas a ser resolvido. Essa linha está representada na Tab. B2 As demais podem ser obtidas de forma análoga ao que foi desenvolvido.

TABELA B2 – MATRIZ DE COEFICIENTES DO SISTEMA ALGÉBRICO

Nó	A	B	C	D
A				
B	0,7	1	- 0,4	0,7
C				
D				

Nessa malha-exemplo, não foram consideradas condições de contorno, que podem ser tratadas com volumes fictícios. Além disso, é necessário completar a matriz indicada na Tab. B2.

APÊNDICE C DISCRETIZAÇÃO EM VOLUMES DE CONTROLE FICTÍCIOS

A Fig. C1 ilustra a situação para o contorno leste.

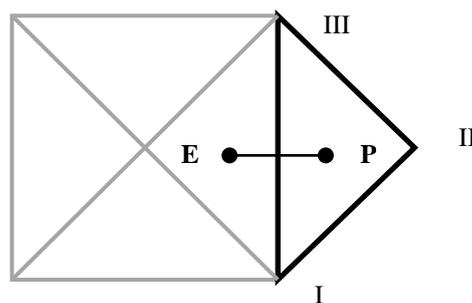


FIGURA C1 – VOLUME DE CONTROLE FICTÍCIO AO LESTE

Considere-se:

Elemento (volume de controle): I – II – III

Centróide do elemento em consideração: P

Coordenadas de P: (x_P, y_P)

Elemento real contíguo ao contorno (leste): E (x_e, y_e) (note-se que $y_e = y_P$)

De acordo com as condições de contorno do tipo Dirichlet (temperatura prescrita):

$$\frac{T_P + T_E}{2} = y_P$$

Dáí: $T_P = 2y_P - T_E$

Então:

$$a_P = 1$$

$$v_1 = -1$$

$$v_2 = 0$$

$$v_3 = 0$$

$$b_P = 2y_P$$

(C1)

A Fig. C2 ilustra a situação para o contorno sul.

Considere-se:

Elemento (volume de controle): I – II – III

Centróide do elemento em consideração: P

Coordenadas de P: (x_P, y_P)

Elemento real contíguo ao contorno (sul): S (x_S, y_S) (note-se que $x_S = x_P$)

De acordo com as condições de contorno do tipo Dirichlet (temperatura prescrita):

$$\frac{T_P + T_S}{2} = 0$$

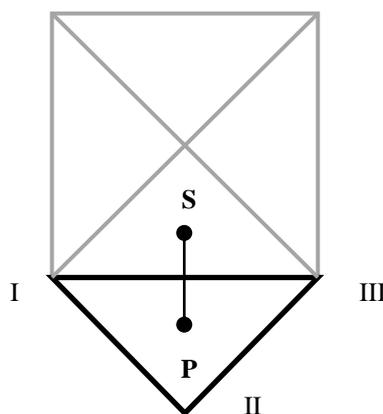


FIGURA C2 – VOLUME DE CONTROLE FICTÍCIO AO SUL

Dáí: $T_P = -T_S$

Então:

$$a_P = 1$$

$$v_1 = -1$$

$$v_2 = 0$$

$$v_3 = 0$$

$$b_P = 0$$

(C2)

A Fig. C3 ilustra a situação para o contorno oeste.

Considere-se:

Elemento (volume de controle): I – II – III

Centróide do elemento em consideração: P

Coordenadas de P: (x_P, y_P)

Elemento real contíguo ao contorno (oeste): W (x_w, y_w) (note-se que $y_w = y_P$)

De acordo com as condições de contorno do tipo Dirichlet (temperatura prescrita):

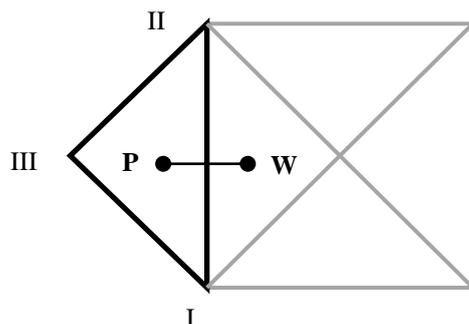


FIGURA C3 – VOLUME DE CONTROLE FICTÍCIO AO OESTE

$$\frac{T_P + T_W}{2} = 0$$

Daí: $T_P = -T_W$

Então:

$$a_P = 1$$

$$v_1 = -1$$

$$v_2 = 0$$

$$v_3 = 0$$

$$b_P = 0$$

(C3)

As Eq. (C1) a Eq. (C3) representam os coeficientes das equações do sistema algébrico a ser resolvido, para volumes de controle fictícios, localizados nas fronteiras leste, sul e oeste, respectivamente, do domínio de cálculo.

APÊNDICE D ANÁLISE A *PRIORI* EM MALHAS QUADRANGULARES

A malha quadrangular ortogonal ilustrada na Fig. D1 em coordenadas cartesianas será usada para apresentar didaticamente as aproximações usadas no modelo numérico empregado para cumprimento deste trabalho no caso de um elemento real interno para variáveis locais. Nela, as faces do volume de controle são indicadas por letras minúsculas e os centróides vizinhos a P por maiúsculas. Considerando-se h o espaçamento da malha, e que a mesma é uniforme, então, a distância entre centróides de volumes de controle contíguos é dada por:

$$\Delta x = h = \Delta y \quad (D1)$$

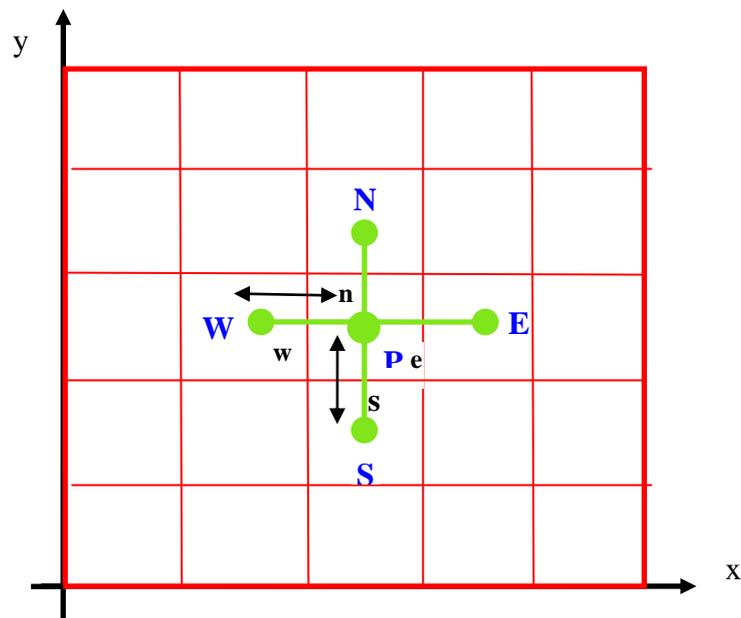


FIGURA D1 – MALHA PARA DEDUÇÃO DAS APROXIMAÇÕES

A expansão da variável T , na direção coordenada x , para os volumes de controle cujos centróides são W e P em torno da face w são, respectivamente, as indicadas pelas Eq.(D2) e Eq.(D3), onde se omite, por questão estética, a notação da face w nas derivadas:

$$T_w = T_w - \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} - \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial x^6} - \dots \quad (D2)$$

$$T_p = T_w + \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial x^6} + \dots \quad (D3)$$

O objetivo é encontrar uma aproximação para a variável, na direção coordenada x , na face w ; portanto, subtraindo Eq.(D2) da Eq.(D3), obtém-se:

$$T_P - T_W = h \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^3}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^5}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^7}{322560} \frac{\partial^7 T}{\partial x^7} + \dots \quad (D4)$$

Neste caso, para direção coordenada x , a variável com aproximação na face oeste pode ser escrita como a Eq.(D5):

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_w = \frac{T_P - T_W}{h} - \left(\frac{h^2}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{32250} \frac{\partial^7 T}{\partial x^7} + \dots \right) \quad (D5)$$

Dessa forma, pode-se afirmar que, para a variável de interesse, a Eq.(D6) é uma aproximação na face oeste, com o esquema CDS-2.

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_w \approx \frac{T_P - T_W}{h} \quad (D6)$$

A expansão da incógnita T , na direção coordenada x , para os volumes de controle cujos centróides são E e P em torno da face e são, respectivamente, as indicadas pelas Eq.(D7) e Eq.(D8), onde se omite, por questão estética, a notação da face e nas derivadas:

$$T_E = T_e + \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial x^6} + \dots \quad (D7)$$

$$T_P = T_e - \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} - \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial x^6} + \dots \quad (D8)$$

O objetivo é encontrar uma aproximação para variável, na direção coordenada x , na face e ; portanto, subtraindo Eq.(D8) da Eq.(D7), obtém-se:

$$T_E - T_P = h \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^3}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^5}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^7}{322560} \frac{\partial^7 T}{\partial x^7} + \dots \quad (D9)$$

Neste caso, para direção coordenada x , a variável com aproximação na face leste pode ser escrita como a Eq.(D10):

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_e = \frac{T_E - T_P}{h} - \left(\frac{h^2}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{32250} \frac{\partial^7 T}{\partial x^7} + \dots \right) \quad (D10)$$

Dessa forma, pode-se afirmar que, para a variável de interesse, a Eq.(D11) é uma aproximação na face leste, com o esquema CDS-2.

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_e \approx \frac{T_E - T_P}{h} \quad (D11)$$

A expansão da incógnita T , na direção coordenada y , para os volumes de controle cujos centróides são N e P em torno da face n são, respectivamente, as indicadas pelas Eq.(D12) e Eq.(D13):

$$T_N = T_n + \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial y^4} + \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial y^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial y^6} + \dots \quad (D12)$$

$$T_P = T_n - \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial y^4} - \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial y^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial y^6} - \dots \quad (D13)$$

O objetivo é encontrar uma aproximação para variável, na direção coordenada y , na face n; portanto, subtraindo Eq.(D13) da Eq.(D12), obtém-se:

$$T_N - T_P = h \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{h^3}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} + \frac{h^5}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial y^5} + \frac{h^7}{322560} \frac{\partial^7 T}{\partial y^7} + \dots \quad (D14)$$

Neste caso, para direção coordenada y , a aproximação da variável na face norte pode ser escrita como a Eq.(D15):

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_n = \frac{T_N - T_P}{h} - \left(\frac{h^2}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} + \frac{h^4}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial y^5} + \frac{h^6}{32250} \frac{\partial^7 T}{\partial y^7} + \dots \right) \quad (D15)$$

Dessa forma, pode-se afirmar que, para a variável de interesse, a Eq.(D16) é uma aproximação na face norte, com o esquema CDS-2.

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_n \approx \frac{T_N - T_P}{h} \quad (\text{D16})$$

A expansão da incógnita T , na direção coordenada y , para os volumes de controle cujos centróides são S e P em torno da face s são, respectivamente, as indicadas pelas Eq.(D17) e Eq.(D18):

$$T_s = T_s - \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial y^4} - \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial y^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial y^6} - \dots \quad (\text{D17})$$

$$T_p = T_s + \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial y^4} + \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial y^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial y^6} + \dots \quad (\text{D18})$$

O objetivo é encontrar uma aproximação para variável, na direção coordenada y , na face s; portanto, subtraindo Eq.(D17) da Eq.(D18), obtém-se:

$$T_p - T_s = h \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{h^3}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} + \frac{h^5}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial y^5} + \frac{h^7}{322560} \frac{\partial^7 T}{\partial y^7} + \dots \quad (\text{D19})$$

Neste caso, para direção coordenada y , a aproximação da variável na face sul pode ser escrita como a Eq.(D20):

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_s = \frac{T_p - T_s}{h} - \left(\frac{h^2}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} + \frac{h^4}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial y^5} + \frac{h^6}{32250} \frac{\partial^7 T}{\partial y^7} + \dots \right) \quad (\text{D20})$$

Dessa forma, pode-se afirmar que, para a variável de interesse, a Eq.(D21) é uma aproximação na face leste, com o esquema CDS-2.

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_s \approx \frac{T_p - T_s}{h} \quad (\text{D21})$$

De acordo com Tannehill et al. (1997), as expressões entre parênteses nas Eq.(D5), Eq.(D10), Eq.(D15) e Eq.(D20) são identificadas como erro de truncamento das representações discretizadas da derivada primeira avaliada, usando esquema UDS-1, nas direções coordenadas x e y , respectivamente; os expoentes de h nessas expressões são as ordens verdadeiras do erro de truncamento; portanto, $PV_s = 1, 2, 3, \dots$ e o menor deles indica a ordem assintótica (PL), neste caso, dois, do erro. A Fig. D2 ilustra a situação de discretização da taxa de transferência de calor para um elemento localizado no contorno ao leste. Nos demais contornos, o procedimento é análogo.

Seja h o espaçamento entre os nós da malha. Considerem-se letras maiúsculas como representando os nós da malha, W, P e E e a letra minúscula f , representando a face de interesse, à qual pertence o ponto P de fronteira em consideração. Pelas condições de contorno de Dirichlet, a temperatura é nula no ponto P ; note-se ainda que:

$$\Delta x = \frac{h}{2} \quad (D22)$$

Aplicando-se a Eq.(3.42), a expansão da série de Taylor para o ponto P da fronteira usando os volumes de controle a oeste ao leste (fictício) na direção coordenada x , omitindo-se a notação de face e nas derivadas, é dada por:

$$T_E = T_e + \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial x^6} + \dots \quad (D23)$$

$$T_P = T_e - \frac{h}{2} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^2}{8} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{h^3}{48} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{384} \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} - \frac{h^5}{3840} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{46080} \frac{\partial^6 T}{\partial x^6} + \dots \quad (D24)$$

O objetivo é encontrar uma aproximação para variável, na direção coordenada x , na face e ; portanto, subtraindo Eq.(D8) da Eq.(D7), obtém-se:

$$T_E - T_P = h \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{h^3}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^5}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^7}{322560} \frac{\partial^7 T}{\partial x^7} + \dots \quad (D25)$$

Neste caso, para direção coordenada x , a variável com aproximação na face leste pode ser escrita como a Eq.(D27):

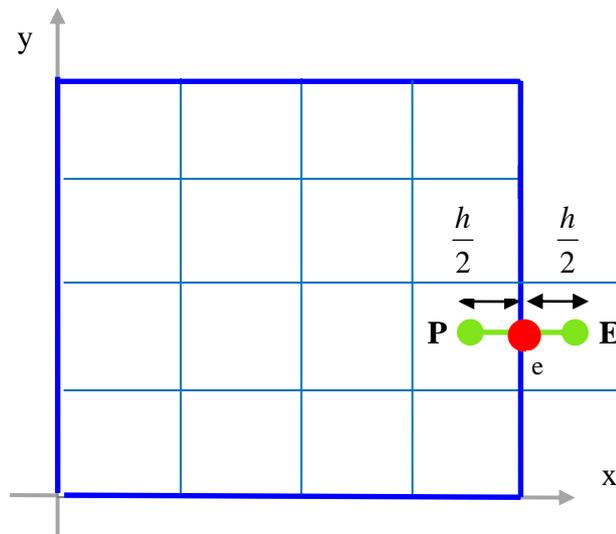


FIGURA D2 – REPRESENTAÇÃO DO CONTORNO LESTE

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_e = \frac{T_E - T_P}{h} - \left(\frac{h^2}{24} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + \frac{h^4}{1920} \frac{\partial^5 T}{\partial x^5} + \frac{h^6}{32250} \frac{\partial^7 T}{\partial x^7} + \dots \right) \quad (D27)$$

Dessa forma, pode-se afirmar que, para a variável de interesse, a Eq.(D28) é uma aproximação na face leste, com o esquema UDS-1. O menor expoente de h na expressão entre parênteses da Eq.(D27) é, por definição, a ordem assintótica do erro de discretização e os demais, 2, 4, 6, ... as ordens verdadeiras do erro.

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_e \approx \frac{T_E - T_P}{h} \quad (D28)$$

Note-se que a ordem dos erros não é alterada em função do tamanho do espaçamento da malha. Nesse caso, o que sofre alteração é apenas seu valor numérico. Esse fato será de importância quando na comparação de resultados entre malhas triangulares e quadrangulares, apresentada nas conclusões do trabalho. A Tab. D1 apresenta um resumo sobre a estimativa *a priori* no caso de malhas quadrangulares. Como as ordens para as taxas de transferência de calor são idênticas, na tabela, o símbolo q identifica a variável taxa de transferência de calor em qualquer dos contornos.

TABELA D1 – ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA DO ERRO

Variável Exata	PVs	PL
T_c	2, 4, 6, ...	2
T_m	2, 4, 6, ...	2
q	2, 4, 6, ...	2

APÊNDICE E TABELAS E GRÁFICOS DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

As tabelas que seguem deram origem aos gráficos do Capítulo 4, Resultados. A Tab. E1 mostra o módulo do erro numérico, cometido na primeira variável, Temperatura no Meio do Domínio, com e sem a utilização de MER, em função de h , para o programa AMG. A Tab. E2 contém, sob as mesmas condições, os mesmos dados, porém, para o programa GMG.

TABELA E1- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL T_c (AMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	5,073159233080670E-02	5,073159233080670E-02
2,500000000000000E-01	2,249171237255650E-02	4,689948060701090E-02
1,250000000000000E-01	5,198258642248740E-03	3,730606370622610E-03
6,250000000000000E-02	1,284671078865230E-03	7,604534584665370E-05
3,125000000000000E-02	3,203604098790390E-04	3,830909282576120E-07
1,562500000000000E-02	8,004134743855310E-05	3,803102277544210E-10
7,812500000000000E-03	2,000731534604340E-05	2,248479180622100E-13
3,906250000000000E-03	5,001640176055530E-06	3,095856904167250E-13
1,953125000000000E-03	1,250397725555130E-06	7,681910663137610E-13
9,765625000000000E-04	3,125959734395780E-07	3,888028787812910E-12
4,882812500000000E-04	7,816667624283010E-08	2,607691840239570E-11
2,441406250000000E-04	1,942542773858410E-08	1,709705155228390E-10

TABELA E2- ERRO COM E SEM MER PARA T_c (GMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	2,249171237255650E-02	2,249171237255650E-02
2,500000000000000E-01	2,123280800508940E-03	4,666196390173570E-03
1,250000000000000E-01	2,21432692534350E-04	8,526076456449870E-05
6,250000000000000E-02	4,434475266623660E-05	4,869742805946320E-07
3,125000000000000E-02	9,896145381355080E-06	9,169592585234200E-10
1,562500000000000E-02	2,399308677542010E-06	4,909961326404750E-13
7,812500000000000E-03	5,951511866386650E-07	5,273559366969490E-16
3,906250000000000E-03	1,484954638419910E-07	3,247402347028580E-15
1,953125000000000E-03	3,710559134950660E-08	3,635980405647390E-15
9,765625000000000E-04	9,275239937212020E-09	2,278732758043130E-14
4,882812500000000E-04	2,318753744567910E-09	2,389755060505650E-14
2,441406250000000E-04	5,796623459009000E-10	3,325117958752340E-14

A Tab. E3 mostra as ordens aparentes para a variável 1, Temperatura no Centro do domínio, chamada de T_c , no capítulo 4, em função de h . Esta tabela deu origem aos gráficos

que mostram o comportamento da ordem assintótica do erro de discretização para malhas triangulares. A Tab. E4 mostra o mesmo para malhas quadrangulares.

TABELA E3 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL T_c (AMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01			
6,250000000000000E-02	2,143662393447140E+00		
3,125000000000000E-02	2,020921809328660E+00		
1,562500000000000E-02	2,004546920367920E+00	4,814484028941660E+00	
7,812500000000000E-03	2,001098616870190E+00	4,235628154433040E+00	
3,906250000000000E-03	2,000272334126960E+00	4,058719268391240E+00	5,539629611345480E+00
1,953125000000000E-03	2,000067817995710E+00	4,013834437462290E+00	5,913872674722920E+00
9,765625000000000E-04	2,000013630762330E+00	3,916041653145460E+00	2,809164524186100E+00
4,882812500000000E-04	2,000130096361260E+00		7,417628785276750E+01
2,441406250000000E-04	1,996707043541120E+00		

TABELA E4 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL T_c (GMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	3,444347385188430E+00		
6,250000000000000E-02	3,170658342188510E+00		
3,125000000000000E-02	2,592667792478420E+00	1,536359880371650E+00	
1,562500000000000E-02	2,200091774910130E+00	2,486413364364300E+00	
7,812500000000000E-03	2,054956695952180E+00	3,234976102841390E+00	4,137330188054750E+00
3,906250000000000E-03	2,014090129968180E+00	3,734613682427150E+00	4,622175158470470E+00
1,953125000000000E-03	2,003545177073860E+00	3,926114221271140E+00	5,533683652089740E+00
9,765625000000000E-04	2,000887038853520E+00	3,980640363951800E+00	5,880680495486750E+00
4,882812500000000E-04	2,000228453583980E+00	4,011098801533330E+00	4,869212859214560E+00
2,441406250000000E-04	2,000025010846760E+00	3,694243796853690E+00	

A Tab. E5 mostra o módulo do erro numérico, cometido na variável 2, Temperatura Média, chamada de T_m no capítulo 4, com e sem a utilização de MER, em função de h , para o programa AMG. A Tab. E6 contém, sob as mesmas condições, os mesmos dados, porém, para o programa GMG.

TABELA E5- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL T_m (AMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	6,414607953971420E-02	6,414607953971420E-02
2,500000000000000E-01	9,077225163648950E-03	3,348499339810330E-02
1,250000000000000E-01	4,083682800300250E-03	3,481136979227310E-04
6,250000000000000E-02	1,149457609418450E-03	1,634627085034260E-05
3,125000000000000E-02	2,957309196272300E-04	7,575539648363440E-08
1,562500000000000E-02	7,446133012764530E-05	9,107165022115280E-11
7,812500000000000E-03	1,864846101642950E-05	3,289035710452030E-14
3,906250000000000E-03	4,664187118447180E-06	1,384448111707570E-13
1,953125000000000E-03	1,166176123751360E-06	2,436661983296060E-13
9,765625000000000E-04	2,915507418543850E-07	1,989547415703900E-12
4,882812500000000E-04	7,289701164925330E-08	1,297728591254100E-11
2,441406250000000E-04	1,816658443121180E-08	8,487122116207500E-11

TABELA E6- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL T_m (GMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	9,077225163648950E-03	9,077225163648950E-03
2,500000000000000E-01	5,621171721170130E-03	4,469153907010530E-03
1,250000000000000E-01	1,722047296221250E-03	1,525515044090430E-04
6,250000000000000E-02	4,531420120672540E-04	1,671715950862800E-06
3,125000000000000E-02	1,147518691147490E-04	4,631810435196120E-09
1,562500000000000E-02	2,878046284585100E-05	3,282679683636050E-12
7,812500000000000E-03	7,200910074445230E-06	6,661338147750940E-16
3,906250000000000E-03	1,800589877448690E-06	1,970645868709650E-15
1,953125000000000E-03	4,501701188486250E-07	1,804112415015880E-15
9,765625000000000E-04	1,125439415550210E-07	5,495603971894520E-15
4,882812500000000E-04	2,813608643292830E-08	1,867950238931830E-14
2,441406250000000E-04	7,034014454232460E-09	1,992850329202160E-14

A Tab. E7 mostra as ordens aparentes para a variável T_m em função de h . Esta tabela deu origem aos gráficos que mostram o comportamento da ordem assintótica do erro de discretização para malhas triangulares. A Tab. E8 mostra o mesmo para malhas quadrangulares.

TABELA E7 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL T_m (AMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01			
6,250000000000000E-02	7,670840137926830E-01		
3,125000000000000E-02	1,781133409130170E+00	4,493323593905210E+01	
1,562500000000000E-02	1,947969096581450E+00	5,849068199378590E+00	
7,812500000000000E-03	1,987135469464550E+00	4,219169159155110E+00	4,702560462561290E+00
3,906250000000000E-03	1,996792464284480E+00	4,048256477243210E+00	6,582594705967510E+00
1,953125000000000E-03	1,999198618104320E+00	4,011718563844040E+00	6,158415188509840E+00
9,765625000000000E-04	1,999797702249600E+00	4,007603066525230E+00	7,139013611127470E+00
4,882812500000000E-04	2,000017255654460E+00	3,448666544172700E+00	3,414642615083050E+00
2,441406250000000E-04	1,998232937647760E+00		

TABELA E8 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL T_m (GMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	1,740246666039860E-01		
6,250000000000000E-02	1,619565808274470E+00		
3,125000000000000E-02	1,906824935459880E+00	4,923711358687670E+01	
1,562500000000000E-02	1,976758734108030E+00	4,271052175849410E+00	
7,812500000000000E-03	1,994191939448390E+00	4,055230850460530E+00	6,813152104689890E+00
3,906250000000000E-03	1,998548110268810E+00	4,013147031007930E+00	6,270563417932680E+00
1,953125000000000E-03	1,999637032376680E+00	4,003251166112430E+00	6,072183912421510E+00
9,765625000000000E-04	1,999909247538140E+00	4,000852959243250E+00	6,041170205800570E+00
4,882812500000000E-04	1,999977595717210E+00	3,993965701738760E+00	2,472871368666530E+00
2,441406250000000E-04	1,999992602746900E+00	4,187286598509380E+00	

A Tab. E9 mostra o módulo do erro numérico, cometido na terceira variável, Taxa de Transferência de Calor ao Leste, chamda q_e no capítulo 4, com e sem a utilização de MER, em função da métrica da malha, para o programa AMG. A Tab. E10 contém, sob as mesmas condições, os mesmos dados, porém, para o programa GMG.

TABELA E9- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL q_e (AMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	1,671523356672740E-01	1,671523356672740E-01
2,500000000000000E-01	6,862419824341800E-02	3,578148576879940E-02
1,250000000000000E-01	2,160751492739280E-02	3,945540581156700E-03
6,250000000000000E-02	5,763210820614040E-03	5,745741643703450E-05
3,125000000000000E-02	1,465053226422540E-03	3,092971445628480E-07
1,562500000000000E-02	3,678069303637570E-04	3,878271037649480E-10
7,812500000000000E-03	9,204865391365670E-05	2,093880624443050E-13
3,906250000000000E-03	2,301822724837250E-05	1,153632744888000E-12
1,953125000000000E-03	5,754936535318220E-06	9,366951658762450E-13
9,765625000000000E-04	1,438744129944600E-06	1,997191301228440E-11
4,882812500000000E-04	3,597373504637960E-07	7,404021840073940E-11
2,441406250000000E-04	8,960051645079400E-08	4,910201134578070E-10

TABELA E10- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL q_e (GMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	2,100455544807270E-01	2,100455544807270E-01
2,500000000000000E-01	7,252913704654120E-02	2,669033123514600E-02
1,250000000000000E-01	2,011526271872690E-02	1,040880612187210E-03
6,250000000000000E-02	5,171799115513580E-03	1,099754518651960E-05
3,125000000000000E-02	1,302234475193180E-03	3,029160566825340E-08
1,562500000000000E-02	3,261445862632330E-04	2,135214227649840E-11
7,812500000000000E-03	8,157285913834580E-05	4,662936703425660E-15
3,906250000000000E-03	2,039551072496870E-05	9,992007221626410E-16
1,953125000000000E-03	5,099021192833670E-06	9,547918011776350E-15
9,765625000000000E-04	1,274764262149120E-06	8,326672684688670E-15
4,882812500000000E-04	3,186916803787910E-07	7,938094626069870E-14
2,441406250000000E-04	7,967304938016890E-08	1,302291607885310E-13

A Tab. E11 mostra as ordens aparentes para a variável 3, chamada q_e no capítulo 4, em função de h . Esta tabela deu origem aos gráficos que mostram o comportamento da ordem assintótica do erro de discretização para malhas triangulares. A Tab. E12 mostra o mesmo para malhas quadrangulares.

TABELA E11 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL q_e (AMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	1,067363013749970E+00		
6,250000000000000E-02	1,569208474062380E+00		
3,125000000000000E-02	1,882174010894010E+00	3,141381633604210E+00	
1,562500000000000E-02	1,969830980758470E+00	4,088822981934960E+00	
7,812500000000000E-03	1,992411308346450E+00	4,020936104251160E+00	
3,906250000000000E-03	1,998099880209430E+00	4,005051809665060E+00	6,069312659413710E+00
1,953125000000000E-03	1,999524905391750E+00	4,001116707778480E+00	6,006967463579210E+00
9,765625000000000E-04	1,999876412758020E+00	4,020366533912490E+00	
4,882812500000000E-04	2,000055248684160E+00	2,975236565852270E+00	
2,441406250000000E-04	1,997941655005070E+00		

TABELA E12 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL q_e (GMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	1,391583206315800E+00		
6,250000000000000E-02	1,810434178584230E+00		
3,125000000000000E-02	1,949271410567160E+00	3,946805777128070E+00	
1,562500000000000E-02	1,987085341753960E+00	3,979345877198980E+00	
7,812500000000000E-03	1,996756377196910E+00	3,994272976812040E+00	5,130622826767570E+00
3,906250000000000E-03	1,999188152516230E+00	3,998530723967720E+00	5,814932497746310E+00
1,953125000000000E-03	1,999796978461260E+00	3,999631954350920E+00	5,952550391347680E+00
9,765625000000000E-04	1,999949241212910E+00	3,999898217548880E+00	6,048011288354000E+00
4,882812500000000E-04	1,999987401315740E+00	3,996535869042700E+00	
2,441406250000000E-04	1,999997069224270E+00	3,980779989985010E+00	1,759095330617110E+00

A Tab. E13 mostra o módulo do erro numérico, cometido na quarta variável, Taxa de Transferência de Calor ao Norte, chamada q_n no capítulo 4, com e sem a utilização de MER, em função da métrica da malha, para o programa AMG. A Tab. E14 contém, sob as mesmas condições, os mesmos dados, porém, para o programa GMG.

TABELA E13- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL q_n (AMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	2,574837463946420E-01	2,574837463946420E-01
2,500000000000000E-01	1,488030644185770E-01	1,125761704265550E-01
1,250000000000000E-01	4,727249363291870E-02	6,819156678442350E-03
6,250000000000000E-02	1,261428851410960E-02	1,325812966195270E-04
3,125000000000000E-02	3,206735979060850E-03	6,391718043730070E-07
1,562500000000000E-02	8,050640282717400E-04	8,141509688641690E-10
7,812500000000000E-03	2,014781723436170E-04	1,177280495312520E-12
3,906250000000000E-03	5,038281930458410E-05	2,248423669470870E-12
1,953125000000000E-03	1,259653501550770E-05	2,460254222569350E-13
9,765625000000000E-04	3,149212447706160E-06	3,892175470809890E-11
4,882812500000000E-04	7,871527678560140E-07	2,263065290719620E-10
2,441406250000000E-04	1,977715968770610E-07	1,446600172982930E-09

TABELA E14- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL q_n (GMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	3,575679236260320E-01	3,575679236260320E-01
2,500000000000000E-01	1,301391869030320E-01	5,432960799536500E-02
1,250000000000000E-01	3,653873273346160E-02	2,072512900154420E-03
6,250000000000000E-02	9,422944385628630E-03	2,202722609867540E-05
3,125000000000000E-02	2,374447841489770E-03	6,074268910083450E-08
1,562500000000000E-02	5,947927770124650E-04	4,285771737500000E-11
7,812500000000000E-03	1,487721742696730E-04	8,881784197001250E-15
3,906250000000000E-03	3,719767010856860E-05	1,953992523340280E-14
1,953125000000000E-03	9,299706774879010E-06	6,572520305780930E-14
9,765625000000000E-04	2,324944782472470E-06	1,376676550535190E-14
4,882812500000000E-04	5,812371086655330E-07	3,166356066230950E-13
2,441406250000000E-04	1,453095275216750E-07	2,868816295631400E-13

A Tab. E15 mostra as ordens aparentes para a variável 4, (q_n) em função de h. Esta tabela deu origem aos gráficos que mostram o comportamento da ordem assintótica do erro de discretização para malhas triangulares. A Tab. E16 mostra o mesmo para malhas quadrangulares.

TABELA E15 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL q_n (AMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	9,818133636087380E-02		
6,250000000000000E-02	1,550645340146350E+00		
3,125000000000000E-02	1,881305596116270E+00	8,103664334000170E+00	
1,562500000000000E-02	1,969780336948810E+00	4,172994596909480E+00	
7,812500000000000E-03	1,992408199762250E+00	4,032007485509650E+00	7,273459865556670E+00
3,906250000000000E-03	1,998099708127600E+00	4,007380671884120E+00	6,456681572191750E+00
1,953125000000000E-03	1,999524727479710E+00	4,001869434050290E+00	6,150123842231510E+00
9,765625000000000E-04	1,999885234997170E+00	3,983893442347360E+00	2,282927734924970E+00
4,882812500000000E-04	1,999860101814430E+00		7,051722733841980E+01
2,441406250000000E-04	2,002772539975670E+00		

TABELA E16 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL q_n (GMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	1,280827122052050E+00		
6,250000000000000E-02	1,787382415097420E+00		
3,125000000000000E-02	1,943745648772380E+00	4,152101630902560E+00	
1,562500000000000E-02	1,985717918228430E+00	4,014625640338970E+00	
7,812500000000000E-03	1,996415384600560E+00	4,002320520473860E+00	7,412688219548790E+00
3,906250000000000E-03	1,999102957924780E+00	4,000497272347120E+00	6,748999620612730E+00
1,953125000000000E-03	1,999775686916930E+00	4,000112176252600E+00	6,242490358363520E+00
9,765625000000000E-04	1,999943911014210E+00	4,000117325250810E+00	
4,882812500000000E-04	1,999985789231030E+00	4,006231458856110E+00	6,234725331462600E+00
2,441406250000000E-04	1,999997806829830E+00	3,801159795258770E+00	

A Tab. E17 mostra o módulo do erro numérico, cometido na quinta variável, Taxa de Transferência de Calor ao Oeste, chamada q_w no capítulo 4, com e sem a utilização de MER, em função da métrica da malha, para o programa AMG. A Tab. E18 contém, sob as mesmas condições, os mesmos dados, porém, para o programa GMG.

TABELA E17 - ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL q_w (AMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	1,671523356672740E-01	1,671523356672740E-01
2,500000000000000E-01	6,862419824341750E-02	3,578148576879850E-02
1,250000000000000E-01	2,160751492739390E-02	3,945540581158590E-03
6,250000000000000E-02	5,763210820611040E-03	5,745741643226050E-05
3,125000000000000E-02	1,465053226431530E-03	3,092971589957470E-07
1,562500000000000E-02	3,678069303650890E-04	3,878246612742940E-10
7,812500000000000E-03	9,204865395995300E-05	1,425526363618700E-13
3,906250000000000E-03	2,301822811145990E-05	7,738254481637340E-14
1,953125000000000E-03	5,754934798263280E-06	2,002509269516390E-12
9,765625000000000E-04	1,438758573613090E-06	1,874167487869730E-12
4,882812500000000E-04	3,597227155038850E-07	4,573619261094560E-11
2,441406250000000E-04	8,971478215880070E-08	3,175139040578760E-10

TABELA E18- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL q_w (GMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	2,100455544807270E-01	2,100455544807270E-01
2,500000000000000E-01	7,252913704654120E-02	2,669033123514600E-02
1,250000000000000E-01	2,011526271872720E-02	1,040880612187660E-03
6,250000000000000E-02	5,171799115513800E-03	1,099754518651960E-05
3,125000000000000E-02	1,302234475193840E-03	3,029160655643180E-08
1,562500000000000E-02	3,261445862638990E-04	2,135280841031320E-11
7,812500000000000E-03	8,157285913679150E-05	2,109423746787800E-15
3,906250000000000E-03	2,039551072874350E-05	7,438494264988550E-15
1,953125000000000E-03	5,099021197163540E-06	5,329070518200750E-15
9,765625000000000E-04	1,274764259262540E-06	1,443289932012700E-14
4,882812500000000E-04	3,186916398556510E-07	2,209343819004060E-14
2,441406250000000E-04	7,967301296485370E-08	9,703349235223870E-14

A Tab. E19 mostra as ordens aparentes para a variável q_w em função de h . Esta tabela deu origem aos gráficos que mostram o comportamento da ordem assintótica do erro de discretização para malhas triangulares. A Tab. E20 mostra o mesmo para malhas quadrangulares.

TABELA E19 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL q_w (AMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	1,067363013750030E+00		
6,250000000000000E-02	1,569208474061950E+00		
3,125000000000000E-02	1,882174010898400E+00	3,141381633583820E+00	
1,562500000000000E-02	1,969830980744370E+00	4,088822982253930E+00	
7,812500000000000E-03	1,992411308591760E+00	4,020936087548090E+00	
3,906250000000000E-03	1,998099897044640E+00	4,005047633512310E+00	6,068932921891120E+00
1,953125000000000E-03	1,999524671027150E+00	4,001375071487430E+00	6,107100953738310E+00
9,765625000000000E-04	1,999882038498090E+00	3,996263223976900E+00	3,519343855639830E+00
4,882812500000000E-04	2,000010960938780E+00		3,002624613085760E+00
2,441406250000000E-04	1,998669106587890E+00		7,046590748439600E+01

TABELA E20 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL q_w (GMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	1,391583206315820E+00		
6,250000000000000E-02	1,810434178584210E+00		
3,125000000000000E-02	1,949271410567340E+00	3,946805777126010E+00	
1,562500000000000E-02	1,987085341753800E+00	3,979345877211210E+00	
7,812500000000000E-03	1,996756377183820E+00	3,994272978766120E+00	5,130622643336430E+00
3,906250000000000E-03	1,999188152655000E+00	3,998530632171300E+00	5,814964572049260E+00
1,953125000000000E-03	1,999796978387950E+00	3,999632546416840E+00	5,951603589741300E+00
9,765625000000000E-04	1,999949238438160E+00	3,999923160254630E+00	5,923838038833250E+00
4,882812500000000E-04	1,999987347245290E+00	3,998449794175900E+00	
2,441406250000000E-04	1,999997150811580E+00	3,958787738086510E+00	7,745347446139290E-01

A Tab. E21 mostra o módulo do erro numérico, cometido na sexta variável, Taxa de Transferência de Calor ao Sul, chamada q_s , no capítulo 4, com e sem a utilização de MER, em função da métrica da malha, para o programa AMG. A Tab. E22 contém, sob as mesmas condições, os mesmos dados, porém, para o programa GMG.

TABELA E21- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL q_s (AMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	7,68209249399060E-02	7,68209249399060E-02
2,500000000000000E-01	1,15546679317402E-02	4,101319888895560E-02
1,250000000000000E-01	4,05746377813290E-03	1,071924483871190E-03
6,250000000000000E-02	1,08786687288970E-03	1,766646375719880E-05
3,125000000000000E-02	2,76629526177102E-04	2,057745474015600E-08
1,562500000000000E-02	6,94501676744841E-05	3,870498366254080E-11
7,812500000000000E-03	1,73808633804895E-05	1,173228181272630E-13
3,906250000000000E-03	4,34636110058229E-06	2,743638649604920E-13
1,953125000000000E-03	1,08666107279110E-06	1,136341021279460E-12
9,765625000000000E-04	2,71668011697646E-07	2,418260036662900E-12
4,882812500000000E-04	6,79336872866365E-08	2,403333088096820E-11
2,441406250000000E-04	1,68729729910222E-08	1,624251011467240E-10

TABELA E22- ERRO COM E SEM MER PARA VARIÁVEL q_s (GMG)

h	Eh	Emer
5,000000000000000E-01	6,252318533542190E-02	6,252318533542190E-02
2,500000000000000E-01	1,491908719005050E-02	9,489455250732970E-04
1,250000000000000E-01	3,691792703993420E-03	9,248324222027590E-06
6,250000000000000E-02	9,206538453979120E-04	3,213572788429710E-08
3,125000000000000E-02	2,300211088984980E-04	1,594741005916940E-10
1,562500000000000E-02	5,749639551441700E-05	1,538214000618150E-13
7,812500000000000E-03	1,437354400651850E-05	6,938893903907230E-16
3,906250000000000E-03	3,593351323605280E-06	3,164135620181700E-15
1,953125000000000E-03	8,983356656055990E-07	2,997602166487920E-15
9,765625000000000E-04	2,245837934233830E-07	1,787459069646500E-14
4,882812500000000E-04	5,614591641611710E-08	3,558264793923630E-14
2,441406250000000E-04	1,403641350372630E-08	9,162115510719100E-14

A Tab. E23 mostra as ordens aparentes para a variável q_s em função de h . Esta tabela deu origem aos gráficos que mostram o comportamento da ordem assintótica do erro de discretização para malhas triangulares. A Tab. E24 mostra o mesmo para malhas quadrangulares.

TABELA E23 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL q_s (AMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	1,067363013750030E+00		
6,250000000000000E-02	1,569208474061950E+00		
3,125000000000000E-02	1,882174010898400E+00	3,141381633583820E+00	
1,562500000000000E-02	1,969830980744370E+00	4,088822982253930E+00	
7,812500000000000E-03	1,992411308591760E+00	4,020936087548090E+00	
3,906250000000000E-03	1,998099897044640E+00	4,005047633512310E+00	6,068932921891120E+00
1,953125000000000E-03	1,999524671027150E+00	4,001375071487430E+00	6,107100953738310E+00
9,765625000000000E-04	1,999882038498090E+00	3,996263223976900E+00	3,519343855639830E+00
4,882812500000000E-04	2,000010960938780E+00	3,471192281006840E+00	3,002624613085760E+00
2,441406250000000E-04	1,998669106587890E+00		7,046590748439600E+01

TABELA E24 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL q_s (GMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	2,084075463681810E+00		
6,250000000000000E-02	2,018459404502670E+00		
3,125000000000000E-02	2,004488378697130E+00	4,184918091012110E+00	
1,562500000000000E-02	2,001115684391100E+00	4,040556998052540E+00	
7,812500000000000E-03	2,000278551347040E+00	4,007983618556160E+00	6,089583947319230E+00
3,906250000000000E-03	2,000069615016010E+00	4,001800588982600E+00	6,383396653501510E+00
1,953125000000000E-03	2,000017404599960E+00	4,000505852948620E+00	6,253215137816960E+00
9,765625000000000E-04	2,000004373178430E+00	4,002304884352960E+00	
4,882812500000000E-04	2,000000779756040E+00	3,858554783677310E+00	
2,441406250000000E-04	1,999998846769500E+00	2,894834540802060E+00	4,189955128475270E-01

A Tab. E25 mostra o módulo do erro numérico, cometido na sétima variável, Média da Norma do Erro (L), em função da métrica da malha, para o programa AMG e para o programa GMG.

TABELA E25- ERRO PARA VARIÁVEL L (AMG e GMG)

h	Eh (AMG)	Eh (GMG)
5,000000000000000E-01	7,868502751342730E-02	1,560461665693180E-02
2,500000000000000E-01	1,507054680544030E-02	6,605189815485560E-03
1,250000000000000E-01	3,914443601166440E-03	1,916586573006880E-03
6,250000000000000E-02	1,084472238176460E-03	4,982608512547000E-04
3,125000000000000E-02	2,849687908813250E-04	1,259249201913410E-04
1,562500000000000E-02	7,295438402898730E-05	3,156166518970880E-05
7,812500000000000E-03	1,845008237119540E-05	7,896169505480920E-06
3,906250000000000E-03	4,638766892896750E-06	1,974355595620260E-06
1,953125000000000E-03	1,162959748059650E-06	4,936084772259130E-07
9,765625000000000E-04	2,911462675761880E-07	1,234034251498930E-07
4,882812500000000E-04	7,284629253266920E-08	3,085094049680440E-08
2,441406250000000E-04	1,816027343773890E-08	7,712743708248260E-09

A Tab. E26 mostra as ordens aparentes para a variável L em função de h . Esta tabela deu origem aos gráficos que mostram o comportamento da ordem assintótica do erro de discretização para malhas triangulares. A Tab. E27 mostra o mesmo para malhas quadrangulares.

TABELA E26 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL L (AMG)

h	pU(Th)	pU(Ti_pU)	pU(Tbi_pU)
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	2,511522021020850E+00		
6,250000000000000E-02	1,978973826461730E+00		
3,125000000000000E-02	1,823611294792600E+00	3,218983312963880E+00	
1,562500000000000E-02	1,914941951855800E+00		
7,812500000000000E-03	1,959720300760900E+00	3,061734632757510E+00	
3,906250000000000E-03	1,980519358922950E+00	3,121789924918540E+00	6,213648863260400E+01
1,953125000000000E-03	1,990430796122470E+00	3,075712812398640E+00	
9,765625000000000E-04	1,995256619676350E+00	3,041088537745410E+00	3,436842011743570E+00
4,882812500000000E-04	1,997707546251200E+00	2,978782326880050E+00	2,131398030654980E+00
2,441406250000000E-04	1,997068016307160E+00		7,121768303883400E+01

TABELA E27 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL L (GMG)

h	$pU(Th)$	$pU(Ti_pU)$	$pU(Tbi_pU)$
5,000000000000000E-01			
2,500000000000000E-01			
1,250000000000000E-01	9,406749205822030E-01		
6,250000000000000E-02	1,724969312084670E+00		
3,125000000000000E-02	1,929512138254760E+00	4,797443368224610E+00	
1,562500000000000E-02	1,980307756067970E+00	4,166025318491740E+00	
7,812500000000000E-03	1,995440044025770E+00	3,783172943558500E+00	4,332006433730350E+00
3,906250000000000E-03	1,998674079929440E+00	4,237034076928290E+00	
1,953125000000000E-03	1,999713876652390E+00	3,639273255748950E+00	
9,765625000000000E-04	1,999928790104220E+00	4,275233590367980E+00	
4,882812500000000E-04	1,999980957215010E+00	4,042694718718520E+00	
2,441406250000000E-04	1,999995284662780E+00	3,864395267413600E+00	4,194969611205370E+00

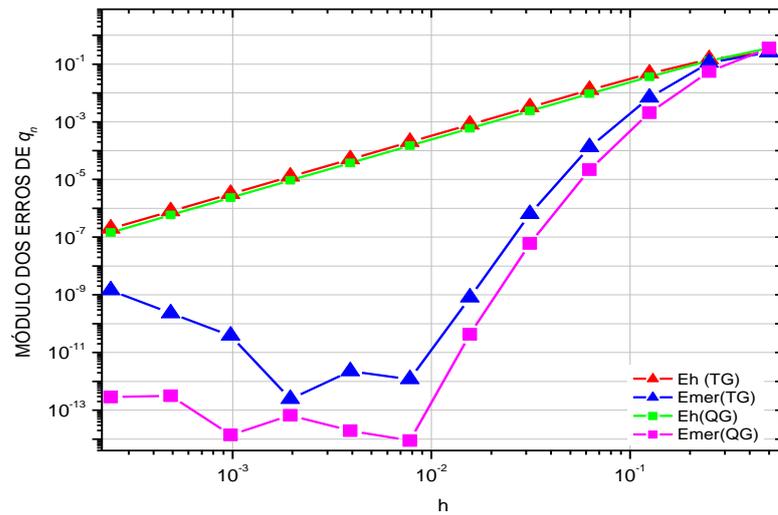


FIGURA E1 – ERROS: q_n

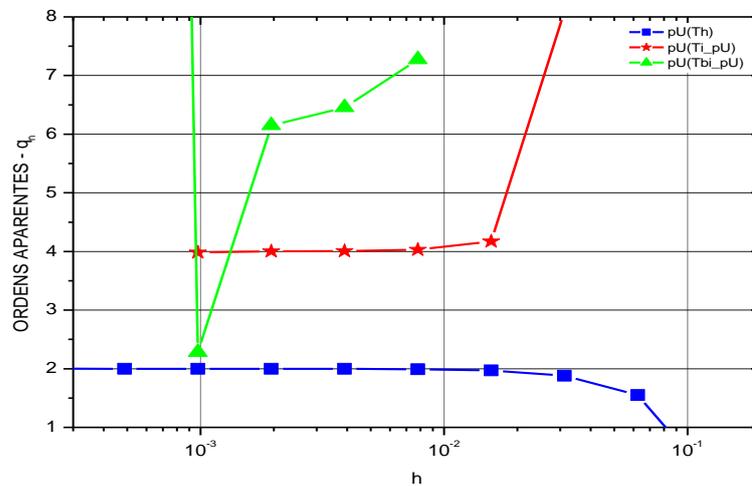


FIGURA E2 – ORDENS DO ERRO DE q_n (TG)

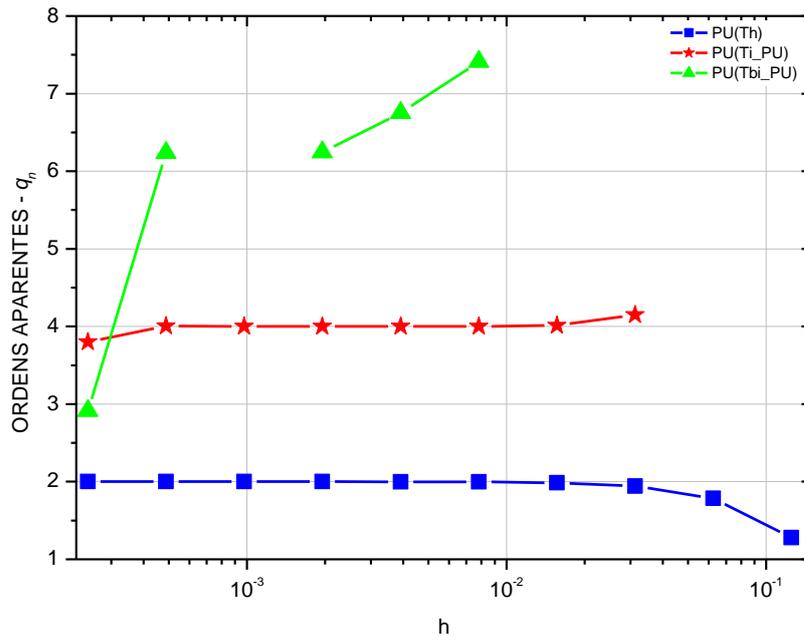


FIGURA E3 – ORDENS DO ERRO DE q_n (QG)

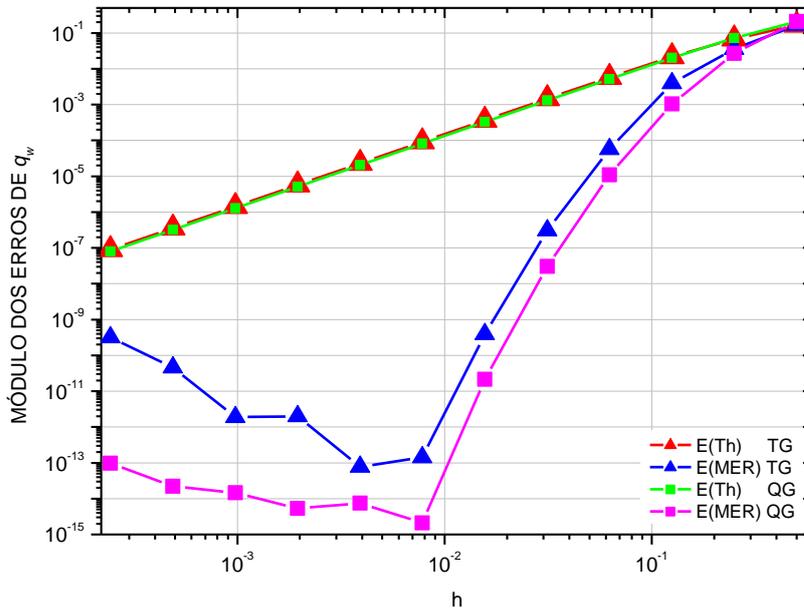


FIGURA E4 – ERROS: q_w

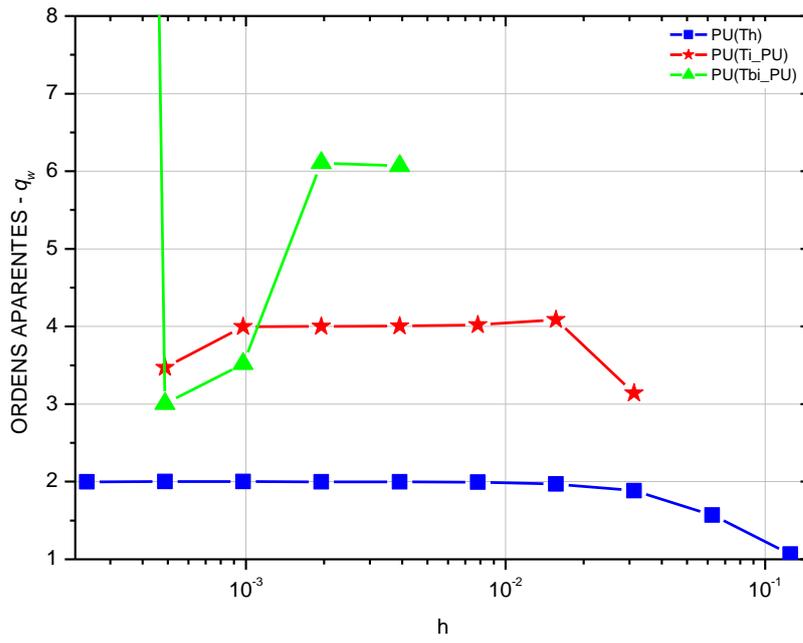


FIGURA E5 – ORDENS DO ERRO DE q_w (TG)

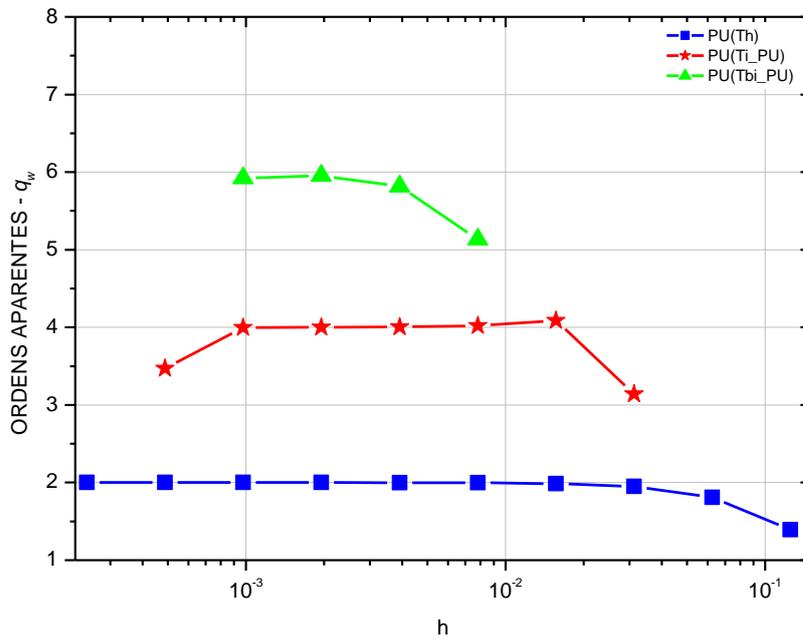


FIGURA E6 – ORDENS DO ERRO DE q_w (QG)

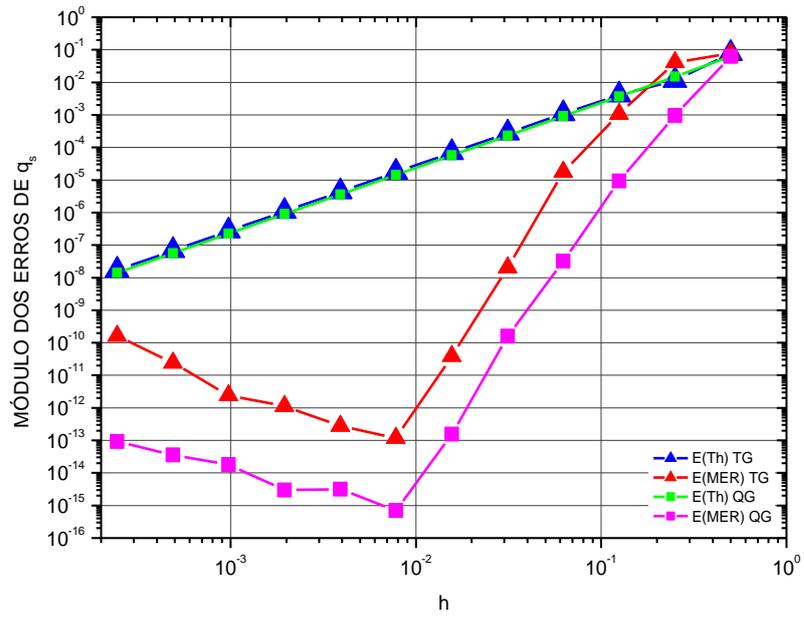


FIGURA E7 – ERROS: q_s

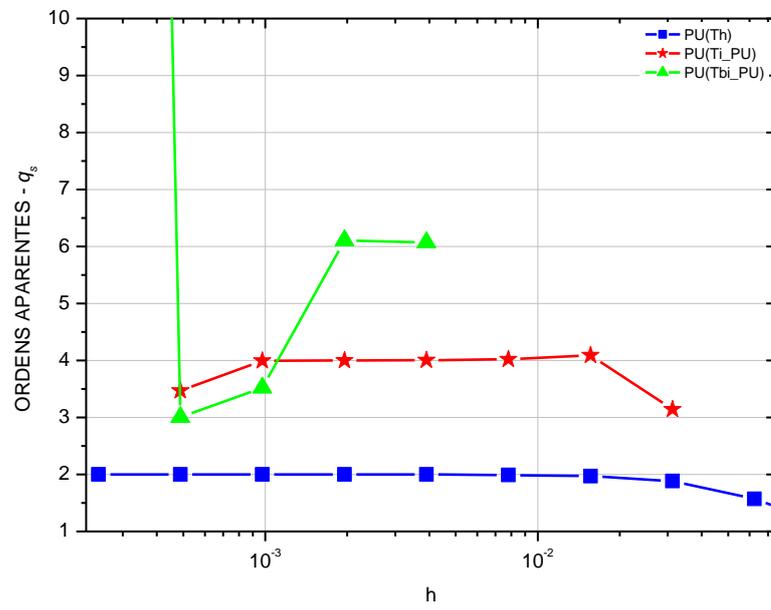
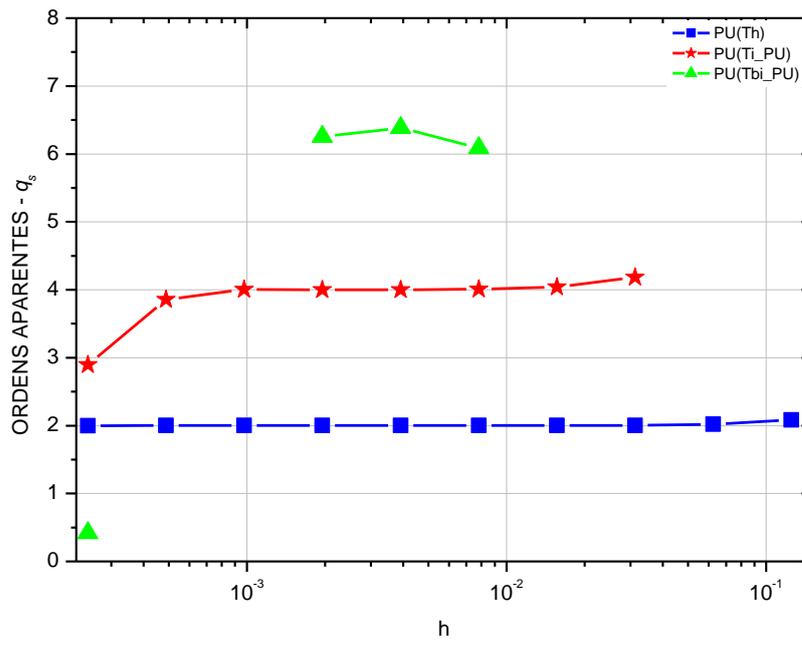


FIGURA E8 – ORDENS DO ERRO DE q_s (TG)

FIGURA E9 – ORDENS DO ERRO DE q_s (QG)

ANEXO

A1. MODELO NUMÉRICO DO PROGRAMA RICHARDSON_3p0

Versão original 1.0 (1 Fev 04)

Versão 2.0 (10 Jan 07)

Versão 1.1 (30 Abr 07)

Versão atual 3.0 (10 Nov 07)

Última alteração = 24 Nov 07

Autor: Carlos Henrique Marchi

DEMEC/TC/UFPR, Curitiba, PR

O programa Richardson_3p0 faz extrapolações simples e múltiplas dos resultados numéricos; calcula ordens efetiva e aparente de resultados extrapolados ou não; calcula erro estimado de resultados numéricos com e sem extrapolações, com estimador delta, Richardson, GCI, convergente e multicoeficientes. Se a solução exata está disponível, calcula erros verdadeiros e o desempenho dos estimadores. A razão de refino de malha (r) pode ser constante ou variável; em caso de r variável, o método da bisseção é usado para obter ordens aparentes. As malhas são uniformes por direção e os cálculos são efetuados com precisão dupla em linguagem Fortran 95, com projeto *Console Application*. O aplicativo usado é Fortran Compaq 6.6. As extrapolações bi e tricoeficiente só se aplicam para refino constante. Os dados devem conter no mínimo duas malhas. Os valores de pL (ordem assintótica do erro verdadeiro) e dpL (variação entre as ordens verdadeiras do erro verdadeiro) são necessários mesmo que a solução analítica não seja conhecida. Resultados em branco de parâmetros significam que não há dados suficientes para calculá-lo ou não é possível calculá-lo. Os arquivos de dados são do tipo .txt e incluem:

- Richardson_3p0.in = lê nome do arquivo principal e do CASO;
- arq_dados = leitura dos dados principais;
- arq_exato = nome do arquivo da solução exata;
- arq_numerico = nomes dos arquivos das soluções numéricas (um para cada malha mas com os resultados de todas as variáveis de interesse)

As saídas do Richardson_3p0 incluem aplicativos auxiliares o Notepad.exe (editor de arquivos) e o Wgnuplot.exe (programa gerador de gráficos). Os arquivos de saídas de dados do programa são:

pL.dat = dados para gráfico de pL
 p2.dat = dados para gráfico de pV(2)
 p3.dat = dados para gráfico de pV(3)
 pE_h.dat = dados para gráfico de pE_h
 pE_i.dat = dados para gráfico de pE_i
 pE_bi.dat = dados para gráfico de pE_bi
 pE_c12.dat = dados para gráfico de pE_c12
 pE_c13.dat = dados para gráfico de pE_c13
 pU_h.dat = dados para gráfico de pU_h
 pU_i.dat = dados para gráfico de pU_i
 pU_bi.dat = dados para gráfico de pU_bi
 pU_c12.dat = dados para gráfico de pU_c12
 pU_c13.dat = dados para gráfico de pU_c13
 Eh.dat = dados para gráfico de Eh
 Ei_12.dat = dados para gráfico de Ei_12
 Ei_pU.dat = dados para gráfico de Ei_pU
 Ec_12.dat = dados para gráfico de Ec_12
 Ec_13.dat = dados para gráfico de Ec_13
 Ei_13.dat = dados para gráfico de Ei_13
 Ei_23.dat = dados para gráfico de Ei_23
 Ei_bi.dat = dados para gráfico de Ei_bi
 Ei_tri.dat = dados para gráfico de Ei_tri
 Ebi.dat = dados para gráfico de Ebi_pU
 U_12.dat = dados para gráfico de Ud, Uri_12 e GCI_pL
 Uri_13.dat = dados para gráfico de Uri_13
 Uri_23.dat = dados para gráfico de Uri_23
 Uri_bi.dat = dados para gráfico de Uri_bi
 Uri_tri.dat = dados para gráfico de Uri_tri
 Uri_pU.dat = dados para gráfico de Uri_pU, Uri_p, GCI_p
 Uc_12.dat = dados para gráfico de Uc_12

Uc_13.dat = dados para gráfico de Uc_13

E_pL_p2.dat= auxiliar para gráficos de E

E_p3.dat = auxiliar para gráficos de E

U_pL.dat = auxiliar para gráficos de U

U_p2.dat = auxiliar para gráficos de U

U_p3.dat = auxiliar para gráficos de U

Os arquivos de comandos para Wgnuplot (gráficos) são:

pU.gnu = gráfico de pU

pE_pU.gnu = gráfico de pE e pU

U.gnu = gráfico de erros estimados (U^*) do grupo 1

U_2.gnu = gráfico de erros estimados (U^*) do grupo 2

E.gnu = gráfico de erros verdadeiros (E^*)

E_U.gnu = gráfico de E^* e U^* do grupo 1

E_U_2.gnu = gráfico de E^* e U^* do grupo 2

A seqüência para compilação dos módulos pela primeira vez após criar o projeto:

1) data_hora.f90

2) variaveis.f90

3) dados.f90

4) calculos.f90

5) resultados.f90

6) main.f90

A2. DADOS DE SAIDA DO RICHARDSON_3p0 PARA T_c (AMG)

O recorte a seguir é de um arquivo de saída do tipo .txt e contém dados sobre os arquivos de entrada que alimentaram o programa Richardson_3p0 para variável 1, Temperatura no meio do domínio.

título = Equação de Laplace - TG/VF –

variável: TEMPERATURA NO MEIO DO DOMINIO

Dia = (22/1/2010) Hora = 17:33:53

1 = número da variável, nos arquivos de resultados, a analisar

nome do arquivo de dados principal = Richardson_3p0_GMG_LAPLACE_2D_FASE_1.in

1 = com solução analítica? 1 = sim; 0 = não

nome do arquivo da solução analítica exata = saidarichsolanal.txt

1.99268407669193E-01 = solução analítica exata

2 = ordem assintótica do erro verdadeiro

2 = variação entre as ordens verdadeiras do erro verdadeiro

12 = número de malhas

1 = tipo de refino de malha (r): 1=constante; 2=variável

500 = número máximo de iterações para obter pU com r variável

1.000000000000000E-15 = tolerância na obtenção de pU com r variável

-1.000000000000000E+01 = limite inferior de pU (r variável)

1.000000000000000E+02 = limite superior de pU (r variável)

h	log10(h)	r21	arquivos numéricos:
5.000000000000000E-01	-3.0103E-01		laplace_2.txt
2.500000000000000E-01	-6.0206E-01	2.0000E+00	laplace_4.txt
1.250000000000000E-01	-9.0309E-01	2.0000E+00	laplace_6.txt
6.250000000000000E-02	-1.2041E+00	2.0000E+00	laplace_8.txt
3.125000000000000E-02	-1.5051E+00	2.0000E+00	laplace_10.txt
1.562500000000000E-02	-1.8062E+00	2.0000E+00	laplace_12.txt
7.812500000000000E-03	-2.1072E+00	2.0000E+00	laplace_14.txt
3.906250000000000E-03	-2.4082E+00	2.0000E+00	laplace_16.txt
1.953125000000000E-03	-2.7093E+00	2.0000E+00	laplace_18.txt
9.765625000000000E-04	-3.0103E+00	2.0000E+00	laplace_20.txt
4.882812500000000E-04	-3.3113E+00	2.0000E+00	laplace_22.txt
2.441406250000000E-04	-3.6124E+00	2.0000E+00	laplace_24.txt

O aplicativo gráfico Wgnuplot gera, para a variável 1, o gráfico da ordens efetiva (pE) e aparente (pU), como o exemplo da Fig. A1; o logaritmo do módulo dos erros verdadeiros, como o exemplo da Fig. A2 e o logaritmo do módulo dos erros verdadeiro(E) e estimado (U), como exemplo da Fig. A3:

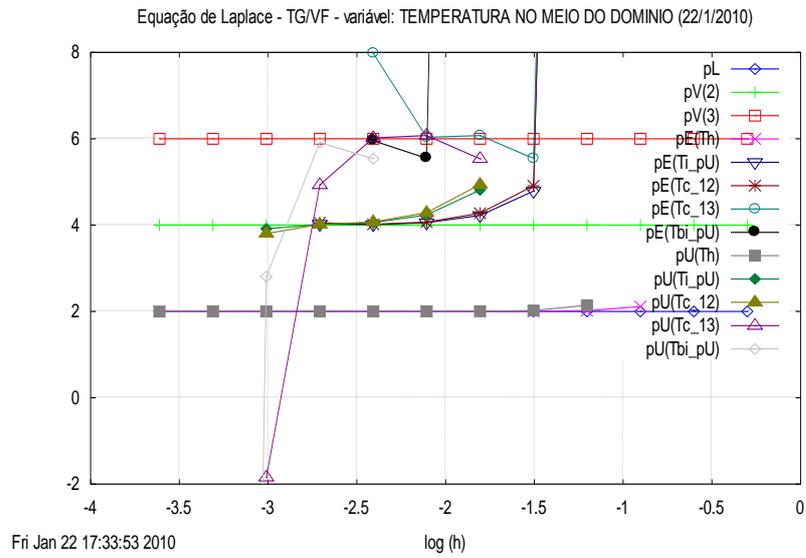


FIGURA A1 – ORDENS APARENTES DA VARIÁVEL T_c (AMG)

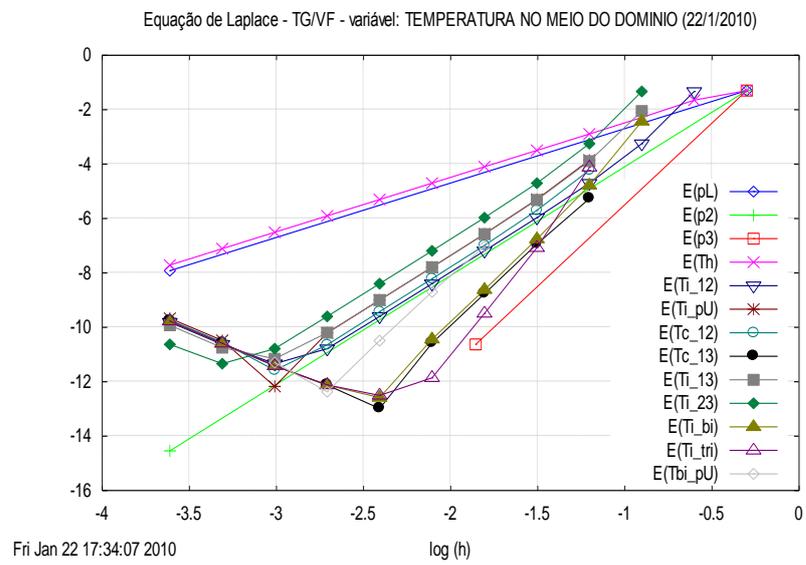


FIGURA A2 – LOG MÓDULO DE ERROS VARIÁVEL T_c (AMG)

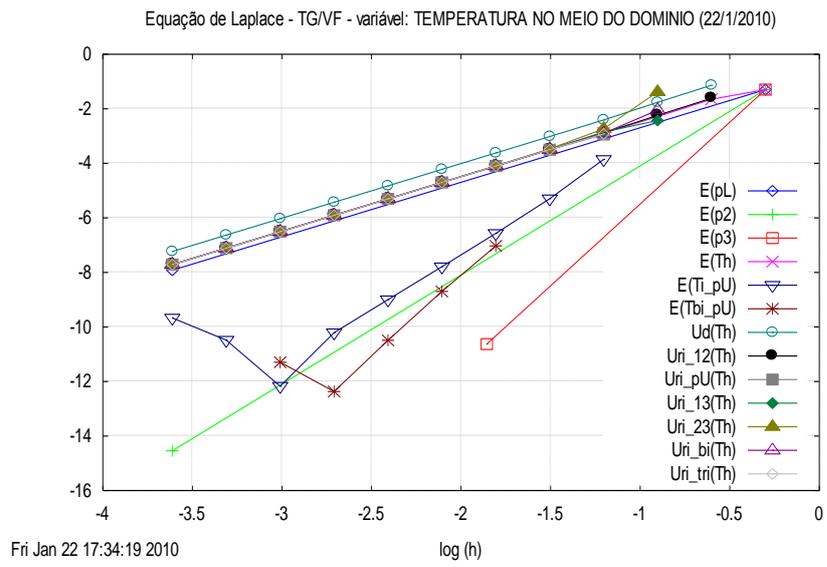


FIGURA A3 – MÓDULO DE (E) e (U) VARIÁVEL T_c (AMG)