

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ANA PAULA DA SILVEIRA VARGAS

**MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON E ESQUEMAS DE 1ª E 2ª ORDENS,
MISTOS E CRANK-NICOLSON SOBRE AS EQUAÇÕES 2D DE
ADVECÇÃO-DIFUSÃO E FOURIER**

CURITIBA

2013

ANA PAULA DA SILVEIRA VARGAS

**MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON E ESQUEMAS DE 1ª E 2ª ORDENS,
MISTOS E CRANK-NICOLSON SOBRE AS EQUAÇÕES 2D DE
ADVECÇÃO-DIFUSÃO E FOURIER**

Tese apresentada como requisito parcial para a obtenção do grau de doutora em Engenharia Mecânica no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR, na área de concentração de Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi.

Coorientador: Prof. Dr. Marcio Augusto Villela
Pinto.

CURITIBA

2013

V297m

Vargas, Ana Paula da Silveira

Multiextrapolação de Richardson e esquemas de 1ª e 2ª ordens, mistos e Crank-Nicolson sobre as equações 2D de advecção-difusão e Fourier. [manuscrito] / Ana Paula da Silveira Vargas. – Curitiba, 2013. 188f. : il. [algumas color.] ; 30 cm.

Tese (doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, 2013.

Orientador: Carlos Henrique Marchi -- Co-orientador: Marcio Augusto Villela Pinto.

1. Engenharia Mecânica. 2. Mecânica dos sólidos. 3. Método de Crank-Nicolson. 4. Fourier, Análise de. I. Universidade Federal do Paraná. II. Marchi, Carlos Henrique. III. Pinto, Marcio Augusto Villela. IV. Título.

CDD: 620.1

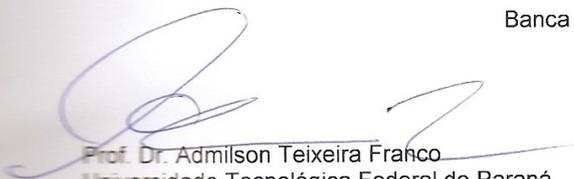
TERMO DE APROVAÇÃO

ANA PAULA DA SILVEIRA VARGAS

MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON E ESQUEMAS DE 1ª E 2ª ORDENS,
MISTOS E CRANK-NICOLSON SOBRE AS EQUAÇÕES 2D
DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO E FOURIER

Tese aprovada como requisito parcial à obtenção do grau de Doutora em Engenharia Mecânica do Curso de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná, área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

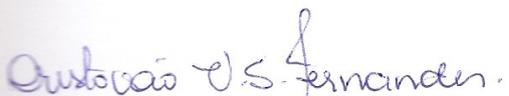
Banca Examinadora:



Prof. Dr. Admilson Teixeira Franco
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Examinador externo



Prof. Dr. Cosmo Damiano Santiago
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Examinador externo



Prof. Dr. Cristovão Vicente Scapulatempo Fernandes
Universidade Federal do Paraná
Examinador externo



Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki
Universidade Federal do Paraná
Examinador interno



Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi
Universidade Federal do Paraná
Presidente da Banca Examinadora

Curitiba, 26 de agosto de 2013.

A Deus.

Ao meu pai Archimedes (*in memoriam*).

AGRADECIMENTOS

A Deus, em primeiro lugar, pois sem ele nada disso seria possível.

Agradeço ao meu orientador e AMIGO Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi pela sabedoria, amizade, e acima de tudo confiança.

Ao AMIGO Prof. Dr. Márcio Augusto Villela Pinto pelo incentivo e orientação ao longo de toda a pesquisa, não medindo esforços para me ajudar a vencer mais essa batalha da vida.

Agradeço aos membros da banca examinadora, Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki, Prof. Dr. Admilson Teixeira Franco, Prof. Dr. Cosmo Damiano Santiago e o Prof. Ph.D. Cristovão V. S. Fernandes, pelas sugestões apresentadas para o aprimoramento deste trabalho.

Agradeço aos colegas do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PG-MEC) em especial as amigas Fabiana de Fátima Giacomini e Luciana Cristina dos Santos Martinho pela força e amizade dedicadas ao longo desta jornada.

Por fim, agradeço aos meus familiares e amigos pela ajuda e compreensão durante este meu percurso.

RESUMO

A análise de erros é objeto de estudo de grande importância em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). A acurácia e a confiabilidade da solução são algumas das dificuldades relacionadas a tal investigação. Para atender essas condições, a análise assintótica de soluções numéricas provê o conhecimento do comportamento de técnicas numéricas aplicadas na solução de modelos matemáticos que descrevem problemas físicos comumente utilizados em Engenharia. O objetivo principal desse trabalho é verificar a influência de esquemas híbridos como o método de correção adiada (MCA) e o método de Crank-Nicolson, bem como o efeito de parâmetros numéricos e físicos (número de Péclet) sobre a redução do erro de discretização com multiextrapolações de Richardson (MER). Para tanto, são consideradas as equações de advecção-difusão e equação de Fourier, ambas bidimensionais com termo fonte e condições de contorno de Dirichlet. As simulações numéricas foram realizadas com base no conhecimento da solução analítica obtida com o método das soluções fabricadas (MSF). As aproximações são desenvolvidas por meio do método de diferenças finitas com esquemas de 1ª e 2ª ordens mistos (para a equação de advecção-difusão) e de Crank-Nicolson (para a equação de Fourier). Na simulação numérica é utilizada a precisão quádrupla e o critério de parada baseado na norma l_1 média. Na solução do sistema de equações foi utilizado o método *multigrid*. Para a análise *a posteriori* com MER foram deduzidas as ordens verdadeiras *a priori* através da expansão da série de Taylor com até três termos para ambas as equações e todas as variáveis de interesse. Com base na estimativa do erro de discretização por meio de MER, malhas refinadas são criadas para alcançar a acurácia de resultados indicando assim as ordens verdadeiras dos mesmos. Dentre as conclusões, constata-se que as ordens do erro de discretização obtidas *a posteriori* com MER comprovam a sua utilidade e eficiência para a estimativa de erros de discretização. Assintoticamente, para esquemas híbridos MCA e Crank-Nicolson, o valor do módulo do erro fica entre os dos esquemas puros. A ordem assintótica do esquema híbrido MCA é igual à ordem assintótica do esquema puro de menor ordem, o que não ocorre para o caso em que o método de Crank-Nicolson é aplicado. Neste caso, a ordem assintótica é igual à ordem do esquema puro de maior ordem. Observa-se que o efeito de pequenos valores no número de Péclet sobre a magnitude do erro de discretização obtido com MER, apresentam os melhores resultados.

Palavras-Chave: Verificação numérica. Multiextrapolação de Richardson. Método de correção adiada. Método das Soluções Fabricadas. Crank-Nicolson.

ABSTRACT

The error analysis is the study object of great importance to the Computational Fluid Dynamics (CFD). The accuracy and reliability of the solution are some of the difficulties related to such investigations. To meet these conditions, the asymptotic analysis of numerical solutions provides the knowledge of the behavior of numerical techniques applied to the solution of mathematical models that describe physical problems commonly used in Engineering. The main objective of this work is to investigate the influence of hybrid schemes such as deferred correction method (DCM) and the Crank-Nicolson method, as well as the effect of numerical and physical parameters (Péclet number) on reducing the discretization error with Richardson multiextrapolation (RME). Therefore, the equations of 2D advection-diffusion equation and 2D Fourier equation are considered, both with source term and Dirichlet boundary conditions. The numerical simulations were based on knowledge of the analytical solution obtained by the method of manufactured solutions (MMS). The approaches are developed by the method of finite differences with mixed first and second orders schemes (for the advection-diffusion equation) and Crank-Nicolson (for the Fourier equation). In numerical simulation, it is used the quadruple precision and the quadruple stopping criterion based on the average standard. In solving the system of equations, the multigrid method was used. To analyze *a posteriori* with RME, the orders priori true were deducted by expanding the Taylor series up to three terms for both equations and all variables of interest. Based on the estimated discretization error by RME, refined meshes are created to achieve the accuracy of the results thus indicating their genuine orders. Among the findings, it appears that the orders of the discretization error obtained *a posteriori* with RME prove their usefulness and efficiency for estimating discretization errors. Asymptotically, for hybrid schemes DCM and Crank-Nicolson, the error modulus value is among the pure schemes. The asymptotic order of the hybrid scheme DCM is equal to the asymptotic order of the pure low-order scheme, which does not occur when the Crank-Nicolson method is applied. In this case, the asymptotic order is equal to the asymptotic order of the pure high-order scheme. It is observed that the effect of small Péclet number in the values of the magnitude of the discretization error obtained from RME, present the best results.

Keywords: Numerical Verification. Richardson Multiextrapolation. Deferred Correction Method. Method of Manufactured Solutions. Crank-Nicolson.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|--|-----|
| Figura 1.1 Processos de validação (Adaptada de Demmel et al. (2005)). | 23 |
| Figura 3.1 Malha regular de pontos para a solução numérica por meio de MDF | 49 |
| Figura 3.2 <i>Multigrid geométrico</i> . | 54 |
| Figura 3.3 Erros envolvidos nos métodos da engenharia (MARCHI, 2010). | 60 |
| Figura 4.1 Representação esquemática da geometria do problema. | 92 |
| Figura 4.2 Visualização gráfica da solução analítica para Péclet igual a 0,1. | 93 |
| Figura 4.3 Visualização gráfica da solução analítica para Péclet igual a 1. | 93 |
| Figura 4.4 Visualização gráfica da solução analítica para Péclet igual a 10. | 93 |
| Figura 4.5 Representação esquemática da malha e do ponto de expansão segundo a função de interpolação (a) explícita; (b) totalmente implícita; (c) Crank-Nicolson. | 112 |
| Figura 4.6 Visualização gráfica da solução analítica da Equação de Fourier 2D para $t = 0,1s$ | 119 |
| Figura 4.7 Representação esquemática (a) explícita; (b) totalmente implícita; (c) Crank-Nicolson | 122 |
| Figura 5.1 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável Tc segundo β . | 138 |
| Figura 5.2 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável Tm segundo β . | 139 |
| Figura 5.3 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável qe segundo β . | 140 |
| Figura 5.4 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável qn segundo β . | 141 |
| Figura 5.5 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável L segundo β . | 142 |
| Figura 5.6 Módulo do erro de discretização da variável Tc com MER (Em1) e sem MER (Eh). | 144 |

| | |
|--|-----|
| Figura 5.7 Módulo do erro de discretização da variável Tm com MER (Em1) e sem MER (Eh)..... | 145 |
| Figura 5.8 Módulo do erro de discretização da variável qe com MER (Em1) e sem MER (Eh). | 145 |
| Figura 5.9 Módulo do erro de discretização da variável qn com MER (Em1) e sem MER (Eh). | 146 |
| Figura 5.10 Módulo do erro de discretização da variável L | 146 |
| Figura 5.11 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável Tc segundo Pe | 149 |
| Figura 5.12 Gráfico do módulo do erro de discretização para Tc com (Em1) e sem (Eh) MER <i>versus h</i> para alguns valores de Péclet (Pe). | 150 |
| Figura 5.13 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável Tm segundo Pe | 151 |
| Figura 5.14 Gráfico do módulo do erro de discretização para Tm com (Em1) e sem (Eh) MER <i>versus h</i> para alguns valores de Péclet. | 152 |
| Figura 5.15 Gráfico do módulo do erro de discretização para qe com (Em1) e sem (Eh) MER <i>versus h</i> para alguns valores de Péclet. | 153 |
| Figura 5.16 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável qe segundo Pe | 154 |
| Figura 5.17 Gráfico do módulo do erro de discretização para qn com (Em1) e sem (Eh) MER <i>versus h</i> para alguns valores de Péclet. | 155 |
| Figura 5.18 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável qn segundo Pe | 156 |
| Figura 5.19 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável L segundo Pe | 158 |
| Figura 5.20 Gráfico do módulo do erro de discretização para a variável L <i>versus h</i> para alguns valores de Péclet. | 159 |
| Figura 5.21 (a) Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável Tc obtidas para $\theta = 12$; (b) Módulo do erro de discretização sem MER (Eh) e com MER (Em1). | 164 |

| | |
|---|-----|
| Figura 5.22 (a) Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável Tm obtidas para $\theta = 12$; | |
| (b) Módulo do erro de discretização sem MER (E_h) e com MER (E_{m1})..... | 164 |
| Figura 5.23 (a) Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável I obtidas para $\theta = 12$; | |
| (b) Módulo do erro de discretização sem MER (E_h) e com MER (E_{m1})..... | 165 |
| Figura 5.24 (a) Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável L obtidas para $\theta = 12$; (b) | |
| Módulo do erro de discretização (E_h)..... | 165 |
| Figura 5.25 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável Tc | 167 |
| Figura 5.26 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável Tm | 167 |
| Figura 5.27 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável qe | 168 |
| Figura 5.28 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável L | 169 |
| Figura 5.29 Módulo do erro de discretização com MER (E_{m1}) e sem MER (E_h) das variáveis de interesse (a) Tc , (b) Tm , (c) qe e (d) L . Resultados obtidos para θ | 170 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|-----|
| Tabela 2.1 Resumo de trabalhos correlatos ao tema desta tese..... | 42 |
| Tabela 3.1 Definição das variáveis de interesse..... | 45 |
| Tabela 3.2 Índices das soluções numéricas sem extrapolação..... | 74 |
| Tabela 3.3 Índices das extrapolações de Richardson..... | 75 |
| Tabela 4.1 Solução analítica da temperatura no centro do domínio segundo Pe^* | 94 |
| Tabela 4.2 Solução analítica da temperatura média segundo Pe^* | 95 |
| Tabela 4.3 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste segundo Pe^* | 95 |
| Tabela 4.4 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao norte segundo Pe^* | 96 |
| Tabela 4.5 Solução analítica da temperatura no centro do domínio - Equação de Fourier 1D* | 110 |
| Tabela 4.6 Solução analítica da temperatura média - Equação de Fourier 1D *..... | 110 |
| Tabela 4.7 Solução analítica da inclinação - Equação de Fourier 1D*..... | 111 |
| Tabela 4.8 Solução analítica da temperatura no centro do domínio - Equação de Fourier 2D * | 119 |
| Tabela 4.9 Solução analítica da temperatura média - Equação de Fourier 2D *..... | 120 |
| Tabela 4.10 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste - Equação de Fourier 2D*..... | 121 |
| Tabela 5.1 Equações governantes usuais em CFD tratadas nesta tese..... | 130 |
| Tabela 5.2 Ordens verdadeiras das funções de interpolação utilizadas na aproximação das variáveis de interesse referentes à equação de advecção-difusão 2D..... | 135 |

| | |
|---|-----|
| Tabela 5.3 Ordens verdadeiras resultantes obtidas <i>a priori</i> das aproximações utilizadas nas variáveis de interesse referentes à equação de advecção-difusão 2D..... | 136 |
| Tabela 5.4 Ordens verdadeiras das funções de interpolação utilizadas na aproximação das variáveis de interesse referentes a equação de Fourier 1D..... | 162 |
| Tabela 5.5 Ordens verdadeiras das funções de interpolação utilizadas na aproximação das variáveis de interesse para a equação de Fourier 2D..... | 162 |
| Tabela 5.6 Ordens verdadeiras obtidas <i>a priori</i> das aproximações finais para as variáveis de interesse referentes a equação de Fourier 1D e 2D..... | 163 |
| Tabela 5.7 Ordens verdadeiras obtidas <i>a priori</i> e <i>a posteriori</i> das aproximações para a equação de advecção-difusão 2D variáveis de interesse T_c , T_m , q_e , q_n e L | 172 |
| Tabela 5.8 Ordens verdadeiras obtidas <i>a priori</i> e <i>a posteriori</i> das aproximações para a equação de Fourier 2D e para as variáveis de interesse T_c , T_m , q_e e L | 173 |

LISTA DE SIGLAS

| | |
|-------|---|
| 1D | Domínio unidimensional |
| 2D | Domínio bidimensional |
| ASME | <i>American Society of Mechanical Engineers</i> |
| CDS-2 | <i>Central Differencing Scheme</i> de 2ª ordem |
| CFD | Dinâmica dos Fluidos Computacional |
| CPU | <i>Central Processing Unit</i> ou Tempo gasto pela Unidade Central de Processamento |
| CS | <i>Correction Scheme</i> |
| DDS-2 | <i>Downstream Differencing Scheme</i> de 2ª ordem |
| EDP | Equação Diferencial Parcial |
| ER | <i>Richardson Extrapolation</i> ou Extrapolação de Richardson |
| ERR | <i>Repeated Richardson Extrapolation</i> ou Extrapolação de Richardson Repetida |
| FAS | <i>Full Approximation Scheme</i> |
| FMG | <i>Full Multigrid</i> |
| GB | Unidade de medida da informação na memória (GigaByte) |
| GCI | <i>Grid Convergence Index</i> ou Índice de convergência de malhas |
| GHz | Velocidade do processador (GigaHertz) |
| MB | Unidade de medida da informação na memória (MegaByte) |
| MCA | Método de correção adiada |
| MDF | Método das Diferenças Finitas |
| MEF | Método de Elementos Finitos |
| MER | Multiextrapolações de Richardson |
| MNP | Método dos Problemas Aproximados |
| MSF | Método das Soluções Fabricadas |
| MVF | Método dos Volumes Finitos |
| RAM | <i>Random Access Memory</i> |
| TDMA | <i>Tridiagonal Matrix Algorithm</i> |
| UDS-1 | <i>Upstream Differencing Scheme</i> de 1ª ordem |
| UDS-2 | <i>Upstream Differencing Scheme</i> de 2ª ordem |

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|------------|--|
| a_E | coeficiente leste |
| a_N | coeficiente norte |
| a_P | coeficiente no ponto |
| a_S | coeficiente sul |
| a_W | coeficiente oeste |
| b_P | coeficiente do termo fonte |
| C_i | coeficientes da expressão do erro de truncamento |
| E_i | erro de iteração |
| E_m | erro de modelagem |
| E_n | erro numérico |
| E_p | erro de programação |
| E_t | erro de truncamento |
| E_x | erro experimental |
| E_π | erro de arredondamento |
| $E(\phi)$ | erro de discretização |
| F_S | fator de segurança do método GCI |
| h^{pv} | espaçamento entre nós |
| h_x, h_y | espaçamento entre nós em cada direção espacial |
| I | inclinação |
| k | espaçamento entre nós no tempo |
| k_1, k_2 | coeficientes |
| L | norma l_1 média |
| l_1 | norma l_1 |
| M | número de malhas |
| N | número de pontos |

| | |
|---------------|---|
| Pe | número de Péclet para equação de advecção-difusão [adimensional] |
| Pe_x, Pe_y | número de Péclet para equação de advecção-difusão em cada direção espacial [adimensional] |
| p_E | ordem efetiva do erro numérico [adimensional] |
| $pE(Tbi_PU)$ | ordem efetiva da terceira ordem verdadeira |
| $pE(Th)$ | ordem efetiva da primeira ordem verdadeira |
| $pE(Ti_PU)$ | ordem efetiva da segunda ordem verdadeira |
| p_L | ordem assintótica do erro numérico [adimensional] |
| p_m | ordem verdadeira do erro numérico do nível de extrapolação m |
| p_U | ordem aparente do erro numérico [adimensional] |
| $pU(Tbi_PU)$ | ordem aparente da terceira ordem verdadeira |
| $pU(Th)$ | ordem aparente da primeira ordem verdadeira |
| $pU(Ti_PU)$ | ordem aparente da segunda ordem verdadeira |
| p_v | ordem verdadeira do erro numérico [adimensional] |
| q | razão de refino [adimensional] |
| q_e | taxa de transferência de calor ao leste |
| q_n | taxa de transferência de calor ao norte |
| S_p | termo fonte no ponto p |
| T | temperatura [K] |
| t | coordenada temporal [s] |
| T_c | temperatura no centro do domínio [K] |
| T_m | temperatura média |
| U | erro numérico estimado |
| U_{bi} | erro estimado pelo estimador Bicoeficiente |
| U_{Δ} | erro estimado pelo estimador Delta |
| U_{GCI} | erro estimado pelo estimador GCI |
| U_{Ri} | erro estimado pelo estimador de Richardson |
| U_{mc} | erro estimado pelo estimador Multicoeficiente |

| | |
|-----------|---|
| U_{tri} | erro estimado pelo estimador Tricoeficiente |
| x, y | coordenadas espaciais unidimensionais [m] |
| z_i | ponto médio do intervalo |

Letras gregas

| | |
|-------------------------------|--|
| α | difusividade térmica (m^2/s) |
| β | fator de mistura do método de correção adiada |
| ε | erro de truncamento |
| $\zeta, \xi, \rho, \varsigma$ | ponto de um intervalo |
| θ | fator de mistura do esquema teta de diferenças finitas |
| λ | função de aproximação numérica |
| $\lambda^{(0)}$ | aproximação inicial |
| λ^i | aproximação da derivada primeira |
| λ^{ii} | aproximação da derivada segunda |
| λ_m | solução numérica da variável média |
| φ | solução numérica |
| ϕ_∞ | solução numérica estimada |
| ϕ_g | solução numérica da malha g |
| Γ | contorno do domínio |
| Λ | variável dependente |
| Λ_m | variável dependente média |
| \sum | somatório |
| Φ | solução analítica |
| Ω | domínio limitado com contorno Γ |

SUMÁRIO

| | |
|--|-----------|
| 1 INTRODUÇÃO..... | 20 |
| 1.1 RELEVÂNCIA DA PESQUISA | 24 |
| 1.2 OBJETIVOS..... | 28 |
| 1.3 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO | 29 |
| 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA..... | 30 |
| 2.1 ESQUEMAS MISTOS..... | 32 |
| 2.2 MÉTODO DAS SOLUÇÕES FABRICADAS | 35 |
| 2.3 ANÁLISES DE ORDEM DE ACURÁCIA..... | 37 |
| 2.4 MULTIEXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON | 39 |
| 2.5 RESUMO DO CAPÍTULO 2..... | 42 |
| 3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | 43 |
| 3.1 MODELOS MATEMÁTICOS BÁSICOS E VARIÁVEIS DE INTERESSE EM CFD .. | 44 |
| 3.2 MÉTODO DE DISCRETIZAÇÃO | 47 |
| 3.3 MÉTODO DAS SOLUÇÕES FABRICADAS | 50 |
| 3.4 MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES LINEARES..... | 51 |
| 3.4.1 Método <i>Multigrid</i> | 53 |
| 3.5 ANÁLISE ASSINTÓTICA..... | 56 |
| 3.6 VERIFICAÇÃO NUMÉRICA | 59 |
| 3.6.1 Fontes de Erros Numéricos | 61 |
| 3.6.1.1 Erro de truncamento (E_t)..... | 61 |
| 3.6.1.2 Erro de iteração (E_i)..... | 62 |
| 3.6.1.3 Erro de programação (E_p)..... | 63 |
| 3.6.1.4 Erro de arredondamento (E_π)..... | 64 |
| 3.6.2 Estimativas para o Erro de Discretização..... | 65 |
| 3.6.2.1 Estimador de Richardson (UR_i)..... | 66 |
| 3.6.2.2 Estimador delta $U\Delta$ | 67 |
| 3.6.2.3 Estimador GCI $UGCI$ | 67 |
| 3.6.2.4 Estimador bicoeficiente U_{bi} | 68 |
| 3.6.2.5 Estimador tricoeficiente U_{tri} | 69 |
| 3.6.2.6 Estimador multicoeficiente U_{mc} | 71 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3.7 | EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON | 71 |
| 3.8 | MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON | 73 |
| 3.9 | RESUMO DO CAPÍTULO 3 | 76 |
| 4 | MODELOS MATEMÁTICOS E NUMÉRICOS..... | 77 |
| 4.1 | REGRA DO TRAPÉZIO | 80 |
| 4.2 | SÉRIE DE TAYLOR | 88 |
| 4.3 | EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO | 91 |
| 4.3.1 | Modelo Matemático | 91 |
| 4.3.1.1 | Solução analítica da temperatura no centro do domínio - T_c | 94 |
| 4.3.1.2 | Solução analítica da temperatura média - T_m | 94 |
| 4.3.1.3 | Solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste - q_e | 95 |
| 4.3.1.4 | Solução analítica da taxa de transferência de calor ao norte - q_n | 96 |
| 4.3.1.5 | Definição da norma l_1 do erro numérico - L | 96 |
| 4.3.2 | Modelo Numérico | 97 |
| 4.3.2.1 | Solução numérica e erro de truncamento da variável T_c | 101 |
| 4.3.2.2 | Solução numérica e erro de truncamento da variável T_m | 102 |
| 4.3.2.3 | Solução numérica e erro de truncamento da variável q_e | 102 |
| 4.3.2.4 | Solução numérica e erro de truncamento da variável q_n | 105 |
| 4.4 | EQUAÇÃO DE FOURIER | 108 |
| 4.4.1 | Modelo Matemático Unidimensional | 108 |
| 4.4.1.1 | Solução analítica da temperatura no centro do domínio - T_c | 109 |
| 4.4.1.2 | Solução analítica da temperatura média - T_m | 110 |
| 4.4.1.3 | Inclinação - I | 110 |
| 4.4.1.4 | Definição da média da norma l_1 do erro numérico - L | 111 |
| 4.4.2 | Modelo Numérico Unidimensional | 112 |
| 4.4.2.1 | Solução numérica e erro de truncamento da variável T_c | 117 |
| 4.4.2.2 | Solução numérica e erro de truncamento da variável T_m | 117 |
| 4.4.2.3 | Solução numérica e erro de truncamento da variável I | 118 |
| 4.4.3 | Modelo Matemático Bidimensional..... | 118 |
| 4.4.3.1 | Solução analítica da temperatura no centro do domínio - T_c | 119 |
| 4.4.3.2 | Solução analítica da temperatura média - T_m | 120 |
| 4.4.3.3 | Solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste - q_e | 120 |
| 4.4.3.4 | Definição da média da norma l_1 do erro numérico | 121 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 4.4.4 | Modelo Numérico Bidimensional..... | 121 |
| 4.4.4.1 | Solução numérica e erro de truncamento da variável T_c | 126 |
| 4.4.4.2 | Solução numérica e erro de truncamento da variável T_m | 127 |
| 4.4.4.3 | Solução numérica e erro de truncamento da variável q_e | 127 |
| 4.4.4.4 | Definição da média da norma L_1 do erro numérico..... | 127 |
| 4.5 | Resumo e considerações do capítulo 4..... | 127 |
| 5 | VERIFICAÇÃO DAS SOLUÇÕES NUMÉRICAS..... | 130 |
| 5.1 | METODOLOGIA..... | 130 |
| 5.2 | EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO 2D..... | 133 |
| 5.2.1 | Análise <i>a Priori</i> da Ordem do Erro de Discretização das Aproximações das Variáveis de Interesse para a Equação de Adveccão-Difusão 2D..... | 134 |
| 5.2.2 | Análise <i>a Posteriori</i> da Ordem do Erro de Discretização das Aproximações na Obtenção das Variáveis de Interesse - Ordens Efetiva e Aparente | 136 |
| 5.2.3 | Efeito do Parâmetro Numérico β no Refinamento do Erro de Discretização dos Resultados com e sem MER..... | 143 |
| 5.2.4 | Efeito do Número de Péclet no Refinamento do Erro de Discretização dos Resultados com e sem MER..... | 147 |
| 5.2.4.1 | Temperatura no centro do domínio - T_c | 148 |
| 5.2.4.2 | Temperatura média - T_m | 150 |
| 5.2.4.3 | Fluxo de calor ao leste - q_e | 152 |
| 5.2.4.4 | Fluxo de calor ao norte - q_n | 155 |
| 5.2.4.5 | Média da norma $l_1 - L$ | 157 |
| 5.3 | EQUAÇÃO DE FOURIER 2D | 160 |
| 5.3.1 | Análise <i>a Priori</i> da Ordem do Erro de Discretização das Aproximações para Obtenção das Variáveis de Interesse para a Equação de Fourier | 161 |
| 5.3.2 | Resultados da Equação de Fourier 1D | 164 |
| 5.3.3 | Análise <i>a Posteriori</i> da Ordem do Erro de Discretização da Equação de Fourier 2D. | 166 |
| 5.3.3.1 | Temperatura no centro do domínio - T_c | 166 |
| 5.3.3.2 | Temperatura média - T_m | 167 |
| 5.3.3.3 | Fluxo de calor ao leste - q_e | 168 |
| 5.3.3.4 | Média da norma $l_1 - L$ | 168 |
| 5.3.4 | Efeito do Parâmetro Numérico θ no Refinamento do Erro de Discretização dos Resultados com e sem MER..... | 169 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5.4 | Resumo e considerações do capítulo 5..... | 170 |
| 6 | CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES | 176 |
| 6.1 | RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS | 178 |
| | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 179 |
| | APÊNDICE A. ARTIGOS..... | 188 |

1 INTRODUÇÃO

A necessidade de prever com acurácia resultados numéricos que representem o comportamento de fluidos em movimento é de grande importância em diversas áreas de atuação como, por exemplo, na engenharia aeronáutica (RIBEIRO, 2002; MOURA, 2009), em análises de energia eólica, em que modelos numéricos são utilizados para extrapolar pontos onde as condições do vento são conhecidas para outros pontos em uma área de parque eólico em que as condições de vento são desconhecidas (DURANTE e RIEDEL, 2007 e 2008); na separação de gás-líquido (RESENDE et al., 2009); modelos para previsões ambientais, como a análise da qualidade da superfície da água e a avaliação do risco de depósitos de lixo nuclear no subsolo (OBERKAMPF e TRUCANO, 2002).

Estes problemas apresentam grande complexidade e, por esta razão, a acurácia e, conseqüentemente, a confiabilidade dos resultados obtidos em simulações computacionais são elementos de grande interesse. Esse fato, em geral, não é o objetivo de projetos desenvolvidos por engenheiros e profissionais envolvidos no estudo do movimento dos fluidos e de seus efeitos. Os cálculos são realizados apenas para prever resultados esperados com base em experimentos e onde a solução analítica é desconhecida.

Avanços têm sido observados em estudos e análises no desenvolvimento de sistemas complexos com difícil aferição de soluções analíticas e/ou numéricas com base em subsídios fornecidos pela dinâmica de fluidos computacional (CFD) (em inglês, *Computational Fluid Dynamics* - CFD), em que estudos teóricos e numéricos se inter-relacionam por meio de métodos numéricos e computacionais para a predição quantitativa das características de escoamentos, transferência de calor e fenômenos físico-químicos (FORTUNA, 2000; HOFFMANN e CHIANG, 2000; HIRSCH, 2007).

Cálculos em CFD são baseados em equações fundamentais que descrevem a conservação de massa, quantidade de movimento e energia. Essas equações podem ser combinadas formando conjuntos de equações diferenciais parciais (EDP's), acopladas, lineares ou não lineares, como as equações de Navier-Stokes, por exemplo. Essas equações não têm solução analítica para muitos problemas em engenharia. Porém, é possível obter soluções aproximadas por meio de métodos numéricos e computacionais.

Atualmente, não se consideram mais apenas efeitos físicos e de modelagem. A preocupação em obter resultados numéricos cada vez mais acurados, na solução de problemas em Engenharia, têm levado muitos pesquisadores a desenvolverem diversas metodologias de solução. Verifica-se o grande interesse no efeito que técnicas numéricas, computacionais, parâmetros físicos e numéricos causam na solução de forma que possibilite a previsão e a confiabilidade de seus resultados (TRUCANO et al., 2006).

Acurácia e previsões confiáveis em mecânica dos fluidos são objetivos fundamentais em CFD (SHYY et al., 2002; FRAYSSE e VALERO, 2012). Devido a isso, aumentar a acurácia do resultado da simulação numérica de escoamento de fluidos e reduzir os recursos computacionais necessários para estas simulações estão em constante estudo.

Existem três metodologias que podem ser utilizadas na solução de um problema e que devem ser consideradas na análise da acurácia da solução (ASME, 2009): a experimental, a analítica e a numérica (TANNEHILL et al., 1997; FORTUNA, 2000; MARCHI, 2001). Todas elas fornecem soluções aproximadas do que seria o valor exato.

A primeira dessas metodologias é a interpretação de fenômenos reais a partir da observação e utilização sistemática de experimentos em laboratórios, embasados em análises teóricas prévias. Essa requer uso de equipamentos, laboratórios, técnicas e instrumentos que possam determinar resultados representativos de um sistema físico.

Resultados experimentais ajudam a comprovar a teoria resultante e também a proporcionar a compreensão, previsão ou até mesmo a controlar o comportamento de um sistema físico chegando a sua representação matemática.

Combinando a linguagem matemática aos resultados experimentais, pode-se empregar a segunda metodologia (AIAA, 1998). Portanto, os métodos analíticos trabalham com representações matemáticas ou modelos matemáticos relacionando grandezas físicas relevantes ao fenômeno e que em geral só admitem soluções se consideradas hipóteses simplificadoras (GOLUB e ORTEGA, 1992).

Quando não é possível a obtenção da solução analítica, parte-se para o desenvolvimento numérico em que métodos numéricos e computacionais são inevitáveis para a solução do problema. Simulações numéricas são desenvolvidas por meio de programas computacionais ou códigos que implementam o modelo matemático.

Trabalhando com uma metodologia computacional, é importante saber como ela está interligada com as outras metodologias a partir do momento em que se faz necessário o conhecimento da física envolvida, e necessariamente do modelo matemático adotado. Essa ideia contribui no sentido em que estudos e análises de resultados podem conduzir a novos modelos teóricos e/ou numéricos (FORTUNA, 2000; MARCHI, 2001).

Contudo, o objetivo final de interesse científico é a validação de um modelo e para isso a verificação se faz necessária. Conforme documento publicado pela ASME (2009), a validação deve ser precedida pela verificação do código e da solução. A verificação do código e a verificação da solução são processos distintos.

A validação é definida como o processo que determina o grau em que um modelo está em representação acurada com o fenômeno real. A verificação é o processo usado para quantificar o erro numérico, e o seu objetivo é estabelecer a acurácia numérica, independente do fenômeno físico, isto é, o processo de verificação mede o quão bem o modelo matemático é resolvido numericamente (ASME, 2009; AIAA, 1998).

No processo de verificação são adotados os procedimentos de verificação do código e a verificação da solução. Na verificação do código um conjunto de procedimentos é desenvolvido para encontrar erros que afetam a codificação da discretização numérica. O método de soluções fabricadas combinado com a verificação da ordem de acurácia é recomendado neste caso. Na verificação da solução, procedimentos como o processo de geração de soluções de referência (conhecido por *benchmarks*) e a estimativa de erros numéricos inerentes à simulação numérica são utilizados. Neste último processo, análises *a posteriori*, por meio do método de Extrapolação de Richardson (ER), são recomendadas (ROY, 2005).

A Fig. 1.1 ilustra como os processos de verificação e de validação são usados para quantificar a relação entre os vários modelos utilizados em computação científica e em processos em engenharia. Demmel et al., (2005) expõem, para melhor compreensão, que a validação é o objetivo das aplicações dos cientistas (exemplo: físicos ou químicos) os quais usam o software para experimentos virtuais, que a verificação da solução é o objetivo da análise numérica e, finalmente, a verificação do código é o objetivo do programador.

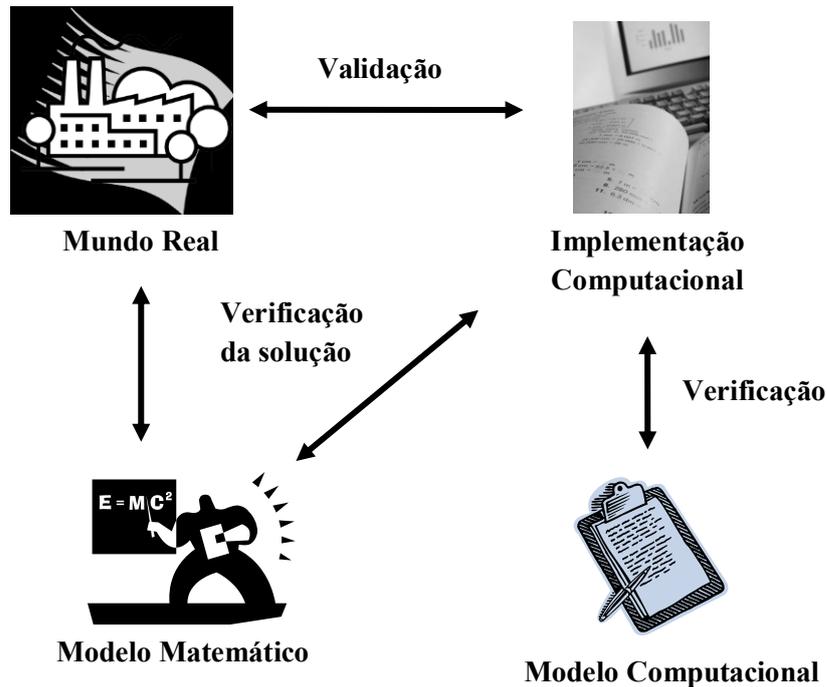


Figura 1.1 Processos de validação (Adaptada de Demmel et al. (2005)).

Tendo em vista o exposto acima, e com o intuito de contribuir para os processos de verificação, a importância desse trabalho se concentra em comprovar o valor correto da ordem assintótica (p_L) do erro de discretização para aproximações numéricas de 1ª e 2ª ordens muito comuns no MDF, bem como a influência de parâmetros físico (número de Péclet) e numéricos (fator de mistura de métodos mistos) com o uso do método de correção adiada (MCA) e o esquema θ sobre o erro de discretização e sua ordem, e assim, permitir que o estimador de Richardson e suas variantes sejam usados corretamente, já que eles dependem diretamente do valor de p_L . Com esse escopo usam-se a estimativa de erro *a priori* baseada na série de Taylor e a estimativa do erro *a posteriori* com MER.

Para tanto, levando-se em conta as condições do erro de truncamento e consequentemente o erro de discretização inerentes a aproximações numéricas baseadas no método de diferenças finitas, são resolvidos alguns problemas teste, a saber, a equação de advecção-difusão 2D, permanente e a equação de Fourier 1D e 2D, transiente. Ambas com termo fonte e solução analítica, obtidos por meio do método das soluções fabricadas (MSF).

1.1 RELEVÂNCIA DA PESQUISA

A dificuldade de se resolver o problema analiticamente no meio contínuo induz a resolver o problema em pontos específicos. Para isso, deve-se discretizar o domínio do problema definindo uma malha que simule esses pontos.

Em uma aplicação prática de CFD a solução de problemas é obtida por meio de métodos de discretização, tais como o Método de Diferenças Finitas (MDF), o Método dos Volumes Finitos (MVF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF) (FERZIGER, 2002). Nesta tese o MDF é utilizado, pois apresenta, em termos de desenvolvimento teórico, condições suficientes para análise proposta.

Através da expansão em série de Taylor, a formulação generalizada de qualquer esquema baseado em diferenças finitas, juntamente com o seu erro de truncamento, traz inúmeras contribuições a respeito da ordem de acurácia.

A análise da ordem de acurácia da solução numérica é importante para uma impressão realística do problema em estudo, assim, modelos numéricos cada vez mais sofisticados permitem simular uma gama maior de fenômenos. Porém, a exigência de malhas muito refinadas, a utilização de parâmetros adequados e o esforço computacional em relação ao tempo de CPU¹ e memória em níveis aceitáveis tornam-se necessários.

Mesmo quando o método é adequado e os cálculos são efetuados de uma maneira correta, os resultados trazem consigo erros acumulados sejam na conversão dos números para o sistema aritmético da máquina, no truncamento derivado de análise teórica ou em sucessivas operações realizadas. Isso é inerente ao processo e não tem como ser evitado (FERZIGER e PERIC, 2002; STOER e BULIRSCH, 2002).

Portanto, análise de erros numéricos torna-se indispensável visto que toda solução numérica apresenta algum tipo de erro. O erro obtido pela simulação numérica é de difícil determinação e muitas vezes só é possível obter uma estimativa desse erro. Estudos sobre erros de modelagem numérica em CFD são muito importantes para avaliar a qualidade de uma simulação numérica (ROACHE, 1994, 1997; STERN, et al., 1999; MARCHI, 2001; FERZIGER e PERIC, 2002; HIRSCH, 2007; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

¹ Tempo gasto pela Unidade Central de Processamento (do inglês, *Central Processing Unit*)

As principais fontes de erros em simulações numéricas são: erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação. Destas, o erro de truncamento é a mais relevante tendo em vista que mesmo na redução das outras fontes este é o mais difícil de controlar (ROY e OBERKAMPF, 2011).

Os efeitos dessas fontes de erros em simulação devem ser minimizados por meio de técnicas e procedimentos específicos, tais como, atingir o erro de máquina em processos iterativos, aumentar a quantidade de números significativos em cálculos computacionais, verificação da ordem de acurácia de esquemas numéricos e avaliação de parâmetros físicos (número de Péclet e de Reynolds) e/ou numéricos (fatores de correção), entre outras (ROY e OBERKAMPF, 2011).

Quando as fontes de erro de iteração, arredondamento e programação são minimizadas, o erro de truncamento passa a ser denominado erro de discretização que é a diferença entre a solução analítica e a solução numérica exata das equações discretizadas (MARCHI e SILVA, 1999; MARCHI, 2001; FERZIGER e PERIC, 2002).

A redução do erro de discretização pode ser obtida com o refinamento de malha, porém a desvantagem é o aumento do uso de memória e tempo de CPU; com a utilização de métodos de alta ordem há desvantagem em um aumento da complexidade do modelo numérico (Ferziger e Peric, 2002); ou ainda com a utilização de técnicas de extrapolação (SIDI, 2003).

Shyy et al., (2002), Roy (2005) e Marchi e Germer (2009) fazem referência à importância da técnica de Extrapolação de Richardson (ER) (em inglês, *Richardson Extrapolation* - RE) no atendimento às análises de erros numéricos e na acurácia obtida com sua aplicação.

ER é uma metodologia utilizada para aumentar a ordem de acurácia de soluções numéricas envolvendo técnicas de discretização (BURG e ERWIN, 2008) e no exame da convergência baseada em um estudo sistemático de malhas, conhecidas por *benchmarks*, pois proporciona meios para estimar quantitativamente incertezas e/ou erros numéricos (RICHARDS, 1997; XING e STERN, 2010).

Conforme a complexidade do problema a ser resolvido, inúmeras técnicas numéricas e computacionais têm sido desenvolvidas com o intuito de obter esquemas com ordem de acurácia mais altas (MARCHI e GERMER 2009; FERZIGER e PERIC, 2002). ER pode

proporcionar uma melhoria significativa na acurácia da solução obtida por diversas técnicas numéricas, pois pode ser usada como pós-processamento e independe da técnica utilizada, sem a necessidade de aumentar a complexidade do modelo numérico.

No entanto, mesmo quando as ordens de convergência são conhecidas é sempre prudente, em alguns casos, estimar essas ordens antes de executar a extrapolação. A compreensão do comportamento da simulação numérica deve levar em conta o efeito de técnicas combinadas e de parâmetros físicos e numéricos na análise dos erros numéricos. A previsão eficaz desses efeitos juntamente com a técnica de extrapolação, permite uma maior confiabilidade nos resultados.

Para isso, dois métodos estão à disposição: estimativas de erros *a priori* e estimativas de erro *a posteriori*. As estimativas de erro *a priori* são usadas para estimar a ordem do erro de discretização. Isso é feito estimando-se o erro de truncamento do modelo matemático do problema através da série de Taylor. As estimativas de erro *a posteriori* são usadas para estimar efetivamente a magnitude do erro de discretização (MARCHI, 2001). Estes são requisitos necessários para a verificação em processos de validação.

Com base nesses métodos, análises exaustivas e rigorosas em CFD têm sido realizadas para reduzir erros de discretização onde estimadores de erro *a posteriori* são estudados para melhorar a acurácia de soluções numéricas (ROACHE, 1997; MARCHI, 2009).

Nesse sentido, o interesse na redução do erro de discretização tem apresentado muitas maneiras nas quais as EDP's podem ser modeladas numericamente de modo a simular, em aspectos importantes, o seu comportamento, mas algumas formas são melhores do que outras no que se refere à ordem de acurácia.

A observação de regras e circunstâncias especiais no desenvolvimento da formulação das equações discretizadas correspondentes ao problema a ser resolvido pode ser melhorada por meio da aplicação recursiva de ER denominada Multiextrapolação de Richardson (MER) ou ainda, em inglês, *Repeated Richardson Extrapolation* (RRE) (STRÖM, 1973; CHRISTIANSEN e PETERSEN, 1989; BJÖRCK e DAHLQUIST, 2008; MARCHI e GERMER, 2009).

Com a aplicação de MER a verificação do valor correto da ordem assintótica e de ordens verdadeiras do erro de discretização contribui para melhorar a qualidade (acurácia e

confiabilidade) das soluções e das estimativas do erro de discretização proporcionando a utilização adequada de esquemas e parâmetros físicos e numéricos em CFD.

A contribuição de MER se deve também a dois motivos: i) pode-se obter o mesmo erro de discretização com uma malha com muito menos nós, resultando na redução do esforço computacional (memória e tempo de CPU) e, ii) pode-se reduzir o erro de discretização em uma malha com o mesmo número de nós, resultando em erro muito menor e maior confiabilidade da solução; esta forma é indicada especialmente para se obter *benchmarks* (MARCHI e GERMER, 2009).

Em uma análise detalhada da literatura verifica-se que são muitos os critérios utilizados na aferição de desempenho das técnicas de solução numérica e computacional, como a análise da ordem de acurácia, efeitos de parâmetros físicos ou numéricos. A avaliação do efeito destes nos resultados numéricos, considerando as diversas características tanto do modelo físico como numérico, também é objeto de pesquisa em CFD (ROACHE,1994; CELIK e ZHANG,1995; ROY, 2003; TRUCANO et al., 2006).

Esquemas mistos ou híbridos, por exemplo, são muito usados na solução de diversos problemas em CFD. O conhecimento da ordem de acurácia correta deles permite estimar o erro de discretização com maior confiabilidade quando se usam estimadores de erro baseados em ER, como é o caso do uso de MER.

Além disso, controvérsias existentes na literatura a respeito de esquemas mistos devem ser esclarecidas como, por exemplo, Celik e Zhang (1995) afirmam que a ordem assintótica de um esquema híbrido (ou misto) é variável. Já Roache (1994) sugere usar a menor ordem entre os dois esquemas puros. Roy (2003) relata que, mesmo em problemas unidimensionais o erro se reduz de forma não-monotônica quando se usam pelo menos dois esquemas com ordens assintóticas diferentes.

Estudar técnicas que sejam eficientes na redução do erro numérico ou de suas fontes é importante para a validação de modelos matemáticos usados para representar fenômenos físicos reais. Em contribuição a isso o emprego do Método de Correção Adiada (MCA) (KHOSLA e RUBIN, 1974; FERZIGER e PERIC, 2002) e a utilização do Método das Soluções Fabricadas (MSF) (KNUPP e SALARI, 2003) podem fornecer informações importantes quanto ao comportamento do erro pela análise da ordem de acurácia.

A importância do estudo de MER na solução de problemas com solução analítica conhecida provê subsídios para os casos em que não se consegue estimar *a priori* ou *a posteriori* as ordens do erro pelo fato de que na prática não se conhece a solução analítica do problema nem o erro verdadeiro.

Conhecer as ordens verdadeiras do erro de esquemas mistos é essencial para reduzir significativamente o erro numérico e, com isso, permitir a verificação da influência de parâmetros físico (número de Péclet) e numérico (fator de mistura em métodos híbridos) sobre o comportamento do erro com maior segurança.

A vantagem do uso de MER se dá pelo fato de ser um pós-processamento simples, pois não interfere diretamente na obtenção da solução. Seu custo computacional é muito baixo em termos de memória e tempo de CPU. Pode ser aplicada a códigos computacionais já existentes ou a resultados já obtidos. Aplica-se a diversas aproximações numéricas e variáveis de interesse. Independe de análises *a priori* e conhecimento da solução analítica do problema.

1.2 OBJETIVOS

O objetivo principal desse trabalho é verificar a influência de esquemas mistos (híbridos ou correção adiada), e de parâmetros físico e numéricos sobre a redução do erro de discretização de problemas de CFD com MER.

Objetivos específicos

Os objetivos específicos podem ser resumidos nos seguintes tópicos:

- Determinar *a priori* e *a posteriori* o erro de discretização e suas ordens verdadeiras de esquemas numéricos mistos no espaço para a equação de advecção-difusão 2D;
- Determinar *a priori* e *a posteriori* o erro de discretização e suas ordens verdadeiras de esquemas numéricos mistos no tempo (esquema θ , onde $0 \leq \theta \leq 1$ e $\theta = \frac{1}{2}$ é o método de Crank-Nicolson) para a equação de Fourier 2D;
- Determinar *a priori* e *a posteriori* o erro de discretização e suas ordens verdadeiras para variáveis secundárias;
- Verificar a influência de parâmetro físico (Pe) e numéricos (β – correção adiada; e θ);

- Verificar se resultados 1D são extensivos para 2D;
- Verificar o desempenho de MER (multiextrapolação de Richardson).

1.3 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO

O presente trabalho está organizado da seguinte forma: o capítulo 2 apresenta a revisão bibliográfica sobre pesquisas relacionadas ao uso de esquemas mistos, método das soluções fabricadas, análise da ordem de acurácia e a extrapolação de Richardson, mais especificamente, a MER. A fundamentação teórica necessária para o desenvolvimento e aplicação das técnicas utilizadas, bem como da verificação dos resultados são apresentados no capítulo 3. A exposição abrange os modelos matemáticos teste, métodos de discretização, teoria sobre o MSF, métodos de solução de equações lineares utilizados, sobre a análise assintótica, técnicas de verificação numérica e a definição de MER. No capítulo 4 são apresentados os desenvolvimentos teóricos e discretos das técnicas e suas aplicações para os modelos matemáticos e variáveis secundárias abordadas nesta tese. Ainda no capítulo 4, são apresentadas as deduções das ordens verdadeiras dos esquemas numéricos aplicados nos problemas a que se propõe esta tese. No capítulo 5, são expostos os resultados das simulações efetuadas e suas verificações. A conclusão geral e específica dos resultados bem como as contribuições desta tese é relatada no capítulo 6.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Considerando avanços significativos de técnicas e tecnologias computacionais em CFD, tornou-se necessária a publicação de um padrão a ser utilizado e confrontado para melhorar a qualidade das publicações nessa área (CELIK, 2008; ASME, 2009).

Desde 1990, a ASME (*American Society of Mechanical Engineers*) propõe atividades concernentes à detecção, estimação e controle de erros e/ou incertezas numéricas em CFD. Esses processos são indispensáveis e permitem a apresentação mais confiável de resultados cada vez mais precisos e também acurados.

Muitas técnicas são desenvolvidas para atender esses processos, e incluem, dentre outros, a comprovação da ordem de acurácia, consistência, estabilidade, difusão e dispersão numéricas nas soluções (WARMING e HYETT, 1974; DEGHAN, 2004).

O desempenho de técnicas, conhecidas em sua maioria, como funções de interpolação, é amplamente discutido na literatura com respeito à verificação da ordem de acurácia do erro de truncamento (STETTER, 1965; KOU e LEE, 1994; ROY, 2003; RUS e VILLATORO, 2007; ZHANG et al., 2012), análises sobre consistência e estabilidade (TANNEHILL et al., 1997; FERZIGER, 2002; RUS e VILLATORO, 2007) e a redução de difusão e dispersão numéricas com MDF (HOFFMANN e CHIANG, 2000), MVF (PATANKAR, 1980; PATEL et al., 1985; MARCHI, 1993) e MEF (BROOKS e HUGHES, 1982; RICE e SCHNIPKE, 1986).

Entende-se por difusão numérica, também conhecida por falsa difusão ou dissipação numérica, como qualquer efeito que tenda a suavizar ou amortecer gradientes ou descontinuidades presentes na solução exata de um problema. Por dispersão numérica, os efeitos que resultam em oscilações na solução (MARCHI, 1993). Segundo Marchi (1993), tanto a difusão numérica quanto a dispersão numérica são erros introduzidos na solução de um problema via função de interpolação.

Dentre os métodos de discretização existentes, o MDF é um método clássico e que apesar da base matemática não ser nova, pode apresentar diferentes formulações de aproximação numérica (AMES, 1977; TANNEHILL et al., 1997; STRIKWERDA, 2004). Com isso esquemas mistos têm sido desenvolvidos com o intuito de contrabalancear

propriedades importantes para a solução de problemas que envolvem derivadas de primeira e segunda ordens, ou ambas, e assim evitar efeitos indesejáveis dos erros de discretização.

Para evitar qualquer ambiguidade em estudos e análises do erro de discretização e dos seus efeitos em resultados obtidos a partir de simulações numéricas, pode-se garantir a ausência de erros de implementação com a aplicação do Método das Soluções Fabricadas (MSF) (em inglês, *Method of Manufactured Solutions* - MMS) (KNUPP e SALARI, 2003; ASME, 2009). Este método é indicado para verificação do código e no estudo de estimativas da incerteza numérica (BLANCAS e CELIK, 2006).

A extrapolação de Richardson (ER) é recomendada para estimar erros de discretização e tem sido estudado e analisado por diversos pesquisadores (FREITAS, 1993; ROACHE, 1998; STERN et al., 1999; MARCHI, 2001; CELIK, 2008; EÇA E HOEKSTRA, 2009), mas o primeiro estudo realizado e aplicado se deve ao seu criador Lewis Fry Richardson (RICHARDSON, 1910; RICHARDSON e GAUNT, 1927; HUNT, 1998).

ER é também comumente utilizado na aproximação numérica de equações diferenciais parciais para melhorar certas quantidades preditivas, tais como arrasto e sustentação de aerofólio (BURG e ERWIN, 2008), em cálculos que envolvem escoamento turbulento (CELIK e ZHANG, 1995), escoamento laminar de gás perfeito (ROY, 2003), em estudos sobre detecção, estimação e controle de incerteza e/ou erros numéricos em CFD (ROACHE, 1997, 1998; MARCHI, 2001; CELIK, 2008; ASME, 2009), entre outros.

A eficácia do método de extrapolação de Richardson se estende não só para o tratamento da redução de erros de discretização (STOER e BULIRSC, 2002), como também no processo de previsão e controle do comportamento assintótico de técnicas utilizadas por meio de sua aplicação sucessiva através da Multiextrapolação de Richardson (MER) (DEUFLHARD et al., 1987; CHRISTIANSEN e PETERSEN, 1989; RAHUL e BHATTACHARYYA, 2006).

Um grupo de pesquisa liderado pelo prof. Carlos H. Marchi, da Universidade Federal do Paraná, tem dedicado esforços no estudo de MER para a redução do erro de discretização em diversas aplicações; os principais resultados podem ser encontrados em Marchi et al. (2008); Marchi e Germer (2009), Marchi et al. (2013) ou em <ftp://ftp.demec.ufpr.br/CFD>.

Com base no exposto acima, este capítulo apresenta revisão bibliográfica relativa aos métodos apresentados e que são utilizados no desenvolvimento desta tese a fim de contribuir para os processos de detecção, estimação e controle de erros e/ou incertezas numéricas em CFD. Em resumo, esta revisão compreende estudos relacionados a esquemas mistos (métodos híbridos e correção adiada), o MSF, Análise de ordem de acurácia e MER.

2.1 ESQUEMAS MISTOS

É comum encontrar em trabalhos científicos de diversas áreas, especificamente em CFD, várias combinações de métodos de solução. Entretanto não foram encontrados na literatura definição ou classificação formal geral sobre esses métodos. Com base nas pesquisas realizadas, os métodos híbridos podem ser definidos como a combinação de dois ou mais métodos totalmente distintos para a solução de um fenômeno físico ou químico em estudo. Os métodos incluídos em qualquer combinação podem ser experimentais, analíticos e/ou numéricos (TANNEHILL et al., 1997; FORTUNA; 2000; MARCHI, 2001).

A combinação de dois ou mais desses métodos, baseados em métodos numéricos define-se por Métodos Numéricos Híbridos (MNH). Os MNH (ou mistos) são frequentemente associados à combinação de características de dois ou mais esquemas numéricos com o intuito de melhorar o desempenho de suas aplicações individuais. Fazem parte desta categoria os métodos que envolvem a utilização de parâmetros empíricos obtidos por meio de métodos experimentais e/ou numéricos, exemplos, Pe (número de Péclet) e Re (número de Reynolds); os métodos que combinam soluções analíticas e numéricas para a solução de problemas de forma simultânea, por exemplo o MSF; os métodos que combinam técnicas analíticas e numéricas utilizando o sistema de manipulação computacional-simbólica para obter soluções analíticas de problemas em engenharia, como por exemplo, o software Maple®, Matlab® ou Mathematica®, entre outros (STEINBERG e ROACHE, 1995; SPHAIER, 2013); e os métodos formados por dois (ou mais) métodos numéricos totalmente distintos e que podem ser aplicados simultaneamente ou não, como é o caso do método de correção adiada (MCA).

O MCA, segundo Patankar (1980), é um esquema híbrido desenvolvido por Spalding (1972) e se refere ao termo híbrido como um indicativo de uma combinação de técnicas de primeira e de segunda ordens. Roy et al. (2001) coloca que este esquema foi desenvolvido a

fim de melhorar a acurácia das soluções numéricas para equações diferenciais. Referências sobre o MCA podem também ser encontradas em Pereyra (1966) e Stetter (1978).

Khosla e Rubin (1974) propõem a aplicação do MCA na solução da equação de Burgers unidimensional com o MDF.

Ferziger e Peric (2002) descrevem o método como uma forma de obter aproximações de alta ordem, para evitar efeitos indesejáveis de oscilação na solução (dispersão numérica). A ideia consiste em equilibrar a solução através de técnicas de aproximação de baixa e alta ordem da seguinte maneira:

$$F_e = F_e^L + (F_e^H - F_e^L)^{OLD} \quad (2.1)$$

onde F_e^L é uma aproximação de baixa ordem e F_e^H é a aproximação de alta ordem. Ferziger e Peric (2002) apresentam como exemplo a utilização do esquema Padé nos termos de advecção e do esquema de segunda ordem CDS (*Central Difference Scheme*) nos termos de difusão. O termo em parênteses é calculado usando valores da iteração imediatamente anterior e é indicado pelo sobrescrito “*OLD*”. O autor também acrescenta que para produzir a mistura entre os dois esquemas puros multiplica-se o termo entre parênteses por um fator $0 < \beta < 1$. Neste caso, para $\beta = 1$ obtém-se a aproximação pela técnica CDS e para $\beta = 0$ a aproximação pela técnica de Padé.

O MCA tem sido utilizado em CFD para aumentar a acurácia de técnicas de discretização espacial de primeira ordem (ALTAS e BURRAGE, 1994; CAWOOD et al., 2000). Ideias semelhantes são propostas com a aplicação do MVF por Patankar (1980) e Fortuna (2000). Este último se refere ao MCA como o Método da Correção Atrasada.

Fortuna (2000) ao propor o MCA relata que a aplicação do esquema *upwind* traz como vantagem a ausência de dispersão numérica, sob a condição de que não se tenha termo fonte, e que, o emprego desta discretização em pontos adjacentes a fronteiras restrinja o acoplamento entre equações, reduzindo o esforço computacional necessário à solução do sistema de equações. O autor apresenta como desvantagem, a apresentação de difusão numérica introduzida pela técnica *upwind* e sugere a aplicação de esquemas de ordem superior, porém adverte que isso acarreta um aumento do acoplamento entre equações e, conseqüentemente, gerando um custo computacional maior.

Burg e Erwin (2008) destacam que com a aplicação do MCA a ordem de acurácia fica limitada entre as ordens das técnicas de discretização utilizadas em contrário à técnica de ER a qual se obtém um aumento dessa ordem. Eles também enfatizam que a vantagem do conhecimento das ordens auxilia na análise da ordem de acurácia.

Linss e Kopteva (2009) resolvem um problema de advecção-difusão com efeito de singularidades através do MCA com base em um esquema híbrido entre um esquema de diferença de primeira ordem e um esquema de diferenças centrais de segunda ordem.

Referências indicadas por Schreiber e Keller (1983) mostram que métodos numéricos híbridos têm sido desenvolvidos para combinar métodos explícitos, implícitos e o método das características na solução de problemas de escoamento viscoso bi e tridimensionais, revelando uma redução de uma ou duas ordens de magnitude em tempo computacional em comparação a aplicação de métodos puros. Com base nesta ideia, o esquema na solução das equações de Navier-Stokes, com alto número de Reynolds, é resolvido aplicando de forma apropriada cada método envolvido.

Outro problema que surge na aplicação de MNH está na solução de problemas que envolvem descontinuidades, como apresentado no trabalho de Roy (2003). O autor relata a dificuldade em ajustar técnicas com ordens de acurácia mistas. Ressalta também que a presença de ambas, primeira e segunda ordens de acurácia, pode comprometer a análise de convergência da malha. Roache (1994) sugere usar a menor ordem entre os dois esquemas puros.

Várias pesquisas mostram que ao aplicar essas técnicas híbridas, o seu resultado tem a sua ordem de acurácia reduzida para a ordem mais baixa, como por exemplo, em Carpenter e Casper (1999), no estudo de escoamentos em velocidades hipersônicas. Em seu trabalho, embora os esquemas numéricos de terceira e quarta ordens tenham sido formalmente empregadas, estes descobriram que a ordem de acurácia espacial sempre é revertida em primeira ordem em malhas suficientemente refinadas. Isto também é verificado por Roy (2003).

Resultados similares têm sido observados por outros autores como nos trabalhos de Celik e Zhang (1995) e Celik e Karatekin (1997) em que afirmam que a ordem assintótica de um esquema híbrido (ou misto) é variável.

Sun e Zhang (2003) propõem uma estratégia de discretização em diferenças finitas, a qual é baseada na técnica de ER e um esquema de interpolação do operador para resolver as equações de advecção-difusão. A estratégia combina duas soluções aproximadas e usa ER para obter um resultado de sexta ordem de acurácia.

Sofroniou e Spaletta (2008) descrevem detalhes de projeto e implementação de métodos de extrapolação para a resolução de equações diferenciais ordinárias no software Mathematica®. Abordagens que podem reduzir o efeito dos erros de arredondamento em extrapolação de alta ordem são apresentadas e mostram que soluções de referência podem ser obtidas com alta acurácia.

Steinberg e Roache (1985) empregaram a manipulação simbólica na solução de EDP's em duas dimensões com o software Maxima® e FORTRAN® para a verificação do código (ROY, 2004).

Roy e Sinclair (2009) propõem o Método dos Problemas Aproximados (em inglês, Method of Nearby Problems (MNP)) para validar a acurácia das soluções numéricas dos problemas em dinâmica dos fluidos. O Método dos Problemas Aproximados é um tipo de MCA conhecido como correção diferencial e requer duas soluções numéricas sobre a mesma malha, eliminando assim os problemas associados com a geração de várias malhas com mesma faixa de convergência assintótica (SKEEL, 1986). Parte desse método envolve a utilização de um procedimento semelhante ao Método de Soluções Fabricadas o qual será apresentado na seção seguinte.

2.2 MÉTODO DAS SOLUÇÕES FABRICADAS

O MSF foi primeiro proposto por Steinberg e Roache (1985), mas o termo "solução fabricada" deve-se a Oberkampf e Blottner (1998).

Segundo Roy e Sinclair (2009), devido à existência de soluções exatas somente para as equações mais simples ou versões simplificadas de equações acopladas e não lineares, a principal dificuldade em estimar o erro de discretização é encontrar uma maneira de estimar a solução exata para EDP's e assim obter maior confiabilidade em sua análise.

Nesse sentido, o MSF tem sido utilizado como excelente ferramenta na verificação de código em CFD (ROACHE, 1998; ROY et al., 2002; ROY, 2005) e é amplamente recomendado pela ASME (2009).

Uma das contribuições do MSF apresentada pela ASME (2009) está relacionada à comparação das ordens de acurácia observada e teórica. Esta aponta algumas das possíveis questões relacionadas a fontes de erro causadas pela discrepância entre uma e outra.

O procedimento para sua utilização inicia-se selecionando uma solução analítica *a priori* e então obtém-se um termo fonte para equilibrar a equação governante (KNUPP e SALARI, 2003). Através da análise do erro de discretização verifica-se a concordância das ordens de acurácia teórica e da solução, conferindo assim um elevado grau de confiança referente a erros na codificação.

Uma extensa discussão sobre MSF para verificação do código pode ser encontrada no trabalho de Knupp e Salari (2003), e inclui os detalhes do método, bem como a aplicação em uma variedade de EDP's.

O MSF foi examinado por Roy et al. (2004) em uma série de casos incluindo as equações de Euler e as equações de Navier-Stokes (ambas as equações em regime subsônico e supersônico 2D), entre outros. Estes demonstraram que a ordem formal de acurácia foi alcançada, e que o código utilizado foi verificado, proporcionando, assim, a confiança de que não há erros na discretização espacial para malhas uniformes. Roy et al. (2004) também relatam que em um dos casos dois erros de lógica resultaram em um comportamento de primeira ordem na análise do erro de discretização espacial e que foi facilmente encontrado devido a aplicação do MSF. Dentre as opções de verificação não foram verificadas a acurácia temporal pelo fato das soluções escolhidas não serem funções do tempo.

Roy (2005) relata que o MSF é uma abordagem geral para a verificação de código e que fornece um procedimento para a geração de soluções exatas para um conjunto de equações governantes modificadas. A solução gerada exata (ou solução fabricada) pode então ser combinada com a verificação da ordem de acurácia, o que resulta em um processo altamente eficiente para encontrar erros de codificação.

Blancas e Celik (2006) avaliam o desempenho da combinação entre métodos de extrapolação e métodos utilizados na estimativa da incerteza numérica usando o MSF e concluem que o MSF pode ser uma técnica muito útil para estimar a incerteza numérica.

O MSF é aplicado por Eça e Hoekstra (2009) no estudo da estimativa da incerteza numérica baseada no refinamento de malhas. Relações relevantes entre os erros de iteração e de discretização são apresentadas.

A análise da ordem de acurácia é importante para estimar o erro de discretização ou incerteza, independentemente do método utilizado. A confiabilidade da estimativa depende da solução estar na faixa de convergência assintótica, a qual é extremamente difícil de conseguir em simulações numéricas complexas (ROY e OBERKAMPF, 2011). Com essa ideia em mente, a seção a seguir apresenta alguns estudos referentes à análise da ordem de acurácia da solução.

2.3 ANÁLISES DE ORDEM DE ACURÁCIA

Através de expansão em série de Taylor, a formulação generalizada de qualquer esquema baseado em diferenças finitas, juntamente com o seu erro de truncamento, traz inúmeras contribuições a respeito da ordem de acurácia.

Nas estimativas de erro/incerteza numéricas que são baseadas no método de extrapolação de Richardson, o erro é expandido em uma série de potências e usa de prática comum focar apenas no primeiro termo da série, assumindo que as soluções estão na faixa da ordem assintótica indicada. É com base nessa ordem que se verifica a ordem de acurácia da solução.

Stetter (1965) discute sobre o comportamento assintótico do erro de discretização por meio de ER de forma detalhada e apresenta várias aplicações e seus resultados. O seu objetivo principal era desenvolver uma base rigorosa para a aplicação de ER.

Skeel (1986) apresenta uma comparação de diversas técnicas propostas na literatura para a estimativa do erro de discretização com interesse específico, segundo o autor, naqueles que são assintoticamente corretos. Dentre eles, estão o MCA e a ER.

Kelly et al. (1988) propõem um método o qual estima a magnitude de todos os termos da série de Taylor truncada e a influência deste erro na técnica de diferenças finitas. A técnica descrita define um limite superior para o efeito do erro de truncamento em soluções de diferenças finitas para problemas elípticos. O método é indicado como um pós-processamento a ser usado para avaliar a qualidade da solução.

Como já definido, na ausência de outras fontes de erro, o erro de truncamento passa a ser denominado erro de discretização, que é a diferença entre a solução analítica exata e a solução numérica das equações discretizadas (MARCHI e SILVA,1999; MARCHI, 2001; FERZIGER e PERIC, 2002).

Tendo em vista que para se conhecer a ordem assintótica é necessário conhecer também a solução analítica do problema, nos casos práticos, a ordem assintótica é verificada através da ordem aparente (p_U) definida como a inclinação local da curva de incerteza da solução numérica versus o tamanho h dos elementos da malha em um gráfico em escala bi-logarítmica. Seu cálculo permite verificar *a posteriori* se à medida que a malha é refinada, a ordem de incerteza das soluções numéricas tende à ordem assintótica dos erros de truncamento obtido *a priori* com a aplicação da técnica numérica e a expansão em série de Taylor (MARCHI, 2001).

Um estudo detalhado nesse sentido é apresentado por Roy (2005). Em seu trabalho o foco principal está sobre os estimadores de erro baseados em extrapolação, mais especificamente na ER, pois afirma que esta abordagem é mais geral para estimativas de erro, e que são igualmente aplicáveis a diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos.

Celik e Zhang (1995) analisam a solução de um problema de escoamento turbulento, obtida com a aplicação de uma técnica híbrida, utilizando a ER e verificam que ER dá bons resultados no cálculo da ordem aparente do procedimento numérico usado.

Leonard (1995) apresenta um estudo comparativo entre as ordens de acurácia definidas pela aplicação dos métodos de diferenças finitas e volumes finitos na solução da equação de advecção-difusão em estado permanente por meio do método QUICK que é apresentada em detalhes.

Estudos sobre métodos que proporcionam a verificação da incerteza numérica mostram que os métodos mais confiáveis para avaliar os erros de convergência de malha na

solução de EDP's de problemas complexos são métodos de estimativas *a posteriori* baseados na ER (FREITAS, 2002; ROY, 2003). Roy (2005) recomenda o uso do índice de convergência de malha (em inglês, *Grid Convergence Index* – GCI) proposto por Roache (1994).

Em Richards (1997), a ER é aplicada na solução do problema em cada nível de tempo para problemas transientes, onde exemplos numéricos são apresentados com a aplicação da técnica de Lax-Wendroff e Crank- Nicholson na solução de equações de advecção-difusão. Os exemplos mostram que a extrapolação pode ser uma maneira fácil e eficiente para produzir soluções numéricas acuradas. Sun e Zhang (2003) aplicam uma metodologia similar na solução da equação de advecção-difusão uni e bidimensional permanente com coeficientes variáveis e em malha uniforme.

Como foi visto, além de melhorar a ordem de acurácia da solução numérica, ER pode ser usada também para prever o comportamento de soluções em que a solução analítica não é conhecida. A utilização de ER tem como requisito mínimo a solução do problema em duas malhas com espaçamentos distintos. Esses dois resultados são usados juntamente com um conhecimento da ordem formal de acurácia do esquema numérico para produzir uma estimativa de erro nas propriedades da solução. Entretanto, conforme Roy (2003), este requisito mínimo pode ser enganoso, quanto à verificação da ordem de acurácia observada, em comparação à ordem formal da técnica aplicada na solução de problemas que envolvem discontinuidades. Sendo assim, a aplicação de ER de forma recursiva é indicada como uma alternativa para verificações mais abrangentes.

2.4 MULTIEXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON

Análises e cálculos numéricos realizados por cientistas e engenheiros com o intuito de prever resultados acurados implicam a utilização de métodos de extrapolação. Extrapolação é uma técnica extremamente poderosa aplicada para aumentar a velocidade na convergência e no estudo da acurácia numérica em várias abordagens em computação científica.

Na construção de processos de extrapolação, Brezinski e Matos (1996) destacam o papel desempenhado pelas estimativas de erro. É mostrado que essa abordagem leva a um

desenvolvimento unificado de muitos algoritmos de extrapolação e dispositivos relacionados a resultados gerais sobre o seu entendimento e que abre o caminho para muitos novos algoritmos. Nesse enfoque a aceleração de convergência e propriedades também são estudadas.

No famoso trabalho de Richardson (1910) em que o termo "computador" ainda significava um ser humano, ele sugere uma técnica de extrapolação simples (ER) para melhorar a ordem de acurácia da solução numérica e que futuramente seria reconhecida como útil no estudo do movimento de fluidos complexos (HUNT, 1998).

Richardson (1910) observa que a discretização uniforme do contínuo implica na expansão do erro de discretização em uma série de potências em função de h . Com a repetição sucessiva da discretização desenvolveu uma técnica que permite eliminar os termos de ordem inferior da expansão, construindo, assim, um esquema de ordem de acurácia superior (RICHARDSON e GAUNT, 1927).

O procedimento de multiextrapolações de Richardson (MER) foi conjecturado por Richardson (1910) e posteriormente analisado por Richardson e Gaunt, (1927), Joyce (1971), Ström (1973), Christiansen e Petersen (1989) e Marchi e Germer (2009), com o objetivo de reduzir o erro de discretização de soluções numéricas.

Segundo Christiansen e Petersen (1989), mesmo quando as ordens de convergência são conhecidas, é sempre prudente, e/ou necessário, em alguns casos, estimar as ordens de convergência pela expansão da série de Taylor antes de executar a extrapolação. Com essa ideia em mente, as ordens são corretamente estimadas pela aplicação sucessiva de ER e conseqüentemente útil no sentido de revelar a natureza da convergência.

Rahul e Bhattacharyya (2006) utilizam MER para avaliar a ordem de acurácia de soluções resultantes da aplicação da aproximação por diferenças finitas unilaterais e atendendo condições de contorno envolvendo o cálculo de derivadas. A aproximação é efetuada com a aplicação de MER, na resolução numérica de um problema de condução de calor em domínio bidimensional, a qual apresentou o resultado esperado.

Resultados com alta ordem de acurácia têm sido obtidos com a aplicação de MER já há algum tempo na solução de problemas clássicos em CFD como o escoamento permanente bidimensional incompressível em uma cavidade com tampa móvel (BENJAMIN e DENNY,

1979; SCHREIBER e KELLER, 1983; ERTURK et al., 2005) e mostrando sua eficiência em aplicações de combustão (DEUFLHARD et al., 1987).

Marchi e Germer (2009) testaram MER para reduzir o erro de discretização na solução da equação de advecção-difusão 1D. Neste trabalho, MER foi empregado em três variáveis de interesse cujas soluções numéricas foram obtidas com dez esquemas advectivo-difusivos. Foi verificado que MER é extremamente eficiente na redução do erro de discretização para todas as variáveis e esquemas testados, mas que em geral, o esquema CDS-2 é o que tem o melhor desempenho com MER, isto é, para uma mesma malha ele tem o menor erro.

Uma base teórica de MER é apresentada por Marchi et al. (2013) com aplicação na solução da equação de Laplace 2D para estimar e reduzir o erro de discretização. Neste trabalho, verificou-se que MER é extremamente eficiente em reduzir o erro de discretização de variáveis primárias ou secundárias, não importando o número de aproximações numéricas usadas. Mostram que o estimador de Richardson (ver seção 3.6.2.1) é acurado para prever o erro de discretização de soluções numéricas obtidas com MER. Expõe, também, que maior redução do erro de discretização com MER é obtido ao se usar: maior precisão nos cálculos, maior número de extrapolações, maior número de malhas e ordens corretas do erro. Para se obter um dado valor de erro, o tempo de CPU e a memória RAM necessários para a solução com MER são muito menores do que sem MER. Quando o erro de arredondamento é maior do que o erro de discretização MER perde o seu efeito de reduzir o erro e o estimador de Richardson não funciona.

A base teórica de MER (MARCHI et al., 2013) e os trabalhos de Benjamin e Denny (1979), Schreiber e Keller (1983), Erturk et al. (2005), Marchi et al. (2008), Marchi e Germer (2009) permitem dizer que os resultados do presente trabalho também se aplicam, entre outras, às equações de advecção-difusão, Poisson e Burgers em duas e três dimensões, bem como em problemas transientes.

2.5 RESUMO DO CAPÍTULO 2

Na Tab. 2.1 é apresentado um resumo dos principais trabalhos que nortearam o desenvolvimento desta tese. Cada método e/ ou metodologia utilizados, e que foi investigado nestas pesquisas serão apresentados no próximo capítulo.

Tabela 2.1 Resumo de trabalhos correlatos ao tema desta tese.

| PESQUISADORES | TEMA |
|---|---|
| AIAA (1998) | <i>American Institute of Aeronautics and Astronautics</i> |
| ASME (2009) | <i>American Society of Mechanical Engineers</i> |
| Roache (1998) Roy (2005, 2011) Oberkampf e Trucano (1998, 2002) | Verificação e Validação. |
| Knupp e Salari (2003) Roy et al. (2002, 2004) ASME (2009) | Método das Soluções Fabricadas (MSF) |
| Khosla e Rubin (1974) Ferziger e Peric (2002) Burg e Erwin (2008) | Método da Correção Adiada (MCA) |
| Celik e Zhang (1995) Roache (1994) Roy (2003) | Esquemas híbridos |
| Richardson (1910) Richardson e Gaunt (1927) Joyce (1971) Schreiber e Keller (1983) Christiansen e Petersen (1989) Shyy et al. (2002) Marchi e Germer (2009) Marchi et al. (2013) | Extrapolação de Richardson (ER) e Multiextrapolações de Richardson (MER). |

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Em geral, os problemas de interesse em diversas áreas como na física, engenharia, meteorologia, entre outras, são não lineares e multidimensionais. As vantagens da simulação numérica na solução desses problemas se concentram, por exemplo, na redução do tempo de solução e análise de problemas. Nos estudos em escalas não realísticas, proporciona melhores informações, redução de custos operacionais e contribui na melhoria de resultados. Por outro lado, efeitos ocasionados por diversas fontes de erro podem levar a análises e contribuições contraproducentes como, por exemplo, influência dos termos difusivos e convectivos de equações governantes.

A obtenção da solução numérica para um dado problema requer a consideração cautelosa de um número de passos até se chegar à solução. A representação apropriada na forma discreta de EDP's é o primeiro passo para a solução acurada do problema. Erros de truncamento são inerentes ao processo de discretização e devem ser considerados na formulação (FERZIGER e PERIC, 2002).

Nem sempre é possível uma análise exaustiva e rigorosa do erro de discretização, principalmente para EDP's complexas. Algumas das formas de abordar este problema são por meio de métodos de discretização adequados, estudos de robustez e convergência, procedimentos de estimativa de erros formais, deduções de equações algébricas a partir de equações governantes, conjuntos de testes e de experiências anteriores. Portanto, esquemas numéricos apropriados, a determinação *a priori* e *a posteriori* do erro de discretização e das ordens verdadeiras (ver seção 3.6) desses esquemas, aceleradores de convergência e análise pós-processamento são recursos indispensáveis para a obtenção de uma solução acurada.

Nesse contexto, nas seções seguintes são discutidos aspectos teóricos fundamentais para a elucidação e desenvolvimento desta tese, ou seja, elementos sobre os modelos matemáticos a serem abordados, métodos de discretização, exposição das aproximações a serem aplicadas, aplicação do método das soluções fabricadas (MSF), métodos de solução de equações lineares, análise assintótica, verificação numérica e MER.

3.1 MODELOS MATEMÁTICOS BÁSICOS E VARIÁVEIS DE INTERESSE EM CFD

As equações de Navier-Stokes descrevem o escoamento de um fluido, estas constituem um sistema de EDP's, não lineares representando três princípios básicos da física: o princípio da conservação da massa, o princípio da conservação da quantidade de movimento e o princípio da conservação de energia. Devido à dificuldade de serem resolvidas, tanto analítica quanto numericamente, simplificações são realizadas em função das propriedades do escoamento, permitindo o emprego de métodos numéricos mais simples (FORTUNA, 2000).

Os modelos matemáticos empregados em CFD representam problemas básicos de transferência de calor e de mecânica dos fluidos. Qualquer equação governante básica tem suas propriedades vinculadas diretamente às propriedades físicas do escoamento. Em modelos de transporte a descrição do escoamento é o resultado de um balanço entre os efeitos dos fluxos advectivo, difusivos, fontes externas e internas.

As noções de processos de advecção e difusão são predominantes no desenvolvimento de métodos numéricos para CFD, e o uso recorrente dessas equações do modelo permite-nos desenvolver um quadro coerente de análise de acurácia, consistência, estabilidade e convergência (LOMAX et al., 2010).

Em contribuição a isso, as equações foco neste trabalho em particular, são equações bidimensionais de advecção-difusão, em regime permanente, Fourier (equação do calor transiente), e algumas análises pertinentes por meio da equação de Fourier 1D. Essas equações contêm muitas das características matemáticas e físicas importantes da equação de Navier-Stokes, como por exemplo, a equação do transporte e os efeitos advectivo e difusivo.

Os modelos matemáticos apresentam-se com condições de contorno e termos fonte ajustados por meio do MSF de forma a possibilitar a obtenção da solução analítica, única e conhecida para as variáveis de interesse. A solução analítica exata obtida dessa forma pode evitar confusões entre instabilidades físicas e numéricas tornando possível avaliar a acurácia e a confiabilidade dos resultados a serem estudados e obtidos com MER (SALARI e KNUPP, 2000).

Nesse quadro, as estimativas de erro de soluções numéricas são feitas para quatro tipos de variáveis de interesse, a saber: variável dependente (Λ), média da variável dependente

(Λ_m) , derivada da variável dependente (Λ^i) e média da norma (L) do erro numérico (ver Tab. 3.1). Essas variáveis são definidas e classificadas com base no trabalho de Marchi (2001).

Tabela 3.1 Definição das variáveis de interesse.

| Tipo de variável | Solução analítica (Φ) | Solução numérica (ϕ) | Tipo de variável em relação à variável independente (x, y) | Tipo de variável em relação à variável dependente |
|---------------------------------------|------------------------------|-----------------------------|--|---|
| Dependente | Λ | λ | local | primária |
| Média da variável dependente | Λ_m | λ_m | global | secundária |
| Derivada da variável dependente | Λ^i | λ_{DDS-2}^i | local | secundária |
| Média da norma l_1 do erro numérico | L | --- | global | secundária |

Fonte: Marchi (2001)

Como pode ser visto na Tab. 3.1, as variáveis de interesse neste trabalho focalizam-se tanto no âmbito local como no global e se dividem em variável primária e variável secundária. Referimo-nos à forma genérica da solução analítica exata de qualquer variável de interesse por Φ , e a solução numérica ϕ .

O primeiro tipo de variável de interesse é a própria variável dependente nos modelos matemáticos, indicada também por variável primária. Sua solução analítica exata é representada por Λ e a solução numérica por λ . Em análises pontuais pode-se definir, por exemplo, o ponto do centro do domínio.

Como em geral a solução analítica não é conhecida, e estudos sobre erros numéricos são avaliados, propõe-se obtê-la por meio do MSF. Um exemplo de grande interesse relacionado à variável primária está, por exemplo, na relevância do valor da temperatura em função de variáveis independentes, isto é, em algum determinado ponto.

O segundo tipo de variável de interesse é a média da variável dependente sobre o domínio de cálculo. Sua solução analítica exata é representada por Λ_m e a solução numérica por λ_m . Esta variável é obtida por meio de integração numérica, como a regra do retângulo ou trapézio. Neste trabalho optou-se pela regra do trapézio. Este tipo de variável está associada, por exemplo, a fluxos de massa e vazões que são calculados em função de velocidades médias em uma área do domínio de cálculo.

O terceiro tipo de variável de interesse é a derivada da variável dependente avaliada em um ou dois dos contornos do domínio. Sua solução analítica exata é representada por Λ^i e a solução numérica é obtida com o esquema λ_{DDS-2}^i . Em aplicações gerais, este tipo de variável está associado ao cálculo de fluxos de calor e tensões cisalhantes nos contornos do domínio de cálculo.

A última variável de interesse é a norma l_1 do erro numérico usada para estimar erros em resultados numéricos.

As aproximações numéricas utilizadas neste trabalho são: um ponto a montante (λ_{UDS}^i) e dois pontos a jusante (λ_{DDS-2}^i) para a aproximação da derivada de 1ª ordem, diferença central (λ_{CDS}^i) para a aproximação da derivada de 2ª ordem e λ_m com a regra do trapézio.

Neste trabalho também são estudados métodos híbridos para os esquemas numéricos. O esquema híbrido atende à ideia apresentada por Ferziger e Peric (2002) e proposta por Khosla e Rubin (1974) por meio do método de correção adiada (MCA) representada pela Eq. (2.1) na forma

$$F_e = F_e^{UDS-1} + \beta(F_e^{CDS-2} - F_e^{UDS-1})^{OLD}$$

Este esquema é aplicado na equação de advecção-difusão 2D. Para esta aplicação, são utilizados os esquemas UDS-1, nos termos de advecção, e CDS-2, nos termos de difusão. O termo entre parênteses é calculado usando valores da iteração imediatamente anterior e indicado pelo sobrescrito ‘*OLD*’. Para produzir a mistura entre os dois esquemas puros multiplica-se o termo entre parênteses por um fator (β) pertencente ao intervalo entre 0 e 1. Ou seja, para $\beta = 1$ obtém-se a técnica CDS e para $\beta = 0$ a técnica UDS.

² Aproximação numérica por diferenças finitas denominada dois pontos a jusante.

Na equação de Fourier 2D é aplicado o método de Crank-Nicolson, por meio do esquema θ .

3.2 MÉTODO DE DISCRETIZAÇÃO

As equações que expressam o modelo matemático normalmente são definidas em um espaço de dimensão infinita. A fim de admitir uma solução numérica, o problema é transformado em um espaço de dimensão finita por algum processo de discretização (DEMMELE et al., 2005). Os métodos de discretização tradicionalmente aplicados para a solução numérica de equações diferenciais em CFD são os Métodos de Diferenças Finitas (MDF), de Volumes Finitos (MVF) e de Elementos Finitos (MEF), entre outros (MALISKA, 2004; MARCHI, 2001).

Desenvolvido a partir da série de Taylor, o MDF descreve o domínio do problema por meio de valores pontuais ou em pontos nodais obtidos a partir de qualquer tipo de malha. Este consiste em substituir as derivadas da equação diferencial por uma aproximação de quociente de diferenças adequada. O quociente de diferenças e o parâmetro h (distância entre dois pontos da malha) são escolhidos de forma a considerar-se determinada ordem de erro de truncamento (AMES, 1977; SMITH, 1985; STRIKWERDA, 2004; GROSSMANN et al., 2007; QUARTERONI et al., 2007; MOIN, 2010; CHENEY e KINCAID, 2008). Um grande número de métodos ou esquemas desenvolvidos encontra-se em Hoffmann e Chiang (2000), Maliska (2004), Marchi (2001) e Smith (1985).

O princípio do MEF consiste em definir uma partição do domínio de forma a determinar subdomínios, ou elementos finitos, apropriados às condições do problema. Para cada elemento, dependendo da natureza do problema, são definidas funções algébricas interpoladoras simples definidas por partes e de forma a serem nulas fora do elemento considerado. Essa forma específica de construir funções aproximadas determina uma das características de grande importância do MEF, e como um resultado de tais construções, o problema pode ser formulado de uma só vez, e a formulação final será obtida pela soma das contribuições fornecidas por cada elemento. Ao substituir as funções aproximadas nas equações de transporte, obtêm-se um resíduo numérico o qual pode ser considerado para medir o erro da aproximação. Cada função aproximada é multiplicada por um conjunto de

funções peso e integrada no domínio de cálculo. Finalmente, obtém-se um sistema de equações algébricas para determinar os coeficientes de cada uma das aproximações funcionais (ODEN, 1973; ODEN e REDDY, 1976; VARGAS, 2002a; VARGAS, 2002b).

Em CFD encontram-se expressões matemáticas cujas equações diferenciais expressam certo princípio de conservação. O método de volumes finitos (MVF) é um método numérico que desempenha um balanço de conservação da propriedade para cada volume de controle com o objetivo de corresponder à física envolvida no problema e assim obter as correspondentes equações aproximadas com base em uma equação diferencial. Essa 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. Realizando a integração para todos os volumes elementares, obtém-se um sistema de equações algébricas. Esse método garante a conservação discreta local e global, permitindo tratar problemas de geometrias complexas e a utilização de técnicas de adaptação de malhas (MALISKA, 2004; PATANKAR, 1980; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Para abordar os problemas propostos nesta tese, a aproximação por esquemas de diferenças finitas é aplicada, mas todas as aproximações descritas acima permitem investigar conceitos-chave, tais como a ordem de acurácia de uma aproximação para a avaliação da ordem do erro de discretização com MER.

Como já mencionado antes, a essência dos métodos de discretização é tornar “finito” o problema, ou seja, reduzir o problema contínuo a um sistema equivalente, discreto, de forma conveniente para a solução computacional e, assim, viabilizar sua solução através da simulação numérica (AMES, 1977). A aproximação básica envolve a substituição do domínio contínuo em uma malha de pontos discretos dentro desse domínio. Em tais processos de discretização deve-se selecionar uma ordem de aproximação para as derivadas. Também se apresenta uma malha computacional de algum tipo. A representação esquemática desta ideia é apresentada na Fig. 3.1 para os casos 1D e 2D.

Na literatura de CFD de volumes finitos é comum utilizar os quatro pontos cardeais N (norte), S (sul), E (leste) e W (oeste) como identificadores da posição de pontos discretos em relação a um ponto central P (FORTUNA, 2000), como indicado na Fig. 3.1. Isso facilita a visualização dos pontos nos esquemas desenvolvidos e, deste modo serão adotados nesta tese com a aplicação do MDF.

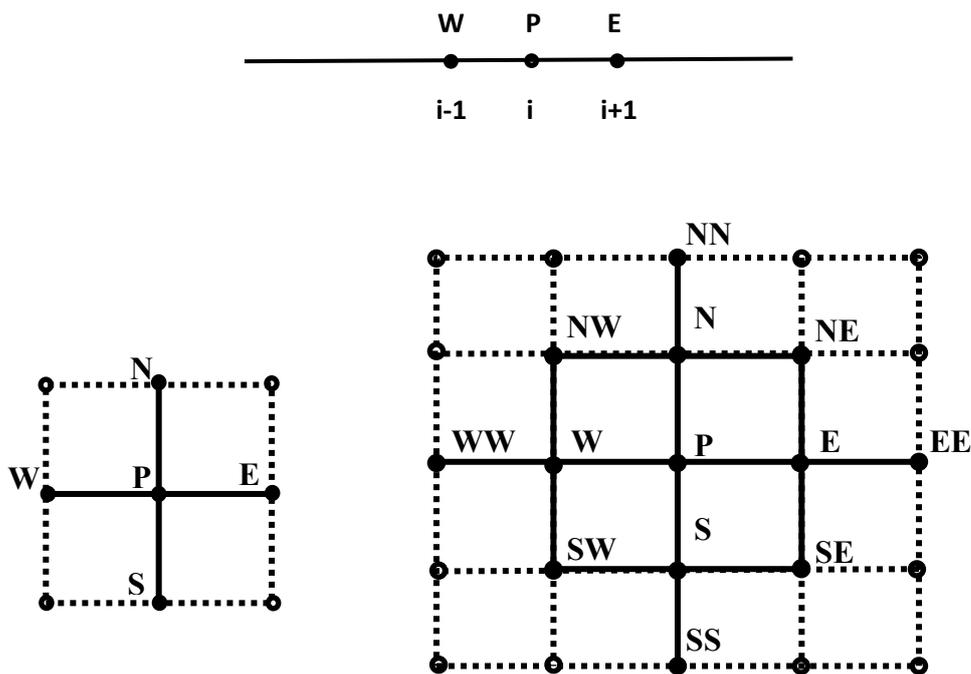


Figura 3.1 Malha regular de pontos para a solução numérica por meio de MDF (caso 1D acima e casos 2D abaixo)

Neste trabalho, o parâmetro h está relacionado à subdivisão de um domínio contínuo em N partes iguais, ou elementos de mesmo tamanho, ou seja, os pontos obtidos com a discretização do domínio de cálculo estão igualmente espaçados e h corresponde ao espaçamento entre esses pontos (ou nós). É através deles que se deseja conhecer a variável dependente. A partir daí desenvolvem-se os esquemas conforme a solução pretendida.

É desejável que o modelo discreto convirja para o modelo contínuo, quando o espaçamento (h) entre nós se aproxima de zero ou a ordem de aproximação se aproxime do valor esperado. Deste modo, a acurácia pode ser controlada utilizando os parâmetros do método numérico (DEMMEL et al., 2005).

Para resolver o modelo numérico, obtido a partir de um método de discretização aplicado, deve ser fornecida uma especificação do método de solução a ser utilizado, a saber, métodos de solução de sistemas de equações, os quais podem ser diretos ou iterativos. Neste trabalho, os métodos utilizados na solução dos modelos propostos são apresentados na seção 3.4.

3.3 MÉTODO DAS SOLUÇÕES FABRICADAS

O termo “método das soluções fabricadas” foi definido por Oberkampf e Blottner (1998), mas a primeira proposta do uso do MSF para verificação do código foi apresentada por Steinberg e Roache (1985) (*apud* ROY et al., 2004) utilizando o software de manipulação simbólica MAXIMA®.

O MSF pode ser usado para verificar esquemas numéricos na solução de problemas em CFD (OBERKAMPF e BLOTTNER, 1998). Um exemplo disso se deve ao trabalho de Shih et al. (1989), que adotaram essa abordagem na solução das equações de Navier-Stokes bidimensionais, apresentando ótimo resultado para o problema da cavidade com tampa móvel para vários números de Reynolds. Oberkampf e Blottner (1998) consideram esse método altamente recomendável para a verificação de códigos com a solução exata nessas aplicações.

A verificação e a análise de erros em problemas testes só são seguras se aplicadas em modelos matemáticos com solução analítica conhecida, pois, somente neste caso é possível mensurar qual é o efeito de situações adversas na solução de um problema real bem como no erro de discretização, condição essencial para o estudo em questão. Esses procedimentos, aplicados dessa forma, fornecem subsídios para os problemas que não possuem solução analítica.

Assim, todos os modelos matemáticos aqui resolvidos possuem solução analítica, condições de contorno e termos fonte definidos com base no MSF. Tanto soluções em regime permanente quanto transiente podem ser tratadas com esse método (SALARI e KNUPP, 2000; ROY et al., 2004).

A ideia do MSF se baseia simplesmente em produzir uma solução exata sem estar interessado na realidade física do problema (ROY, 2005). Uma função analítica é definida e inserida no lugar da variável dependente na EDP, e todas as derivadas são calculadas analiticamente, manualmente ou por meio de algum programa de computação simbólica, como o Maple®, utilizado neste trabalho. A equação é criada de tal maneira que todos os termos restantes que não satisfazem a EDP são incorporados em um termo fonte. Este termo é, então, simplesmente acrescentado à EDP de forma a satisfazer exatamente à nova EDP (SALARI e KNUPP, 2000).

Segundo Salari e Knupp (2000), esse procedimento também pode ser aplicado a sistemas de equações, com o termo fonte gerado separadamente para cada equação. Este método pode ser usado tanto para evitar o crescimento exponencial da solução com o tempo, quanto para evitar confusões entre instabilidades físicas e numéricas.

3.4 MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES LINEARES

Na etapa de discretização do modelo matemático, o MDF usa expressões algébricas baseadas na série de Taylor para aproximar cada termo da equação diferencial. Esses termos envolvem derivadas de primeira ou segunda ordem e podem ser aproximados por diferentes formulações desenvolvidas a partir da série de Taylor. Estas formulações numéricas são também conhecidas por esquemas de interpolação numérica.

O processo de discretização das equações diferenciais do modelo matemático, obtida com a aproximação numérica dos termos das equações do modelo, junto com suas condições de contorno e inicial em cada nó da malha, resulta em um conjunto de equações discretizadas denominado sistema de equações algébricas, definido da seguinte forma:

$$a_P \lambda_P = \sum_l a_l \lambda_l + b \quad (3.1)$$

onde P corresponde ao nó para o qual a equação diferencial parcial é aproximada, o índice l corresponde aos nós vizinhos envolvidos nas aproximações em diferenças finitas e b é o termo que engloba todas as contribuições que não foram incluídas nos coeficientes.

Este sistema pode ser escrito na notação matricial:

$$A \cdot \lambda = B \quad (3.2)$$

onde A é uma matriz de coeficientes esparsa (utilizando-se a estrutura dada pela Fig. 3.1, com ordenação lexicográfica, tal matriz é tridiagonal no caso 1D e pentadiagonal no caso 2D), λ é um vetor que contém os valores da variável e B é um vetor que contém os termos independentes.

Para a solução de sistemas de equações lineares os métodos numéricos usualmente utilizados podem ser divididos em diretos e iterativos (BURDEN e FAIRES, 2003).

Dentre os métodos mais comuns utilizados em CFD, e que serão utilizados neste trabalho, estão o TDMA³ (método direto) (FERZIGER e PERIC, 2002; MALISKA, 2004; PATANKAR, 1980) que consiste em uma forma simplificada do Método de Eliminação de Gauss e é aplicado na solução de sistemas de equações que resultam da discretização do problema 1D (FORTUNA, 2000), e o método de Gauss-Seidel (método iterativo) utilizado na solução do problema 2D (BURDEN e FAIRES, 2003).

O sistema dado pela Eq. (3.2) pode ser resolvido por um método direto convencional (por exemplo, Eliminação de Gauss) caso a matriz A seja matriz de banda, mas são ineficientes, pois possui a desvantagem no preenchimento dessa matriz, não garantindo assim a conservação de sua estrutura.

Para sistemas com matrizes de coeficientes do tipo banda é possível adaptar os métodos diretos tradicionais, de modo que os valores nulos não sejam manipulados desnecessariamente como é o caso do TDMA.

Sabe-se que os métodos diretos, apesar de resolver sistemas de equações lineares algébricas em um número fixo de passos, apresentam problemas sérios com erros de arredondamento. Uma alternativa é o emprego de métodos iterativos que além de apresentarem menos erros de arredondamento têm a vantagem de não alterar a estrutura da matriz dos coeficientes (RUGGIERO e LOPES, 1997).

A ideia básica dos métodos iterativos consiste em construir uma sequência $\lambda^{(k)}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) de vetores a partir de uma estimativa inicial $\lambda^{(0)}$ que converge para a solução exata Λ de uma equação matricial dada pela Eq. (3.2), desde que atenda certas condições de convergência.

A partir do vetor $\lambda^{(0)}$, o método iterativo gera uma sequência de vetores corrigidos, e se essa sequência satisfaz

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda^{(k)} = \Lambda \quad (3.3)$$

³ *Tridiagonal Matrix Algorithm*, em inglês

então o método iterativo converge para a solução do sistema de equações, caso ela exista. Essa sequência de vetores fica definida iterativamente por

$$\boldsymbol{\lambda}^{(k+1)} = F\boldsymbol{\lambda}^{(k)} + \mathbf{G} \quad (3.4)$$

onde $k = 0, 1, 2, \dots$ e a matriz F é a matriz de iteração do método e \mathbf{G} é um vetor coluna. O processo iterativo termina quando um critério de parada é satisfeito. Segundo Fortuna (2000), métodos iterativos distintos resultam de diferentes maneiras de escrever a Eq. (3.4) advinda da Eq. (3.2).

Associado ao método Gauss-Seidel, será visto ainda um acelerador de convergência de tal método, denominado de método *multigrid* (seção seguinte). No âmbito das estimativas do erro de discretização, foco deste trabalho, o método *multigrid* pode contribuir para tal estimativa para comparação deste tipo de erro entre malhas distintas, pois melhora a taxa de convergência dos métodos iterativos proporcionando assim a obtenção de soluções em malhas muito finas, essenciais para a aplicação de MER.

3.4.1 Método *Multigrid*

Os métodos *multigrid* são, por exemplo, aplicados para a solução numérica de equações diferenciais baseados na discretização do domínio de cálculo pela subsequente aproximação das derivadas com a técnica de diferenças finitas (KINCAID e CHENEY, 2008).

A malha pode ser classificada em uniforme ou não-uniforme e estruturada ou não-estruturada, conforme distribuição dos pontos discretos no domínio. Caso a malha seja estruturada, o método *multigrid* é chamado *multigrid* geométrico (WESSELING e OOSTERLEE, 2001), se a malha é não estruturada, o método *multigrid* recomendado é o *multigrid* algébrico (STÜBEN, 2001).

A ideia básica é trabalhar com um conjunto de malhas e, intercalar as aplicações entre iterações em cada nível de malha e soluções aproximadas da Eq. (3.2) em malhas mais grossas. São usados operadores para transferir informações (resíduo e/ ou solução) 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) (BRIGGS et al., 2000).

No método *multigrid* geométrico (mais recomendado para malhas estruturadas, e que será utilizado neste trabalho), existem diversos tipos de ciclos (formas de percorrer o conjunto de malhas), como por exemplo, o ciclo V (BRIGGS et al., 2000) e o ciclo W (CHISHOLM, 1997), entre outros. Na Fig. 3.2 pode-se ter uma ideia de como funcionam os operadores de restrição, prolongação e de como é realizada a aplicação dos ciclos para a transferência de informações.

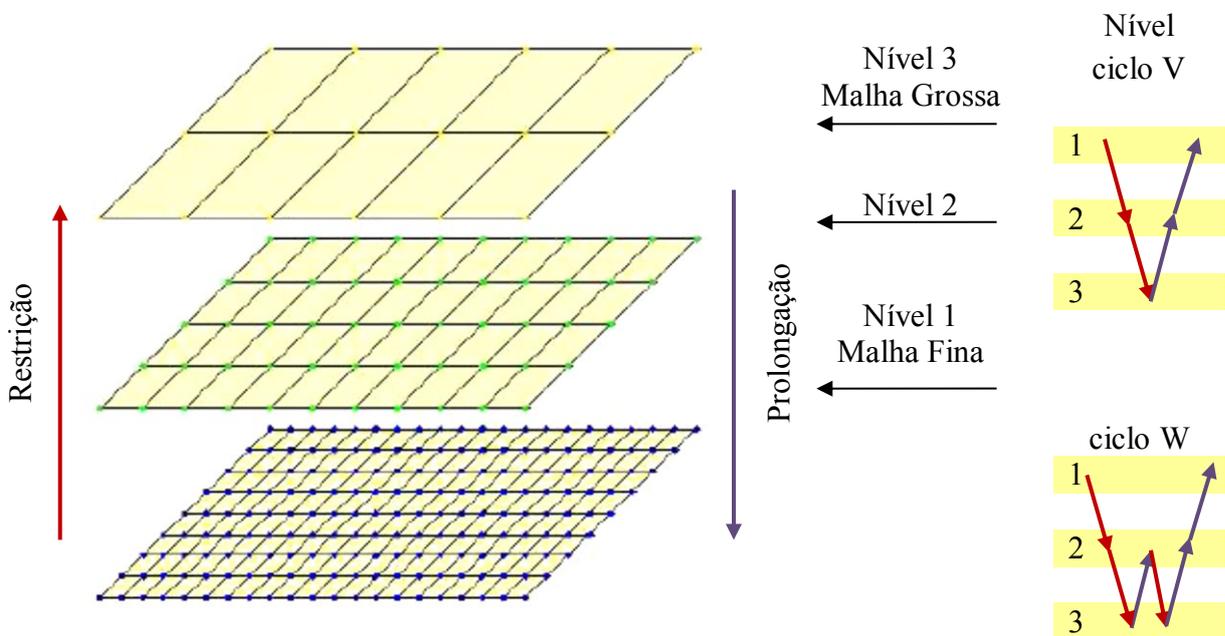


Figura 3.2 Multigrid geométrico

Fonte: adaptada de <http://www.ini-graz.at/imawww/borzi/index.html>

Com o método *multigrid* podem ser usados alguns tipos de esquemas que se caracterizam por suas diferentes informações e a forma como as mesmas são transportadas (TROTTEBERG et al., 2001; WESSELING, 1992): o esquema de correção (*Correction Scheme*, CS) e o esquema de aproximação completa (*Full Approximation Scheme*, FAS). No esquema CS, a Eq. (3.2) é resolvida apenas na malha mais fina; nas malhas mais grossas, resolve-se a equação residual. Já no caso do esquema FAS, a Eq. (3.2) é resolvida em todas as malhas. O esquema CS é geralmente recomendado em problemas lineares e o esquema FAS, em problemas não lineares (BRIGGS et al., 2000). Outro esquema usa soluções nas malhas

grossas para gerar estimativas iniciais melhoradas para as malhas mais finas. O esquema que usa esta estratégia chama-se *multigrid* completo (*Full Multigrid*, FMG).

Detalhes da teoria e aplicações sobre o esquema de correção CS, o esquema de aproximação completa FAS, o esquema FMG, operadores, algoritmos, complexidade, propriedades variacionais, análise espectral, aplicações, etc, podem ser encontradas nos livros de Trottenberg et al. (2001) e Wesseling (1992).

Conforme Trottenberg et al. (2001), os métodos *multigrid* são geralmente considerados os métodos numéricos mais rápidos para acelerar a resolução de equações diferenciais parciais.

A Eq. (3.2) pode ser resolvida com o método direto TDMA ou com o método de Gauss-Seidel, para obterem-se informações sobre o desempenho do método no tipo de problema, porém o método TDMA é um método direto o qual não é utilizado como suavizador no método *multigrid*. Além disso, ele é um método específico para sistemas banda tridiagonal, ou seja, problemas 1D. O método Gauss-Seidel é um método iterativo que pode ser usado tanto para matriz banda (tridiagonal que é problema 1D, como em pentadiagonal que é problema 2D) como em sistemas densos. Como o método Gauss-Seidel é iterativo, ele pode ser usado como suavizador no *multigrid*. No caso deste trabalho, utiliza-se o método *multigrid* em que os sistemas de equações $Ax = b$, onde b representa o termo fonte (resíduo na restrição e correção na prolongação), são resolvidos a cada nível de malha com o método de Gauss-Seidel.

O princípio de funcionamento do método *multigrid* está fortemente relacionado ao comportamento de convergência dos métodos iterativos estacionários como os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel. Esses métodos apresentam 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, geralmente, 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).

Conforme Pereira e Nabeta (2007), como as componentes suaves do erro aparecem mais oscilatórias em um domínio com discretização com malhas mais grossas, essa característica de suavização dos métodos iterativos estacionários indica a transferência do

problema para outro nível de resolução, no qual a discretização do domínio da EDP possui um menor número de pontos. A repetição recursiva desse processo é que dá origem ao método *multigrid*.

A taxa de convergência ideal (teórica) do método *multigrid* é independente do tamanho da malha, isto é, independe do número de pontos da malha (FERZIGER e PERIC; 1999; ROACHE 1998). Para obter um bom desempenho do *multigrid*, diversos níveis de malha devem ser usados (TANNEHILL et al., 1997). Pinto e Marchi (2007) e Santiago e Marchi (2008) recomendam usar todos os níveis possíveis.

3.5 ANÁLISE ASSINTÓTICA

As estimativas do erro de discretização, gerado por erros de truncamento, podem ser divididas em dois tipos básicos: estimativas *a priori* ou *a posteriori* da obtenção da solução numérica (MARCHI, 2001).

O primeiro passo para estimar o erro produzido por um método numérico é de natureza preditiva. No contexto da verificação da solução, as estimativas de erro *a priori* servem como orientação, uma vez que elas não podem dar qualquer avaliação numérica dos erros.

A acurácia de uma aproximação por métodos numéricos em geral depende de certos aspectos como consistência, convergência e estabilidade. Um dos requisitos no cálculo de uma estimativa de erro *a priori* é a consistência do método de discretização. Uma das limitações para obter consistência na discretização é a suavidade da solução da EDP. Singularidades na discretização limitam a aplicação de estimativas de erro de truncamento (LINSS e KOPTEVA, 2009).

A estabilidade é condição adicional para a convergência. Em condições limitadas, a convergência para a solução acurada depende de sua estabilidade. Assim, ser capaz de evidenciar que a discretização de um problema mais complexo é estável irá conduzir a propriedades de convergência que permitem a utilização de uma estimativa de erro *a priori* para o problema.

Estimativas de erro *a priori* só têm significado teórico. Eles mostram qual é o comportamento do método de aproximação em princípio. No entanto, na prática, o interesse está em o quão acurada é a solução numérica. Sendo assim, é possível atrelar uma informação *a priori* com os dados adquiridos a partir de resultados numéricos. Isso leva à noção de estimativa de erro *a posteriori*.

Neste trabalho, as estimativas de erro *a priori* são usadas para estimar a ordem do erro de discretização. Isso é feito estimando-se o erro de truncamento do modelo numérico do problema através da série de Taylor, e admitindo-se solução consistente.

Considera-se a representação do erro de truncamento, com os primeiros três termos da série em função de h , obtido do resíduo que resulta quando se substitui a solução analítica exata da variável dependente (Λ) (MARCHI, 2001; FERZIGER e PERIC, 2002) na forma

$$E_t = c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \dots \quad \text{para } h \rightarrow 0 \quad (3.5)$$

onde o menor expoente de h (p_1) na expressão de E_t na Eq. (3.5), será definido por p_L e chamamos ordem assintótica ou de acurácia de E_t . A ordem assintótica (p_L) e os expoentes dos termos não nulos na equação do erro de truncamento (p_2, p_3, \dots) são denominadas ordens verdadeiras (p_V). O conjunto representado por p_V e seus elementos são números reais e seguem a relação: $1 \leq p_1 < p_2 < p_3 < \dots$. Todas as ordens verdadeiras são valores conhecidos. Os coeficientes reais c_1, c_2, c_3, \dots independem de h e podem ser positivos ou negativos e podem ser função da variável dependente e de suas derivadas. Tanto os coeficientes c_i como as ordens verdadeiras dependem das aproximações numéricas aplicadas.

A estimativa de erro *a priori* se dá por meio da Eq. (3.5), pois assim é possível avaliar, antes da obtenção de qualquer solução numérica, qual é o efeito do tipo de aproximação numérica usada, ou seja, do valor de p_L . Também é possível avaliar qual é o efeito da redução do parâmetro h dos elementos da malha sobre o erro de discretização da solução numérica. Segundo Marchi (2001), as estimativas de erro *a priori* proporcionam uma análise qualitativa do erro de discretização.

Os valores de p_V , como visto acima, podem ser obtidos *a priori* com um procedimento que emprega a série de Taylor (TANNEHILL et al., 1997) e podem ser confirmados *a posteriori* com o conceito de ordem efetiva (p_E) (MARCHI, 2001) do erro de discretização, representada na Eq. (3.6).

$$p_E = \frac{\log \left[\frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)} \right]}{\log(r)} \quad (3.6)$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 são as soluções numéricas obtidas com as malhas fina e grossa, respectivamente. O parâmetro (r), na Eq. (3.6), é a razão de refino entre as malhas, e é dada por:

$$r = \frac{h_1}{h_2} \quad (3.7)$$

onde h_1 é o tamanho dos elementos da malha mais grossa e h_2 é o tamanho dos elementos da malha mais fina. A ordem efetiva, (p_E) é a inclinação local da curva do erro de discretização da solução numérica (ϕ) *versus* o tamanho h dos elementos da malha em um gráfico logarítmico (MARCHI, 2001).

Como já foi mencionado, o cálculo por meio da Eq. (3.6) permite verificar na prática, isto é, *a posteriori*, se a ordem do erro de discretização das soluções numéricas tende à ordem assintótica dos erros de truncamento obtido *a priori*, à medida que h é reduzido.

Quando a solução analítica é inexistente ou de difícil obtenção, estima-se o seu valor. Com essa estimativa conseqüentemente o erro numérico é estimado e é chamado de incerteza (U) da solução numérica. A incerteza de uma solução numérica é calculada com os chamados estimadores de erros e serão apresentados na seção 3.6.2. Com isso, pode-se usar o conceito de ordem aparente ou observada (p_U) (DE VAHL DAVIS, 1983) do erro de discretização. Conceitua-se ordem aparente, (p_U), 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; MARCHI e SILVA, 2005).

A ordem aparente, (p_U), deduzida a partir do conceito de incerteza, é dada por:

$$p_U = \frac{\log \left[\frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2} \right]}{\log(r)} \quad (3.8)$$

Com o uso da Eq. (3.8) verifica-se *a posteriori*, se à medida que h é reduzido, a ordem da incerteza das soluções numéricas tende à ordem assintótica dos erros de truncamento, obtido *a priori*.

As estimativas de erro *a posteriori* avaliam o erro de discretização presente na solução aproximada de uma EDP com as Eqs. (3.6) e (3.8) comparadas às informações *a priori* obtidas por meio da Eq. (3.5) e com soluções numéricas obtidas em uma ou mais malhas diferentes.

Entre os estimadores de erro de discretização, isto é, estimadores *a posteriori*, disponíveis na literatura estão: os estimadores de Richardson, delta, GCI, bicoeficiente, tricoeficiente e multicoeficiente (ver seção 3.6.2). Com estes estimadores é possível avaliar quantitativamente o erro de discretização (ROACHE, 1998; MARCHI, 2001).

No presente trabalho, são realizadas estimativas de erro *a priori* descritas acima e estimativas de erro *a posteriori* feitas com base em soluções numéricas obtidas em várias malhas e a aplicação de MER.

3.6 VERIFICAÇÃO NUMÉRICA

Como já mencionado na introdução deste trabalho, o objetivo final de interesse científico é a validação de um modelo e para isso a verificação se faz necessária. A verificação é o processo usado para quantificar o erro numérico, e o seu objetivo é estabelecer a acurácia numérica, independente do fenômeno físico, isto é, o processo de verificação mede o quão bem o modelo matemático é resolvido numericamente (ASME, 2009; AIAA, 1998).

Uma vez que nenhum método de aproximação pode revelar a solução exata, todos estão sujeitos a erros inerentes aos próprios meios adotados. Em busca da minimização desses erros, simulações computacionais são aperfeiçoadas com o intuito de prever com acurácia e precisão o desempenho de soluções numéricas de um fenômeno físico.

Os resultados numéricos obtidos na solução de um problema envolvem tanto os erros inerentes ao modelo físico ou matemático como aqueles contraídos no decorrer do desenvolvimento do processo de solução. No primeiro caso tem-se o fato de se trabalhar com aproximações, isto é, as considerações físicas associadas ao fenômeno que em geral são desprezadas, como por exemplo, os efeitos relativísticos nos problemas de mecânica clássica. O segundo caso deve-se, por exemplo, a imprecisões em constantes físicas as quais podem ser desprezadas, mas que devem ser examinadas quando provenientes de dados empíricos.

Os erros envolvidos nos métodos descritos acima são (ASME, 2009):

- Nos resultados experimentais: erros experimentais;
- Nas soluções analíticas: erros de modelagem; e
- Nas soluções numéricas: erros de modelagem e erros numéricos.

A Fig. 3.3 apresenta a hierarquia desses erros envolvidos nos métodos de solução de problemas associados ao fenômeno em estudo (ASME, 2009).

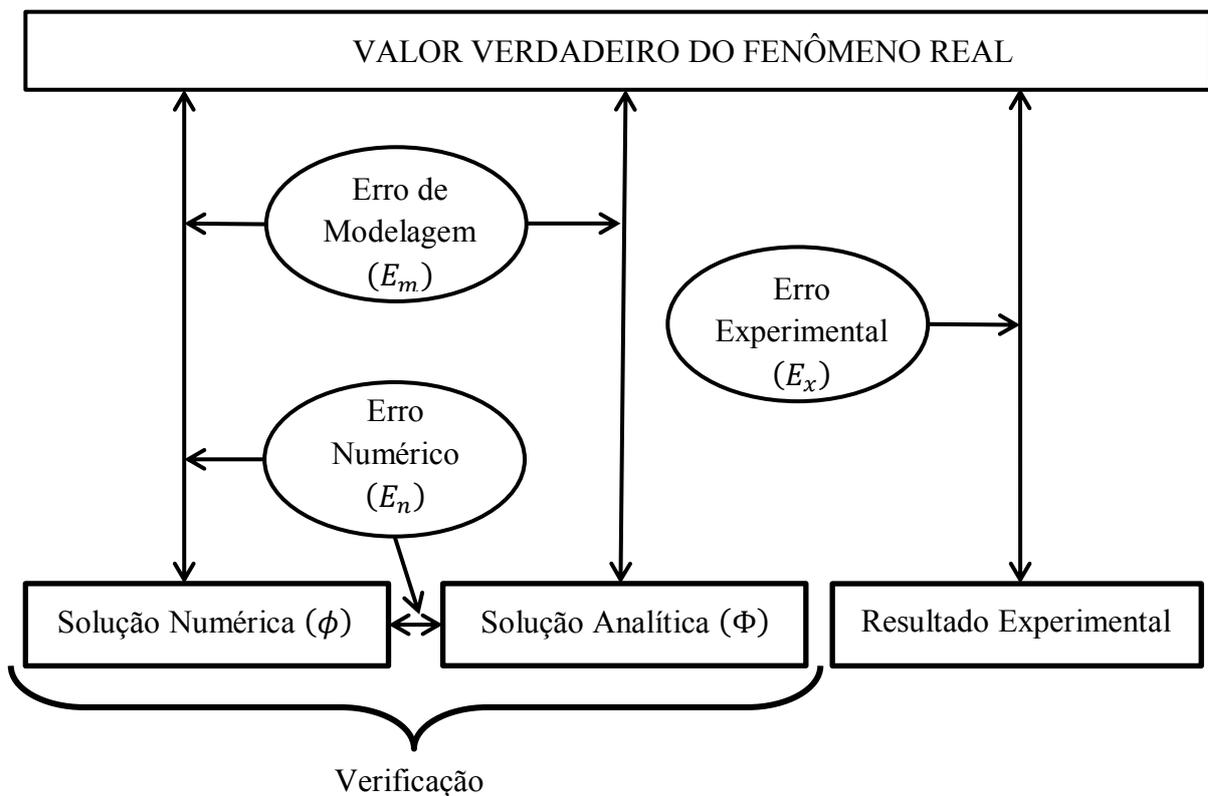


Figura 3.3 Erros envolvidos nos métodos da engenharia (MARCHI, 2010).

O erro experimental (E_x) é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e o seu resultado experimental. Mesmo os modelos mais simples em CFD são complexos o suficiente para que soluções analíticas sejam praticamente impossíveis de se obter. Por isso, em geral, o valor verdadeiro é desconhecido, o que leva a estimar o valor do erro experimental.

O erro de modelagem (E_m) é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse de um fenômeno real, e a sua solução analítica ou sua solução numérica exata (FERZIGER e PERIC, 2002; MARCHI, 2001). Também neste caso o valor verdadeiro é

desconhecido, conseguindo-se apenas estimar seu valor que é feito a partir da comparação das soluções analíticas e numéricas com resultados experimentais. O processo que quantifica esse tipo de erro denomina-se validação (ASME, 2009). No exercício da validação também são analisados os erros de dados de entrada como, por exemplo, as propriedades físicas de um sistema em estudo.

O erro da solução numérica, ou simplesmente erro numérico (E_n), é a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e sua solução numérica (ϕ), ou seja,

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (3.9)$$

O processo de verificação tem sido definido como a concordância dos resultados numéricos com o modelo matemático que descreve o fenômeno físico em estudo, quantificando o erro numérico (ASME, 2009). Nesse sentido, na próxima seção, são apresentadas as diversas fontes de erro que constituem o erro numérico.

3.6.1 Fontes de Erros Numéricos

O erro numérico é causado por diversas fontes, que são: erros de truncamento (E_t), erros de iteração (E_i), erros de arredondamento (E_π) e erros de programação (E_p) (MARCHI, 2001; FERZIGER e PERIC, 2002). Simbolicamente, tem-se:

$$E(\phi) = E(E_t, E_i, E_\pi, E_p) \quad (3.10)$$

Nas seções a seguir, cada uma dessas quatro fontes de erro é explicada, separadamente.

3.6.1.1 Erro de truncamento (E_t)

O objetivo do cálculo de funções por séries de Taylor é o de se obter expressões simples para a avaliação de funções com grau de complexidade maior. Além disso, esse

procedimento forma a ideia básica de uma estimativa de erro *a priori*, de modo que o entendimento desse assunto é indispensável para a análise da estimativa do erro *a posteriori*.

O resultado que se obtém ao se truncar um processo infinito é chamado erro de truncamento (E_t), ou seja, é originário do fato de se aproximar um modelo matemático contínuo, com informação em um conjunto infinito, por um modelo numérico discreto com informação em um conjunto finito.

Segundo Marchi (2001), o erro de truncamento de uma equação diferencial é o resíduo obtido quando se substitui a solução analítica exata de uma variável dependente na equação discretizada do modelo matemático. Ele é igual ao oposto do valor do operador numérico aplicado à solução analítica da variável dependente.

Ao se considerar a divisão de um domínio contínuo em subdomínios com espaçamento h , o erro de truncamento de uma equação diferencial ou de uma aproximação numérica qualquer pode ser representado genericamente pela Eq. (3.5) (FERZIGER e PERIC, 2002).

Quando $h \rightarrow 0$, o primeiro termo do erro de truncamento domina o valor total de E_t . Nesse caso, ao se considerar o gráfico logarítmico de E_t versus h , a sua inclinação em relação ao eixo das abscissas tende ao valor de p_L (com a redução de h). Quanto maior for esse valor, maior será a taxa de redução de E_t quando $h \rightarrow 0$.

3.6.1.2 Erro de iteração (E_i)

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).

Os erros de iteração podem ser causados, por exemplo, pelo emprego de métodos iterativos para resolução do sistema de equações algébricas resultantes do processo de discretização; pelo uso de métodos segregados (acoplamento de equações), por exemplo, o tratamento de modelos matemáticos constituídos por mais de uma equação, sendo cada uma resolvida separadamente; e a resolução de problemas não lineares em que a matriz dos coeficientes é função da variável dependente do problema (MARCHI, 2001; MARTINS e MARCHI, 2008).

A redução desses erros se dá pelo aumento do número de iterações, isto é, para $n \rightarrow \infty$ obtém-se $E_i \rightarrow 0$. Uma teoria detalhada sobre a estimativa desse tipo de erro em CFD é apresentado em Martins e Marchi (2008).

3.6.1.3 Erro de programação (E_p)

Erros de programação são aqueles que resultam, por exemplo, do uso incorreto de um modelo numérico a ser empregado, na implementação do modelo numérico ou no uso do programa, entre outros (ROACHE, 1998; MARCHI, 2001).

Além de técnicas básicas, é fundamental que ao desenvolver um programa computacional uma compreensão aprofundada de como os algoritmos são construídos, do porque eles funcionam, e quais são suas limitações é de suma importância.

Por exemplo, a necessidade de efetuar cálculos algébricos para obter resultados exatos, e respostas numéricas acuradas deve levar em consideração a precisão obtida com uma linguagem de programação que deve acompanhar os recursos oferecidos pela máquina digital.

Símbolos e números podem ser manipulados pelo computador, mas a lógica da solução é induzida pelo programador. A simplificação de uma expressão apresenta outra alternativa de solução para um sistema de manipulação simbólica. Algoritmos devem ser adaptados para a solução de expressões algébricas representadas de forma equivalente com o intuito de reduzir erros. As preferências estilísticas diferem do que é mais apropriado em se tratando de álgebra computacional.

A álgebra computacional ou computação algébrica, utilizada por muitos, trata de implementar operações algébricas levando em consideração a eficiência do código mas muitas vezes esquecendo-se de considerar a precisão dos resultados ou o seu custo com relação ao tempo computacional.

Maliska (2004) e Roache (1998) apresentam procedimentos para evitar esse tipo de erro como: implementar um programa específico para depois generalizá-lo; implementar o programa em módulos; usar uma malha pequena e verificar se a solução converge, isto é, verificar se o erro de iteração atinge o nível do erro de máquina ou do erro de

arredondamento; e resolver um problema por meio do MSF (com solução analítica conhecida) para verificar se as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) tendem a (p_L) com $h \rightarrow 0$.

3.6.1.4 Erro de arredondamento (E_π)

Conforme Marchi (2001), erros de arredondamento são os erros que ocorrem principalmente devido à representação finita dos números reais em cálculos computacionais, isto é, ocorrem quando estão além da capacidade de armazenamento na máquina digital ou então os últimos dígitos são desprezados por não serem significativos na representação numérica. A representação numérica finita em processadores gera a propagação destes erros pela quantidade de operações utilizadas.

Os erros de arredondamento tornam-se parte dos processos efetuados pelo computador e a sua redução depende inclusive da escolha da linguagem de programação. Deste modo, eles variam de acordo com o *software* e com o *hardware* utilizados na execução do código computacional.

Os erros de arredondamento também são originários de dados de entrada, métodos de aproximação, operações numéricas efetuadas e manipulações algébricas e/ou algoritmos.

Dois fatores a serem considerados na análise do efeito dos erros de arredondamento são o de operações aritméticas como a soma e a multiplicação, as quais satisfazem a propriedade associativa dos números reais, que podem perder essa propriedade quando se trabalha em representações finitas, e o cancelamento subtrativo.

Goldberg (1991) ressalta a importância sobre os aspectos da aritmética de ponto flutuante que devem ser considerados no desenvolvimento de códigos computacionais. Ele cita o trabalho de Sterbenz (1974) o qual discute as implicações do uso de diferentes estratégias de arredondamento para as operações básicas de adição, subtração, multiplicação e divisão.

A aplicação da álgebra computacional é capaz de lidar com uma enorme quantidade de números com grande precisão. Os processos algébricos lidam com manipulações e solução exata de equações. Essas equações podem ser polinomiais, diferenciais ou a diferenças finitas,

por exemplo, (STEINBERG e ROACHE, 1985; WILKINSON, 1994; STERBENZ, 1974; KINCAID e CHENEY, 2008). Trata-se de uma área muito ampla e, portanto, pode ser vista de diferentes perspectivas, como por exemplo, o simples cálculo de uma exponencial, a lógica de solução de sistemas de equações lineares, o cálculo exato de integrais indefinidas de funções elementares e cálculo de somatórios de números binomiais.

A redução dos erros de arredondamento implica em maior precisão usada para representar as variáveis, porém com isso torna-se necessário maior esforço computacional, ou seja, maior quantidade de memória disponível para armazenamento dessas variáveis (MARCHI, 2001).

3.6.2 Estimativas para o Erro de Discretização

Como dito anteriormente, quando o erro da solução numérica se reduz somente a erros de truncamento este passa a ser denominado erro de discretização e pode ser calculado por meio da Eq. (3.5) ou da Eq. (3.11) na forma

$$E(\phi) = C_1 h^{pL} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + C_4 h^{p_4} + \dots \quad (3.11)$$

A Eq. (3.11) é denominada equação geral do erro de discretização que é semelhante à Eq. (3.5), porém como já mencionado, com a diferença que é constituída somente por erros de truncamento.

Em termos práticos, o valor do erro de discretização só pode ser calculado quando a solução analítica do modelo matemático é conhecida. Quando isso não é possível, é necessário estimar qual é o valor da solução analítica. Assim, em vez do erro de discretização, calcula-se uma estimativa do seu valor. Esta estimativa é chamada de incerteza (U) da solução numérica (CHAPRA e CANALE, 2008; MARCHI, 2001) e é calculada pela diferença entre a solução analítica estimada (ϕ_∞) para a variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ) (MARCHI e SILVA, 2005), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (3.12)$$

A incerteza de uma solução numérica é calculada com os chamados estimadores de erro apresentados a seguir de forma sucinta. Em Marchi (2001) pode-se encontrar a teoria detalhada sobre o assunto.

Para prever quantitativamente o erro de discretização encontram-se disponíveis na literatura, entre outros, seis estimadores (MARCHI, 2001), que são: os estimadores de Richardson, delta, GCI, bicoeficiente, tricoeficiente e multicoeficiente. Todos eles se baseiam em soluções numéricas obtidas sobre duas ou mais malhas diferentes, isto é, são estimadores a posteriori.

3.6.2.1 Estimador de Richardson (U_{Ri})

O cálculo da incerteza por meio do estimador de Richardson (U_{Ri}) (RICHARDSON e GAUNT, 1927) é realizado com base na Eq. (3.12) onde o valor de ϕ_∞ é a estimativa do valor da solução analítica e é obtida através da extrapolação de Richardson (RICHARDSON, 1910; RICHARDSON e GAUNT, 1927) generalizada pela substituição do expoente da razão de refino por p_L (ROACHE, 1994):

$$\phi_\infty = \phi_2 + \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{(r^{p_L} - 1)} \quad (3.13)$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 são as soluções numéricas obtidas com malhas grossa e fina, ou ainda, com malhas cujo tamanho h dos elementos é h_1 e h_2 , respectivamente; p_L é a ordem assintótica do erro de discretização; e r é a razão de refino de malha, definida pela Eq. (3.7).

Substituindo a Eq. (3.13) na Eq. (3.12), o estimador de Richardson resulta em

$$U_{Ri}(\phi_2) = \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{(r^{p_L} - 1)} \quad (3.14)$$

A Eq. (3.14) fornece a incerteza da solução numérica obtida com a malha fina (h_2). Caso seja de interesse obter a incerteza da solução na malha grossa, substitui-se a Eq. (3.13) e ϕ_1 na Eq. (3.12).

A representação correta da solução numérica ϕ e sua incerteza U_{Ri} obtida com o estimador de Richardson é

$$\phi = \phi_2 + U_{Ri}(\phi_1) \quad (3.15)$$

onde ϕ_2 é a solução numérica obtida com a malha fina (com uma malha cujo tamanho h dos elementos é h_2); e lembrando-se que o cálculo da incerteza (U_{Ri}) também envolve ϕ_1 que é a solução numérica obtida com a malha mais grossa (com uma malha cujo tamanho h dos elementos é h_1).

3.6.2.2 Estimador delta (U_{Δ})

Conforme Marchi (2001), o estimador delta U_{Δ} calcula a incerteza de uma solução numérica ϕ_2 por meio da equação

$$U_{\Delta}(\phi_2) = |\phi_1 - \phi_2| \quad (3.16)$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 seguem as definições da seção 3.6.2.1. A incerteza calculada com a Eq. (3.16) também usa duas soluções numéricas (ϕ_1 e ϕ_2) obtidas em duas malhas distintas (h_1 e h_2), assim como o estimador de Richardson.

A representação correta da solução numérica ϕ e sua incerteza U_{Δ} obtida com o estimador delta é

$$\phi = \phi_2 + U_{\Delta}(\phi_1) \quad (3.17)$$

3.6.2.3 Estimador GCI (U_{GCI})

A incerteza da solução numérica também pode ser calculada com o estimador *GCI* (*Grid Convergence Index*) (ROACHE, 1998) através de

$$U_{GCI}(\phi_2) = F_S \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(r^{p_L} - 1)} \quad (3.18)$$

onde F_S é um fator de segurança com valor igual a três para aplicações em geral; os demais parâmetros da Eq. (3.18) seguem as definições dadas na seção 3.6.2.1.

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

$$\phi = \phi_2 \pm U_{GCI}(\phi_2) \quad (3.19)$$

A Eq. (3.18) pode ser reescrita de forma a relacionar os três estimadores de erro vistos até então, U_{GCI} , U_Δ e U_{Ri} , considerando-se $r = p_L = 2$ para $F_S = 3$ (ROACHE, 1994; MARCHI, 2001). Assim tem-se

$$U_{GCI}(\phi_1) = \frac{F_S U_\Delta}{(r^{p_L} - 1)} = F_S |U_{Ri}| \quad (3.20)$$

onde ϕ_2 é a solução numérica obtida com a malha fina, isto é, com uma malha cujo tamanho h dos elementos é h_2 ; e lembrando-se que o cálculo da incerteza (U_{GCI}) também envolve ϕ_1 que é a solução numérica obtida com a malha mais grossa, isto é, com uma malha cujo tamanho h dos elementos é h_1 .

3.6.2.4 Estimador bicoeficiente (U_{bi})

Para o estimador bicoeficiente (U_{bi}), definido por Marchi (2001), a incerteza é calculada com

$$U_{bi} = K_1 h^{p_L} + K_2 h^{p_L + \Delta p} \quad (3.21)$$

onde K_1 e K_2 são os dois coeficientes da incerteza que são admitidos serem independentes de h , p_L é a ordem assintótica e $(p_L + \Delta p)$ é o expoente de h no segundo termo da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.11), ou seja, é a segunda ordem verdadeira.

A partir da Eq. (3.2), aplicada a três malhas diferentes (h_1 , h_2 e h_3) e considerando-se a Eq. (3.12), obtém-se um sistema de equações com incógnitas ϕ_∞ , K_1 e K_2 . Para o caso em

que a razão de refino (r) é constante pode-se deduzir três formas distintas para ϕ_∞ para casos de ordens verdadeiras (p_V) distintas na equação do erro de discretização que são:

$$\phi_\infty = \frac{[r^3 \phi_3 - r(r+1)\phi_2 + \phi_1]}{(r^3 - r^2 - r + 1)} \quad (p_V = 1 \text{ e } 2) \quad (3.22)$$

$$\phi_\infty = \frac{[r^5 \phi_3 - r^2(r+1)\phi_2 + \phi_1]}{(r^5 - r^3 - r^2 + 1)} \quad (p_V = 2 \text{ e } 3) \quad (3.23)$$

$$\phi_\infty = \frac{[r^6 \phi_3 - r^2(r^2+1)\phi_2 + \phi_1]}{(r^6 - r^4 - r^2 + 1)} \quad (p_V = 2 \text{ e } 4) \quad (3.24)$$

A incerteza é calculada através do estimador bicoeficiente utilizando as equações (3.22), (3.23) e (3.24) na Eq. (3.12) e tomando ϕ como a solução numérica calculada com uma malha, cujo tamanho de seus elementos é h com a razão de refino dada como na Eq. (3.7) por

$$r = \frac{h_1}{h_2} = \frac{h_2}{h_3} \quad (3.25)$$

Marchi (2001), com base em algumas análises mostra que essa incerteza, em muitos casos, é diferente do erro de discretização e que essa diferença vai depender da complexidade de cada problema e do h usado.

A representação correta da solução numérica ϕ e sua incerteza U_{bi} obtida com o estimador bicoeficiente é

$$\phi = \phi_3 + U_{bi}(\phi_3) \quad (3.26)$$

onde ϕ_3 é a solução numérica obtida com a malha fina, isto é, com uma malha cujo tamanho h dos elementos é h_3 ; e lembrando-se que o cálculo da incerteza (U_{bi}) também envolve ϕ_1 e ϕ_2 .

3.6.2.5 Estimador tricoeficiente (U_{tri})

O estimador tricoeficiente (U_{tri}) é definido como o estimador bicoeficiente, com a diferença que o seu cálculo envolve quatro malhas distintas. O estimador tricoeficiente (U_{tri}), definido por Marchi (2001), é baseado em

$$U_{tri} = K_1 h^{p_L} + K_2 h^{p_L + \Delta p} + K_3 h^{p_L + 2\Delta p} \quad (3.27)$$

onde K_1, K_2 e K_3 são os três coeficientes da incerteza que são admitidos serem independentes de h , p_L , $(p_L + \Delta p)$, $(p_L + 2\Delta p)$ são as três primeiras ordens verdadeiras (p_v) da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.11).

A partir da Eq. (3.27), aplicada a quatro malhas distintas (h_1, h_2, h_3 e h_4) e considerando-se a Eq. (3.12), obtém-se um sistema de equações com incógnitas ϕ_∞, K_1, K_2 e K_3 . A dedução da expressão para ϕ_∞ é realizada conforme o caso dado para as ordens verdadeiras e razão de refino (r).

A fim de reduzir a extensão das expressões de ϕ_∞ , e considerando a razão de refino (r) constante e igual a dois, são apresentadas três formas distintas para ϕ_∞ para casos de ordens verdadeiras (p_v) distintas na equação do erro de discretização que são:

$$\phi_\infty = \frac{(192\phi_4 - 168\phi_3 + 42\phi_2 - 3\phi_1)}{63} \quad (p_v = 1, 2 \text{ e } 3) \quad (3.28)$$

$$\phi_\infty = \frac{(1536\phi_4 - 672\phi_3 + 84\phi_2 - 3\phi_1)}{945} \quad (p_v = 2, 3 \text{ e } 4) \quad (3.29)$$

$$\phi_\infty = \frac{(552960\phi_4 - 181440\phi_3 + 11340\phi_2 - 135\phi_1)}{382725} \quad (p_v = 2, 4 \text{ e } 6) \quad (3.30)$$

A incerteza é calculada através do estimador tricoeficiente utilizando qualquer uma das equações (3.28), (3.29) e (3.30) na Eq. (3.12) e tomando ϕ como a solução numérica calculada com uma malha cujo tamanho de seus elementos é h , dentre as quatro soluções numéricas, e de acordo com as ordens verdadeiras indicadas. Aqui a malha ϕ_4 indica a solução numérica obtida na malha mais fina e ϕ_1 , na malha mais grossa obedecendo a equação (como na Eq. (3.7))

$$r = \frac{h_1}{h_2} = \frac{h_2}{h_3} = \frac{h_3}{h_4} \quad (3.31)$$

A representação correta da solução numérica ϕ e sua incerteza U_{tri} obtida com o estimador tricoeficiente é

$$\phi = \phi_4 + U_{\text{tri}}(\phi_4) \quad (3.32)$$

onde ϕ_4 é a solução numérica obtida com a malha fina, isto é, com uma malha cujo tamanho h dos elementos é h_4 ; e lembrando-se que o cálculo da incerteza (U_{tri}) também envolve ϕ_1, ϕ_2 e ϕ_3 .

3.6.2.6 Estimador multicoeficiente (U_{mc})

O estimador multicoeficiente (U_{mc}) é definido como o estimador bicoeficiente, com a diferença que o seu cálculo envolve n malhas distintas. O estimador multicoeficiente (U_{mc}), definido por Marchi (2001), considera que a incerteza é dada por “ $m-1$ ” coeficientes, isto é, de acordo com a Eq. (3.11) tem-se

$$U_{\text{mc}} = K_1 h^{p_1} + K_2 h^{p_2} + K_3 h^{p_3} + \dots + K_{m-1} h^{p_{m-1}} \quad (3.33)$$

onde m é igual ao número de soluções numéricas distintas, $K_1, K_2, K_3, \dots, K_{m-1}$ são os coeficientes da incerteza, e $p_1, p_2, p_3, \dots, p_{m-1}$ são as ordens verdadeiras (p_V) do erro de discretização.

A aplicação da Eq. (3.33) a m malhas distintas ($h_1, h_2, h_3, \dots, h_m$) fornecem um sistema de equações com incógnitas $\phi_\infty, K_1, K_2, \dots, K_m$. Obtida a solução do sistema de equações, a incerteza de cada solução numérica (ϕ) pode ser calculada conforme a Eq. (3.12).

3.7 EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

Segundo Brezinski (2000), extrapolação é uma técnica usada em análise numérica para melhorar a acurácia de um processo baseada em um parâmetro ou para acelerar a convergência de uma sequência.

A extrapolação de Richardson (ER) é um método simples que corrobora essa ideia e tanto contribui para a velocidade de convergência como também para um resultado acurado.

A ideia básica exige a solução numérica da variável de interesse em duas malhas com diferentes números de nós. Esta também é usada para estimar o erro de discretização (MARCHI e SILVA, 2002) ou como base para outros estimadores, tal como o GCI (ROACHE, 1994).

Consideram-se duas malhas com espaçamentos distintos entre os nós (MÜLLER, 2002):

Um método de ordem p é usado, significando que o comportamento teórico do erro de truncamento é conhecido quando $h \rightarrow 0$. Procede-se da seguinte forma:

- Calcula-se a solução em x_k usando o espaçamento de tamanho h : $y(x_k, h)$
- Calcula-se a solução em x_k usando o espaçamento de tamanho $2h$: $y(x_k, 2h)$
- Dados dois valores com erros distintos e conhecido o comportamento do erro de truncamento pela ordem $\mathcal{O}(h^p)$ é possível extrapolar uma aproximação do valor exato $y(x_k, 0)$.

Para o método de ordem p , a solução exata pode ser expressa como:

$$y(x_k) = y(x_k, h) + ch^{p_1} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (3.34)$$

onde c é uma constante e p_1 e p_2 são inteiros com $p_1 < p_2$. Resolvendo o problema para malhas com espaçamentos entre nós h e $2h$, respectivamente, tem-se:

$$y(x_k) = y(x_k, h) + ch^{p_1} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (3.35)$$

$$y(x_k) = y(x_k, 2h) + c(2h)^{p_1} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (3.36)$$

Subtraindo a Eq. (3.36) da Eq. (3.35), obtém-se a expressão para o erro de truncamento:

$$ch^{p_1} = \frac{y(x_k, h) - y(x_k, 2h)}{2^{p_1} - 1} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (3.37)$$

Assim, substituindo a Eq. (3.37) na Eq. (3.35) chega-se a

$$y(x_k) = y(x_k, h) + \frac{y(x_k, h) - y(x_k, 2h)}{2^{p_1} - 1} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (3.38)$$

Joyce (1971) descreve um estudo abrangente sobre os processos de extrapolação em análise numérica, e a maioria deles é baseada em ER ou em suas variantes.

3.8 MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

Essa análise será feita utilizando o método de extrapolação de Richardson repetido, denominada aqui multiextrapolações de Richardson (MER).

A técnica de MER tem como objetivo reduzir o erro de discretização melhorando a eficiência e a exatidão computacional. Porém, devido a ocorrências de erros de arredondamento nos resultados desse processo, faz-se necessária a redução desses erros de forma a contribuir para o desempenho ideal do método e, conseqüentemente, obter a melhor precisão dos resultados.

A ideia básica do MER, (BJORCK e DAHLQUIST, 2009; MARCHI e SILVA, 2002; ROACHE, 1994) apresentada na seção anterior, tem como base a extrapolação de Richardson generalizada (Eq. (3.13)) para estimar erros de discretização (MARCHI et al., 2008).

O processo é desenvolvido considerando, para cada variável de interesse, a solução numérica (ϕ) na malha g , com m extrapolações de Richardson, e é dada por:

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_m} - 1} \quad (3.39)$$

onde $r = h_{g-1}/h_g$ é a razão de refino da malha (ver Eq. (3.7)), e a variável p_m representa a ordem verdadeira no nível m (MARCHI et al., 2013) do erro de discretização, o qual pode ser obtido como explanado na seção 3.5.

A Eq. (3.39) é válida para $g = [2, M]$ e $m = [1, M - 1]$; M é o número total de malhas distintas sobre as quais foram obtidas soluções numéricas (ϕ) sem qualquer extrapolação; g representa cada uma das malhas, sendo $g = 1$ a malha mais grossa do conjunto de malhas, isto é, aquela na qual a distância h entre dois nós consecutivos tem o maior valor. A malha mais fina ocorre em $g = M$, e é aquela na qual a distância h entre dois nós consecutivos tem o menor valor, conforme apresentado na Tab. 3.2.

Tabela 3.2 Índices das soluções numéricas sem extrapolação

| Malhas | Solução Numérica sem extrapolação |
|---------|-----------------------------------|
| $g = 1$ | ϕ_1 |
| $g = 2$ | ϕ_2 |
| $g = 3$ | ϕ_3 |
| ... | ... |
| $g = M$ | ϕ_M |

Conforme explanado na seção 3.5, os valores de p_m , obtidos *a priori*, podem ser confirmados *a posteriori* com o conceito de ordem efetiva (p_E) (MARCHI, 2001) do erro de discretização, que generalizado para multiextrapolações de Richardson (MER) é dado por

$$p_{Eg,m} = \frac{\log \left[\frac{E(\phi_{g-1,m})}{E(\phi_{g,m})} \right]}{\log(r)} \quad (3.40)$$

A Eq. (3.40) é válida para $g = [2, M]$ e $m = [0, g - 2]$. As demais definições referentes à Eq. (3.39) se aplicam a Eq. (3.40).

Para obter a ordem efetiva é necessário conhecer a solução analítica nos pontos desejados a fim de obter o erro entre as soluções. Caso contrário, a utilização de $p_{Ug,m}$, Eq. (3.41), torna-se necessária.

$$p_{Ug,m} = \frac{\log \left[\frac{\varphi_{g-1,m} - \varphi_{g-2,m}}{\varphi_{g,m} - \varphi_{g-1,m}} \right]}{\log(r)} \quad (3.41)$$

A Eq. (3.41) é válida para $g = [3, M]$ e $m = [0, \text{Int}((g - 3)/2)]$, r constante entre as três malhas e $\text{Int}(a)$ representa a parte inteira de a .

Os valores de p_U não são obtidos com a Eq. (3.40), pois ela admite que o valor de p_m é conhecido. Para obter p_m *a posteriori* independentemente de p_m *a priori*, ao invés de usar a variável ϕ obtida com a Eq. (3.40), usa-se uma nova variável φ , a qual é calculada por

$$\varphi_{g,m} = \varphi_{g,m-1} + \frac{\varphi_{g,m-1} - \varphi_{g-1,m-1}}{r^{p_{Ug,m-1}} - 1} \quad (3.42)$$

A Eq. (3.42) é válida para $g = [3, M]$ e $m = [1, \text{Int}((g-1)/2)]$. As demais definições são as mesmas atribuídas a Eq. (3.40). Nota-se que são necessárias três soluções referentes a três malhas distintas. Como para $m = 0$, a Eq. (3.42) não se aplica, tem-se $\varphi_{g,0} = \phi_{g,0}$, onde $\phi_{g,0}$ é a solução numérica obtida sem qualquer extrapolação.

Teoricamente, à medida que h tende a zero, os valores de $(p_E)_{g,m}$ (e/ou $(p_U)_{g,m}$) devem tender à ordem verdadeira (p_m) do respectivo nível de extrapolação (m) da Eq. (3.11).

Na Tab. 3.3 pode-se acompanhar o procedimento aplicado acima. Para $m = 0$ tem-se a solução numérica (ϕ) sem qualquer extrapolação. Nota-se também que a cada valor de ϕ obtido, para a aplicação dessa técnica, necessita-se da solução de pelo menos duas malhas distintas para a utilização de p_E (g e $g-1$) ou três malhas distintas para a utilização de p_U (g , $g-1$ e $g-2$), como demonstrado por meio das células tracejadas e como resultado a célula destacada com a borda em negrito segundo a aplicação de p_E .

Tabela 3.3 Índices das extrapolações de Richardson

| Malhas | Solução numérica sem extrapolação $m = 0$ | Primeira extrapolação $m = 1$ | Segunda extrapolação $m = 2$ | ... | $m = M-1$ |
|--------|---|-------------------------------|------------------------------|-----|----------------------|
| $g=1$ | ϕ_1 | | | | |
| $g=2$ | ϕ_2 | $\phi_{(g=2,m=1)}$ | | | |
| $g=3$ | ϕ_3 | $\phi_{(g=3,m=1)}$ | $\phi_{(g=3,m=2)}$ | | |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| $g=M$ | ϕ_M | $\phi_{(g=M,m=1)}$ | $\phi_{(g=M,m=2)}$ | ... | $\phi_{(g=M,m=M-1)}$ |

As vantagens do uso da extrapolação de Richardson (ER) se estendem ao uso de MER. i) é um pós-processamento simples, pois não interfere diretamente na obtenção da solução; ii) seu custo computacional é muito baixo em termos de memória e tempo de CPU; iii) possibilita o refinamento de malhas para práticas que conduzem ao desempenho superior e para o processo de geração de soluções de referência (*Benchmark*); iv) podem ser aplicadas a códigos computacionais já existentes ou a resultados já obtidos; v) aplica-se a diversas

aproximações numéricas e variáveis de interesse; vi) independe de análises *a priori* e conhecimento da solução analítica do problema (MARCHI et al., 2013).

3.9 RESUMO DO CAPÍTULO 3

Neste capítulo foi apresentada a nomenclatura genérica das equações teste e das variáveis secundárias de interesse analisadas neste trabalho. Os principais métodos de discretização foram brevemente descritos enfatizando o MDF por ser o método utilizado, bem como as referências relacionadas à sua aplicação. O processo do MSF é apresentado com base nas referências pesquisadas. Foram apresentados os métodos de solução dos sistemas de equações lineares apresentando uma breve visão do método *multigrid*. A análise assintótica é exposta elucidando as relações entre as análises *a priori* e *a posteriori* abordadas neste texto. Foram abordados alguns tópicos sobre as principais fontes de erro numérico e alguns estimadores. Finalmente, foi apresentado de forma sucinta, o método de extrapolação de Richardson como embasamento teórico ao procedimento de MER.

4 MODELOS MATEMÁTICOS E NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados os modelos matemáticos baseados em equações diferenciais parciais do tipo elíptico, (equação de advecção-difusão bidimensional permanente); parabólico (equação da difusão do calor uni e bidimensional transiente – equação de Fourier); as variáveis de interesse e modelos numéricos correspondentes.

A inclusão de um termo fonte na descrição de um modelo matemático em CFD é pouco discutida. Do ponto de vista analítico as soluções são de difícil acesso ou inexistentes, o que torna a solução numérica ainda mais complicada. Nesse sentido, as equações mencionadas possuem termo fonte, solução analítica e condições de contorno desenvolvidas com base na teoria do MSF.

Nos problemas citados acima a temperatura é considerada a variável primária. O estudo das variáveis secundárias por ser importante em certos contextos na engenharia, é também tratado neste trabalho. Por exemplo, para uma placa aquecida, uma variável secundária é a taxa de fluxo de calor através da superfície da placa. Pode-se determinar o fluxo de calor transportado por condução pela Lei de Fourier:

$$q'' = -k \frac{dT}{dx}$$

O escoamento térmico q'' (W/m^2) é a taxa de transferência de calor por unidade de área perpendicular à direção de transferência e é proporcional ao gradiente de temperatura $\frac{dT}{dx}$. A constante k é uma propriedade de transporte denominada condutividade térmica ($W/(m \cdot K)$) do material. O sinal negativo é uma consequência do fato do calor ser transferido na direção da temperatura decrescente (INCROPERA et al., 2008). Neste trabalho, por conveniência a condutividade térmica será considerada igual a unidade, e a taxa de fluxo de calor será avaliada nos contornos leste e norte do domínio.

Para análise do impacto de esquemas mistos (híbridos, correção adiada ou Crank-Nicolson), e de parâmetros físicos e numéricos sobre a redução do erro de discretização com MER foram definidas na seção 3.1 quatro variáveis de interesse, sendo duas locais e duas globais. As variáveis consideradas para os modelos matemáticos definidos são:

- T_c : variável dependente T em $x = \frac{1}{2}$, obtida diretamente do valor nodal;
- T_m : média de T no domínio, obtida com a regra do trapézio;
- L : média da norma l_1 do erro de discretização de T ; e
- q ou I : derivada de primeira ordem de T obtida com o esquema UDS-2 no caso 1D e com esquema UDS-2 e regra do trapézio nos casos 2D.

Grandes esforços têm sido empregados no tratamento de diversas dificuldades que surgem na solução de equações de advecção-difusão por diversos esquemas de interpolação, como por exemplo, a dispersão e difusão numéricas e a redução do erro de discretização (SHYY, 1985; MARCHI, 1993; MARCHI e GERMER, 2009).

Métodos de discretização, funções de interpolação e análise de sensibilidade do número de Péclet (Pe) são constantemente avaliados neste sentido. Porém, outros fatores como, por exemplo, restrições para a acurácia da aproximação conforme o número de Péclet e a presença de termo fonte também devem ser considerados (SHYY, 1985).

O número de Péclet é um parâmetro adimensional que mede a razão entre as intensidades dos processos de convecção e difusão, definido por

$$Pe = \frac{UL}{\alpha}$$

onde U é a velocidade característica, L é o comprimento do domínio e α é a difusividade térmica (m^2/s) do fluido (BEJAN, 1995). Este parâmetro é obtido com base no produto de dois outros adimensionais da forma $Pe_L = Re_L Pr$, cujo Re_L é o número de Reynolds baseado no comprimento característico L e Pr é o número de Prandtl, onde

$$Re_L \cong \frac{\rho UL}{\mu} = \frac{UL}{\nu}$$

onde ν é a viscosidade cinemática (também conhecida difusividade molecular, cinética, ou de momentum linear) dada por $\nu = \mu/\rho$. O número de Prandtl é um adimensional que depende apenas de propriedades do fluido, ou seja, é a razão entre difusividades definido por

$$Pr \cong \frac{\nu}{\alpha}$$

A importância do número de Péclet está no fato em que, através dele, é possível avaliar a relação entre os termos advectivos e difusivos, permitindo assim, fazer uma análise dos problemas de instabilidade na equação de transporte quando há advecção (FORTUNA, 2000; QUARTERONI, 2009).

Segundo Shyy (1985), a acurácia de uma previsão numérica não se baseia apenas na acurácia do modelo físico, mas basicamente, na acurácia das técnicas numéricas utilizadas para resolver as equações que concretizam o modelo.

A complexidade do problema a ser resolvido leva a entender que a aplicação de esquemas de alta ordem e malhas cada vez mais refinadas são exigidas, o que nem sempre é verdade. Fletcher (1992) expõe que formulações de alta ordem apresentam menos acurácia em malhas grossas do que em malhas finas, por exemplo. Para Fortuna (2000), quanto maior o número de pontos envolvidos na aproximação, maior o risco de problema de instabilidade do método numérico. Além disso, isso leva a algoritmos mais complexos e um custo computacional maior.

Os modelos numéricos são desenvolvidos a partir da série de Taylor que por razões práticas é truncada após certo número finito de termos. Isso impõe um erro que existe em todas as soluções que utilizam a técnica de diferenças finitas, por exemplo. Neste trabalho, esse procedimento é aplicado juntamente com seus respectivos erros de truncamento com pelo menos três termos da expansão, o que não é comum na literatura.

Existem muitas relações obtidas por meio da série de Taylor, e as quais são denominadas por funções de interpolação. Uma função de interpolação é uma expressão estabelecida por meio de diferenças finitas obtidas a partir da expansão da série de Taylor, permitindo assim, prever o valor da função em um ponto em termos do valor da função e suas derivadas em outro ponto. O erro de truncamento é representado pela parte da expressão que resulta do ponto onde a série é truncada.

Muitas aplicações da engenharia dependem da dinâmica da intensidade de calor transiente. A equação de Fourier é tipicamente conhecida como a equação da difusão ou condução de calor. Para um completo entendimento do desenvolvimento numérico usado na solução da equação parabólica bidimensional, também é apresentada a solução unidimensional, ambas analítica e numérica.

A maioria dos problemas físicos é colocada no espaço bi ou tridimensional. Nesta e nas próximas seções, são exploradas as formulações bidimensionais analíticas e numéricas para a resolução de EDP's no espaço bidimensional e tempo. O objetivo é verificar se a implementação de um esquema numérico em dimensões superiores causa complicações adicionais. Neste contexto, a investigação da ordem de acurácia das aplicações numéricas torna-se relevante para o aprimoramento de seus resultados.

4.1 REGRA DO TRAPÉZIO

A necessidade da aplicação da integração numérica surge muitas vezes para avaliar a integral definida cuja primitiva é inexistente, ou é de difícil obtenção, ou quando se quer avaliar o erro em uma perspectiva global.

Neste trabalho, a média da variável dependente é obtida para duas dimensões por meio da regra do trapézio composta. Essa técnica é apresentada em Burden e Faires (2003) de forma equivalente, porém a expressão para o cálculo apresenta somente a indicação da ordem assintótica. Para a obtenção de mais termos na expressão do erro de truncamento a dedução deve ser ampliada para o conhecimento das ordens verdadeiras e, sendo assim, esta é apresentada nesta seção.

O cálculo da variável média é baseado na seguinte expressão

$$\Lambda_m = \frac{1}{L_x L_y} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \Lambda(x, y) dy dx \quad (4.1)$$

onde L_x e L_y expressam os limites do domínio em estudo.

Para obter as ordens verdadeiras *a priori* do erro de truncamento da variável média deve-se deduzir a expressão equivalente da Eq. (4.1) com erro de truncamento considerando mais termos na expansão.

Dessa forma, considere uma função de duas variáveis sobre o retângulo $R = \{(x, y) | a < x < b, c < y < d\}$. Dado o intervalo $[a, b]$, este é subdividido em m

subintervalos igualmente espaçados, de tamanho $h_x = \frac{b-a}{m}$, tomando $x_i = x_0 + ih_x$ para $i = 1, 2, \dots, m$. De forma análoga, o intervalo $[c, d]$ é subdividido em n subintervalos igualmente espaçados, de tamanho $h_y = \frac{d-c}{n}$, tomando $y_j = y_0 + jh_y$ para $j = 1, 2, \dots, n$.

A regra do trapézio composta em duas dimensões é dada pela expressão

$$\iint_R \Lambda(x, y) dA = \int_a^b \int_c^d \Lambda(x, y) dy dx \approx T_{2D} \quad (4.2)$$

onde

$$T_{2D} = \frac{1}{4} h_x h_y \left[\Lambda(a, c) + \Lambda(b, c) + \Lambda(a, d) + \Lambda(b, d) + 2 \sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, c) \right. \\ \left. + 2 \sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, d) + 2 \sum_{j=2}^{n-1} \Lambda(a, y_j) + 2 \sum_{j=2}^{n-1} \Lambda(b, y_j) + 4 \sum_{j=2}^{n-1} \left(\sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, y_j) \right) \right] \quad (4.3)$$

Para obter a expressão do erro de truncamento da Eq. (4.3) parte-se da construção da ideia para o caso 1D seguindo para o caso 2D.

Assumindo espaçamentos uniformes, considera-se um subintervalo $\mathcal{J}_i = [x_i, x_{i+1}]$ do intervalo inteiro $[a, b]$. Considerando a regra do ponto médio para o intervalo \mathcal{J}_i

$$\mathcal{J}_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda(x) dx \approx h_i \Lambda(z_i) \quad (4.4)$$

onde

$$z_i = (x_i + x_{i+1})/2 \quad (4.5)$$

é o ponto médio do intervalo. Substituindo o integrando pela aproximação por série de Taylor em torno de z_i , tem-se

$$\begin{aligned} \Lambda(x) = & \Lambda(z_i) + (x - z_i)\Lambda^i(z_i) + \frac{(x-z_i)^2}{2}\Lambda^{ii}(z_i) + \frac{(x-z_i)^3}{6}\Lambda^{iii}(z_i) + \frac{(x-z_i)^4}{24}\Lambda^{iv}(z_i) + \\ & + \frac{(x-z_i)^5}{120}\Lambda^v(z_i) + \frac{(x-z_i)^6}{720}\Lambda^{vi}(z_i) + \frac{(x-z_i)^7}{5040}\Lambda^{vii}(z_i) + \dots \end{aligned} \quad (4.6)$$

tal que

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda(x) dx = & h_i \Lambda(z_i) + \frac{(x-z_i)^2}{2} \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda^i(z_i) + \frac{(x-z_i)^3}{6} \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda^{ii}(z_i) + \\ & + \frac{(x-z_i)^4}{24} \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda^{iii}(z_i) + \frac{(x-z_i)^5}{120} \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda^{iv}(z_i) + \frac{(x-z_i)^6}{720} \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda^v(z_i) + \dots \end{aligned} \quad (4.7)$$

Como todos os termos $(x - z_i)$ com potência par são nulos, a Eq. (4.7) fica

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda(x) dx = h_i \Lambda(z_i) + \frac{h_i^3}{24} \Lambda^{ii}(z_i) + \frac{h_i^5}{1920} \Lambda^{iv}(z_i) + \frac{h_i^7}{322560} \Lambda^{vi}(z_i) + \dots \quad (4.8)$$

onde $h_i = (x - z_i)$. Agora, considera-se a expansão da série de Taylor em torno do ponto médio dado pela Eq. (4.5) de duas formas

$$\Lambda(x_i) = \Lambda(z_i) - \frac{h_i}{2} \Lambda^i(z_i) + \frac{h_i^2}{8} \Lambda^{ii}(z_i) - \frac{h_i^3}{48} \Lambda^{iii}(z_i) + \frac{h_i^4}{384} \Lambda^{iv}(z_i) - \frac{h_i^5}{3840} \Lambda^v(z_i) + \dots \quad (4.9)$$

e

$$\Lambda(x_{i+1}) = \Lambda(z_i) + \frac{h_i}{2} \Lambda^i(z_i) + \frac{h_i^2}{8} \Lambda^{ii}(z_i) + \frac{h_i^3}{48} \Lambda^{iii}(z_i) + \frac{h_i^4}{384} \Lambda^{iv}(z_i) + \dots \quad (4.10)$$

Adicionando as equações (4.9) e (4.10) e dividindo o resultado por dois, tem-se

$$\frac{\Lambda(x_i) + \Lambda(x_{i+1})}{2} = \Lambda(z_i) + \frac{h_i^2}{8} \Lambda^{ii}(z_i) + \frac{h_i^4}{384} \Lambda^{iv}(z_i) + \frac{h_i^6}{46080} \Lambda^{vi}(z_i) + \dots \quad (4.11)$$

Substituindo a Eq. (4.11) na Eq. (4.8) a regra do trapézio para um intervalo fica

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda(x) dx = h_i \frac{\Lambda(x_i) + \Lambda(x_{i+1})}{2} - \frac{h_i^3}{12} \Lambda^{ii}(z_i) - \frac{h_i^5}{480} \Lambda^{iv}(z_i) - \frac{h_i^7}{53760} \Lambda^{vi}(z_i) + \dots \quad (4.12)$$

A regra do trapézio composta para uma dimensão e para todo o domínio é obtida somando-se ambos os lados da Eq. (4.12) da forma

$$T_{1D} = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \Lambda(x) dx = \frac{h}{2} \left[\Lambda(a) + \Lambda(b) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \Lambda_i(x_i) \right] - \frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{m-1} \Lambda^{ii}(z_i) - \frac{h^5}{480} \sum_{i=0}^{m-1} \Lambda^{iv}(z_i) - \frac{h^7}{53760} \sum_{i=0}^{m-1} \Lambda^{vi}(z_i) + \dots \quad (4.13)$$

onde h é o espaçamento entre os nós da malha.

Utilizando o teorema do valor médio para os somatórios sabe-se que existe um ponto ξ no intervalo $[a, b]$ tal que

$$\sum_{i=0}^{m-1} \Lambda^{ii}(z_i) = M \Lambda^{ii}(\xi) \quad (4.14)$$

Similarmente, existe um ponto $\zeta \in [a, b]$ tal que

$$\sum_{i=0}^{m-1} \Lambda^{iv}(z_i) = M \Lambda^{iv}(\zeta) \quad (4.15)$$

e, existe um ponto $\varsigma \in [a, b]$ tal que

$$\sum_{i=0}^{m-1} \Lambda^{vi}(z_i) = M \Lambda^{vi}(\varsigma) \quad (4.16)$$

Vale salientar aqui que a ideia dada pelas Eqs. (4.14) a (4.16) se estende para as demais derivadas que não aparecem explicitamente na Eq. (4.13).

Sabendo que $m = (b - a)/h$ a Eq. (4.13) fica

$$T_{1D} = \frac{h}{2} \left[\Lambda(a) + \Lambda(b) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \Lambda_i(x_i) \right] - (b - a) \frac{h^2}{12} \Lambda^{ii}(\xi) - (b - a) \frac{h^4}{480} \Lambda^{iv}(\zeta) - (b - a) \frac{h^6}{53760} \Lambda^{vi}(\varsigma) + \dots \quad (4.17)$$

Portanto, para uma dimensão, a regra do trapézio composta é dada por

$$T_{1D} = \frac{h}{2} \left[\Lambda(a) + \Lambda(b) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} \Lambda(x_i) \right] + \varepsilon_{T_{1D}} \quad (4.18)$$

onde ε representa a expressão do erro de truncamento dado pela Eq. (4.19).

$$\varepsilon_{T_{1D}} = -(b-a) \frac{h^2}{12} \Lambda^{ii}(\xi) - (b-a) \frac{h^4}{480} \Lambda^{iv}(\zeta) - (b-a) \frac{h^6}{53760} \Lambda^{vi}(\varsigma) + \dots \quad (4.19)$$

Pode-se verificar por meio da Eq. (4.19) que as ordens verdadeiras são $p_v = 2, 4, 6, \dots$.

Estendendo, agora, para duas dimensões, a técnica apresentada na Eq. (4.17) é utilizada na aproximação da integral dupla (Eq. (4.2)) (Burden e Faires, 2003) dada pela Eq. (4.3).

Para a obtenção da regra do trapézio composta dada pela Eq.(4.3), inicialmente utiliza-se a regra para aproximar

$$\int_c^d \Lambda(x, y) dy \quad (4.20)$$

considerando x como uma constante.

Seja $y_j = c + jh_y$ para $j = 1, 2, \dots, n$. Então

$$\begin{aligned} \int_c^d \Lambda(x, y) dy &= \frac{h_y}{2} \left[\Lambda(x, c) + \Lambda(x, d) + 2 \sum_{j=2}^{n-1} \Lambda(x, y_j) \right] - (d-c) \frac{h_y^2}{12} \Lambda^{ii}(x, \xi) \\ &\quad - (d-c) \frac{h_y^4}{480} \Lambda^{iv}(x, \zeta) - (d-c) \frac{h_y^6}{53760} \Lambda^{vi}(x, \varsigma) - \dots \end{aligned} \quad (4.21)$$

para algum ξ, ζ e $\varsigma \in (c, d)$. Assim,

$$\begin{aligned}
\int_a^b \int_c^d \Lambda(x, y) dy dx &= \frac{h_y}{2} \left[\int_a^b \Lambda(x, c) dx + \int_a^b \Lambda(x, d) dx + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \int_a^b \Lambda(x, y_j) dx \right] \\
&\quad - (d - c) \frac{h_y^2}{12} \int_a^b \Lambda^{ii}(x, \xi) dx - (d - c) \frac{h_y^4}{480} \int_a^b \Lambda^{iv}(x, \zeta) dx \\
&\quad - (d - c) \frac{h_y^6}{53760} \int_a^b \Lambda^{vi}(x, \varsigma) dx - \dots
\end{aligned} \tag{4.22}$$

A regra do trapézio composta é agora empregada sobre as integrais na Eq. (4.22). Seja $x_i = a + ih_x$ para $i = 1, 2, \dots, m$. Então para cada $j = 1, 2, \dots, n$, tem-se

$$\begin{aligned}
\int_a^b \Lambda(x, y_j) dx &= \frac{h_x}{2} \left[\Lambda(a, y_j) + \Lambda(b, y_j) + 2 \sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, y_j) \right] \\
&\quad - (b - a) \frac{h_x^2}{12} \Lambda^{ii}(\xi_x, \xi_y) - (d - c) \frac{h_x^4}{480} \Lambda^{iv}(\zeta_x, \zeta_y) \\
&\quad - (d - c) \frac{h_x^6}{53760} \Lambda^{vi}(\varsigma_x, \varsigma_y) - \dots
\end{aligned} \tag{4.23}$$

para algum ξ_x, ζ_x e $\varsigma_x \in (a, b)$ e ξ_y, ζ_y e $\varsigma_y \in (c, d)$. A regra do trapézio composta bidimensional tem a forma

$$\begin{aligned}
T_{2D} &= \int_a^b \int_c^d \Lambda(x, y) dy dx \\
&= \frac{h_x h_y}{4} \left\{ \left[\Lambda(a, c) + \Lambda(b, c) + 2 \sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, c) \right] \right. \\
&\quad + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \left(\Lambda(a, y_j) + \Lambda(b, y_j) + 2 \sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, y_j) \right) \\
&\quad \left. + \left[\Lambda(a, d) + \Lambda(b, d) + 2 \sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, d) \right] \right\} + \varepsilon_{T_{2D}}
\end{aligned} \tag{4.24}$$

com erro de truncamento

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{T_{2D}} = & -\frac{h_y(b-a)h_x^2}{24} \left[\Lambda_x^{ii}(\xi_x, c) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \Lambda_x^{ii}(\xi_j, y_j) + \Lambda_x^{ii}(\xi_m, d) \right] \\
& - \frac{h_y(b-a)h_x^4}{960} \left[\Lambda_x^{iv}(\zeta_0, c) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \Lambda_x^{iv}(\zeta_j, y_j) + \Lambda_x^{iv}(\zeta_m, d) \right] \\
& - \frac{h_y(b-a)h_x^6}{107520} \left[\Lambda_x^{vi}(\varsigma_0, c) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \Lambda_x^{vi}(\varsigma_j, y_j) + \Lambda_x^{vi}(\varsigma_m, d) \right] \\
& - \frac{(d-c)h_y^2}{12} \int_a^b \Lambda_y^{ii}(x, \xi_y) dx - \frac{(d-c)h_y^4}{480} \int_a^b \Lambda_y^{iv}(x, \zeta_y) dx \\
& - \frac{(d-c)h_y^6}{53760} \int_a^b \Lambda_y^{vi}(x, \varsigma_y) dx - \dots
\end{aligned} \tag{4.25}$$

onde $\Lambda_x^{ii}, \Lambda_x^{iv}$ e Λ_x^{vi} denotam as derivadas parciais em x e $\Lambda_y^{ii}, \Lambda_y^{iv}$ e Λ_y^{vi} denotam as derivadas parciais em y . Se as derivadas parciais em x são contínuas, o teorema do valor médio pode ser aplicado repetidas vezes podendo ser substituídas por um valor comum, então a Eq. (4.25) passa a ser

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{T_{2D}} = & -\frac{h_y(b-a)h_x^2}{24} [2n\Lambda_x^{ii}(\bar{\rho}_1, \bar{\sigma}_1)] - \frac{h_y(b-a)h_x^4}{960} [2n\Lambda_x^{iv}(\bar{\rho}_2, \bar{\sigma}_2)] \\
& - \frac{h_y(b-a)h_x^6}{107520} [2n\Lambda_x^{vi}(\bar{\rho}_3, \bar{\sigma}_3)] - \frac{(d-c)h_y^2}{12} \int_a^b \Lambda_y^{ii}(x, \xi_y) dx \\
& - \frac{(d-c)h_y^4}{480} \int_a^b \Lambda_y^{iv}(x, \zeta_y) dx - \frac{(d-c)h_y^6}{53760} \int_a^b \Lambda_y^{vi}(x, \varsigma_y) dx - \dots
\end{aligned} \tag{4.26}$$

para algum $(\bar{\rho}_i, \bar{\sigma}_j)$ em \mathbb{R} . Da mesma forma, se as derivadas parciais em y são contínuas, a aplicação do teorema do valor médio implica que

$$\int_a^b \Lambda_y^s(x, \eta) dx = (b-a)\Lambda_y^s(\hat{\rho}, \hat{\sigma}) \tag{4.27}$$

para algum $(\hat{\rho}, \hat{\sigma})$ em \mathbb{R} . Sabendo-se que $n = (d-c)/h_y$, a Eq. (4.26) fica

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{T_{2D}} = & -\frac{(b-a)(d-c)h_x^2}{12}\Lambda_x^{ii}(\bar{\rho}_1, \bar{\sigma}_1) - \frac{(b-a)(d-c)h_x^4}{480}\Lambda_x^{iv}(\bar{\rho}_2, \bar{\sigma}_2) \\
& - \frac{(b-a)(d-c)h_x^6}{53760}\Lambda_x^{vi}(\bar{\rho}_3, \bar{\sigma}_3) - \frac{(b-a)(d-c)h_y^2}{12}\Lambda_y^{ii}(\hat{\rho}_1, \hat{\sigma}_1) \\
& - \frac{(b-a)(d-c)h_y^4}{480}\Lambda_y^{iv}(\hat{\rho}_2, \hat{\sigma}_2) - \frac{(b-a)(d-c)h_y^6}{53760}\Lambda_y^{vi}(\hat{\rho}_3, \hat{\sigma}_3) - \dots \quad (4.28)
\end{aligned}$$

■

Substituindo a Eq. (4.24) na Eq. (4.1) e fazendo as devidas adaptações, chega-se a seguinte expressão para a variável temperatura média

$$\begin{aligned}
\Lambda_m = & \frac{h_x h_y}{4L_x L_y} \left[\Lambda(0,0) + \Lambda(L_x, 0) + \Lambda(0, L_y) + \Lambda(L_x, L_y) + 2 \sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, 0) \right. \\
& \left. + 2 \sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, L_y) + 2 \sum_{j=2}^{n-1} \Lambda(0, y_j) + 2 \sum_{j=2}^{n-1} \Lambda(L_x, y_j) + 4 \sum_{j=2}^{n-1} \left(\sum_{i=2}^{m-1} \Lambda(x_i, y_j) \right) \right] \quad (4.29)
\end{aligned}$$

Considerando $h = h_x = h_y$, o erro de truncamento

$$\varepsilon_{T_{2D}} = -\frac{h^2}{12}(\Lambda_x^{ii} + \Lambda_y^{ii}) - \frac{h^4}{480}(\Lambda_x^{iv} + \Lambda_y^{iv}) - \frac{h^6}{53760}(\Lambda_x^{vi} + \Lambda_y^{vi}) - \dots \quad (4.30)$$

Como as derivadas parciais são diferentes de zero, as ordens verdadeiras para o erro no cálculo de Λ_m são $p_V = 2, 4, 6, \dots$. E, sendo assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de Λ_m é $p_V = 2$.

De forma equivalente pode-se representar a Eq. (4.29) como (Dahlquist e Bjorck, 2003)

$$\Lambda_m = \frac{h_x h_y}{4L_x L_y} \sum_{i=2}^{N_x} \sum_{j=2}^{N_y} (\Lambda_{i,j} + \Lambda_{i-1,j} + \Lambda_{i-1,j-1} + \Lambda_{i,j-1}) \quad (4.31)$$

onde $N_x \times N_y$ é o número total de pontos.

Uma vez efetuada a discretização do domínio do problema, para a determinação das incógnitas aplica-se um método numérico. As derivadas ou integrais, que aparecem na equação original, são substituídas (ou aproximadas) por esquemas numéricos. A aplicação

desses esquemas nos pontos do domínio discretizado determina um sistema de equações algébricas, cuja solução fornece os valores das incógnitas do problema nesses pontos discretos.

4.2 SÉRIE DE TAYLOR

As aproximações por diferenças finitas para derivadas parciais são baseadas na expansão da série de Taylor de uma ou mais variáveis (LAPIDUS e PINDER, 1999). Todas introduzem erros de truncamento cuja presença será representada pelo emprego da notação “O” indicando a ordem de acurácia. No caso de uma variável tem-se

$$\Lambda_x = \Lambda_j + \Lambda_j^i (x - x_j) + \Lambda_j^{ii} \frac{(x - x_j)^2}{2!} + \Lambda_j^{iii} \frac{(x - x_j)^3}{3!} + \dots + \Lambda_j^M \frac{(x - x_j)^M}{M!} \quad (4.32)$$

A Eq. (4.32) é válida se Λ_x é uma função contínua de x no intervalo fechado $[x_0, x_L]$ e possui derivadas $(\Lambda_j^i, \Lambda_j^{ii}, \dots, \Lambda_j^M)$ contínuas até a ordem M neste mesmo intervalo (MARCHI, 2001).

A série infinita para duas variáveis é definida como:

$$\Lambda(x + h_x, y + h_y) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \left(h_x \frac{\partial}{\partial x} + h_y \frac{\partial}{\partial y} \right)^i \Lambda(x, y) \quad (4.33)$$

onde i denota ambas, potência e derivada da expressão.

Esta série é análoga à série de Taylor para uma variável. Como no caso de uma variável, se a série de Taylor é truncada, o termo da parte restante ou erro é necessário para estabelecer a igualdade. Então a equação apropriada fica

$$\Lambda(x + h_x, y + h_y) = \sum_{i=0}^{M-1} \frac{1}{i!} \left(h_x \frac{\partial}{\partial x} + h_y \frac{\partial}{\partial y} \right)^i \Lambda(x, y) + \frac{1}{M!} \left(h_x \frac{\partial}{\partial x} + h_y \frac{\partial}{\partial y} \right)^M \Lambda(\bar{x}, \bar{y}) \quad (4.34)$$

O ponto (\bar{x}, \bar{y}) está sobre o segmento de linha que une (x, y) a $(x + h_x, y + h_y)$ no plano (CHENEY e KINCAID, 2008; CARNAHAN et al., 1990).

Sejam os pontos $P_{i,j}$ obtidos na aproximação discreta do domínio como mencionado na seção anterior com espaçamento uniforme $h_x = \Delta x$ e $h_y = \Delta y$ para o caso bidimensional.

A aproximação da derivada da variável dependente $\left. \frac{\partial \Lambda}{\partial x} \right|_{i,j}$ é desenvolvida com a notação $\Lambda_{P_x}^i$ onde Λ_{P_x} é o valor analítico exato obtido em qualquer coordenada (i, j) na direção x , com a expansão da série de Taylor a partir do nó $P_{i,j}$, onde são conhecidos os valores analíticos exatos de $\Lambda_{i,j}$ e suas derivadas $(\Lambda_{P_x}^i, \Lambda_{P_x}^{ii}, \dots, \Lambda_{P_x}^M)$. Analogamente, $\left. \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right|_{i,j}$ é desenvolvida com a notação $\Lambda_{P_y}^i$ onde Λ_{P_y} é o valor analítico exato obtido em qualquer coordenada (i, j) na direção y , com a expansão da série de Taylor a partir do nó $P_{i,j}$, onde são conhecidos os valores analíticos exatos de $\Lambda_{i,j}$ e suas derivadas $(\Lambda_{P_y}^i, \Lambda_{P_y}^{ii}, \dots, \Lambda_{P_y}^M)$.

A expansão da série de Taylor para cada direção, em torno do ponto $P = (i, j)$, indicado na Fig 3.1, para o caso bidimensional fica

$$\Lambda_E = \Lambda_{i+1,j} = \Lambda_P + \Lambda_{P_x}^i h_x + \Lambda_{P_x}^{ii} \frac{h_x^2}{2!} + \Lambda_{P_x}^{iii} \frac{h_x^3}{3!} + \Lambda_{P_x}^{iv} \frac{h_x^4}{4!} + \Lambda_{P_x}^v \frac{h_x^5}{5!} + \Lambda_{P_x}^{vi} \frac{h_x^6}{6!} + \dots \quad (4.35)$$

$$\Lambda_W = \Lambda_{i-1,j} = \Lambda_P - \Lambda_{P_x}^i h_x + \Lambda_{P_x}^{ii} \frac{h_x^2}{2!} - \Lambda_{P_x}^{iii} \frac{h_x^3}{3!} + \Lambda_{P_x}^{iv} \frac{h_x^4}{4!} - \Lambda_{P_x}^v \frac{h_x^5}{5!} + \Lambda_{P_x}^{vi} \frac{h_x^6}{6!} - \dots \quad (4.36)$$

$$\Lambda_N = \Lambda_{i,j+1} = \Lambda_P + \Lambda_{P_y}^i h_y + \Lambda_{P_y}^{ii} \frac{h_y^2}{2!} + \Lambda_{P_y}^{iii} \frac{h_y^3}{3!} + \Lambda_{P_y}^{iv} \frac{h_y^4}{4!} + \Lambda_{P_y}^v \frac{h_y^5}{5!} + \Lambda_{P_y}^{vi} \frac{h_y^6}{6!} + \dots \quad (4.37)$$

$$\Lambda_S = \Lambda_{i,j-1} = \Lambda_P - \Lambda_{P_y}^i h_y + \Lambda_{P_y}^{ii} \frac{h_y^2}{2!} - \Lambda_{P_y}^{iii} \frac{h_y^3}{3!} + \Lambda_{P_y}^{iv} \frac{h_y^4}{4!} - \Lambda_{P_y}^v \frac{h_y^5}{5!} + \Lambda_{P_y}^{vi} \frac{h_y^6}{6!} - \dots \quad (4.38)$$

Os fenômenos físicos podem ser divididos em estacionários e transientes. Tendo em vista que a discretização de EDP's estacionárias para duas dimensões é apenas uma generalização direta das técnicas válidas para funções de uma única variável, o mesmo ocorre com os procedimentos para a discretização temporal para duas dimensões.

Na discretização no tempo, quando se usa o esquema implícito trabalha-se com derivadas mistas no tempo e no espaço, e a expansão da série de Taylor em cada direção, em torno do ponto $P = (i, j, k)$, é baseada na Eq. (4.33). Com esta ideia em mente a notação para as derivadas são modificadas para indicar em que direção a variável é derivada, por exemplo, a notação $\Lambda_{P_{xt}}^{ii}$ indica que a função é derivada duas vezes, uma vez na direção x e outra na direção t . O parâmetro k se refere ao passo no tempo. Assim, temos

$$\begin{aligned} \Lambda_E = \Lambda_{i+1,j,k+1} = \Lambda_P + \Lambda_{P_x}^i h_x + \Lambda_{P_t}^i k + \Lambda_{P_{xx}}^{ii} \frac{h_x^2}{2!} + \Lambda_{P_{xt}}^{ii} h_x k + \Lambda_{P_{tt}}^{ii} \frac{k^2}{2!} \\ + \Lambda_{P_{xxx}}^{iii} \frac{h_x^3}{3!} + \frac{1}{2} \Lambda_{P_{xxt}}^{iii} h_x^2 k + \frac{1}{2} \Lambda_{P_{xtt}}^{iii} h_x k^2 + \Lambda_{P_{ttt}}^{iii} \frac{k^3}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_W = \Lambda_{i-1,j,k+1} = \Lambda_P - \Lambda_{P_x}^i h_x + \Lambda_{P_t}^i k + \Lambda_{P_{xx}}^{ii} \frac{h_x^2}{2!} - \Lambda_{P_{xt}}^{ii} h_x k + \Lambda_{P_{tt}}^{ii} \frac{k^2}{2!} \\ - \Lambda_{P_{xxx}}^{iii} \frac{h_x^3}{3!} + \frac{1}{2} \Lambda_{P_{xxt}}^{iii} h_x^2 k - \frac{1}{2} \Lambda_{P_{xtt}}^{iii} h_x k^2 + \Lambda_{P_{ttt}}^{iii} \frac{k^3}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_N = \Lambda_{i,j+1,k+1} = \Lambda_P + \Lambda_{P_y}^i h_y + \Lambda_{P_t}^i k + \Lambda_{P_{yy}}^{ii} \frac{h_y^2}{2!} + \Lambda_{P_{yt}}^{ii} h_y k + \Lambda_{P_{tt}}^{ii} \frac{k^2}{2!} \\ + \Lambda_{P_{yyy}}^{iii} \frac{h_y^3}{3!} + \frac{1}{2} \Lambda_{P_{yyt}}^{iii} h_y^2 k + \frac{1}{2} \Lambda_{P_{ytt}}^{iii} h_y k^2 + \Lambda_{P_{ttt}}^{iii} \frac{k^3}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_S = \Lambda_{i,j-1,k+1} = \Lambda_P - \Lambda_{P_y}^i h_y + \Lambda_{P_t}^i k + \Lambda_{P_{yy}}^{ii} \frac{h_y^2}{2!} - \Lambda_{P_{yt}}^{ii} h_y k + \Lambda_{P_{tt}}^{ii} \frac{k^2}{2!} \\ - \Lambda_{P_{yyy}}^{iii} \frac{h_y^3}{3!} + \frac{1}{2} \Lambda_{P_{yyt}}^{iii} h_y^2 k - \frac{1}{2} \Lambda_{P_{ytt}}^{iii} h_y k^2 + \Lambda_{P_{ttt}}^{iii} \frac{k^3}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (4.42)$$

A partir destas expressões podem-se obter esquemas por diferenças finitas truncados para substituir em uma EDP. Os termos truncados levam ao erro de truncamento local, que é utilizado para fornecer uma medida da acurácia da aproximação por esta técnica.

Para qualquer EDP existem muitas dessas possíveis representações finitas com erros de truncamento locais menores (ou seja, de ordem superior em potências de h_x, h_y, k, \dots) que

devem ser preferidos. Com esse intuito, análises a priori e a posteriori contribuem na escolha dessas representações.

4.3 EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

No presente trabalho, a solução analítica da equação de advecção-difusão bidimensional, bem com as condições de contorno e o termo fonte são determinados por meio do MSF, e os esquemas utilizados para o cálculo numérico incluem o esquema UDS-1 ou CDS-2 com correção adiada, para o termo de advecção, e o esquema CDS-2 para o termo difusivo. Conforme já explicado na seção 2.1, o esquema híbrido (MCA) é aplicado por meio da Eq. (2.1) para produzir a mistura entre os dois esquemas puros. O termo em parênteses é multiplicado por um fator (β) pertencente ao intervalo entre 0 e 1, ou seja, para $\beta = 1$ obtemos a técnica CDS-2 (diferença central de dois pontos) e para $\beta = 0$ a técnica UDS-1.

A escolha dessa equação se deve ao fato de apresentar dois fenômenos físicos de forma que a definição das funções de interpolação exerce influência direta na magnitude do erro de discretização final.

4.3.1 Modelo Matemático

A equação de advecção-difusão (FORTUNA, 2000) utilizada neste trabalho representa o comportamento da temperatura em um domínio bidimensional, com termo fonte, em um sistema de coordenadas cartesianas, para regime permanente e considerando-se propriedades constantes, dada por

$$Pe_x \frac{\partial T}{\partial x} + Pe_y \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + S(x, y) \quad (4.43)$$

onde, T é a temperatura, Pe_i é o número de Péclet com $i = x$ ou y e o termo fonte S é dado por

$$S(x, y) = \frac{\pi[(\pi \text{sen}(\pi x) + Pe_x \cos(\pi x))(e^{Pe_x x} - 1) - 2Pe_x \cos(\pi x)e^{Pe_x}](e^{Pe_y y} - 1)}{(e^{Pe_x} - 1)(e^{Pe_y} - 1)} \quad (4.44)$$

obtido por meio do MSF (ver seção 3.3).

Admitindo o sistema retangular de coordenadas espaciais no domínio dado por $D = \{(x, y) | 0 < x < 1, 0 < y < 1\}$, representada esquematicamente pela Fig. 4.1.

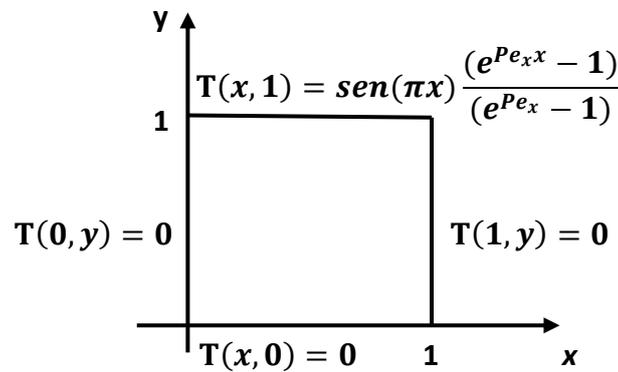


Figura 4.1 Representação esquemática da geometria do problema.

As condições de contorno são dadas por

$$T(0, y) = T(1, y) = T(x, 0) = 0 \quad (4.45)$$

$$T(x, 1) = \text{sen}(\pi x) \frac{(e^{Pe_x x} - 1)}{(e^{Pe_x} - 1)} \quad (4.46)$$

Como já mencionado anteriormente, o termo fonte e as condições de contorno foram ajustadas por meio do MSF de forma a possibilitar a obtenção da solução analítica dada por

$$T(x, y) = \text{sen}(\pi x) \frac{(e^{Pe_x x} - 1)(e^{Pe_y y} - 1)}{(e^{Pe_x} - 1)(e^{Pe_y} - 1)} \quad (4.47)$$

Neste trabalho, por conveniência, os resultados para este problema serão analisados considerando $Pe_x = Pe_y = Pe$. Sendo assim, os valores de Pe a serem assumidos para análise são: $Pe = 0,1$, $Pe = 1$ e $Pe = 10$. A escolha desses valores é atribuída somente a fim

de testes iniciais, não havendo relação a qualquer caso específico. As superfícies geradas pela Eq. (4.47) sobre um domínio quadrado unitário estão representadas nas Figs. 4.2, 4.3 e 4.4 para os valores de Pe mencionados.

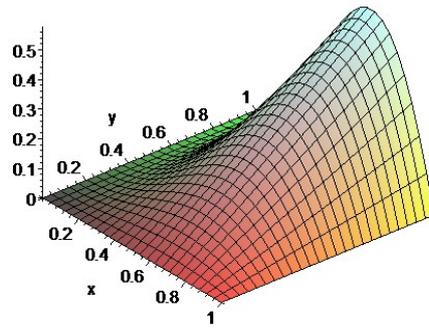


Figura 4.2 Visualização gráfica da solução analítica para Péclet igual a 0,1.

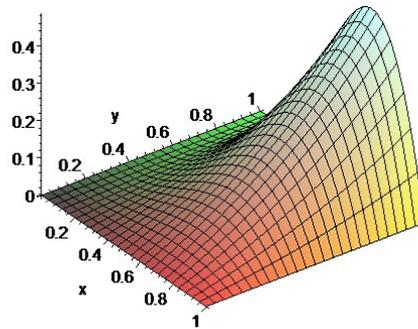


Figura 4.3 Visualização gráfica da solução analítica para Péclet igual a 1.

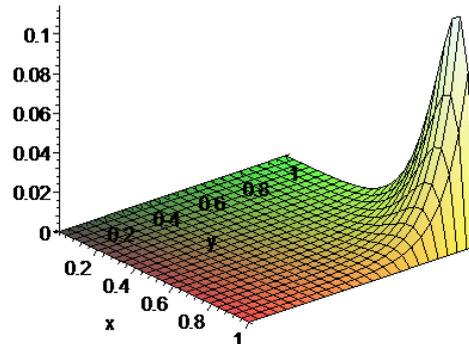


Figura 4.4 Visualização gráfica da solução analítica para Péclet igual a 10.

4.3.1.1 Solução analítica da temperatura no centro do domínio - T_c

A análise da variável de interesse $T_c = T\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ é obtida por meio da Eq. (4.47) no ponto $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, então

$$T\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{\left(e^{\frac{Pe_x}{2}} - 1\right)\left(e^{\frac{Pe_y}{2}} - 1\right)}{\left(e^{Pe_x} - 1\right)\left(e^{Pe_y} - 1\right)} \quad (4.48)$$

A Tab. 4.1 apresenta as soluções analíticas da temperatura no centro do domínio para três valores distintos de Pe obtidos com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos e apresentados em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10). A quantidade de algarismos significativos tem como objetivo a redução de erro de arredondamento.

Tabela 4.1 Solução analítica da temperatura no centro do domínio segundo Pe^*

| Pe | T_c – Temperatura no centro do domínio |
|------|--|
| 0,1 | 2,376587884346732093970260689836405411328610711041993258567119887E-1 |
| 1 | 1,425369565965509462917967392334845770566490757387810725958398425E-1 |
| 10 | 4,479425349470064536344587718094363861434241230946352843570823903E-5 |

*obtidos com software Maple® 7 com 64 algarismos significativos.

4.3.1.2 Solução analítica da temperatura média - T_m

Substituindo a Eq. (4.47) na Eq. (4.1) e assumindo $L_x = L_y = 1$, obtém-se

$$T_m = \int_0^1 \int_0^1 \text{sen}(\pi x) \frac{\left(e^{Pe_x x} - 1\right)\left(e^{Pe_y y} - 1\right)}{\left(e^{Pe_x} - 1\right)\left(e^{Pe_y} - 1\right)} dx dy$$

o que resulta em

$$T_m = \frac{\left(e^{Pe_y} - Pe_y - 1\right)}{Pe_y \left(e^{Pe_x} - 1\right)\left(e^{Pe_y} - 1\right)} \left(\frac{\pi^2 e^{Pe_x} - 2Pe_x^2 - \pi^2}{\pi \left(Pe_x^2 + \pi^2\right)} \right) \quad (4.49)$$

A Tab. 4.2 apresenta as soluções analíticas da temperatura média para três valores distintos de Pe obtidos com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos e apresentados em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.2 Solução analítica da temperatura média segundo Pe^*

| Pe | T_m – Temperatura média |
|------|---|
| 0,1 | 1,533319631872591456251250459502716193840696667794638682914783216 E-1 |
| 1 | 1,065707748555485877231978274957814201311556506433643378276701080E-1 |
| 10 | 2,855455115952600994662426060679163024266631473666163718019427983E-3 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos significativos

4.3.1.3 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste - q_e

Conforme a definição

$$q_e = -k \int_0^1 \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=1} dy \quad (4.50)$$

a solução da taxa de transferência de calor ao leste (q_e) resulta em

$$q_e = \frac{k\pi(e^{Pe_y} - Pe_y - 1)}{Pe_y(e^{Pe_y} - 1)} \quad (4.51)$$

A Tab. 4.3 apresenta as soluções analíticas da temperatura no centro do domínio para três valores distintos de Pe obtidos com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos e apresentados em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.3 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste segundo Pe^*

| Pe | q_e – Taxa de transferência de calor ao leste |
|------|--|
| 0,1 | 1,544620750299484857926184661799807649510525314746505998539436307E+0 |
| 1 | 1,313258906728736785901676493265882532530190610268452209315263951E+0 |
| 10 | 3,140166307975649389141478551163743578983403739318618125873994193E-1 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos significativos

4.3.1.4 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao norte - q_n

Conforme a definição

$$q_n = -k \int_0^1 \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=1} dx \quad (4.52)$$

a solução da taxa de transferência de calor ao leste (q_n) resulta em

$$q_n = k \left[\frac{Pe_y e^{Pe_y} (-\pi^2 e^{Pe_x} + \pi^2 + 2Pe_x^2)}{\pi(Pe_x^2 + \pi^2)(e^{Pe_x} - 1)(e^{Pe_y} - 1)} \right] \quad (4.53)$$

A Tab. 4.4 apresenta as soluções analíticas da temperatura no centro do domínio para três valores distintos de Pe obtidos com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos e apresentados em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.4 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao norte segundo Pe^*

| Pe | q_n – Taxa de transferência de calor ao norte |
|------|---|
| 0,1 | -3,277136168992216101845755675539402943175571290065504600676127772E-1 |
| 1 | -4,033088256682178831390090922055338129677574055536874519455004251E-1 |
| 10 | -2,856881840536501826602021405923853213079859926424899593798001466E-1 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos significativos.

4.3.1.5 Definição da norma l_1 do erro numérico - L

Definição da norma l_1 média do erro numérico

$$L = \frac{\sum_{P=1}^N |T_P^{analítico} - T_P^{numérico}|}{N} \quad (4.54)$$

onde $P=(x,y)$ e $N = (N_x - 1) \times (N_y - 1)$ é o número total de pontos da malha. A solução analítica de L é zero.

4.3.2 Modelo Numérico

A equação de advecção-difusão expressa na forma da Eq. (4.43) pode ser representada esquematicamente por meio de um método numérico na qual a ideia básica consiste em transformar um domínio contínuo em um problema discreto com um número finito de pontos nodais. Sendo assim, a construção das aproximações é baseada em uma malha regular de pontos (nós), como mostra a Fig. 3.1.

O esquema que descreve a aproximação para a representação da difusão é obtida por meio da função de interpolação CDS-2, ou seja, adicionando as Eq. (4.35) e a Eq. (4.36), chega-se a

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_W + T_E - 2T_{P_x}}{h_x^2} - T_{P_x}^{iv} \frac{h_x^2}{12} - T_{P_x}^{vi} \frac{h_x^4}{360} - T_{P_x}^{viii} \frac{h_x^6}{20160} - T_{P_x}^x \frac{h_x^8}{1814400} - \dots \quad (4.55)$$

Reescrevendo a Eq. (4.55) na forma

$$\Lambda_P^{ii} = (\lambda_{CDS-2}^{ii})_{P_x} + \varepsilon(\lambda_{CDS-2}^{ii})_{P_x} \quad (4.56)$$

tem-se a derivada segunda, em relação a x , aproximada por

$$(\lambda_{CDS-2}^{ii})_{P_x} = \frac{T_W + T_E - 2T_P}{h_x^2} \quad (4.57)$$

com erro de truncamento dado por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS-2}^{ii})_{P_x} = -T_{P_x}^{iv} \frac{h_x^2}{12} - T_{P_x}^{vi} \frac{h_x^4}{360} - T_{P_x}^{viii} \frac{h_x^6}{20160} - T_{P_x}^x \frac{h_x^8}{1814400} - \dots \quad (4.58)$$

Analogamente, fazendo a relação $\frac{\partial^s T}{\partial y^s} = T_P^s$ e adicionando as equações (4.35) e (4.36), obtém-se

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_N + T_S - 2T_P}{h_y^2} - T_{P_y}^{iv} \frac{h_y^2}{12} - T_{P_y}^{vi} \frac{h_y^4}{360} - T_{P_y}^{viii} \frac{h_y^6}{20160} - T_{P_y}^x \frac{h_y^8}{1814400} - \dots \quad (4.59)$$

onde a derivada segunda, em relação a y , escrita conforme a Eq. (4.56), é aproximada por

$$(\lambda_{CDS-2}^{ii})_{P_y} = \frac{T_N + T_S - 2T_P}{h_y^2} \quad (4.60)$$

com erro de truncamento dado por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS-2}^{ii})_{P_y} = -T_{P_y}^{iv} \frac{h_y^2}{12} - T_{P_y}^{vi} \frac{h_y^4}{360} - T_{P_y}^{viii} \frac{h_y^6}{20160} - T_{P_y}^x \frac{h_y^8}{1814400} - \dots \quad (4.61)$$

Nas aproximações para os termos de advecção é utilizada a técnica CDS-2 com correção adiada sobre UDS-1 conforme a Eq. (2.1) redefinida pela Eq. (4.62).

$$T_P = T_{P,UDS-1} + \beta(T_{P,CDS-2}^* - T_{P,UDS-1}^*) \quad (4.62)$$

onde $T_{P,CDS-2}^*$ e $T_{P,UDS-1}^*$ são os valores conhecidos da iteração anterior e são aplicados conforme o esquema dado pela Eq. (4.63).

$$\beta = \begin{cases} 0, & \text{caso UDS} - 1 \\ 1, & \text{caso CDS} - 2 \\ 0 < \beta < 1, & \text{mistura} \end{cases} \quad (4.63)$$

Neste caso, para o esquema UDS-1 em cada direção espacial tem-se:

Da Eq.(4.36):

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_P - T_W}{h_x} + T_{P_x}^{ii} \frac{h_x}{2!} - T_{P_x}^{iii} \frac{h_x^2}{3!} + T_{P_x}^{iv} \frac{h_x^3}{4!} - T_{P_x}^v \frac{h_x^4}{5!} + T_{P_x}^{vi} \frac{h_x^5}{6!} - T_{P_x}^{vii} \frac{h_x^6}{7!} + \dots \quad (4.64)$$

Da Eq.(4.38):

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T_P - T_S}{h_y} + T_{P_y}^{ii} \frac{h_y}{2!} - T_{P_y}^{iii} \frac{h_y^2}{3!} + T_{P_y}^{iv} \frac{h_y^3}{4!} - T_{P_y}^v \frac{h_y^4}{5!} + T_{P_y}^{vi} \frac{h_y^5}{6!} - T_{P_y}^{vii} \frac{h_y^6}{7!} + \dots \quad (4.65)$$

E para o esquema CDS-2 subtrai-se as equações (4.35) e (4.36) para a derivada primeira e chega-se a Eq. (4.66)

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_E - T_W}{2h_x} - T_{P_x}^{iii} \frac{h_x^2}{3!} - T_{P_x}^v \frac{h_x^4}{5!} - T_{P_x}^{vii} \frac{h_x^6}{7!} - T_{P_x}^{ix} \frac{h_x^8}{9!} - \dots \quad (4.66)$$

A mesma ideia é aplicada para as equações (4.37) e (4.38) para obter

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T_N - T_S}{2h_y} - T_{P_y}^{iii} \frac{h_y^2}{3!} - T_{P_y}^v \frac{h_y^4}{5!} - T_{P_y}^{vii} \frac{h_y^6}{7!} - T_{P_y}^{ix} \frac{h_y^8}{9!} - \dots \quad (4.67)$$

Substituindo as equações (4.64) e (4.66) na Eq. (4.62) chega-se ao esquema de correção adiada em x

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_P - T_W}{h_x} + \beta \left(\frac{T_W^* - 2T_P^* + T_E^*}{2h_x} \right) + \varepsilon_{\tau_1} \quad (4.68)$$

onde

$$\varepsilon_{\tau_1} = T_{P_x}^{ii} \frac{h_x}{2!} (1 - \beta) - T_{P_x}^{iii} \frac{h_x^2}{3!} + T_{P_x}^{iv} \frac{h_x^3}{4!} (1 - \beta) - T_{P_x}^v \frac{h_x^4}{5!} + T_{P_x}^{vi} \frac{h_x^5}{6!} (1 - \beta) - \dots \quad (4.69)$$

Substituindo as equações (4.65) e (4.67) na Eq. (4.62) chega-se ao esquema de correção adiada em y

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T_P - T_S}{h_y} + \beta \left(\frac{T_S^* - 2T_P^* + T_N^*}{2h_y} \right) + \varepsilon_{\tau_2} \quad (4.70)$$

onde

$$\varepsilon_{\tau_2} = T_{P_y}^{ii} \frac{h_y}{2!} (1 - \beta) - T_{P_y}^{iii} \frac{h_y^2}{3!} + T_{P_y}^{iv} \frac{h_y^3}{4!} (1 - \beta) - T_{P_y}^v \frac{h_y^4}{5!} + T_{P_y}^{vi} \frac{h_y^5}{6!} (1 - \beta) - \dots \quad (4.71)$$

Substituindo as equações (4.55), (4.59), (4.68) e (4.70) na Eq. (4.43) obtém-se

$$\begin{aligned} \left(\frac{Pe_x}{h_x} + \frac{Pe_y}{h_y} + \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2} \right) T_P &= \left(\frac{Pe_x}{h_x} + \frac{1}{h_x^2} \right) T_W + \left(\frac{Pe_y}{h_y} + \frac{1}{h_y^2} \right) T_S + \frac{1}{h_x^2} T_E - \frac{1}{h_y^2} T_N + \\ S(x, y) + \beta &\left[\left(\frac{Pe_x}{h_x} + \frac{Pe_y}{h_y} \right) T_P^* - \frac{Pe_x}{2h_x} (T_W^* + T_E^*) - \frac{Pe_y}{2h_y} (T_S^* + T_N^*) \right] + \varepsilon_{\tau\beta} \end{aligned} \quad (4.72)$$

onde $\varepsilon_{\tau\beta}$ é o erro de truncamento dado por

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\tau\beta} = \varepsilon_{\tau_1 + \varepsilon_{\tau_2}} &= -\frac{(1 - \beta)}{2!} (T_{P_x}^{ii} h_x + T_{P_y}^{ii} h_y) + (2T_{P_x}^{iii} - T_{P_x}^{iv}) \frac{h_x^2}{12} + (2T_{P_y}^{iii} - T_{P_y}^{iv}) \frac{h_y^2}{12} \\ &- \frac{(1 - \beta)}{4!} (T_{P_x}^{iv} h_x^3 + T_{P_y}^{iv} h_y^3) + (3T_{P_x}^v - T_{P_x}^{vi}) \frac{h_x^4}{360} + (3T_{P_y}^v - T_{P_y}^{vi}) \frac{h_y^4}{360} \\ &- \frac{(1 - \beta)}{6!} (T_{P_x}^{iv} h_x^5 + T_{P_y}^{iv} h_y^5) + (4T_{P_x}^{vii} - T_{P_x}^{viii}) \frac{h_x^6}{20160} + (4T_{P_y}^{vi} - T_{P_y}^{viii}) \frac{h_y^6}{20160} + \dots \end{aligned} \quad (4.73)$$

Escrevendo na forma

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_N T_N + a_S T_S + b_P \quad (4.74)$$

obtemos as seguintes expressões dos coeficientes da matriz do sistema de equações:

$$a_P = \frac{Pe_x}{h_x} + \frac{Pe_y}{h_y} + \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2} \quad (4.75)$$

$$a_W = -\frac{Pe_x}{h_x} - \frac{1}{h_x^2} \quad (4.76)$$

$$a_S = -\frac{Pe_y}{h_y} - \frac{1}{h_y^2} \quad (4.77)$$

$$a_E = -\frac{1}{h_x^2} \quad (4.78)$$

$$a_N = -\frac{1}{h_y^2} \quad (4.79)$$

$$b_P = S_P + \beta \left[\left(\frac{Pe_x}{h_x} + \frac{Pe_y}{h_y} \right) T_P^* - \frac{Pe_x}{2h_x} (T_W^* + T_E^*) - \frac{Pe_y}{2h_y} (T_S^* + T_N^*) \right] \quad (4.80)$$

A solução do problema é obtida considerando $h = h_x = h_y$ nas Eqs. (4.75) a (4.80). Com essa ideia em mente e reescrevendo a Eq. (4.73) temos:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\tau\beta} = & -\frac{(1-\beta)}{2!} (T_{P_x}^{ii} + T_{P_y}^{ii}) h + \left[(2T_{P_x}^{iii} - T_{P_x}^{iv}) + (2T_{P_y}^{iii} - T_{P_y}^{iv}) \right] \frac{h^2}{12} \\ & -\frac{(1-\beta)}{4!} (T_{P_x}^{iv} + T_{P_y}^{iv}) h^3 + \left[(3T_{P_x}^v - T_{P_x}^{vi}) + (3T_{P_y}^v - T_{P_y}^{vi}) \right] \frac{h^4}{360} \\ & -\frac{(1-\beta)}{6!} (T_{P_x}^{iv} + T_{P_y}^{iv}) h^5 + \left[(4T_{P_x}^{vii} - T_{P_x}^{viii}) + (4T_{P_y}^{vii} - T_{P_y}^{viii}) \right] \frac{h^6}{20160} + \dots \end{aligned} \quad (4.81)$$

Como as derivadas parciais são diferentes de zero, as ordens verdadeiras para o erro no cálculo de T são

$$\begin{aligned} 0 \leq \beta < 1 & \implies p_v = 1, 2, 3, 4, \dots \\ \beta = 1 & \implies p_v = 2, 4, 6, 8, \dots \end{aligned} \quad (4.82)$$

Confirmando, assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de T quando o esquema utilizado é UDS-1, $p_L = 1$, e CDS-2, $p_L = 2$.

4.3.2.1 Solução numérica e erro de truncamento da variável T_c

Sendo $T_c = T\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, as ordens verdadeiras do erro no cálculo de T_c , bem como a ordem assintótica, são as mesmas de T .

4.3.2.2 Solução numérica e erro de truncamento da variável T_m

O modelo numérico utilizado segue como definido na seção 4.1 com a Eq. (4.31). A Eq. (4.30) mostra que sendo as derivadas parciais diferentes de zero, as ordens verdadeiras para o erro no cálculo de T_m são $p_V = 2, 4, 6, \dots$. E, sendo assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de T_m é $p_L = 2$.

4.3.2.3 Solução numérica e erro de truncamento da variável q_e

Com base na Eq. (4.64) e na Fig. 3.1 a solução numérica é obtida por meio da aproximação por diferenças finitas do tipo UDS-2 (MARCHI, 2001) para a derivada, e a regra do trapézio composta (caso 1D, ver seção 4.1) para a integração.

Considerando a série de Taylor da forma da Eq. (4.32) e fazendo $x - x_j = x_W - x_P = -h_x$, obtém-se

$$\Lambda_W = \Lambda_P - \Lambda_{P_x}^i h_x + \Lambda_{P_x}^{ii} \frac{h_x^2}{2} - \Lambda_{P_x}^{iii} \frac{h_x^3}{6} + \Lambda_{P_x}^{iv} \frac{h_x^4}{24} - \Lambda_{P_x}^v \frac{h_x^5}{120} + \Lambda_{P_x}^{vi} \frac{h_x^6}{720} - \dots \quad (4.83)$$

que é a Eq. (4.36) reescrita aqui por questões didáticas. Considerando agora que $x - x_j = x_{WW} - x_P = -2h_x$, então

$$\Lambda_{WW} = \Lambda_P - 2\Lambda_{P_x}^i h_x + \Lambda_{P_x}^{ii} \frac{4h_x^2}{2} - \Lambda_{P_x}^{iii} \frac{8h_x^3}{6} + \Lambda_{P_x}^{iv} \frac{16h_x^4}{24} - \Lambda_{P_x}^v \frac{32h_x^5}{120} + \Lambda_{P_x}^{vi} \frac{64h_x^6}{720} - \dots \quad (4.84)$$

Multiplicando a Eq.(4.83) por quatro e desse resultado subtraindo a Eq. (4.84), tem-se

$$4\Lambda_W - \Lambda_{WW} = 3\Lambda_P - 2\Lambda_{P_x}^i h_x + 4\Lambda_{P_x}^{iii} \frac{h_x^3}{6} - 12\Lambda_{P_x}^{iv} \frac{h_x^4}{24} + 28\Lambda_{P_x}^v \frac{h_x^5}{120} - \dots \quad (4.85)$$

Isolando a derivada primeira, fica

$$\Lambda_P^i = \frac{3\Lambda_P - 4\Lambda_W + \Lambda_{WW}}{2h_x} + \Lambda_{P_x}^{iii} \frac{h_x^2}{3} - \Lambda_{P_x}^{iv} \frac{h_x^3}{4} + \Lambda_{P_x}^v \frac{7h_x^4}{60} - \Lambda_P^{vi} \frac{h_x^5}{24} + \dots \quad (4.86)$$

Reescrevendo a Eq. (4.86) na forma da Eq. (4.56) e considerando $h = h_x$, tem-se

$$(\lambda_{UDS-2}^i)_P = \frac{3\Lambda_P - 4\Lambda_W + \Lambda_{WW}}{2h} \quad (4.87)$$

e

$$\varepsilon_1(\lambda_{UDS-2}^i)_P = \Lambda_P^{iii} \frac{h^2}{3} - \Lambda_P^{iv} \frac{h^3}{4} + \Lambda_P^v \frac{7h^4}{60} - \Lambda_P^{vi} \frac{h^5}{24} + \dots \quad (4.88)$$

Assim, para a aproximação da derivada primeira da temperatura, na Eq. (4.50), usando UDS-2, tem-se

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_P = \frac{3T_P - 4T_W + T_{WW}}{2h} \quad (4.89)$$

A regra do trapézio composta (caso 1D, ver seção 4.1) é utilizada para a integração (veja Eq. (4.13)). Com isso, tem-se

$$q_e = -k \sum_{P=2}^{N_y} \left\{ \frac{h}{2} \left[\frac{3T_P - 4T_W + T_{WW}}{2h} + \frac{3T_S - 4T_{SW} + T_{WWS}}{2h} + \varepsilon_{q_e} \right] \right\} \quad (4.90)$$

onde ε_{q_e} é o erro de truncamento resultante da aplicação dos esquemas. De fato, com a Eq. (4.32) podem-se obter as respectivas aproximações da segunda parcela da Eq. (4.90) como foi feito para a primeira parcela, ou seja, fazendo $x - x_j = x_W - x_P = -h_x$ e $y - y_j = y_S - y_P = -h_y$, tem-se

$$\begin{aligned}
\Lambda_{SW} = & \Lambda_P - \Lambda_{P_x}^i h_x - \Lambda_{P_y}^i h_y + \Lambda_{P_x}^{ii} \frac{h_x^2}{2} + \Lambda_{P_y}^{ii} \frac{h_y^2}{2} + \Lambda_{P_{xy}}^{ii} \frac{h_x h_y}{2} - \Lambda_{P_x}^{iii} \frac{h_x^3}{6} - \Lambda_{P_y}^{iii} \frac{h_y^3}{6} \\
& - \Lambda_{P_{xy}}^{iii} \frac{h_x^2 h_y}{2} - \Lambda_{P_{xyy}}^{iii} \frac{h_x h_y^2}{2} + \Lambda_{P_x}^{iv} \frac{h_x^4}{24} + \Lambda_{P_y}^{iv} \frac{h_y^4}{24} + \Lambda_{P_{xxy}}^{iv} \frac{h_x^3 h_y}{6} \\
& + \Lambda_{P_{xyy}}^{iv} \frac{h_x^2 h_y^2}{4} + \Lambda_{P_{xyyy}}^{iv} \frac{h_x h_y^3}{6} - \dots
\end{aligned} \tag{4.91}$$

e, fazendo $x - x_j = x_{WW} - x_P = -2h_x$ e $y - y_j = y_S - y_P = -h_y$, tem-se

$$\begin{aligned}
\Lambda_{WWS} = & \Lambda_P - 2\Lambda_{P_x}^i h_x - \Lambda_{P_y}^i h_y + 2\Lambda_{P_{xx}}^{ii} h_x^2 + 2\Lambda_{P_{xy}}^{ii} h_x h_y + \Lambda_{P_{yy}}^{ii} \frac{h_y^2}{2} - \Lambda_{P_{xxx}}^{iii} \frac{4h_x^3}{3} \\
& - 2\Lambda_{P_{xxy}}^{iii} h_x^2 h_y - \Lambda_{P_{xyy}}^{iii} h_x h_y^2 - \Lambda_{P_{yyy}}^{iii} \frac{h_y^3}{6} + \dots
\end{aligned} \tag{4.92}$$

Considerando $h = h_x = h_y$, multiplicando a Eq.(4.91) por quatro e desse resultado subtraindo a Eq. (4.92), tem-se

$$\begin{aligned}
4\Lambda_{SW} - \Lambda_{WWS} = & 3\Lambda_P - 2\Lambda_{P_x}^i h - 2\Lambda_{P_{xy}}^{ii} h^2 + \left(\Lambda_{P_{xyy}}^{iii} - \frac{2}{3}\Lambda_{P_{xxx}}^{iii} \right) h^3 \\
& + \left(-\frac{1}{3}\Lambda_{P_{xyyy}}^{iv} + \frac{2}{3}\Lambda_{P_{xxy}}^{iv} + \frac{1}{2}\Lambda_{P_{xxx}}^{iv} \right) h^4 \\
& + \left(-\frac{7}{30}\Lambda_{P_{xxxxx}}^v - \frac{1}{2}\Lambda_{P_{xxxxy}}^v - \frac{1}{3}\Lambda_{P_{xxxxy}}^v + \frac{1}{12}\Lambda_{P_{xyyyy}}^v \right) h^5 + \dots
\end{aligned} \tag{4.93}$$

Reescrevendo a Eq. (4.93) na forma da Eq. (4.56), tem-se

$$(\lambda_{UDS-2}^i)_P = \frac{3\Lambda_P - 4\Lambda_{SW} + \Lambda_{WWS}}{2h} \tag{4.94}$$

com erro de truncamento

$$\begin{aligned}
\varepsilon(\lambda_{UDS-2}^i)_P = & \Lambda_{P_{xy}}^{ii} h - \left(\Lambda_{P_{xyy}}^{iii} - \frac{2}{3}\Lambda_{P_{xxx}}^{iii} \right) \frac{h^2}{2} \\
& - \left(-\frac{1}{3}\Lambda_{P_{xyyy}}^{iv} + \frac{2}{3}\Lambda_{P_{xxy}}^{iv} + \frac{1}{2}\Lambda_{P_{xxx}}^{iv} \right) \frac{h^3}{2} \\
& - \left(-\frac{7}{30}\Lambda_{P_{xxxxx}}^v - \frac{1}{2}\Lambda_{P_{xxxxy}}^v - \frac{1}{3}\Lambda_{P_{xxxxy}}^v + \frac{1}{12}\Lambda_{P_{xyyyy}}^v \right) \frac{h^4}{2} - \dots
\end{aligned} \tag{4.95}$$

Com isso, fazendo $\varepsilon_{q_e} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ e multiplicando, o erro de truncamento por $\frac{h}{2}$, da Eq. (4.90) fica

$$\begin{aligned} \varepsilon_{q_e} = & \Lambda_{P_{xy}}^{ii} \frac{h^2}{2} - \left(\Lambda_{P_{xyy}}^{iii} - \frac{4}{3} \Lambda_{P_{xxx}}^{iii} \right) \frac{h^3}{4} - \left(-\frac{1}{3} \Lambda_{P_{xyyy}}^{iv} + \frac{2}{3} \Lambda_{P_{xxxy}}^{iv} \right) \frac{h^4}{4} \\ & - \left(-\frac{7}{15} \Lambda_{P_{xxxxx}}^v - \frac{1}{2} \Lambda_{P_{xxxxy}}^v - \frac{1}{3} \Lambda_{P_{xxxyy}}^v + \frac{1}{12} \Lambda_{P_{xyyyy}}^v \right) \frac{h^5}{4} - \dots \end{aligned} \quad (4.96)$$

Se as derivadas parciais são diferentes de zero, as ordens verdadeiras para o erro de truncamento no cálculo de q_e são $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$. E, sendo assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de q_e é $p_L = 2$.

4.3.2.4 Solução numérica e erro de truncamento da variável q_n

Com base na Eq. (4.65), da mesma forma como desenvolvido na seção anterior para a variável q_e a solução numérica será obtida por meio da aproximação por diferenças finitas do tipo UDS-2 (MARCHI, 2001) para a derivada, e a regra do trapézio composta (caso 1D, seção 4.1) para a integração.

Considerando a série de Taylor da forma dada pela Eq. (4.32). Fazendo $y - y_j = y_S - y_P = -h_y$, então

$$\Lambda_S = \Lambda_P - \Lambda_{P_y}^i h_y + \Lambda_{P_y}^{ii} \frac{h_y^2}{2} - \Lambda_{P_y}^{iii} \frac{h_y^3}{6} + \Lambda_{P_y}^{iv} \frac{h_y^4}{24} - \Lambda_{P_y}^v \frac{h_y^5}{120} + \Lambda_{P_y}^{vi} \frac{h_y^6}{720} - \dots \quad (4.97)$$

que é a Eq. (4.38) reescrita aqui por questões didáticas. Considerando agora que $y - y_j = x_{SS} - x_P = -2h_y$, então

$$\Lambda_{SS} = \Lambda_P - 2h_y \Lambda_{P_y}^i + \Lambda_{P_y}^{ii} \frac{4h_y^2}{2} - \Lambda_{P_y}^{iii} \frac{8h_y^3}{6} + \Lambda_{P_y}^{iv} \frac{16h_y^4}{24} - \Lambda_{P_y}^v \frac{32h_y^5}{120} + \Lambda_{P_y}^{vi} \frac{64h_y^6}{720} - \dots \quad (4.98)$$

Multiplicando a Eq.(4.97) por 4 e desse resultado subtraindo a Eq. (4.98), tem-se

$$4\Lambda_S - \Lambda_{SS} = 3\Lambda_P - 2\Lambda_{P_y}^i h_y + 4\Lambda_{P_y}^{iii} \frac{h_y^3}{6} - 12\Lambda_{P_y}^{iv} \frac{h_y^4}{24} + 28\Lambda_{P_y}^v \frac{h_y^5}{120} - 60\Lambda_{P_y}^{vi} \frac{h_y^6}{720} - \dots \quad (4.99)$$

Isolando a derivada primeira, tem-se

$$\Lambda_P^i = \frac{3\Lambda_P - 4\Lambda_S + \Lambda_{SS}}{2h_y} + \Lambda_P^{iii} \frac{h_y^2}{3} - \Lambda_P^{iv} \frac{h_y^3}{4} + \Lambda_P^v \frac{7h_y^4}{60} - \Lambda_P^{vi} \frac{h_y^5}{24} + \dots \quad (4.100)$$

Reescrevendo a Eq. (4.100) na forma da Eq. (4.56) e considerando $h = h_y$, tem-se

$$(\lambda_{UDS-2}^i)_P = \frac{3\Lambda_P - 4\Lambda_S + \Lambda_{SS}}{2h} \quad (4.101)$$

e

$$\varepsilon_3(\lambda_{UDS-2}^i)_P = \Lambda_P^{iii} \frac{h^2}{3} - \Lambda_P^{iv} \frac{h^3}{4} + \Lambda_P^v \frac{7h^4}{60} - \Lambda_P^{vi} \frac{h^5}{24} + \dots \quad (4.102)$$

Da Eq. (4.52), a aproximação da derivada primeira da temperatura usando UDS-2, tem-se

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_P = \frac{3T_P - 4T_S + T_{SS}}{2h} \quad (4.103)$$

Para a integração numérica utiliza-se a regra do trapézio composta que leva a seguinte expressão

$$q_n = -k \sum_{i=2}^{N_x} \left\{ \frac{h_y}{2} \left[\frac{3T_P - 4T_S + T_{SS}}{2h} + \frac{3T_W - 4T_{SW} + T_{WSS}}{2h} + \varepsilon_{q_n} \right] \right\} \quad (4.104)$$

onde ε_{q_n} é o erro de truncamento resultante da aplicação dos esquemas. De fato, com a Eq. (4.32) obtem-se as respectivas aproximações da segunda parcela da Eq. (4.104), ou seja, fazendo $x - x_j = x_W - x_P = -h_x$ e $y - y_j = y_S - y_P = -h_y$, tem-se

$$\begin{aligned}
\Lambda_{SW} = & \Lambda_P - \Lambda_{P_x}^i h_x - \Lambda_{P_y}^i h_y + \Lambda_{P_x}^{ii} \frac{h_x^2}{2} + \Lambda_{P_y}^{ii} \frac{h_y^2}{2} + \Lambda_{P_{xy}}^{ii} \frac{h_x h_y}{2} - \Lambda_{P_x}^{iii} \frac{h_x^3}{6} - \Lambda_{P_y}^{iii} \frac{h_y^3}{6} \\
& - \Lambda_{P_{xy}}^{iii} \frac{h_x^2 h_y}{2} - \Lambda_{P_{xy}}^{iii} \frac{h_x h_y^2}{2} + \Lambda_{P_x}^{iv} \frac{h_x^4}{24} + \Lambda_{P_y}^{iv} \frac{h_y^4}{24} + \Lambda_{P_{xxy}}^{iv} \frac{h_x^3 h_y}{6} \\
& + \Lambda_{P_{xxy}}^{iv} \frac{h_x^2 h_y^2}{4} + \Lambda_{P_{xyy}}^{iv} \frac{h_x h_y^3}{6} - \dots
\end{aligned} \tag{4.105}$$

Fazendo $x - x_j = x_W - x_P = -h_x$ e $y - y_j = y_{SS} - y_P = -2h_y$, tem-se

$$\begin{aligned}
\Lambda_{WSS} = & \Lambda_P - \Lambda_{P_x}^i h_x - 2\Lambda_{P_y}^i h_y + \Lambda_{P_{xx}}^{ii} \frac{h_x^2}{2} + 2\Lambda_{P_{xy}}^{ii} h_x h_y + 2\Lambda_{P_{yy}}^{ii} h_y^2 - \Lambda_{P_{xxx}}^{iii} \frac{h_x^3}{6} \\
& - \Lambda_{P_{xxy}}^{iii} h_x^2 h_y - 2\Lambda_{P_{xyy}}^{iii} h_x h_y^2 - \Lambda_{P_{yyy}}^{iii} \frac{4h_y^3}{3} + \dots
\end{aligned} \tag{4.106}$$

Considerando $h = h_x = h_y$, multiplicando a Eq.(4.104) por 4 e desse resultado subtraindo a Eq. (4.106), tem-se

$$\begin{aligned}
4\Lambda_{SW} - \Lambda_{WSS} = & 3\Lambda_P - 2\Lambda_{P_y}^i h - 2\Lambda_{P_{xy}}^{ii} h^2 + \left(\Lambda_{P_{xxy}}^{iii} - \frac{2}{3}\Lambda_{P_{yyy}}^{iii} \right) h^3 \\
& + \left(-\frac{1}{3}\Lambda_{P_{xxy}}^{iv} + \frac{2}{3}\Lambda_{P_{xyy}}^{iv} + \frac{1}{2}\Lambda_{P_{yyy}}^{iv} \right) h^4 \\
& + \left(-\frac{7}{30}\Lambda_{P_{yyy}}^{v} - \frac{1}{2}\Lambda_{P_{xyy}}^{v} - \frac{1}{3}\Lambda_{P_{xxy}}^{v} + \frac{1}{12}\Lambda_{P_{xxxxy}}^{v} \right) h^5 + \dots
\end{aligned} \tag{4.107}$$

Reescrevendo a Eq. (4.107) na forma da Eq. (4.56), tem-se

$$(\lambda_{UDS-2}^i)_P = \frac{3\Lambda_P - 4\Lambda_{SW} + \Lambda_{WSS}}{2h} \tag{4.108}$$

com erro de truncamento

$$\begin{aligned}
\varepsilon_4(\lambda_{UDS-2}^i)_P = & \Lambda_{P_{xy}}^{ii} h - \left(\Lambda_{P_{xxy}}^{iii} - \frac{2}{3}\Lambda_{P_{yyy}}^{iii} \right) \frac{h^2}{2} \\
& - \left(-\frac{1}{3}\Lambda_{P_{xxy}}^{iv} + \frac{2}{3}\Lambda_{P_{xyy}}^{iv} + \frac{1}{2}\Lambda_{P_{yyy}}^{iv} \right) \frac{h^3}{2} \\
& - \left(-\frac{7}{30}\Lambda_{P_{yyy}}^{v} - \frac{1}{2}\Lambda_{P_{xyy}}^{v} - \frac{1}{3}\Lambda_{P_{xxy}}^{v} + \frac{1}{12}\Lambda_{P_{xxxxy}}^{v} \right) \frac{h^4}{2} - \dots
\end{aligned} \tag{4.109}$$

Com isso, fazendo $\varepsilon_{q_n} = \varepsilon_3 + \varepsilon_4$ e multiplicando o erro de truncamento ε_{q_n} por $\frac{h}{2}$, da Eq. (4.104) fica

$$\begin{aligned} \varepsilon_{q_n} = & \Lambda_{P_{xy}}^{ii} \frac{h^2}{2} - \left(\Lambda_{P_{xxy}}^{iii} - \frac{4}{3} \Lambda_{P_{yyy}}^{iii} \right) \frac{h^3}{4} - \left(-\frac{1}{3} \Lambda_{P_{xxy}}^{iv} + \frac{2}{3} \Lambda_{P_{xyyy}}^{iv} \right) \frac{h^4}{4} \\ & - \left(-\frac{7}{15} \Lambda_{P_{yyyy}}^v - \frac{1}{2} \Lambda_{P_{xyyy}}^v - \frac{1}{3} \Lambda_{P_{xxyy}}^v + \frac{1}{12} \Lambda_{P_{yyyy}}^v \right) \frac{h^5}{4} - \dots \end{aligned} \quad (4.110)$$

Como as derivadas parciais são diferentes de zero, as ordens verdadeiras para o erro de truncamento no cálculo de q_n são $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$. E, sendo assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de q_n é $p_L = 2$.

4.4 EQUAÇÃO DE FOURIER

Esta seção constitui o desenvolvimento de métodos analíticos e numéricos da equação de Fourier conhecida como a equação da condução do calor em regime transiente. Esta EDP é uma equação bastante referenciada na literatura dos métodos numéricos aplicados na resolução de equações diferenciais parciais (FORTUNA, 2000; INCROPERA et al., 2008).

Para uma melhor compreensão da técnica e do desenvolvimento aplicados na análise da equação de Fourier bidimensional, faz-se primeiramente um estudo sobre os procedimentos no âmbito unidimensional, de forma a considerar-se possíveis efeitos de mudança de domínio no erro numérico e, conseqüentemente, no erro de discretização.

4.4.1 Modelo Matemático Unidimensional

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}$ um domínio limitado com contorno Γ , a EDP (TANNEHILL et al, 1997)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + S(x, t) \quad (4.111)$$

onde α é a difusividade térmica (m^2/s), T é a distribuição da temperatura ao longo de uma barra de comprimento L (metros), isto é, com $x \in \Omega = (0, L)$, $t \in]0, t_f]$ e t_f é o tempo final em segundos, com condições de contorno de Dirichlet e iniciais dados por

$$T(0, t) = T(L, t) = 0 \quad e \quad T(x, 0) = \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (4.112)$$

com termo fonte dado por

$$S(x, t) = (\pi^2 - 1)\text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right)e^{-t} \quad (4.113)$$

Considerando $L = 1 \text{ m}$ e difusividade térmica $\alpha = 1 \text{ (m}^2/s\text{)}$, o termo fonte e as condições de contorno foram ajustados por meio do MSF com base na solução analítica dada por

$$T(x, t) = \text{sen}(\pi x)e^{-t} \quad (4.114)$$

4.4.1.1 Solução analítica da temperatura no centro do domínio - T_c

A análise da variável de interesse $T_c = T\left(\frac{1}{2}, t\right)$ é obtida por meio da Eq. (4.114) no ponto $\left(\frac{1}{2}, t\right)$, então

$$T\left(\frac{1}{2}, t\right) = e^{-t} \quad (4.115)$$

A Tab. 4.5 apresenta a solução analítica da temperatura no centro do domínio para $t_f = 0,1s$ obtidos com o software Maple® 7 com 64 Algarismos significativos. O resultado é apresentado em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.5 Solução analítica da temperatura no centro do domínio - Equação de Fourier 1D*

| $t(s)$ | T_c – Temperatura no centro do domínio |
|--------|--|
| 0,1 | 9,048374180359595731642490594464366211947053609804009520562573171E-1 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos significativos.

4.4.1.2 Solução analítica da temperatura média - T_m .

Substituindo a Eq. (4.114) na Eq. (4.1) tem-se a temperatura média em um certo instante de tempo.

$$T_m = \int_0^1 \text{sen}(\pi x) e^{-t} dx$$

Assim, a solução analítica de T_m é

$$T_m = \frac{2}{\pi} e^{-t} \quad (4.116)$$

A Tab. 4.6 apresenta a solução analítica da temperatura média para $t_f = 0,1$ obtida com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos. O resultado é apresentado em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.6 Solução analítica da temperatura média - Equação de Fourier 1D *

| $t(s)$ | T_m – Temperatura média |
|--------|--|
| 0,1 | 5,760373910997226246556989397445780351823836628770943929109438599E-1 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos significativos.

4.4.1.3 Inclinação - I

Variável local obtida a partir da seguinte definição

$$I = \left(\frac{dT}{dx} \right)_{x=1} \quad (4.117)$$

indica o fluxo de calor no contorno leste.

A solução analítica é

$$I = -\pi e^{-t} \quad (4.118)$$

A Tab. 4.7 apresenta a solução analítica da inclinação para $t_f = 0,1$ obtida com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos. O resultado é apresentado em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.7 Solução analítica da inclinação - Equação de Fourier 1D*

| $t(s)$ | $I - \text{Inclinação}$ |
|--------|---|
| 0,1 | -2,842630585194927275923426048910772115435313553101901066787226499E+0 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos

4.4.1.4 Definição da média da norma l_1 do erro numérico - L

Como definido na Eq. (4.54) a definição da norma l_1 média do erro numérico é reescrita aqui e utilizada para o caso 1D dada por

$$L = \frac{\sum_{P=1}^N |T_P^{\text{analítico}} - T_P^{\text{numérico}}|}{N}$$

onde $P=(x)$ e N é o número total de pontos da malha. Esta variável é calculada em todo instante do tempo, mas é avaliada somente em t_f . A solução analítica de L é zero.

4.4.2 Modelo Numérico Unidimensional

No interesse de obter as ordens verdadeiras do erro de truncamento da aproximação obtida pela aplicação da série de Taylor em uma EDP, em um ponto arbitrário do domínio, deve-se tomar cuidado em usar o mesmo ponto de expansão para a aproximação de todas as derivadas (TANNEHILL et al., 1997).

Na literatura, em geral, a expansão da série de Taylor é realizada considerando o *ponto de expansão conveniente* como indicado na Fig. 4.5. Conforme Tannehill et al. (1997), isso não é uma condição para obter as aproximações, porém, verifica-se que, dependendo da determinação do ponto escolhido, as ordens verdadeiras são afetadas comprometendo uma análise futura.

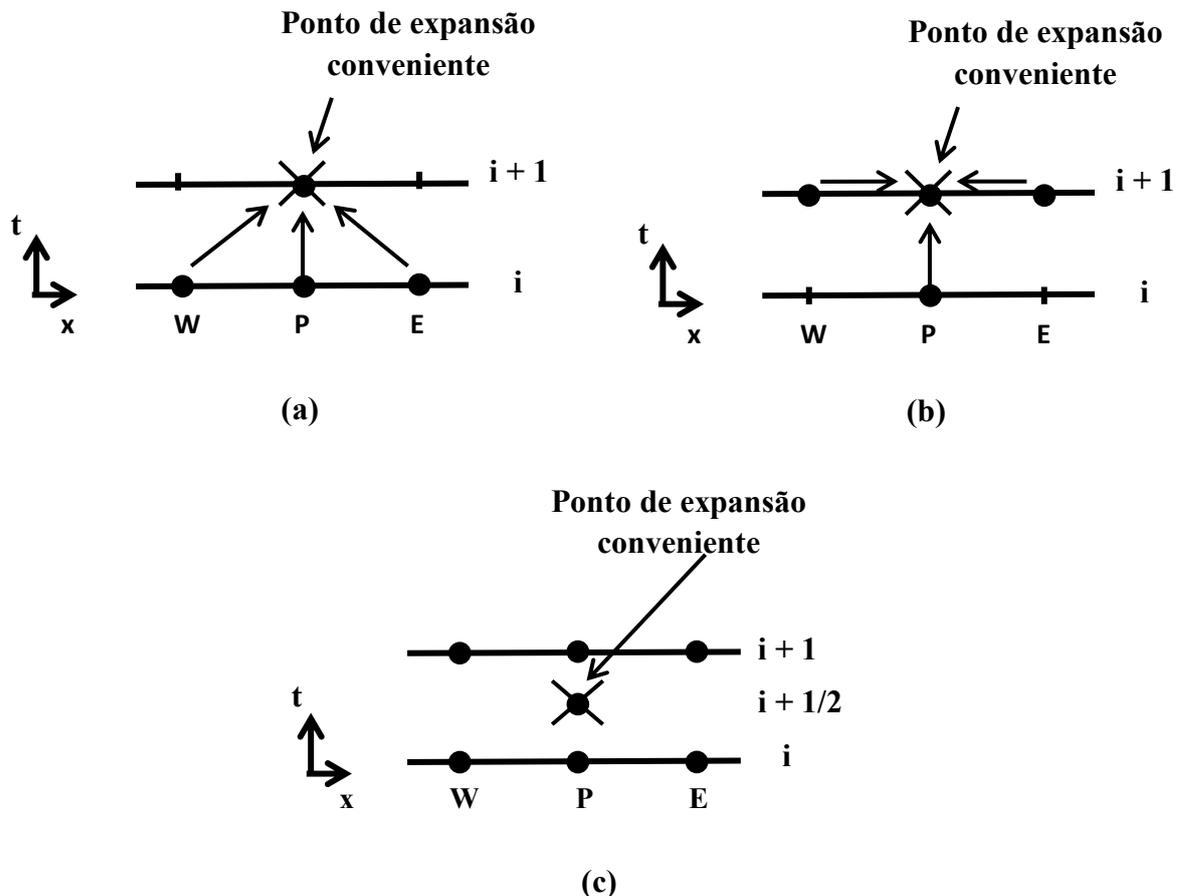


Figura 4.5 Representação esquemática da malha e do ponto de expansão segundo a função de interpolação (a) explícita; (b) totalmente implícita; (c) Crank-Nicolson.

A solução numérica unidimensional é baseada na malha unidimensional apresentada na Fig. 4.5 em termos do tempo com os pontos da malha definidos como na seção 3.2, ou seja, $P = (j)$, $E = (j + 1)$ e $W = (j - 1)$.

Para obter a função de interpolação para equação do calor transiente dada pela Eq. (4.111) a aproximação desenvolvida para o esquema θ se dá pela utilização da Eq. (4.34) para cada derivada, onde i representa a discretização temporal e j a discretização espacial.

Lembrando que os métodos explícito e totalmente implícito diferem somente pelo fato de que o primeiro aproxima $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ por três pontos no nível de tempo t_i (Fig. 4.5 (a)), e o segundo por três pontos, um no nível de tempo t_i e dois no nível de tempo t_{i+1} (Fig. 4.5 (b)).

O esquema θ associa o parâmetro de mistura (θ) aos esquemas explícito, totalmente implícito e ao esquema de Crank-Nicolson conforme indicado na Eq. (4.120) e é definido na forma

$$\frac{T_{1+1,j} - T_{i,j}}{k} = \theta \left(\frac{T_{i+1,j+1} - 2T_{i+1,j} + T_{i+1,j-1}}{h^2} \right) + (1 - \theta) \left(\frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{h^2} \right) + S(x, t) \quad (4.119)$$

onde k é o passo de tempo, $0 \leq \theta \leq 1$ e

$$\theta = \begin{cases} 0, & \text{método explícito} \\ \frac{1}{2}, & \text{Crank - Nicolson} \\ 1, & \text{método totalmente implícito} \end{cases} \quad (4.120)$$

Para calcular o erro de truncamento do esquema θ , quando envolve cinco pontos, toma-se o ponto $(x_j, t_{i+\frac{1}{2}})$ (Fig. 4.5 (c)) como ponto de expansão na série de Taylor. Segundo Tannehill et al. (1997), o erro de truncamento pode ser avaliado tanto nesse ponto quanto no ponto (x_j, t_i) ou em outro ponto qualquer, porém a sua avaliação não considera um termo fonte na equação do calor. Além disso, o ponto $(x_j, t_{i+\frac{1}{2}})$, por simetria, é melhor, pois há maior número de termos na expansão que se cancelam.

Para verificar as considerações acima, a derivada temporal é discretizada com a aplicação do esquema DDS, tomando-se a Eq. (4.35) e reescrita na forma

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{k} + E_{T_1} \quad (4.121)$$

$$E_{T_1} = -T_{2t}^{ii} \frac{k}{2!} - T_{3t}^{iii} \frac{k^2}{3!} - T_{4t}^{iv} \frac{k^3}{4!} - T_{5t}^v \frac{k^4}{5!} - T_{6t}^{vi} \frac{k^5}{6!} - T_{7t}^{vii} \frac{k^6}{7!} - \dots \quad (4.122)$$

onde o índice sobrescrito indica a ordem da derivada e o índice subscrito indica a sequência em que foram calculadas as derivadas segundo uma dada direção, por exemplo, $3t$ significa a derivada da variável dependente T três vezes com relação ao tempo.

Considerando a discretização no tempo, a expressão entre parênteses da primeira parcela do lado direito da Eq. (4.119) pode ser obtida somando-se as Eqs. (4.39) e (4.40) desconsiderando uma direção no espaço na forma

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1,j+1} - 2T_{i+1,j} + T_{i+1,j-1}}{h^2} + E_{T_2} \quad (4.123)$$

onde

$$E_{T_2} = -T_{4x}^{iv} \frac{h^2}{12} - 2T_t^i \frac{k}{h^2} - T_{2xt}^{iii} k - T_{2x2t}^{iv} \frac{k^2}{2} - T_{2t}^{ii} \frac{k^2}{h^2} - T_{3t}^{iii} \frac{k^3}{3h^2} - T_{4t}^{iv} \frac{k^4}{12h^2} - \dots \quad (4.124)$$

onde o índice sobrescrito tem o mesmo sentido já explicado para a Eq. (4.122) e o índice subscrito, indica a sequência em que foram calculadas as derivadas segundo uma dada direção, por exemplo, T_{2xt}^{iii} significa a derivada da variável dependente T , duas vezes com relação a x e uma vez com relação a t .

A expressão entre parênteses da segunda parcela do lado direito da Eq. (4.119) pode ser obtida somando-se as Eqs. (4.37) e (4.38) obtém-se

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{h_x^2} + E_{T_3} \quad (4.125)$$

onde

$$E_{T_3} = -T_{4x}^{iv} \frac{h^2}{12} - T_{6x}^{vi} \frac{h^4}{360} - T_{8x}^{viii} \frac{h^6}{20160} - T_{10x}^x \frac{h^8}{1814400} - \dots \quad (4.126)$$

A discretização da equação do calor transiente com termo fonte (equação de Fourier) é pouco discutida na literatura (STRIKWERDA, 2004; GROSSMANN et al., 2007; QUARTERONI et al., 2007; MOIN, 2010). Em Strikwerda (2004), por exemplo, a única referência se faz ao aplicar o método de Crank-Nicolson em que considera uma aproximação para $S(x, t)$ (da Eq. (4.111)) na forma

$$S \cong \frac{S_{i+1,j} + S_{i,j}}{2} \quad (4.127)$$

Segundo Strikwerda (2004) e Grossmann et al. (2007) quando $\theta = \frac{1}{2}$ a ordem de acurácia (ou assintótica) é $O(h^2 + k^2)$, do contrário é $O(h^2 + k)$, como nos casos em que não há termo fonte.

Para buscar essa conclusão, é necessário ter em mente o ponto de expansão como na Fig. 4.3 (c) e reescrever a expressão dada pela Eq. (4.119) considerando $S(x, t)$ na forma (QUARTERONI et al., 2007)

$$S(x, t) \cong \theta S_{i+1,j} + (1 - \theta) S_{i,j}$$

resultando em

$$\begin{aligned} \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{k} + E_{T_1} = & \theta \left(\frac{T_{i+1,j+1} - 2T_{i+1,j} + T_{i+1,j-1}}{h^2} + S_{i+1,j} + E_{T_2} + E_{T_S} \right) + \\ & (1 - \theta) \left(\frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{h^2} + S_{i,j} + E_{T_3} \right) \end{aligned} \quad (4.128)$$

onde, de acordo com a Eq. (4.35),

$$E_{T_S} = S_t^i k + S_{2t}^{ii} \frac{k^2}{2!} + S_{3t}^{iii} \frac{k^3}{3!} + T_{4t}^{iv} \frac{k^4}{4!} + T_{5t}^v \frac{k^5}{5!} + T_{6t}^{vi} \frac{k^6}{6!} + T_{7t}^{vii} \frac{k^7}{7!} + \dots \quad (4.129)$$

Substituindo as Eqs. (4.121) a (4.126) e a Eq. (4.129) na expressão de $S_{i+1,j}$ na Eq. (4.128) e rearranjando a expressão, chega-se ao erro de truncamento de toda a aproximação para a Eq. (4.111)

$$\begin{aligned}
T_t^i - T_{2x}^{ii} - S = & -k \left[\frac{1}{2} T_{2t}^{ii} - \theta (T_{2xt}^{iii} + S_t^i) \right] + T_{4x}^{iv} \frac{h^2}{12} - \\
& -k^2 \left[\frac{1}{6} T_{3t}^{iii} - \frac{\theta}{2} (T_{2x2t}^{iv} + S_{tt}^{ii}) \right] \\
& -k^3 \left[\frac{1}{24} T_{4t}^{iv} - \frac{\theta}{6} (T_{2x3t}^v + S_{3t}^{iii}) \right] + T_{6x}^{vi} \frac{h^4}{360} - \\
& -k^4 \left[\frac{1}{120} T_{5t}^v - \frac{\theta}{24} (T_{2x4t}^{vi} + S_{4t}^{iv}) \right] \\
& -k^5 \left[\frac{1}{720} T_{6t}^{vi} - \frac{\theta}{120} (T_{2x5t}^{vii} + S_{5t}^v) \right] + T_{8x}^{viii} \frac{h^6}{20160} - \\
& -k^6 \left[\frac{1}{5040} T_{7t}^{vii} - \frac{\theta}{720} (T_{2x6t}^{viii} + S_{6t}^{vi}) \right] \\
& + \theta \left(T_{4xt}^v \frac{kh^2}{12} + T_{4x2t}^{vi} \frac{k^2h^2}{24} + T_{4x3t}^{vii} \frac{k^3h^2}{72} + T_{6xt}^{vii} \frac{kh^4}{360} + T_{6x2t}^{viii} \frac{k^2h^4}{720} + T_t^i 2 \frac{k}{h^2} + T_{2t}^{ii} \frac{k^2}{h^2} \right. \\
& \left. + T_{3t}^{iii} \frac{k^3}{3h^2} + T_{4t}^{iv} \frac{k^4}{12h^2} + T_{5t}^v \frac{k^5}{60h^2} + T_{6t}^{vi} \frac{k^6}{360h^2} + T_{7t}^{vii} \frac{k^7}{2520h^2} + T_{8t}^{viii} \frac{k^8}{20160h^2} \right) + \dots \quad (4.130)
\end{aligned}$$

Em uma primeira análise do erro de truncamento da Eq. (4.130) conclui-se que independente do valor de θ a ordem de acurácia é $O(h^2 + k)$, porém verifica-se que para $\theta = \frac{1}{2}$ a primeira parcela do lado direito da igualdade pode ser reescrita como

$$-k \left[\frac{1}{2} T_{2t}^{ii} - \theta (T_{2xt}^{iii} + S_t^i) \right] = -\frac{k}{2} [T_{2t}^{ii} - T_{xxt}^{iii} - S_t^i] \quad (4.131)$$

Como T satisfaz a EDP dada pela Eq. (4.111), diferenciando essa equação mais uma vez em t obtém-se

$$T_{2t}^{ii} - T_{2xt}^{iii} = S_t^i \quad (4.132)$$

cancelando esse termo. Portanto, conforme Eq. (4.130), quando $\theta = \frac{1}{2}$ a ordem de acurácia (ou assintótica) é $O(h^2 + k^2)$. Seguindo a mesma análise, a princípio, a sequência das ordens

verdadeiras difere em relação ao espaço e tempo, por exemplo, as ordens verdadeiras relativas ao tempos são $p_V = 2, 3, 4, \dots$ e no espaço $p_V = 2, 4, 6, \dots$, além disso, existem combinações entre os parâmetros h e k , não deixando clara a predominância das ordens.

Para a solução desse problema o sistema de equações lineares é construído obtendo os coeficientes e termo fonte a partir da Eq. (4.74). A Eq. (4.74) se refere a um problema 2D. O mesmo modelo vale para o caso 1D fazendo $a_N = a_S = 0$. Assim

$$a_P = 1 + 2\theta \frac{k}{h^2} \quad (4.133)$$

$$a_W = a_E = \theta \frac{k}{h^2} \quad (4.134)$$

$$b_P = kS_P + \left(1 - 2(1 - \theta) \frac{k}{h^2}\right) T_P^* + (1 - \theta) \frac{k}{h^2} (T_W^* + T_E^*) \quad (4.135)$$

4.4.2.1 Solução numérica e erro de truncamento da variável T_c

Sendo $T_c = T\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, as ordens verdadeiras do erro no cálculo de T_c , bem como a ordem assintótica, são as mesmas de T .

4.4.2.2 Solução numérica e erro de truncamento da variável T_m

O modelo numérico utilizado segue como definido na seção 4.1 com a Eq. (4.17). Verifica-se que as ordens verdadeiras para o erro no cálculo de T_m são $p_V = 2, 4, 6, \dots$. E, sendo assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de T_m é $p_L = 2$.

4.4.2.3 Solução numérica e erro de truncamento da variável I

O modelo numérico utilizado segue como definido na seção 4.3.2.3 com as Eqs. (4.87) e (4.88). Verifica-se que as ordens verdadeiras para o erro de truncamento no cálculo de I são: $p_V = 2, 3, 4, \dots$. E, sendo assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de I é $p_L = 2$.

4.4.3 Modelo Matemático Bidimensional

Estendendo a ideia da seção 4.4.2 para o problema bidimensional (ver Fig. 3.1). Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio limitado com contorno Γ . A equação do calor bidimensional transiente com termo fonte (equação de Fourier) é dada por (INCROPERA et al., 2008)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + S(x, y, t) \quad (4.136)$$

onde α é a difusividade térmica (m^2/s). A Eq. (4.136) fornece a distribuição da temperatura T em domínio retangular, isto é, com $(x, y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1)$, $t \in]0, t_f]$ em que t_f indica o tempo final em segundos, com condições de contorno de Dirichlet e iniciais dados por

$$T(0, y, t) = T(L, y, t) = T(x, 0, t) = T(x, L, t) = 0 \quad (4.137)$$

$$T(x, y, 0) = \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{\pi y}{L}\right) \quad (4.138)$$

e termo fonte dado por

$$S(x, y, t) = \pi^2 \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{\pi y}{L}\right) e^{-\pi^2 t} \quad (4.139)$$

Considerando $L = 1 \text{ m}$ e difusividade térmica $\alpha = 1 \text{ (m}^2/\text{s)}$, o termo fonte e as condições de contorno foram ajustados por meio do MSF com base na solução analítica dada por

$$T(x, y, t) = \text{sen}(\pi x) \text{sen}(\pi y) e^{-\pi^2 t} \quad (4.140)$$

A superfície gerada pela Eq. (4.140) sobre um domínio quadrado unitário está representada na Fig. 4.4 para $t = 0,1s$.

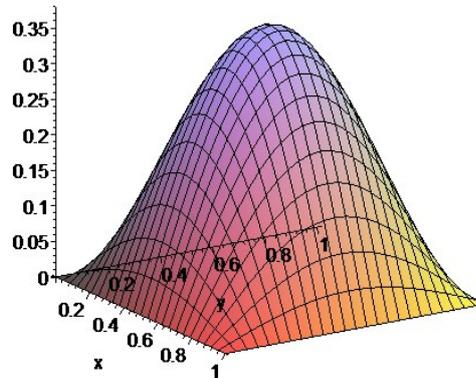


Figura 4.6 Visualização gráfica da solução analítica da Equação de Fourier 2D para $t = 0,1s$

4.4.3.1 Solução analítica da temperatura no centro do domínio - T_c

A análise da variável de interesse $T_c = T\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, t\right)$ é obtida por meio da Eq. (4.140) no ponto $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, t\right)$, então

$$T\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, t\right) = e^{-\pi^2 t} \quad (4.141)$$

A Tab. 4.8 apresenta a solução analítica da temperatura no centro do domínio para $t_f = 0,1s$ obtida com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos. O resultado é apresentado em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.8 Solução analítica da temperatura no centro do domínio - Equação de Fourier 2D *

| $t(s)$ | T_c – Temperatura no centro do domínio |
|--------|---|
| 0,1 | 3,727078388534379135776020928393564131313160076807674330416545409E-01 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos

4.4.3.2 Solução analítica da temperatura média - T_m

Substituindo a Eq. (4.140) na Eq. (4.1) tem-se a temperatura média em um certo instante de tempo:

$$T_m = \int_0^1 \int_0^1 \text{sen}(\pi x) \text{sen}(\pi y) e^{-\pi^2 t} dx dy$$

Assim, a solução analítica de T_m é

$$T_m = \frac{4}{\pi^2} e^{-\pi^2 t} \quad (4.142)$$

A Tab. 4.9 apresenta a solução analítica da temperatura média para $t_f = 0,1s$ obtida com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos. O resultado é apresentado em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.9 Solução analítica da temperatura média - Equação de Fourier 2D *

| $t(s)$ | T_m – Temperatura média |
|--------|---|
| 0,1 | 1,510527975416320625180650675536347056120524951124064780016544140E-01 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos

4.4.3.3 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste – q_e

Seguindo a definição dada pela Eq. (4.50) tem-se

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \pi \cos(\pi x) \text{sen}(\pi y) e^{-\pi^2 t}$$

Assim, a solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste é

$$q_e = -2e^{-\pi^2 t} \quad (4.143)$$

A Tab. 4.10 apresenta a solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste para $t_f = 0,1$ obtida com o software Maple® 7 com 64 algarismos significativos. O resultado é apresentado em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10).

Tabela 4.10 Solução analítica da taxa de transferência de calor ao leste - Equação de Fourier 2D*

| $t(s)$ | q_e – Taxa de transferência de calor ao leste |
|--------|---|
| 0,1 | 7.454156777068758271552041856787128262626320153615348660833090816E-01 |

*obtido com software Maple® 7 com 64 algarismos

4.4.3.4 Definição da média da norma l_1 do erro numérico

Como definido na Eq. (4.54) a definição da norma l_1 média do erro numérico é reescrita aqui e utilizada para o caso 2D onde $P=(x,y)$ e $N = (N_x - 1) \times (N_y - 1)$ é o número total de pontos da malha. Esta variável é calculada em todo instante do tempo, mas é avaliada somente em t_f . A solução analítica de L é zero.

4.4.4 Modelo Numérico Bidimensional

Com a mesma ideia da seção 4.4.2, a técnica de aproximação desenvolvida para a Eq. (4.136) com as funções de interpolação e erro de truncamento, seguem a aproximação desenvolvida para o esquema θ com base na utilização da Eq. (4.34) para cada derivada no espaço e tempo. No desenvolvimento das expressões k representa a discretização temporal e i, j a discretização espacial dos valores x e y , respectivamente. Para isso a solução numérica bidimensional é baseada na malha bidimensional da Fig. 4.7 em termos do tempo com os pontos da malha definidos como na seção 3.2, ou seja, $P = (i, j)$, $E = (i + 1, j)$, $W = (i - 1, j)$, $N = (i, j + 1)$ e $S = (i, j - 1)$.

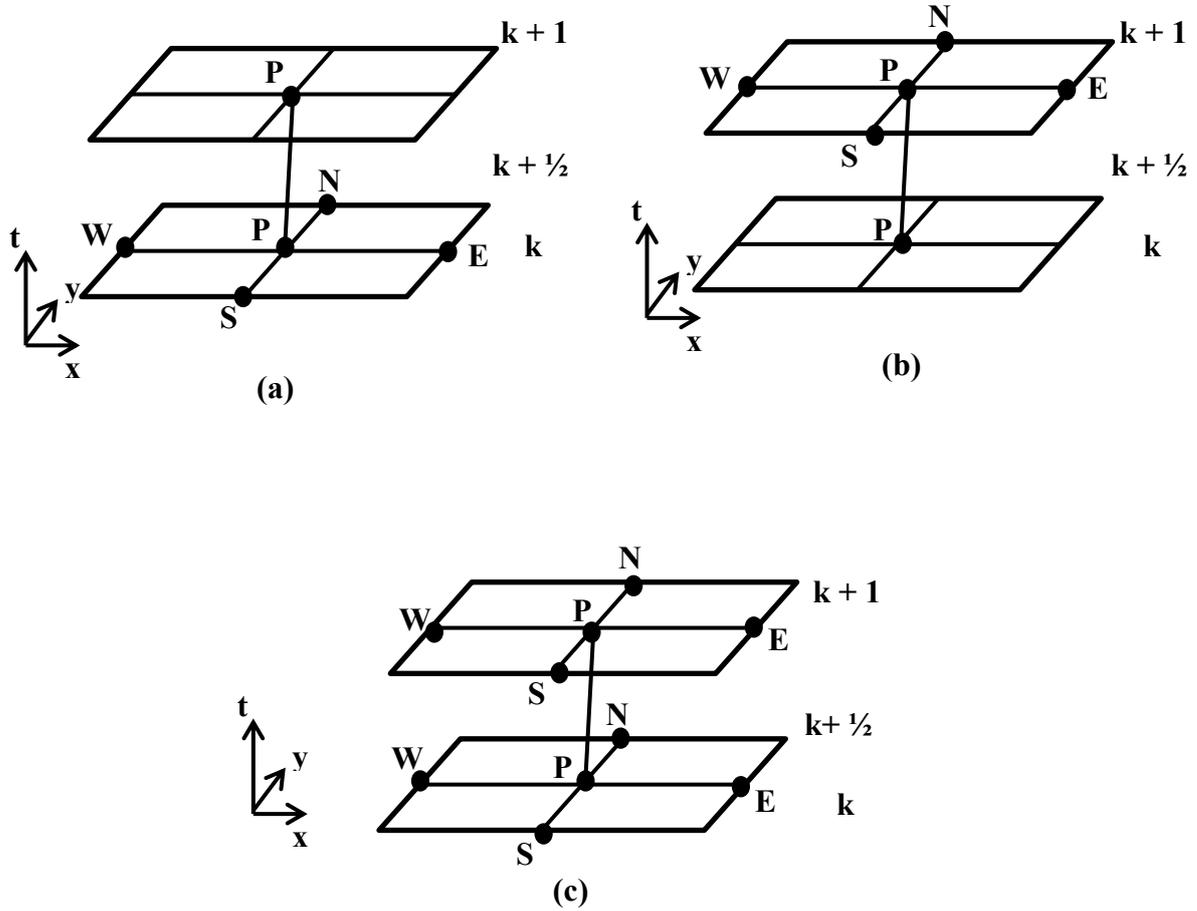


Figura 4.7 Representação esquemática (a) explícita; (b) totalmente implícita; (c) Crank-Nicolson

Reescrevendo para y e substituindo as Eqs. (4.121) a (4.126) e a Eq. (4.129) na expressão de $S_{i,j,k+1}$, o esquema θ associa o parâmetro de mistura (θ) aos esquemas explícito, totalmente implícito e ao esquema Crank-Nicolson, na forma

$$\begin{aligned} \frac{T_{i,j,k+1} - T_{i,j,k}}{k} + E_{T_1} = & \theta \left(\frac{T_{i-1,j,k+1} - 2T_{i,j,k+1} + T_{i+1,j,k+1}}{h_x^2} + \right. \\ & \left. + \frac{T_{i,j-1,k+1} - 2T_{i,j,k+1} + T_{i,j+1,k+1}}{h_y^2} + S_{i,j,k+1} + E_{T_2} \right) \\ & + (1 - \theta) \left(\frac{T_{i-1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i+1,j,k}}{h_x^2} + \frac{T_{i,j-1,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j+1,k}}{h_y^2} + S_{i,j,k} + E_{T_3} \right) \end{aligned} \quad (4.144)$$

onde k é o passo de tempo, h_x e h_y é o espaçamento entre nós da malha na direção x e y , respectivamente, e $0 \leq \theta \leq 1$ obedece o critério dado pela Eq. (4.120).

Seguindo a ideia em Tannehill et al. (1997) quando desenvolvido para o caso unidimensional, para calcular o erro de truncamento do esquema θ , que envolve dez pontos, toma-se o ponto $\left(x_j, t_{k+\frac{1}{2}}\right)$ (Fig. 4.7 (c)) como ponto de expansão na série de Taylor.

Para verificar as considerações acima, considere a derivada temporal tomando-se a Eq. (4.35) reescrita como nas Eqs. (4.121) e (4.122) onde o índice sobrescrito indica a ordem da derivada, e o índice subscrito, indica a sequência em que foram calculadas as derivadas segundo uma dada direção, por exemplo, T_{2xt}^{iii} significa a derivada da variável dependente T , duas vezes com relação a x e uma vez com relação a t .

As expressões para as derivadas em x seguem como nas equações (4.123) a (4.126) reescritas agora como

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i-1,j,k+1} - 2T_{i,j,k+1} + T_{i+1,j,k+1}}{h_x^2} + E_{T_4} \quad (4.145)$$

onde

$$E_{T_4} = -T_{4x}^{iv} \frac{h_x^2}{12} - 2T_t^i \frac{k}{h_x^2} - T_{2xt}^{iii} k - T_{2x2t}^{iv} \frac{k^2}{2} - T_{2t}^{ii} \frac{k^2}{h_x^2} - T_{3t}^{iii} \frac{k^3}{3h_x^2} - T_{4t}^{iv} \frac{k^4}{12h_x^2} - \dots \quad (4.146)$$

e

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i-1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i+1,j,k}}{h_x^2} + E_{T_5} \quad (4.147)$$

onde

$$E_{T_5} = -T_{4x}^{iv} \frac{h_x^2}{12} - T_{6x}^{vi} \frac{h_x^4}{360} - T_{8x}^{viii} \frac{h_x^6}{20160} - T_{10x}^x \frac{h_x^8}{1814400} - \dots \quad (4.148)$$

As expressões para as derivadas em y são obtidas da mesma forma com

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_{i,j-1,k+1} - 2T_{i,j,k+1} + T_{i,j+1,k+1}}{h_y^2} + E_{T_6} \quad (4.149)$$

onde

$$E_{T_6} = -T_{4y}^{iv} \frac{h_y^2}{12} - 2T_t^i \frac{k}{h_y^2} - T_{2yt}^{iii} k - T_{2y2t}^{iv} \frac{k^2}{2} - T_{2t}^{ii} \frac{k^2}{h_y^2} - T_{3t}^{iii} \frac{k^3}{3h_y^2} - T_{4t}^{iv} \frac{k^4}{12h_y^2} - \dots \quad (4.150)$$

e

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_{i,j-1,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j+1,k}}{h_y^2} + E_{T_7} \quad (4.151)$$

onde

$$E_{T_7} = -T_{4y}^{iv} \frac{h_y^2}{12} - T_{6y}^{vi} \frac{h_y^4}{360} - T_{8y}^{viii} \frac{h_y^6}{20160} - T_{10y}^x \frac{h_y^8}{1814400} - \dots \quad (4.152)$$

Assim como no caso unidimensional (seção 4.4.2), a discretização da equação do calor bidimensional com termo fonte e com erro de truncamento não é comum na literatura. Quando a ideia é apresentada, na maioria das vezes não é considerado um termo fonte, e o erro de truncamento é apresentado somente para expor a ordem assintótica.

Sendo assim, a estimativa *a priori* das ordens verdadeiras para o caso bidimensional segue a mesma ideia do caso unidimensional considerando a substituição das Eqs. (4.145) a (4.152) e a Eq. (4.35) na expressão de $S_{i,j,k+1}$ da Eq. (4.144). Rearranjando a expressão, chega-se ao erro de truncamento de toda a aproximação para a Eq. (4.136) na forma

$$\begin{aligned}
T_t^i - T_{xx}^{ii} - T_{yy}^{ii} - S &= -k \left[\frac{1}{2} T_{2t}^{ii} - \theta (T_{2xt}^{iii} + T_{2yt}^{iii} + S_t^i) \right] + T_{4x}^{iv} \frac{h_x^2}{12} + T_{4y}^{iv} \frac{h_y^2}{12} - \\
&k^2 \left[\frac{1}{6} T_{3t}^{iii} - \frac{\theta}{2} (T_{2x2t}^{iv} + T_{2y2t}^{iv} + S_{tt}^{ii}) \right] - k^3 \left[\frac{1}{24} T_{4t}^{iv} - \frac{\theta}{6} (T_{2x3t}^v + T_{2y3t}^v + S_{3t}^{iii}) \right] + \\
&+ T_{6x}^{vi} \frac{h_x^4}{360} + T_{6y}^{vi} \frac{h_y^4}{360} - k^4 \left[\frac{1}{120} T_{5t}^v - \frac{\theta}{24} (T_{2x4t}^{vi} + T_{2y4t}^{vi} + S_{4t}^{iv}) \right] - \\
&- k^5 \left[\frac{1}{720} T_{6t}^{vi} - \frac{\theta}{120} (T_{2x5t}^{vii} + T_{2y5t}^{vii} + S_{5t}^v) \right] + T_{8x}^{viii} \frac{h_x^6}{20160} + T_{8y}^{viii} \frac{h_y^6}{20160} - \\
&k^6 \left[\frac{1}{5040} T_{7t}^{vii} - \frac{\theta}{720} (T_{2x6t}^{viii} + T_{2y6t}^{viii} + S_{6t}^{vi}) \right] + T_{10x}^x \frac{h_x^8}{1814400} + T_{10y}^x \frac{h_y^8}{1814400} + \\
&\theta \left(T_{4xt}^v \frac{kh_x^2}{12} + T_{4yt}^v \frac{kh_y^2}{12} + T_{4x2t}^{vi} \frac{k^2 h_x^2}{24} + T_{4y2t}^{vi} \frac{k^2 h_y^2}{24} + T_{4x3t}^{vii} \frac{k^3 h_x^2}{72} + T_{4y3t}^{vii} \frac{k^3 h_y^2}{72} + \right. \\
&T_{6xt}^{vii} \frac{kh_x^4}{360} + T_{6yt}^{vii} \frac{kh_y^4}{360} + T_{6x2t}^{viii} \frac{k^2 h_x^4}{720} + T_{6y2t}^{viii} \frac{k^2 h_y^4}{720} + T_t^i 2 \frac{k}{h_x^2} + T_t^i 2 \frac{k}{h_y^2} + T_{2t}^{ii} \frac{k^2}{h_x^2} \\
&+ T_{2t}^{ii} \frac{k^2}{h_y^2} + T_{3t}^{iii} \frac{k^3}{3h_x^2} + T_{3t}^{iii} \frac{k^3}{3h_y^2} + T_{4t}^{iv} \frac{k^4}{12h_x^2} + T_{4t}^{iv} \frac{k^4}{12h_y^2} + T_{5t}^v \frac{k^5}{60h_x^2} + T_{5t}^v \frac{k^5}{60h_y^2} \\
&\left. + T_{6t}^{vi} \frac{k^6}{360h_x^2} + T_{6t}^{vi} \frac{k^6}{360h_y^2} + T_{7t}^{vii} \frac{k^7}{2520h_x^2} + T_{7t}^{vii} \frac{k^7}{2520h_y^2} \right) + \dots \tag{4.153}
\end{aligned}$$

Da Eq. (4.153), da mesma forma como no caso unidimensional, conclui-se que o erro de truncamento, independente da ordem da EDP, tem ordem de acurácia $O(h_x^2 + h_y^2 + k)$ para $\theta=0$ ou $\theta=1$, porém considerando $\theta = \frac{1}{2}$ a primeira parcela do lado direito da igualdade pode ser reescrita como

$$-k \left[\frac{1}{2} T_{2t}^{ii} - \theta (T_{2xt}^{iii} + T_{2yt}^{iii} + S_t^i) \right] = -\frac{k}{2} [T_{2t}^{ii} - T_{2xt}^{iii} - T_{2yt}^{iii} - S_t^i] \tag{4.154}$$

pois como T satisfaz a EDP dada pela Eq. (4.135) e diferenciando essa equação mais uma vez em t obtém-se

$$T_{2t}^{ii} - T_{2xt}^{iii} - T_{2yt}^{iii} = S_t^i \tag{4.155}$$

cancelando esse termo. Portanto, conforme Eq. (4.120), quando $\theta = \frac{1}{2}$ a ordem de acurácia (ou assintótica) é $O(h_x^2 + h_y^2 + k^2)$.

Como no caso unidimensional, nesta mesma análise, a princípio, a sequência das ordens verdadeiras diferem em relação ao espaço e tempo, por exemplo, as ordens relativas ao tempo são $p_V = 2, 3, 4, \dots$ e no espaço $p_V = 2, 4, 6, \dots$, e, além disso, existem combinações entre os parâmetros h e k , não deixando clara a predominância das ordens.

Para a solução desse problema o sistema de equações lineares é construído obtendo os coeficientes e termo fonte a partir da Eq. (4.74), onde

$$a_P = 1 + 2\theta \left(\frac{k}{h_x^2} + \frac{k}{h_y^2} \right) \quad (4.156)$$

$$a_E = a_W = \frac{k}{h_x^2} \theta \quad (4.157)$$

$$a_N = a_S = \frac{k}{h_y^2} \theta \quad (4.158)$$

$$b_P = kS_P + \frac{k}{h_x^2} (1 - \theta) (T_{i-1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i+1,j,k}) + \frac{k}{h_y^2} (1 - \theta) (T_{i,j-1,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i,j+1,k}) + T_{i,j,k} \quad (4.159)$$

4.4.4.1 Solução numérica e erro de truncamento da variável T_c

Sendo $T_c = T\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{10}\right)$, as ordens verdadeiras do erro no cálculo de T_c , bem como a ordem assintótica, são as mesmas de T .

4.4.4.2 Solução numérica e erro de truncamento da variável T_m

O modelo numérico utilizado segue como definido na seção 4.1 com as Eqs. (4.29) e (4.30) em cada passo de tempo. Verifica-se que as ordens verdadeiras para o erro no cálculo de T_m são $p_V = 2, 4, 6, \dots$. E, sendo assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de T_m é $p_L = 2$.

4.4.4.3 Solução numérica e erro de truncamento da variável q_e

O cálculo para a variável de interesse q_e segue o mesmo raciocínio da seção 4.3.2.3 para cada nível do tempo.

4.4.4.4 Definição da média da norma L_1 do erro numérico

Como definido na Eq. (4.54) a definição da norma l_1 média do erro numérico é reescrita aqui e utilizada para o caso 2D onde $P=(x,y)$ e $e N = (N_x - 1) \times (N_y - 1)$ é o número total de pontos da malha. Esta variável é calculada em todo instante do tempo, mas é avaliada somente em t_f . A solução analítica de L é zero.

4.5 Resumo e considerações do capítulo 4

O exposto neste capítulo apresentou as definições e soluções analíticas, bem como o desenvolvimento de esquemas numéricos de EDP's resultantes de problemas de transporte em CFD. Todos esses procedimentos têm como objetivo expor a análise *a priori* da ordem do erro de discretização para, posteriormente, compará-la aos resultados da análise *a posteriori* que será apresentada no capítulo seguinte.

Os esquemas numéricos desenvolvidos mostram a complexidade da discretização numérica referentes à obtenção da ordem do erro de truncamento, em particular ao desenvolvimento do esquema numérico para a equação de Fourier.

A diversidade de esquemas numéricos apresentados na literatura levanta algumas questões relativas às propriedades das equações discretizadas. Conforme exposto por Hirsch (2007), há questões a serem discutidas, como: i) que condições temos de impor a um esquema numérico para obter uma aproximação aceitável para o problema diferencial, ii) por que vários esquemas têm comportamentos muito diferentes e como podemos prever os limites de estabilidade, e iii) para um cálculo estável, como obter informações quantitativas sobre a acurácia da simulação numérica.

Para dar respostas a estas perguntas, é necessário definir, mais precisamente, requisitos a serem impostos a um esquema numérico. Esses requisitos são definidos como consistência, estabilidade e convergência. Eles abrangem diferentes aspectos das relações entre as equações analíticas e as discretizadas, entre a solução numérica e a solução exata, e a solução analítica das equações diferenciais que representam o modelo matemático (HIRSCH, 2007).

Um resultado importante utilizado na análise do MDF para a solução numérica de EDP's é o teorema fundamental de equivalência de Lax. O teorema diz que para um problema de valor inicial bem-posto e um método de discretização consistente, estabilidade é condição necessária e suficiente para a convergência. O teorema indica que para analisar um problema de valor inicial ou que dependa do tempo, dois procedimentos devem ser utilizados: i) a determinação do erro de truncamento e sua ordem (para análise de consistência) e ii) analisar propriedades de estabilidade.

Examinando todas as aproximações aqui desenvolvidas, fazendo todos os parâmetros de espaçamento tender a zero, verifica-se que todas são consistentes. Significa que ao minimizarmos o erro de truncamento dessas expressões o resultado tende ao valor exato da EDP original indicando a convergência. Para a convergência ainda é necessário garantir a estabilidade.

Segundo Fletcher (1992), o conceito de estabilidade está relacionado à redução ou crescimento dos erros introduzidos no cálculo. Conforme Fortuna (2000), causas para instabilidade numérica são: condições de contorno ou iniciais aproximadas de forma incorreta, acúmulo de erros de arredondamento na solução e critérios de estabilidade dos

métodos não atendidos. Dentre estas causas, a última é a mais difícil de ser controlada considerando EDP's que dependam de misturas de funções de interpolação.

Nesse contexto, problemas como a forma de aplicar as condições de contorno e/ou que envolvem, por exemplo, singularidades na solução também podem acarretar dificuldades na aproximação por série de Taylor. Se a solução é descontínua, por exemplo, a validade da técnica por diferenças finitas fica comprometida não garantindo assim que os termos sucessivos da expressão do erro de truncamento sejam corroborados (FLETCHER, 1992).

O fato da tendência do erro não corresponder aos valores obtidos *a priori* em determinada aplicação, pode estar relacionada ao erro de poluição, inerente dos erros de truncamento e discretização (MARCHI, 2001). Segundo Marchi (2001) a denominação de erro de poluição foi introduzida por Babuska et al. (1997), porém com outra finalidade. Neste trabalho e em Marchi (2001), o erro de poluição é a diferença dos erros de discretização e truncamento.

Na estimativa do erro de discretização, a consideração desses aspectos com a análise *a posteriori* por meio de MER traz uma nova perspectiva para a solução do problema a qual envolva os fenômenos físicos de advecção e difusão, pois otimiza informações importantes em um número mínimo de cálculos.

Portanto, no próximo capítulo, o estudo da ordem do erro de discretização *a priori* por meio do erro de truncamento e *a posteriori* com MER traz contribuições relevantes ao aprimoramento da aplicação dessas funções com o intuito de obter soluções mais acuradas.

5 VERIFICAÇÃO DAS SOLUÇÕES NUMÉRICAS

Neste capítulo são apresentados os resultados numéricos das equações governantes propostas e suas análises referentes às ordens verdadeiras obtidas *a priori* e *a posteriori* e o desempenho do erro de discretização considerando o efeito de parâmetros físico e numérico, a saber, o número de Péclet (Pe) no caso da equação de advecção-difusão e os fatores de mistura β e θ de esquemas numéricos mistos, respectivamente. Esses resultados são discutidos e verificados também para o desempenho de MER, inclusive para as variáveis de interesse. Outro resultado importante aqui apresentado é a verificação de que resultados 1D sejam validados para 2D para o caso da equação de Fourier.

Como exposto no capítulo um e definido no capítulo quatro, os modelos matemáticos usuais em CFD testados para cumprir os objetivos propostos nesta tese são: a equação de transporte de advecção-difusão 2D (Eq. (4.43)) com termo fonte (Eq. (4.44)) e condições de contorno de Dirichlet (Eqs. (4.45) e (4.46)); e a equação de transferência de calor transiente 2D (equação de Fourier) (Eq. (4.136)) com termo fonte e (Eq.(4.139)), condições de contorno de Dirichlet e iniciais definidas pelas Eqs. (4.137) e (4.138), respectivamente. A saber, veja um resumo na Tab. 5.1.

Tabela 5.1 Equações governantes usuais em CFD tratadas nesta tese.

| EQUAÇÃO DIFERENCIAL PARCIAL | CLASSIFICAÇÃO | TIPO |
|---|---------------|------------------|
| $Pe_x \frac{\partial T}{\partial x} + Pe_y \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + S(x, y)$ | ELÍPTICA | ADVECÇÃO-DIFUSÃO |
| $\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + S(x, y, t)$ | PARABÓLICA | FOURIER |

5.1 METODOLOGIA

Para a verificação do código e da solução, inicialmente, problemas mais simples como a equação de Fourier 1D (ver seções 4.4.1, 4.4.2 e 5.3.2) e a equação de Laplace 2D (Marchi et. al, 2013) foram utilizadas como base para a dedução das ordens verdadeiras do erro de

discretização das equações por meio da expansão da série de Taylor; testadas apenas para depurar a modelagem numérica e o programa. Estas aplicações têm por objetivo verificar se o programa é executado corretamente para os casos em questão.

As simulações numéricas foram realizadas para as equações propostas, e para as quais se conhecem os resultados a partir da solução analítica obtida com o MSF. Isso testa não só a parte numérica, mas também o modelo matemático. Em outras palavras, buscou-se verificar se os resultados analíticos relativos ao modelo matemático são observados numericamente.

Para a execução das simulações, uma programação foi desenvolvida para os dois modelos utilizando o microcomputador CFD17 do Laboratório de Experimentação Numérica (LENA-2) da Universidade Federal do Paraná (UFPR), com processador Intel® Pentium® Dual, velocidade de 1.80GHz, com 8 GB de memória e sistema operacional Windows XP, Professional x64 Edition Versão 2003; Service Pack 2.

Para testes computacionais nas malhas mais finas, foram utilizados outros dois microcomputadores; um com processador Intel® Core™ i7-2860 QM, com velocidade de 2.50 GHz, com 8GB de memória, 1 TB de HD e sistema operacional Windows 7 Home Premium, 64 Bits - Service Pack 1; e o CFD21 do Laboratório de Experimentação Numérica (LENA-2) da UFPR com dois processadores Intel Xeon X5690 (6 core), 2,4 TB de HD e 192 GB de memória.

A linguagem utilizada para implementar todos os programas foi Fortran® 2003 por meio do compilador Intel® Visual Fortran 11.1, com precisão quádrupla. O tipo de projeto utilizado para criar todos os programas fonte foi o *Console Application* na versão *release*.

O software utilizado para a solução analítica foi o Maple® 7 com cálculos efetuados utilizando 64 algarismos significativos. A precisão da solução analítica escolhida dessa forma é suficiente para servir de referência às soluções numéricas tornando clara a verificação dos erros de arredondamento, e também por apresentar erros de máquina muito menores do que os presentes nas soluções numéricas.

Os resultados das soluções numéricas para as variáveis de interesse foram obtidos com um número de malhas que vão de 3×3 , 5×5 ,... até 32.769×32.769 na discretização do espaço; e no caso da discretização do tempo, inicia-se com 5, 10, 20, 40, ... até 5.120 passos no tempo.

O refino sistemático de malhas é necessário para a verificação da solução e a aplicação de MER, o que exige um alto custo computacional, pois para reduzir consideravelmente os erros de discretização, aumenta-se o número de elementos na malha, requerendo assim, técnicas sofisticadas para tratar a solução de sistemas de equações lineares.

Em cada malha o sistema de equações é resolvido com o método *multigrid* geométrico com esquema CS (*Correction Scheme*), ciclo V, restrição por injeção, prolongação por interpolação linear e razão de engrossamento dois. O número de vezes que o ciclo V do método *multigrid* é repetido é denominado iterações externas. O número de iterações externas utilizadas foi sempre o dobro de iterações necessárias para atingir o erro de arredondamento de máquina. O número de iterações internas para a aplicação de Gauss-Seidel foi de 2.

O objetivo da aplicação do método *multigrid* é acelerar a convergência a fim de reduzir o tempo de CPU necessário para resolver cada equação bidimensional (PINTO, 2006). No caso da equação unidimensional o sistema de equações foi resolvido com o método TDMA.

Para eliminar o erro de iteração, tanto no caso unidimensional como no bidimensional, o processo iterativo foi realizado até atingir o erro de arredondamento de máquina com base na norma l_1 média para solução das variáveis de interesse.

A análise e verificação numérica final foram realizadas por meio de pós-processamento com ER e MER. O programa usado para calcular MER denomina-se Richardson_3p2, versão 2012, o qual pertence ao grupo CFD da UFPR.

A memória computacional usada em cada simulação foi acompanhada por meio do gerenciador de tarefas da plataforma Windows. A quantidade de malhas obtidas se deu conforme a disposição de memória física permitida pela máquina empregada.

O tempo de processamento utilizado para execução dos cálculos computacionais nas simulações realizadas foi obtido através da função CPU_TIME (x), disponível na biblioteca do aplicativo Fortran/2003, onde $x = tcpu1$ inicializa a contagem do tempo de processamento e $x = tcpu2$ finaliza a contagem do tempo de processamento. O resultado é obtido pela subtração destes dois valores. Esses resultados estão disponíveis em ftp://ftp.demec.ufpr.br/CFD/monografias/2013_Ana_Vargas_doutorado.

Todas essas considerações baseiam-se no documento publicado pela ASME (2009), no trabalho de KNUPP e SALARI (2000) e nos protocolos para estimar erros de discretização em CFD, versão 1.1 de 2005, e para testes de coerência, versão 1.0 de 2007, respectivamente, do grupo de pesquisa em CFD da UFPR.

5.2 EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO 2D

Esta seção mostra os resultados encontrados para a equação de advecção-difusão 2D representada pela Eq. (4.43) com termo fonte dada pela Eq. (4.44) e condições de contorno dadas pelas Eqs. (4.45) e (4.46).

Para a verificação dos resultados foram estudadas cinco variáveis de interesse, a saber, a temperatura no centro do domínio, a temperatura média, o fluxo de calor ao leste e ao norte e a média da norma l_1 do erro numérico como apresentado no capítulo 4 na seção 4.3.

Para a implementação computacional, considerou-se:

- Método de Diferenças Finitas;
- Método Híbrido - MCA
- Regime permanente;
- Domínio bidimensional com $D = \{(x, y) | 0 < x < 1, 0 < y < 1\}$;
- Sistema de coordenadas cartesianas;
- Discretização do espaço considerando malhas estruturadas e uniformes;
- Número ímpar de nós;
- Velocidade do escoamento positivo e constante em ambas as direções;
- quinze malhas computacionais;
- $Pe = 0,1; Pe = 1$ e $Pe = 10$, para análise dos erros de discretização e verificação da solução;
- os fatores de mistura (β dado pela Eq. (4.63)): $\beta = 0; \beta = 0,1; \beta = 0,5; \beta = 0,9$ e $\beta = 1$. Neste caso, fixou-se $Pe = 1$.

Neste contexto, inicialmente são apresentados resultados referentes às ordens obtidas pela análise *a priori* seguida pelos resultados referentes às ordens obtidas pela análise *a posteriori* resultante da aplicação da extrapolação de Richardson (Eq. (3.31), Eq. (3.57) e Eq. (3.60)) e, com isso, confrontar seus valores.

Na sequência, são apresentados os resultados dos erros de discretização com e sem MER para verificação e análise da magnitude do erro segundo a variação do fator de mistura (β).

Finalmente, são apresentados resultados para verificação da influência da variação do número de Péclet (Pe) no erro de discretização com e sem MER.

5.2.1 Análise *a Priori* da Ordem do Erro de Discretização das Aproximações das Variáveis de Interesse para a Equação de Advecção-Difusão 2D

Na seção 4.3.2, foram deduzidas as ordens verdadeiras do erro de discretização, por meio da expansão da série de Taylor e obtidas pelo menos três termos da expressão do erro de truncamento, para cada variável de interesse.

Na Tab. 5.2 são apresentadas as ordens verdadeiras de cada função de interpolação utilizada na aproximação de cada variável de interesse. A importância da apresentação destas informações deve-se ao interesse nas combinações das ordens dessas funções efetuadas devido à necessidade de mistura das mesmas na discretização do modelo e que são relevantes ao processo.

Ressalta-se que a variável L tem suas ordens de erro definidas como para a variável T_c , pois não há relação que agregue considerações referentes ao erro de truncamento, a não ser aquela deduzida para a própria variável primária, T .

As ordens do erro de discretização encontradas *a priori* das aproximações finais para as variáveis de interesse T_c , q_e e q_n , pela mistura das técnicas utilizadas conforme apresentado na Tab. 5.2, estão relacionadas na Tab. 5.3.

Tabela 5.2 Ordens verdadeiras das funções de interpolação utilizadas na aproximação das variáveis de interesse referentes à equação de advecção-difusão 2D

| VARIÁVEL DE INTERESSE | FUNÇÃO DE INTERPOLAÇÃO | ORDENS VERDADEIRAS | ORDEM ASSINTÓTICA |
|-----------------------|---|--|--|
| T_c | (termo advectivo) UDS-1 ($\beta = 0$) CDS-2 ($\beta = 1$) | $\beta = 0 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $\beta = 0 \Rightarrow p_L = 1$ $\beta = 1 \Rightarrow p_L = 2$ |
| | (termo difusivo) CDS-2 | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| T_m | Regra do trapézio | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| q_e | UDS-2 | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $p_L = 2$ |
| | Regra do Trapézio | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| q_n | UDS-2 | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $p_L = 2$ |
| | Regra do Trapézio | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |

Analisando as Tabs. 5.2 e 5.3 verifica-se que:

- Para a variável T_c as ordens verdadeiras predominantes são aquelas envolvidas nos termos advectivos;
- Para a variável T_m as ordens verdadeiras predominantes são as mesmas verificadas para a variável T_c ;
- Para a variável q_e as ordens verdadeiras se reduzem as ordens da função de interpolação UDS-2;
- Para a variável q_n as ordens verdadeiras se reduzem as ordens da função de interpolação UDS-2;
- A variável L tem suas ordens verdadeiras definidas como para a variável T_c .

Novamente, destaca-se que nas Tabs. 5.2 e 5.3 a variável L tem suas ordens de erro definidas como para a variável T_c , pois não há relação que agregue considerações referentes ao erro de truncamento, a não ser aquela deduzida para a própria variável primária, T .

Tabela 5.3 Ordens verdadeiras resultantes obtidas *a priori* das aproximações utilizadas nas variáveis de interesse referentes à equação de advecção-difusão 2D

| VARIÁVEL DE INTERESSE | ORDENS VERDADEIRAS | ORDEM ASSINTÓTICA |
|-----------------------|---|---|
| T_c | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_L = 1$ $\beta = 1 \Rightarrow p_L = 2$ |
| T_m | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| q_e | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $p_L = 2$ |
| q_n | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $p_L = 2$ |
| L | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |

5.2.2 Análise *a Posteriori* da Ordem do Erro de Discretização das Aproximações na Obtenção das Variáveis de Interesse - Ordens Efetiva e Aparente

A seguir, são apresentados os resultados referentes às ordens verdadeiras, efetiva e aparente, de cada variável de interesse, obtidas com o programa Richardson 3.2, que é baseado no estimador de Richardson, conforme visto na seção 3.6.2.1. Estes resultados mostram a tendência das ordens verdadeiras do erro de discretização obtidas *a posteriori*, considerando a variação do parâmetro de mistura (β) dada pela Eq. (4.63). As ordens obtidas desta forma podem ser corroboradas com aquelas obtidas na estimativa *a priori* apresentadas na Tab. 5.3.

Para efeito de análise, os resultados apresentados são os obtidos para $Pe = 1$ e as indicações encontradas nas legendas de cada gráfico referem-se ao método de obtenção da respectiva ordem, isto é, para $p_E(Th)$ (ordem efetiva) e $p_U(Th)$ (ordem aparente) utilizou-se as Eqs. (3.58) e (3.59) respectivamente; Ti_{pU} é a solução extrapolada uma vez com base em pU e Tbi_{pU} é a solução extrapolada duas vezes com base em pU , ou seja, é a solução de

Ti_pU com mais uma extrapolação. Análises para outros valores de Péclet serão vistos na seção 5.2.4.

A Fig. 5.1 apresenta as ordens efetivas (p_E) e as ordens aparentes (p_U) do erro de discretização obtidas para $\beta = 0$, $\beta = 0,1$, $\beta = 0,5$, $\beta = 0,9$ e $\beta = 1$ conforme Eq. (4.63) para a variável T_c . Pode-se verificar que as ordens verdadeiras obtidas *a priori* (ver Tab. 5.3) são confirmadas para $\beta = 0$ e $\beta = 1$. Ou seja, para $\beta = 0$ tem-se a aplicação da técnica UDS-1/ CDS-2 e com isso as ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2, 3, \dots$; e para $\beta = 1$ tem-se a aplicação da técnica CDS-2/CDS-2 e com isso as ordens verdadeiras são $p_V = 2, 4, 6, \dots$. Verifica-se ainda que para qualquer mistura entre essas duas técnicas, ou seja, para $0 < \beta < 1$, as ordens verdadeiras são como as obtidas para $\beta = 0$.

Esses mesmos resultados podem ser verificados na Fig. 5.2 para o caso da variável T_m , isto é, as ordens efetivas e aparentes são confirmadas para $\beta = 0$ e $\beta = 1$ e, ainda, constata-se também que para qualquer mistura entre essas duas técnicas, ou seja, para $0 < \beta < 1$, as ordens verdadeiras são como as obtidas para $\beta = 0$.

Para o caso da variável q_e pode-se verificar na Fig. 5.3 que, comparando a sua ordem obtida *a priori* (ver Tab. 5.3) com os resultados obtidos *a posteriori*, estas são satisfeitas somente quando $\beta = 1$. Os resultados obtidos para $\beta = 0$, $\beta = 0,1$, $\beta = 0,5$ e $\beta = 0,9$ não são os esperados. Nestes casos percebe-se que a ordem do erro de discretização *a posteriori* foi degenerada. Este comportamento pode estar relacionado ou com a condição de contorno, uma vez que esta variável está sendo analisada em $x = 1$, ou com a ordem da função de interpolação utilizada, ou ainda, estar relacionado ao erro de poluição como mencionado na seção 4.5. A influência da forma de aplicação das condições de contorno na ordem do erro de discretização pode ser explicada, pois para a análise de variáveis no contorno, as análises *a priori* podem não detectar outros efeitos (por exemplo, singularidades) que influenciarão o erro *a posteriori*. Outra possível influência a ser considerada é o fato da mistura das ordens do erro dos diferentes esquemas aplicados para aproximar a derivada e a integral, como pode ser visto na Tab. 5.2. Com base nos resultados das variáveis T_c e T_m , pode-se considerar, para este caso, que as ordens obtidas *a posteriori* informam que as ordens obtidas *a priori* são determinadas segundo a aplicação da função de interpolação utilizada; no caso em que $\beta \neq 1$, a de menor ordem.

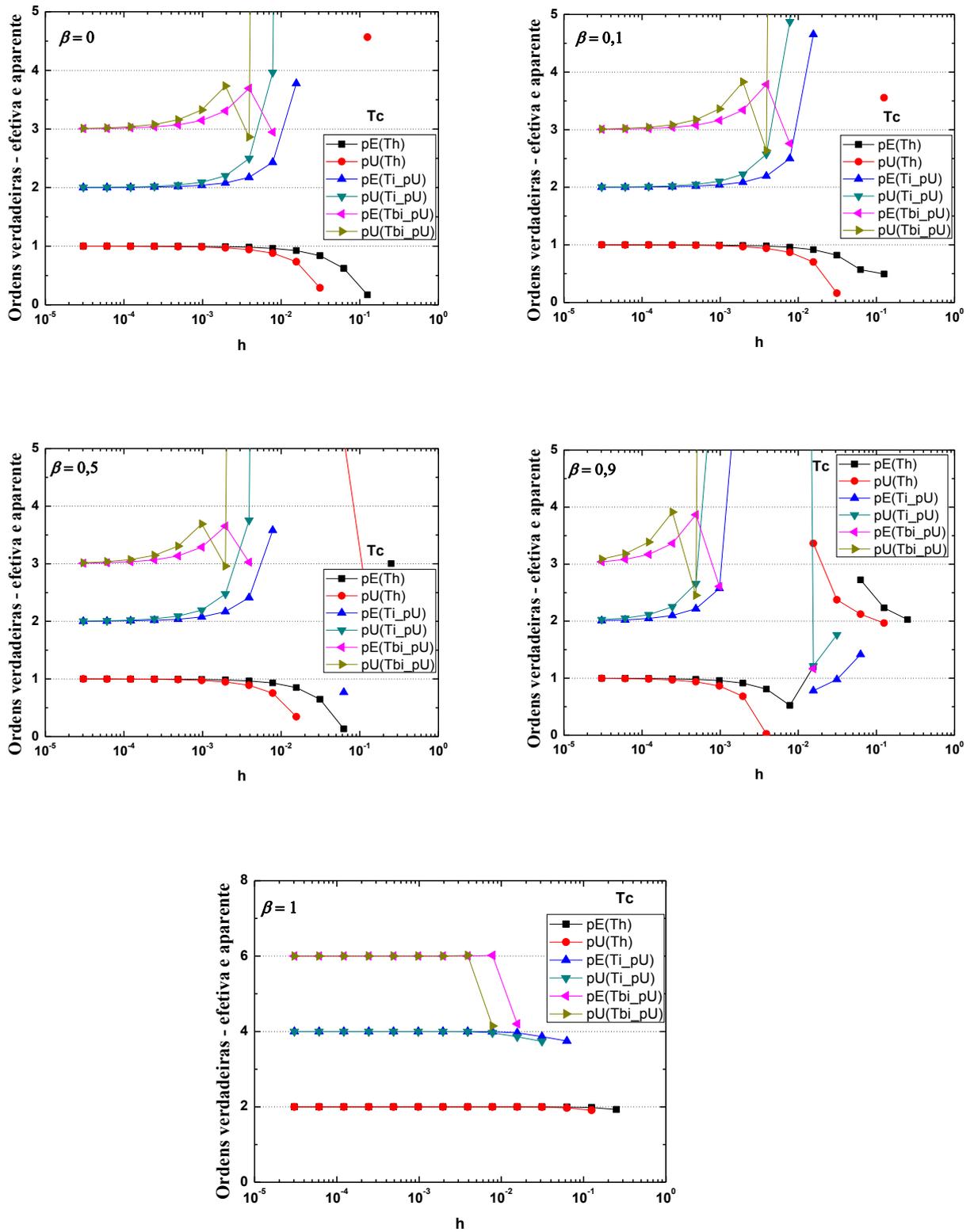


Figura 5.1 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_c segundo β .

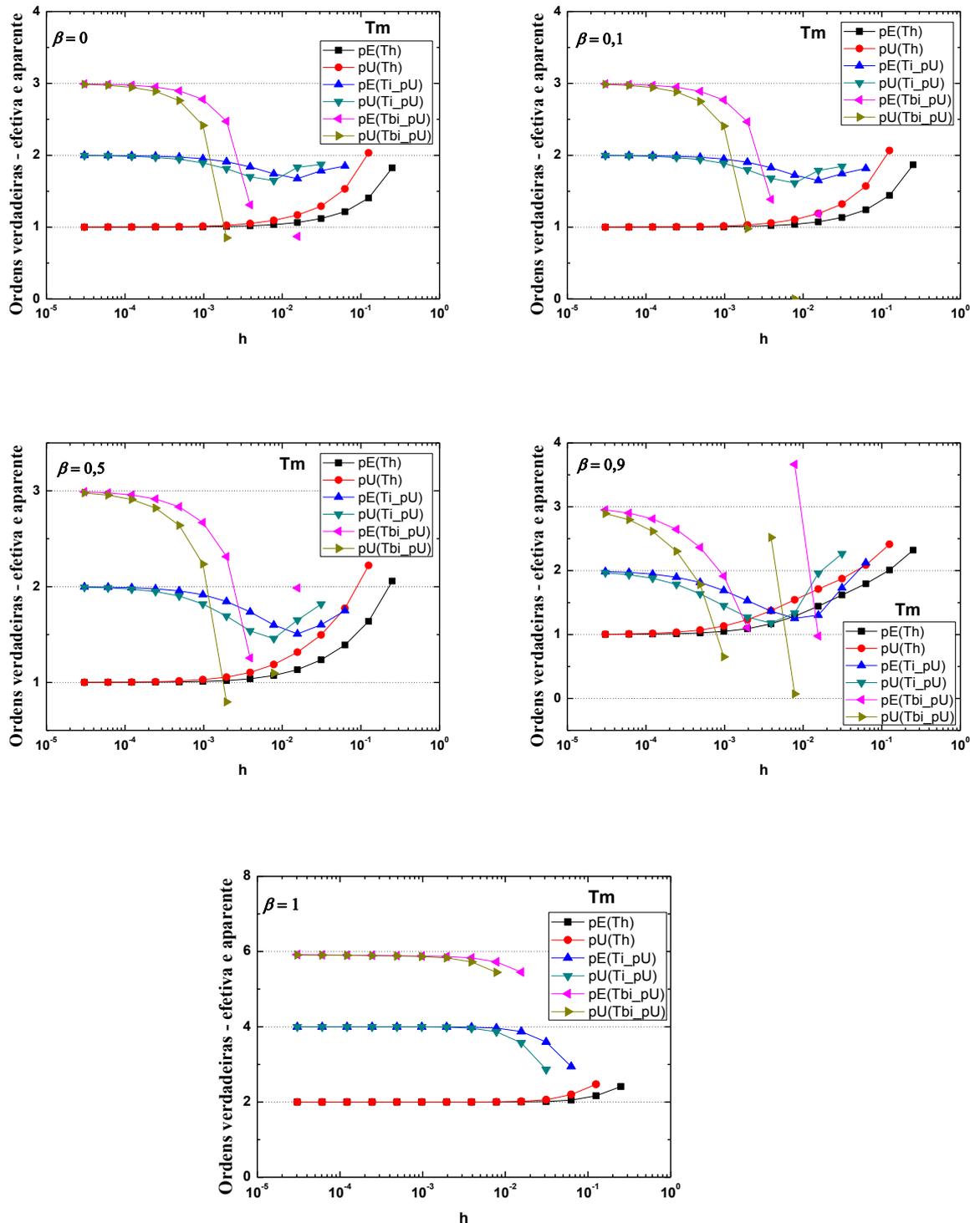


Figura 5.2 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_m segundo β .

Analisando a Fig. 5.4, para o caso da variável q_n , apesar da terceira ordem verdadeira não ser clara quando $\beta = 1$, a sua tendência sugere que seu valor seja quatro. Com isso pode-se considerar que as ordens efetivas e aparentes constatadas para esta variável corroboram para o fator de mistura $\beta = 1$, porém os resultados obtidos para $\beta = 0$, $\beta = 0,1$, $\beta = 0,5$ e

$\beta = 0,9$ não são os esperados. Aqui, como ocorreu para o caso de q_e , percebe-se que a ordem do erro de discretização *a posteriori* também foi degenerada. A variável q_n está sendo analisada em $y = 1$, sendo assim, são consideradas as mesmas justificativas apresentadas para a variável q_e .

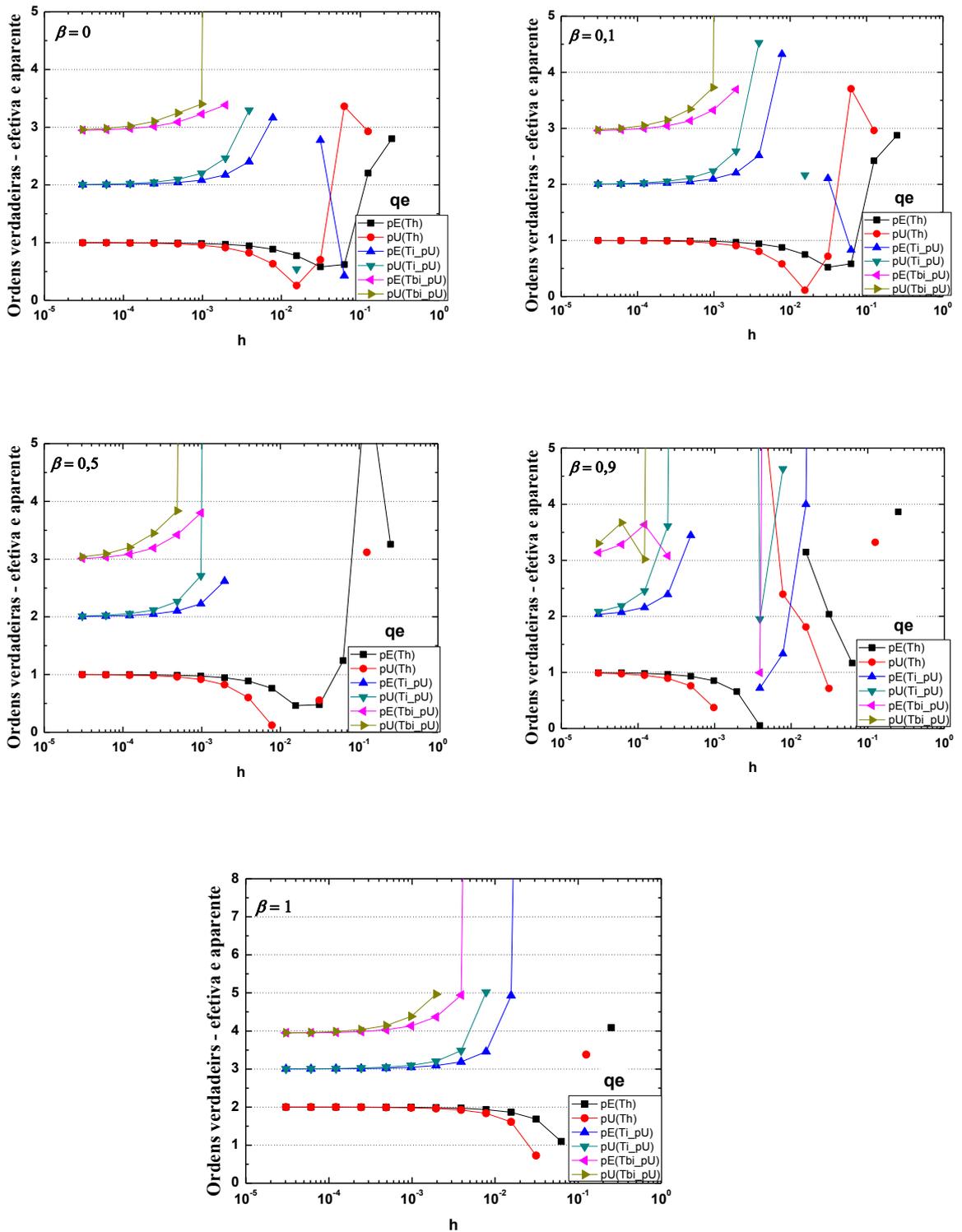


Figura 5.3 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável q_e segundo β .

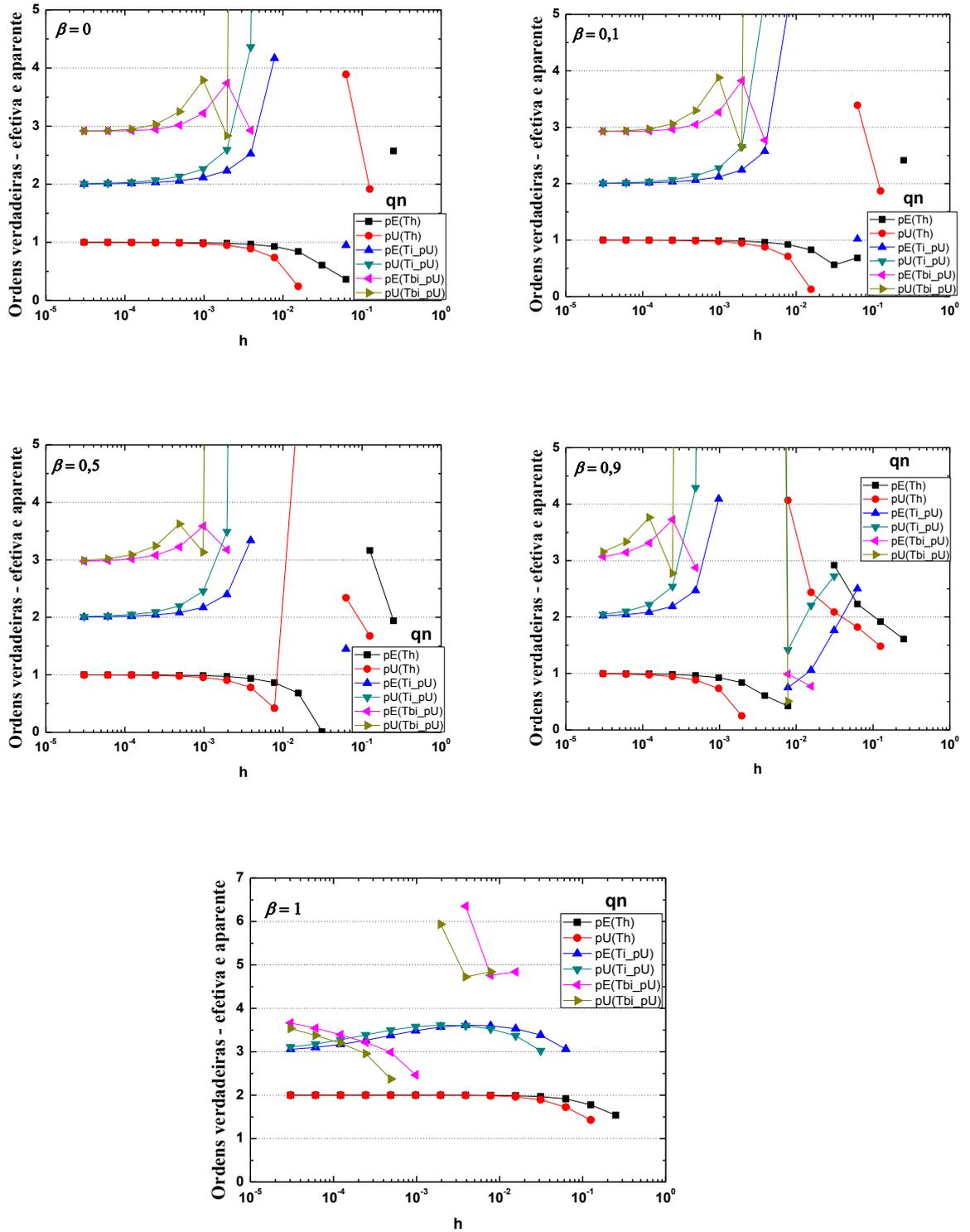


Figura 5.4 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável q_n segundo β .

No caso da variável L (ver Fig. 5.5) observam-se os mesmos resultados analisados para a variável T_c e T_m , ou seja, os valores das ordens efetivas e aparentes tendem as ordens

verdadeiras previstas na análise *a priori* como visto na Tab. 5.3 mostrando coerência nos resultados.

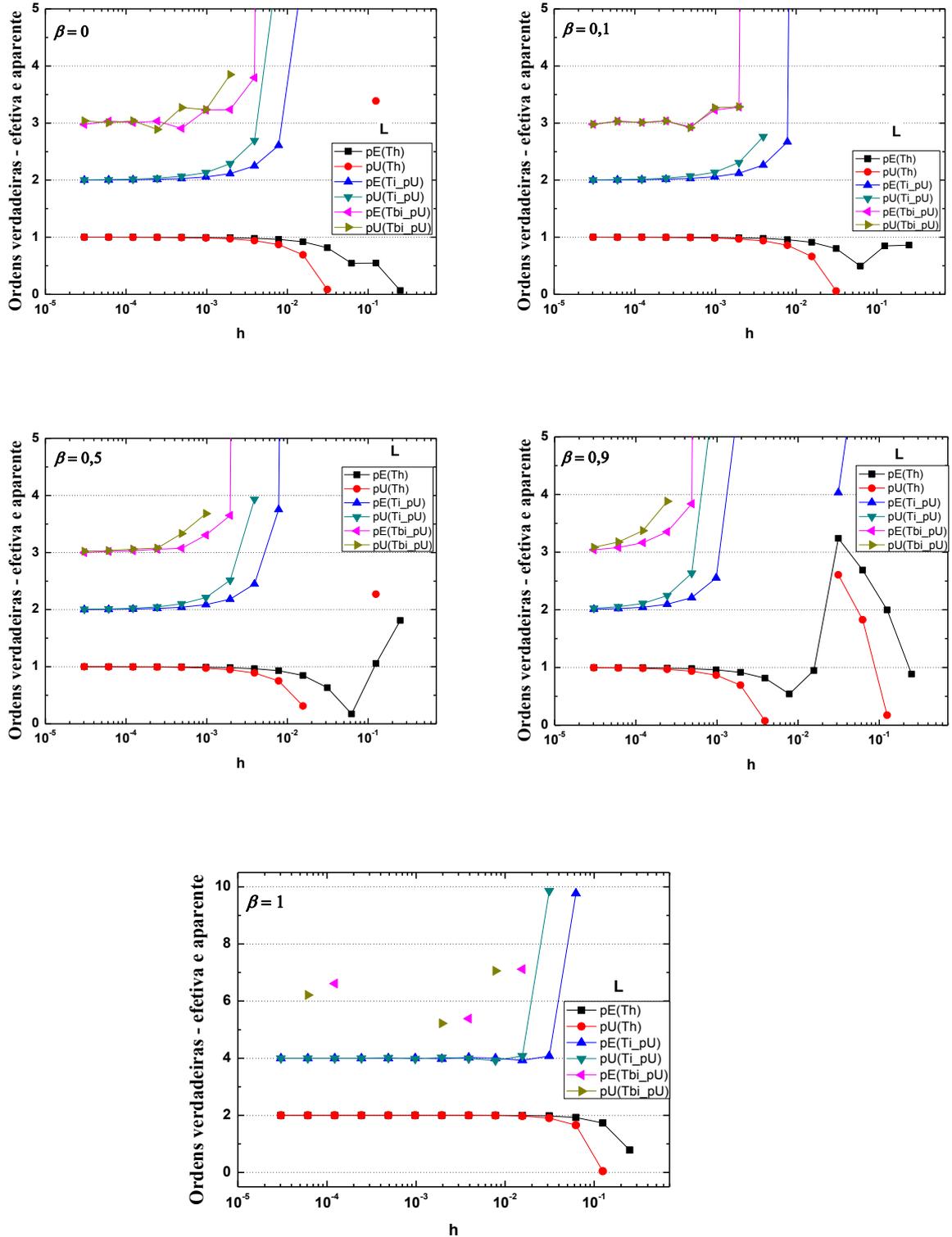


Figura 5.5 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável L segundo β .

Um fator importante a ser considerado nos resultados é que, na medida em que a malha é refinada, as ordens aparentes do erro tendem as ordens verdadeiras obtidas *a priori* e, conseqüentemente, tendem a assintótica. Como visto na seção 3.5, a análise da ordem aparente é importante considerando que, para os casos em que a solução analítica é desconhecida, e também para os casos em que a análise *a priori* não é definida ou de difícil acesso, esta se torna referencial confiável para verificar a acurácia da solução numérica.

5.2.3 Efeito do Parâmetro Numérico β no Refinamento do Erro de Discretização dos Resultados com e sem MER

A seguir são apresentados os resultados com e sem a utilização de MER para a redução do erro de discretização em função de h para cada variável de interesse para análise do efeito do método híbrido (MCA) segundo o fator de mistura β . Estes também são os obtidos para $Pe = 1$. Análises para outros valores de Péclet serão vistos na seção 5.2.4.

Analisando as Figs. 5.6 a 5.10 verifica-se que o erro de discretização (E_h) é reduzido monotonicamente à medida que a malha é refinada, e que as ordens de magnitude corroboram com os valores das ordens assintóticas obtidas pelas análises *a priori* e *a posteriori*. Ou seja, a não ser para $\beta = 1$, onde $p_L = 2$, para quaisquer outros valores de β , $p_L = 1$, indicando assim a influência de β .

Na Fig. 5.6, verifica-se que o erro de discretização da variável de interesse T_c é reduzido consideravelmente com o uso de MER para quaisquer valores de β . Porém no caso em que $\beta = 1$ (aproximação do tipo CDS-2) tanto para o termo advectivo quanto para o termo difusivo, a curva obtida com MER atinge magnitudes de erros bem mais baixas do que aquelas obtidas sem a aplicação de MER. Pode-se ainda verificar que a eficiência de MER é reduzida somente em malhas muito finas quando o erro de arredondamento contamina o resultado. Este último resultado pode ser verificado a partir da décima segunda malha, ou seja, a malha de ordem 4096x4096.

As Figs. 5.7 a 5.10 mostram que as curvas do erro de discretização com MER tiveram um decaimento linear para as variáveis de interesse T_m (Fig. 5.7), q_e (Fig. 5.8), q_n (Fig. 5.9) e L (Fig. 5.10). A tendência do erro apresentada nestes casos não corresponder aos valores

esperados pode estar relacionada ao erro de poluição, inerente dos erros de truncamento e discretização, como explicitado na seção 4.5.

Os resultados apresentados nas Figs. 5.7 a 5.10 também mostram que apesar dos resultados com MER apresentarem ordens de magnitude bem mais baixas do que as ordens obtidas nos resultados numéricos sem MER, estes não foram tão significantes como os resultados obtidos para a variável T_c . Mesmo assim, no caso em que $\beta = 1$ nota-se resultados melhores do que para outros valores de β . Considerando-se o módulo do erro de discretização com MER (Em1) percebe-se que para h relativamente grande, em geral para $\beta = 1$ o erro é menor comparado a outros valores de β .

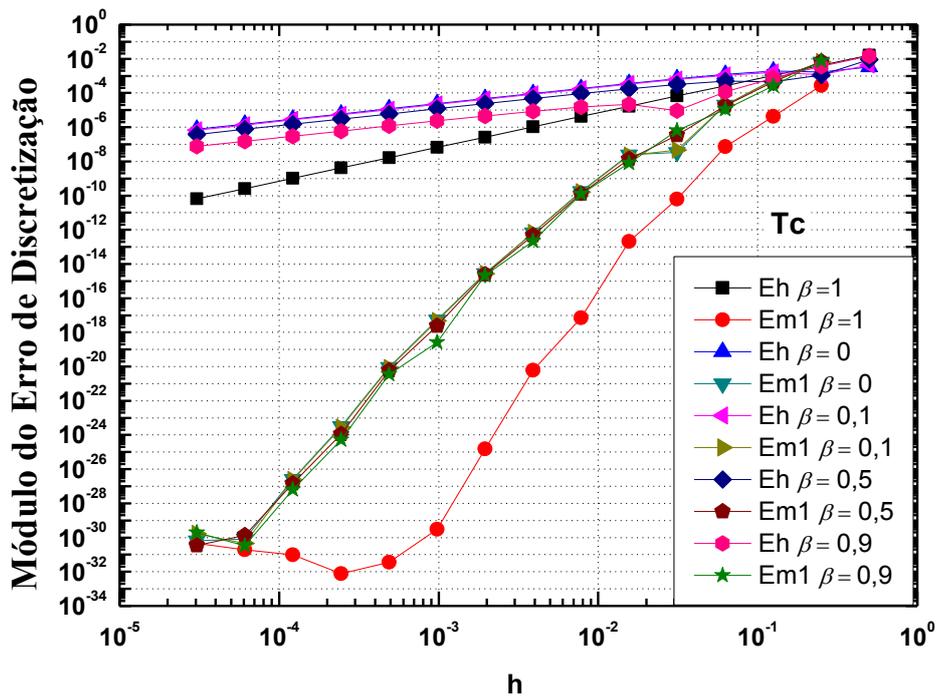


Figura 5.6 Módulo do erro de discretização da variável T_c com MER (Em1) e sem MER (Eh).

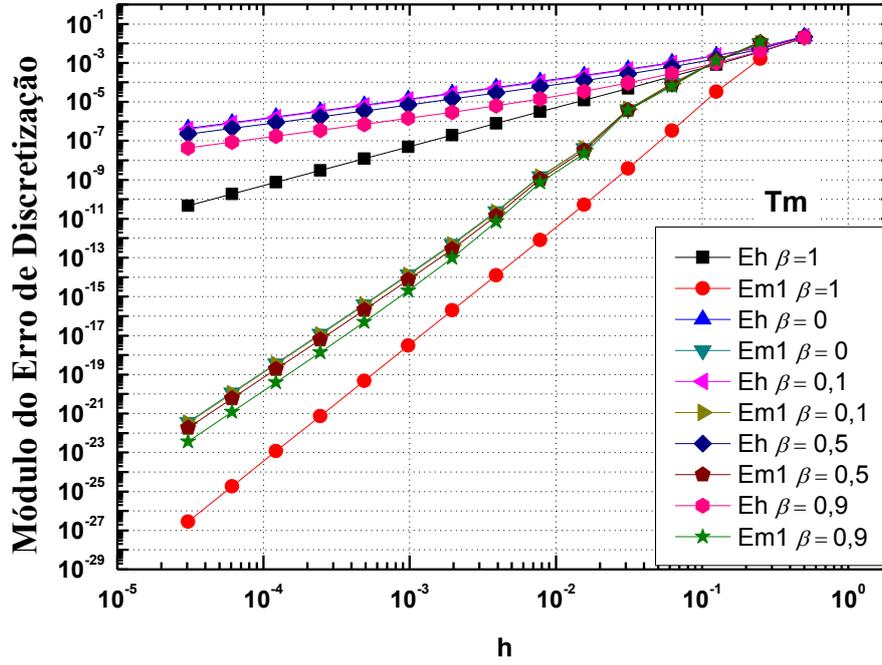


Figura 5.7 Módulo do erro de discretização da variável T_m com MER (Em1) e sem MER (Eh).

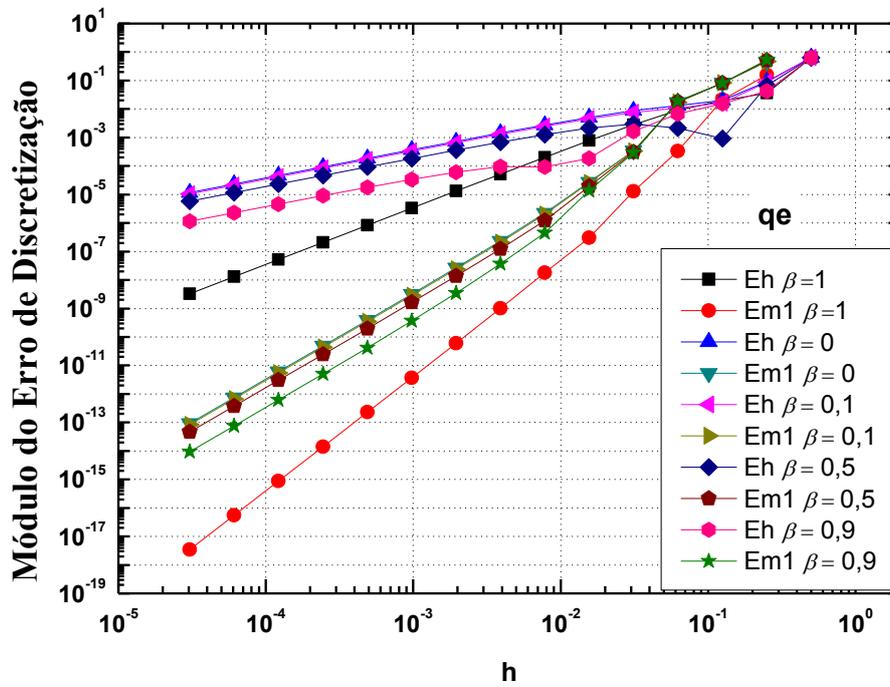


Figura 5.8 Módulo do erro de discretização da variável q_e com MER (Em1) e sem MER (Eh).

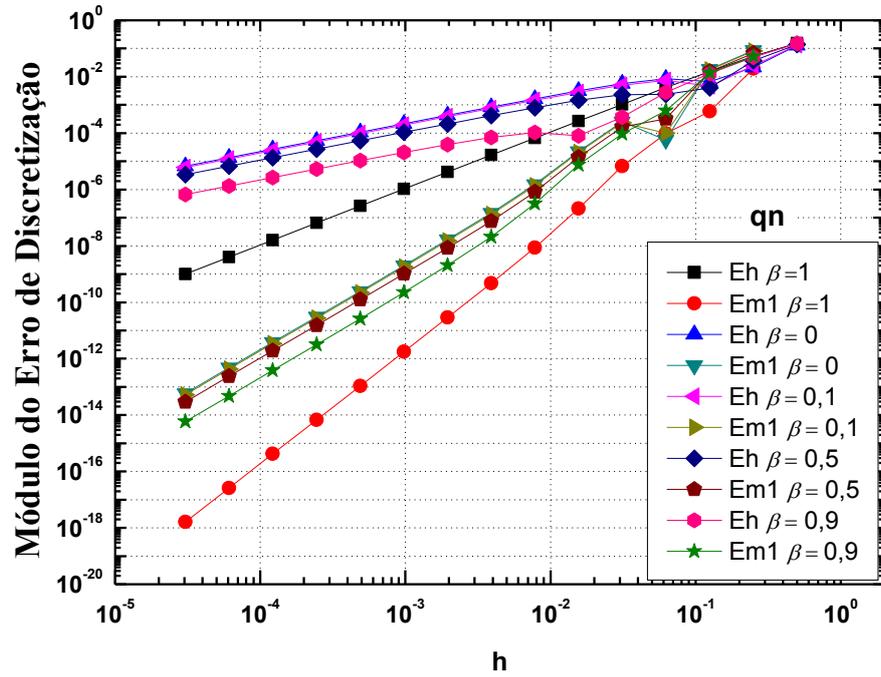


Figura 5.9 Módulo do erro de discretização da variável q_n com MER (Em1) e sem MER (Eh).

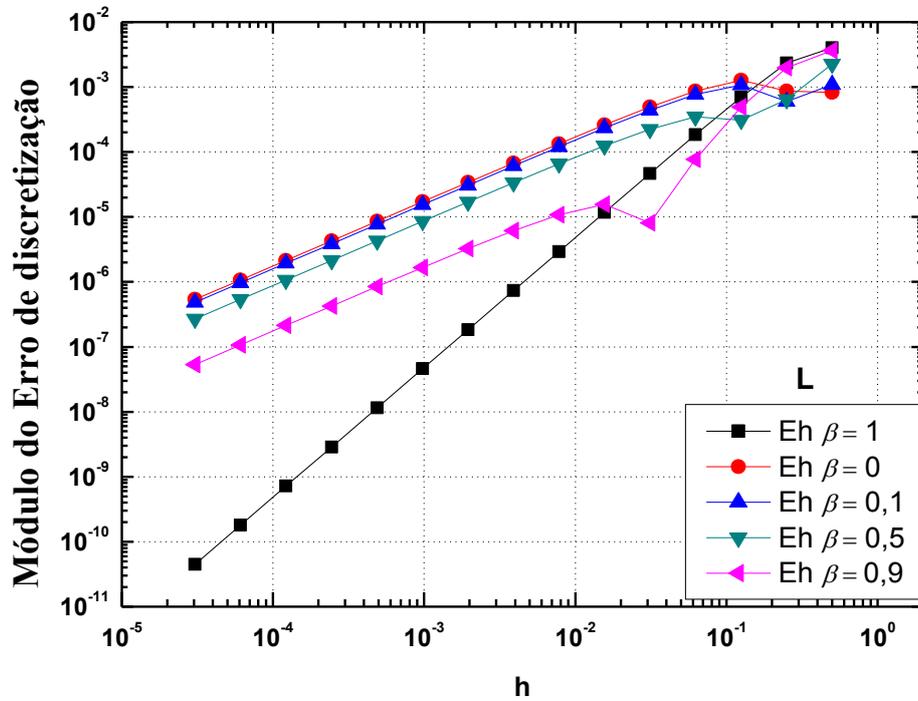


Figura 5.10 Módulo do erro de discretização da variável L .

Em todos os resultados, mais especificamente na Fig. 5.10, pode-se verificar que para o esquema híbrido proposto, o valor do módulo do erro fica entre os dois esquemas puros, exceto em malhas muito grossas. A proximidade do valor do módulo do erro entre o esquema híbrido e o esquema de maior ordem depende do valor usado para o fator β .

Note que a variável L , mede a norma do erro, portanto, ao aplicar MER sobre essa variável melhora-se a acurácia da norma do erro, e não o erro, ou seja, MER não estaria melhorando de fato a solução. MER pode ser aplicado em variáveis locais e em variáveis globais, desde que esta aplicação interfira para melhor na acurácia da solução.

5.2.4 Efeito do Número de Péclet no Refinamento do Erro de Discretização dos Resultados com e sem MER

Até o momento foram realizadas análises referentes ao efeito do fator de mistura (β) nas ordens verdadeiras do erro numérico bem como nos resultados obtidos pela redução do erro de discretização com e sem MER. Nas análises anteriores fixou-se o número de Péclet igual a unidade ($Pe = 1$). Outra análise importante é o efeito do número de Péclet (Pe) sobre os resultados.

Para a análise do efeito deste parâmetro físico (Pe) no erro de discretização são apresentados resultados obtidos *a posteriori* das ordens verdadeiras (as três primeiras ordens verdadeiras como na análise *a priori*), efetivas e aparentes, obtidas com base no estimador de Richardson com o aplicativo Richardson 3.2. Também são expostos os resultados referentes ao módulo do erro de discretização *versus* o tamanho da malha para comparação, segundo o número de Péclet utilizado.

Os resultados foram obtidos variando-se o número de Péclet somente nos casos em que $\beta = 0$ e $\beta = 1$ pelo fato de outros valores de β apresentarem influência semelhante a $\beta = 0$ e não afetarem de forma significativa os resultados.

Para uma análise detalhada na redução dos erros numéricos com MER e de suas ordens foram avaliados três valores para o número de Péclet, a saber, $Pe = 0,1$; $Pe = 1$ e $Pe = 10$, com e sem a aplicação de MER. O valor de $Pe = 1$ é novamente apresentado para

facilitar a comparação. As escolhas dos valores do número de Péclet são de caráter puramente numérico, considerado apenas para efeito de testes.

Importante ressaltar nesse momento que, para valores de Pe muito elevados ($Pe \gg 1$), o efeito do termo advectivo é mais significativo do que o difusivo. O impacto desse número nos resultados fica evidenciado quando se consideram os efeitos dos termos advectivo e/ou difusivo, quando a malha é muito grossa e também pelos métodos utilizados na discretização do modelo para cada um dos termos envolvidos.

Nesse sentido, nas seções seguintes são apresentados todos os resultados para cada variável de interesse referente ao modelo de advecção-difusão.

5.2.4.1 Temperatura no centro do domínio - T_c

Analisando as ordens efetivas e aparentes obtidas *a posteriori* para a variável T_c com os três valores de Péclet definidos anteriormente, vê-se na Fig. 5.11 que os valores coincidem com aqueles obtidos para $Pe = 1$, já analisado. Portanto, para a variável T_c o valor de Péclet não altera as ordens efetiva e aparente do erro para nenhum dos dois parâmetros de mistura, isto é, para $\beta = 0$ ou $\beta = 1$. Nota-se claramente também que os resultados são confirmados com aqueles obtidos *a priori* à medida que é realizado o refinamento das malhas.

A Fig. 5.12 mostra o comportamento da magnitude do erro de discretização para os três valores de Pe quando se utilizam as funções de interpolação UDS-1/CDS-2 ($\beta = 0$) e CDS-2/CDS-2 ($\beta = 1$) para os termos de advecção/difusão do modelo. Pode-se verificar que quando $\beta = 1$ os erros são minimizados comparados aos mesmos quando $\beta = 0$, tanto para Eh quanto para a solução com MER (Em1).

Pode-se verificar ainda que a magnitude dos erros com MER e $\beta = 1$ é bem minimizada. Nota-se também que a diferença entre as magnitudes dos erros sem MER para $Pe = 0,1$ e $Pe = 1$ é pequena em todas as malhas e que para $Pe = 10$ os erros são menores comparados a estes últimos. Porém, quando MER é utilizado, o comportamento se inverte até o ponto em que os erros de arredondamento começam a afetar os resultados para $Pe = 0,1$ e $Pe = 1$.

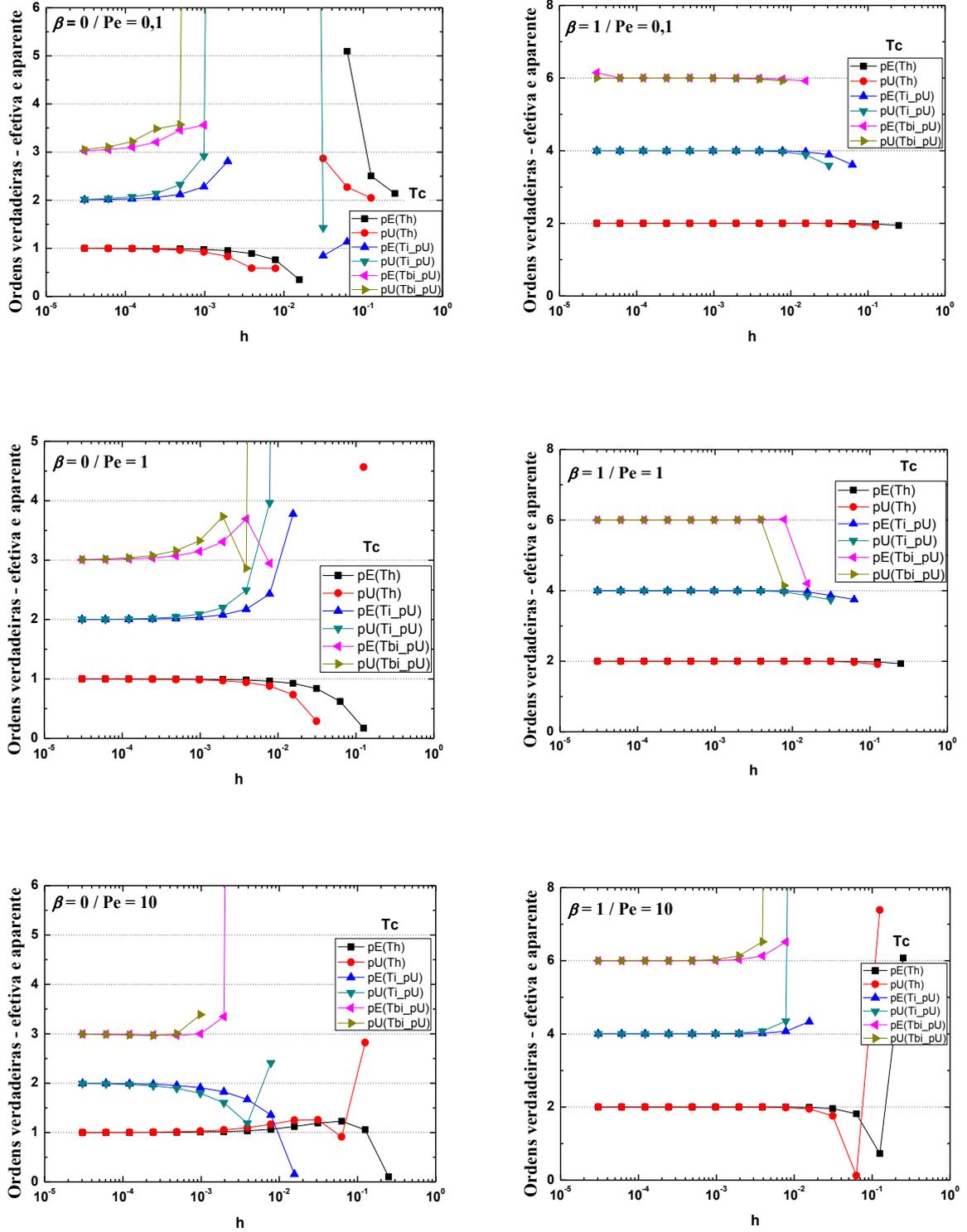


Figura 5.11 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_c segundo Pe .

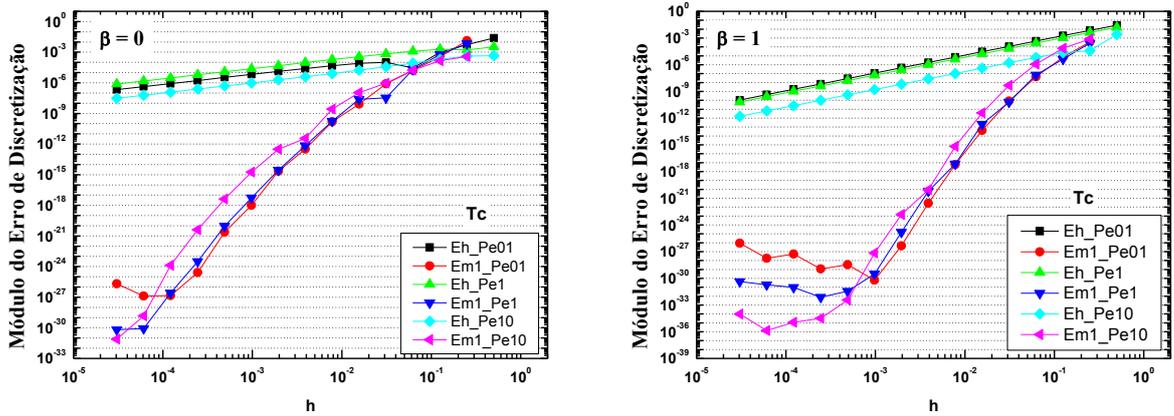


Figura 5.12 Gráfico do módulo do erro de discretização para T_c com (Em1) e sem (Eh) MER versus h para alguns valores de Péclet (Pe).

5.2.4.2 Temperatura média - T_m

Os resultados das ordens efetivas e aparentes obtidas *a posteriori* para a variável T_m para os três valores de Péclet definidos anteriormente, podem ser visualizados na Fig. 5.13 e assemelham-se aos analisados para a variável T_c porém, para $\beta = 0$ verifica-se que para malhas mais grossas, a terceira ordem verdadeira não está clara, mas a medida que a malha é refinada, sua tendência confirma os valores obtidos *a priori*.

Vê-se na Fig. 5.13 que os valores destas ordens coincidem com aqueles obtidos para $Pe = 1$, já analisado. Portanto, também para a variável T_m o valor de Péclet não altera as ordens efetiva e aparente do erro para nenhum dos dois parâmetros de mistura ($\beta = 0$ ou $\beta = 1$) como era esperado.

A Fig. 5.14 mostra o comportamento da magnitude do erro de discretização para variável T_m para três valores de Pe quando se utiliza as funções de interpolação UDS-1/CDS-2 ($\beta = 0$) e CDS-2/CDS-2 ($\beta = 1$) para os termos de advecção/difusão do modelo agora para a variável T_m . Pode-se verificar que, tanto para Eh quanto para a solução com MER (Em1), os erros são minimizados para $\beta = 1$, comparados com $\beta = 0$.

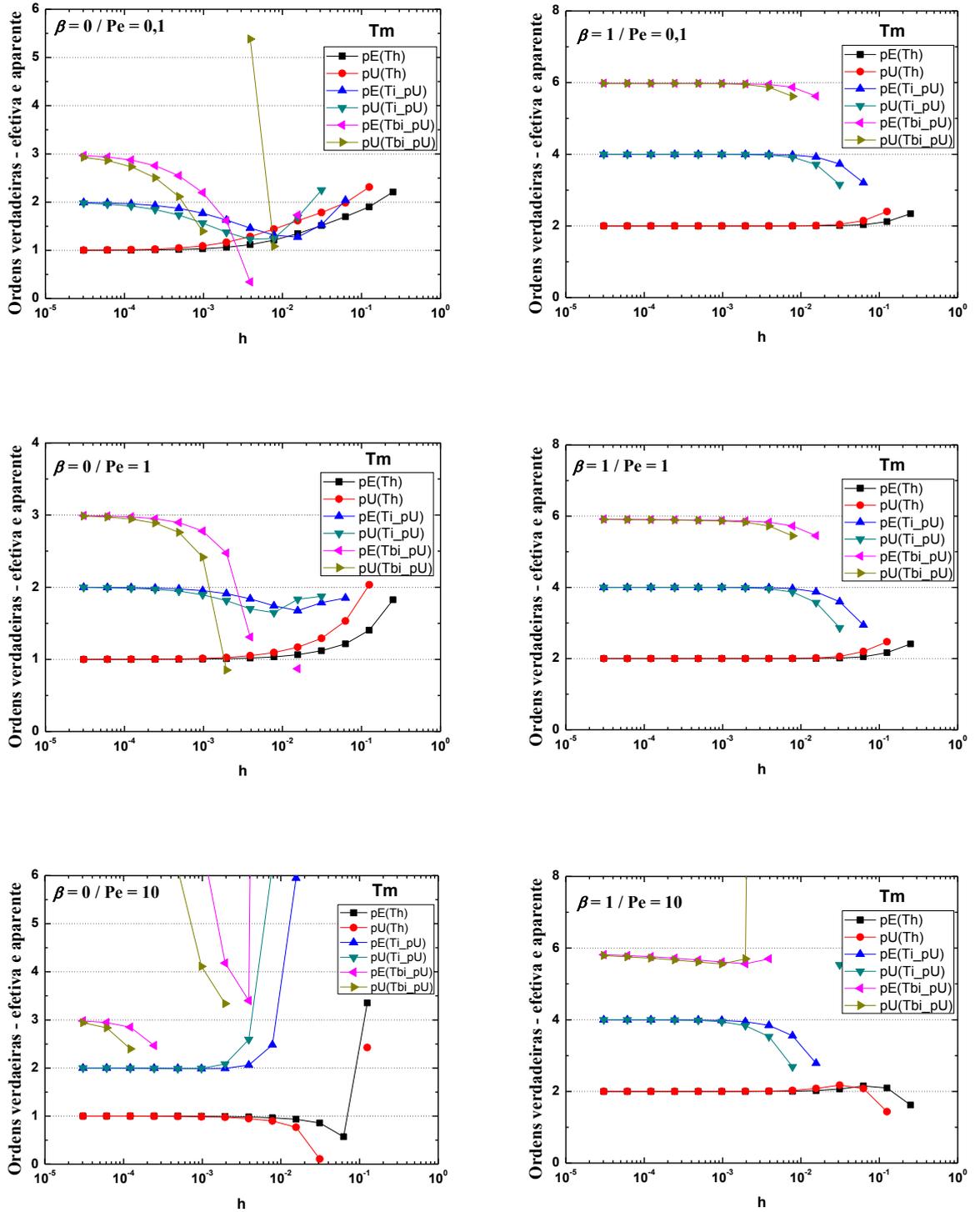


Figura 5.13 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_m segundo Pe .

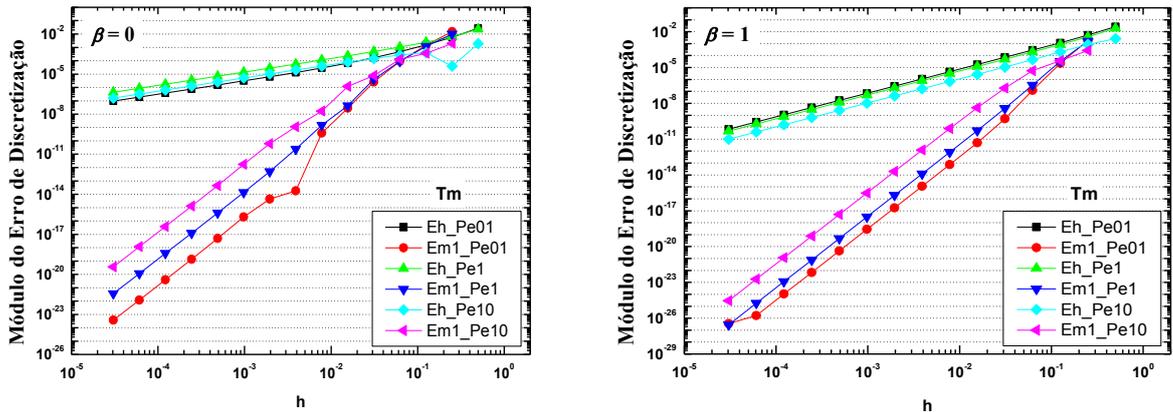


Figura 5.14 Gráfico do módulo do erro de discretização para T_m com (Em1) e sem (Eh) MER versus h para alguns valores de Péclet.

No caso da variável T_m pôde-se verificar que houve uma redução na magnitude dos erros com MER e $\beta = 1$, porém com um comportamento linear o que mostra uma perda de eficiência na aplicação de MER. Nota-se também que a diferença entre as magnitudes dos erros sem MER para $Pe = 0,1$ e $Pe = 1$ é pequena para malhas mais finas e que para $Pe = 10$ os erros são menores que estes somente no caso em que $\beta = 1$. A análise do erro global mostra que quando MER é utilizado, a redução da magnitude do erro apresenta melhor resultado para $Pe = 0,1$.

5.2.4.3 Fluxo de calor ao leste - q_e

A Fig. 5.15 mostra o comportamento da magnitude do erro de discretização para os três valores de Pe quando se utiliza as funções de interpolação UDS-1/CDS-2 ($\beta = 0$) e CDS-2/CDS-2 ($\beta = 1$) para os termos de advecção/difusão do modelo agora para a variável q_e . Pode-se verificar que quando $\beta = 1$ os erros são minimizados comparados aos mesmos quando $\beta = 0$, tanto para Eh quanto para a solução com MER (Em1).

No caso da variável q_e pôde-se verificar que houve uma redução na magnitude dos erros com MER e $\beta = 1$, porém também neste caso, como para a variável T_m , o comportamento é linear, o que mostra perda de eficiência na aplicação de MER.

Analisando a Fig. 5.15 verifica-se que a diferença entre as magnitudes dos erros sem MER para essa variável é pequena para $Pe = 1$ e $Pe = 10$ e que para $Pe = 0,1$ os erros são menores que estes somente no caso em que $\beta = 0$. A análise da magnitude do erro para essa variável quando MER é utilizado, mostra que a redução da magnitude do erro apresenta melhor resultado para Péclet menor que 10 tanto para $\beta = 0$ como para $\beta = 1$.

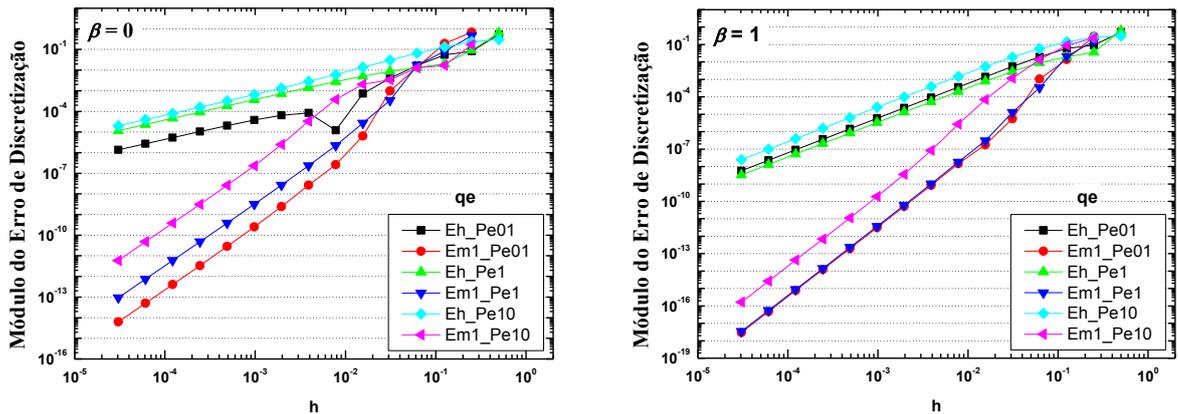


Figura 5.15 Gráfico do módulo do erro de discretização para q_e com (Em1) e sem (Eh) MER versus h para alguns valores de Péclet.

A análise da Fig. 5.16 mostra que as ordens efetivas e aparentes obtidas *a posteriori* para a variável q_e também se assemelham aos analisados para a variável T_c para os três valores de Péclet definidos anteriormente. Porém, neste caso verifica-se que quando $\beta = 0$, para malhas mais grossas as ordens verdadeiras apresentam discontinuidades para $Pe = 0,1$ e $Pe = 10$, tanto para a ordem efetiva quanto para a aparente, mas sua tendência também confirma os valores obtidos *a priori*, à medida que a malha é refinada. Esse comportamento também é verificado para $Pe = 10$ quando $\beta = 1$ na terceira ordem verdadeira.

A Fig. 5.16 mostra que quando $\beta = 1$ os valores coincidem com aqueles obtidos para $Pe = 1$, já analisado. Logo, a tendência das ordens verdadeiras para a variável q_e mostra que o valor de Péclet não altera as ordens efetiva e aparente do erro para nenhum dos dois parâmetros de mistura ($\beta = 0$ ou $\beta = 1$), como era esperado.

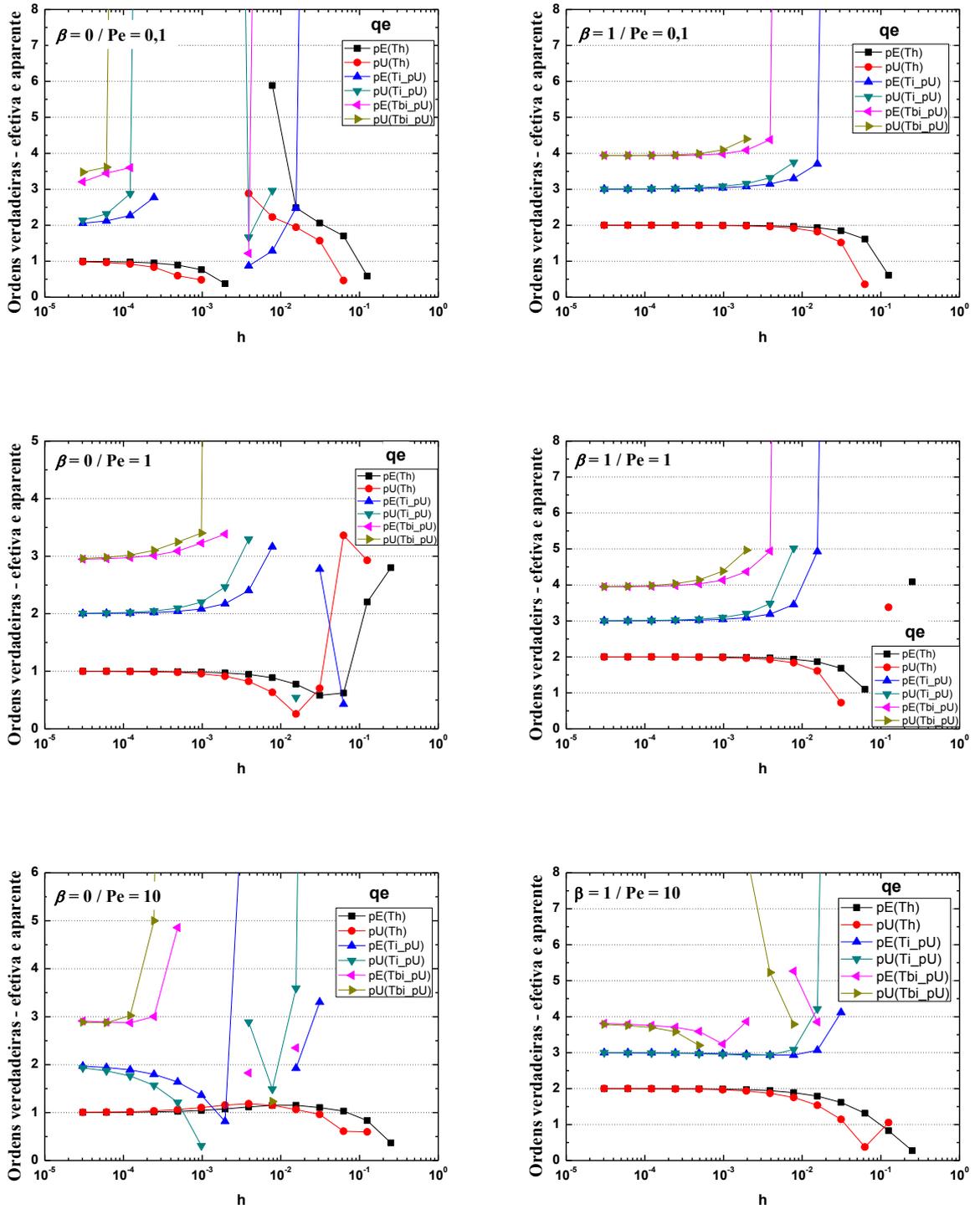


Figura 5.16 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável q_e segundo Pe .

5.2.4.4 Fluxo de calor ao norte - q_n

A Fig. 5.17 mostra também o comportamento da magnitude do erro de discretização para os três valores de Pe quando se utiliza as funções de interpolação UDS-1/CDS-2 ($\beta = 0$) e CDS-2/CDS-2 ($\beta = 1$) para os termos de advecção/difusão do modelo agora para a variável q_n . Pode-se verificar que quando $\beta = 1$ os erros são minimizados comparados aos mesmos quando $\beta = 0$, tanto para Eh quanto para a solução com MER (Em1).

No caso da variável q_n pôde-se verificar que houve uma redução na magnitude dos erros com MER e $\beta = 1$, porém também neste caso como para a variável q_e , o comportamento é linear o que mostra uma perda de eficiência na aplicação de MER.

Analisando a Fig. 5.17 verifica-se que a diferença entre as magnitudes dos erros sem MER para esse parâmetro é pequena quando $Pe = 1$ e $Pe = 10$ no caso de $\beta = 0$ e para $Pe = 0,1$ e $Pe = 1$ quando $\beta = 1$.

A análise da magnitude do erro para essa variável quando MER é utilizado mostra que no caso em que $\beta = 0$ a redução da magnitude do erro apresenta algumas características distintas ao que é esperado. Por exemplo, para $Pe = 10$ a magnitude do erro só corresponde ao esperado a partir da 9ª malha (512x512) onde, até então, a diferença entre os resultados com e sem MER é pequena. Para $\beta = 1$ o comportamento é semelhante a variável q_e . Nota-se claramente a eficiência de MER em casos onde a ordem do erro é menor.

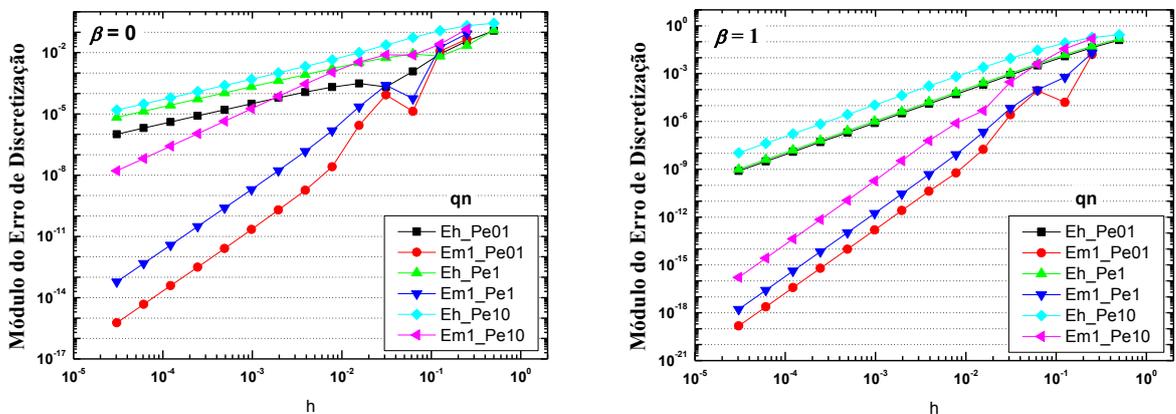


Figura 5.17 Gráfico do módulo do erro de discretização para q_n com (Em1) e sem (Eh) MER versus h para alguns valores de Péclet.

As tendências das ordens no caso da variável q_n , apresentadas na Fig. 5.18, seguem o mesmo padrão da variável q_e , porém, com algumas particularidades.

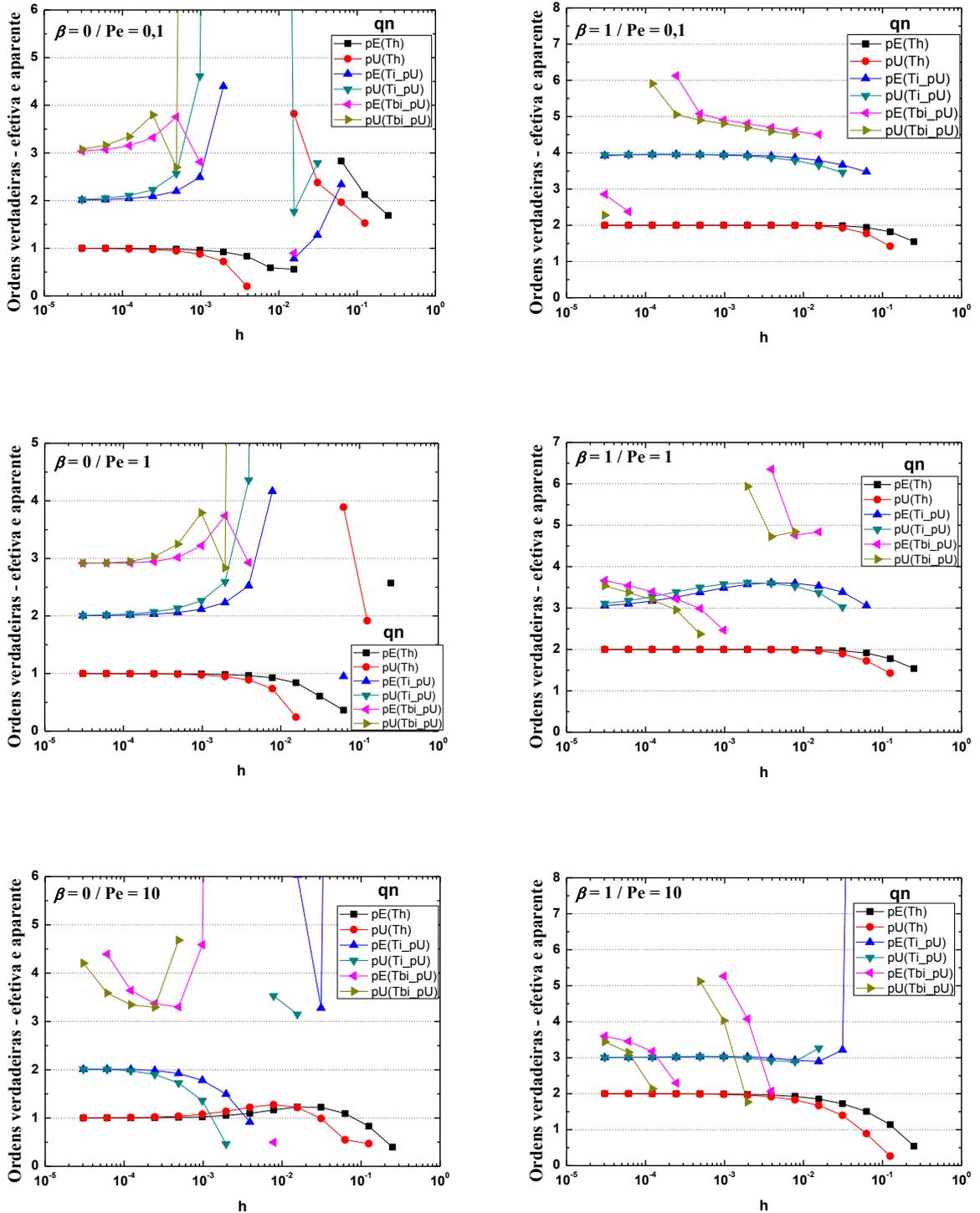


Figura 5.18 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável q_n segundo Pe .

Por exemplo, para $\beta = 0$ e $Pe = 10$, a tendência da terceira ordem parece discordar do resultado obtido a priori ao se refinar a malha, e na Fig. 5.18 quando $\beta = 1$ e $Pe = 0,1$,

não fica clara a tendência da terceira ordem verdadeira quando se refina a malha, mas fica constatado tal resultado obtido *a priori* com o aumento do número de Péclet.

Nos outros casos a variável se assemelha aos analisados para a variável q_e , para os três valores de Péclet definidos anteriormente, ou seja, verifica-se que para malhas mais grossas, as ordens verdadeiras apresentam descontinuidades para $Pe = 0,1$ e $Pe = 10$ e $\beta = 0$, tanto para a ordem efetiva quanto para a ordem aparente, mas à medida que a malha é refinada a sua tendência também confirma os valores obtidos *a priori*. Também é verificada uma descontinuidade no caso em que $Pe = 10$ quando $\beta = 1$ e a sua tendência da terceira ordem verdadeira parece discordar daquela obtida *a priori*.

Uma análise qualitativa da Fig. 5.18 mostra que os valores das ordens verdadeiras apresentam tendência que a princípio parece concordar com as ordens obtidas *a priori* para todos os valores de Péclet, porém deve-se levar em conta as ocorrências apresentadas acima.

5.2.4.5 Média da norma $l_1 - L$

Os resultados das ordens efetivas e aparentes obtidas *a posteriori* para a variável L assemelham-se aos analisados para a variável T_c para os três valores de Péclet definidos anteriormente quando $\beta = 0$. Analisando a Fig. 5.19 verifica-se que quando $\beta = 1$, não fica clara a tendência da terceira ordem verdadeira, principalmente para $Pe = 0,1$, tanto para a ordem efetiva quanto para a ordem aparente.

Vê-se na Fig. 5.19 que a tendência dos valores coincide com aqueles obtidos para $Pe = 1$, já analisado. Portanto, com base nos resultados, considera-se também para a variável L que o valor de Péclet não altera as ordens efetiva e aparente do erro para $\beta = 0$, mas para $\beta = 1$, como era esperado.

Analisando a Fig. 5.20 verifica-se que a magnitude do erro é menor para $Pe = 0,1$ quando $\beta = 0$, e é menor para $Pe = 10$ quando $\beta = 1$.

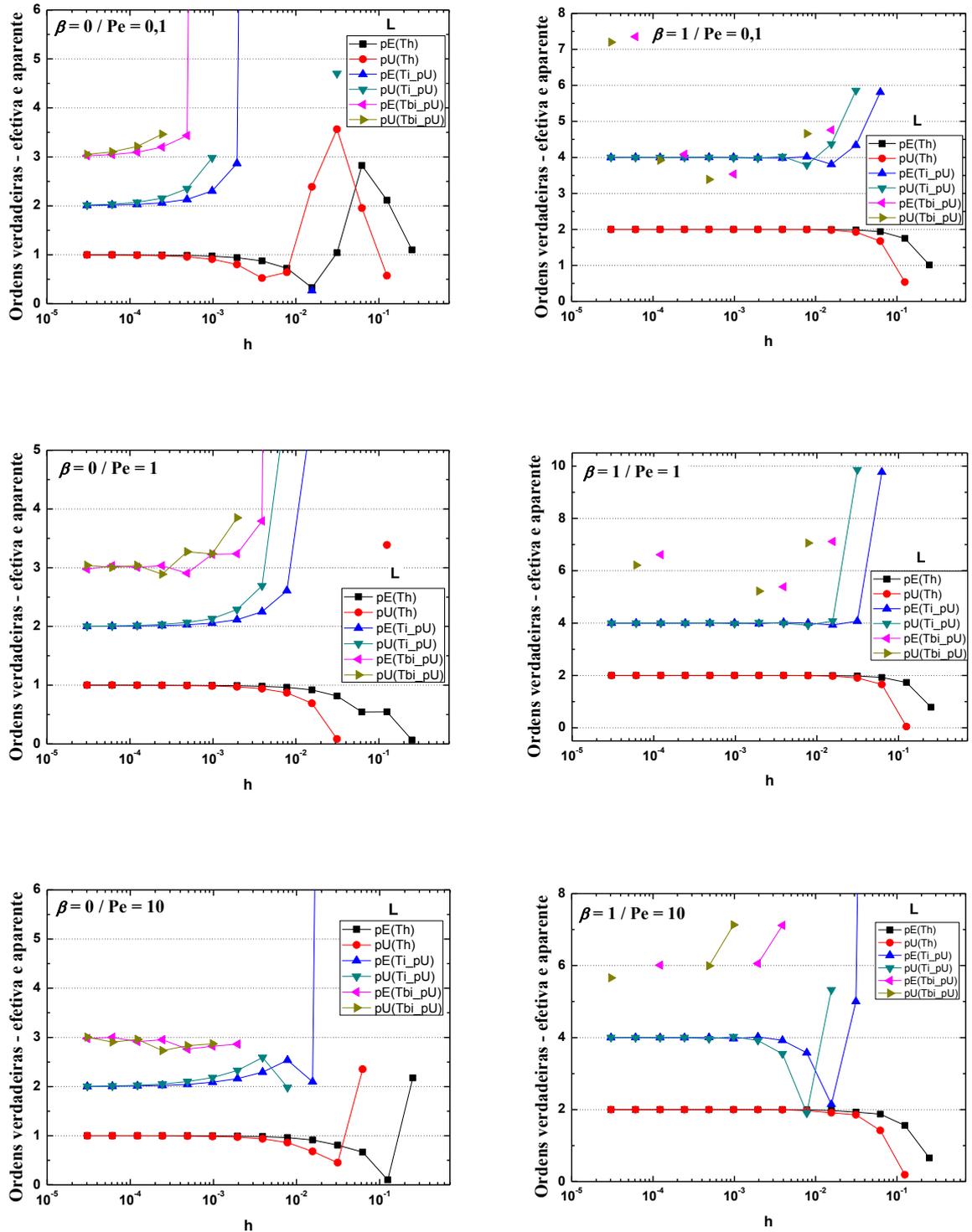


Figura 5.19 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável L segundo Pe .

Em uma análise geral das ordens verdadeiras obtidas *a posteriori* para cada variável de interesse segundo o fator de mistura $\beta = 0$ ou $\beta = 1$ todas as tendências confirmam as análises obtidas *a priori*. Com isso torna-se confiável a análise das mesmas para outros

fatores de mistura dos métodos propostos. Da mesma forma verificou-se que, independente do número de Péclet, todas as tendências corroboram com os resultados obtidos *a priori* mostrando assim que análises feitas *a priori* trazem vantagens como ferramenta de previsão da magnitude do erro de discretização. Por outro lado, na análise *a posteriori*, a ordem aparente (pU) mostrou-se uma ferramenta confiável para a verificação numérica da solução no caso em que a solução analítica é desconhecida.

As análises realizadas sobre o efeito do fator de mistura nos resultados obtidos com MER mostram o mesmo comportamento verificado nos resultados obtidos sem MER, ou seja, para valores de $0 < \beta < 1$ entre 0 e 1 a redução da magnitude do erro de discretização é aproximadamente a mesma observada para o caso em que $\beta = 0$. Mas os melhores resultados são observados para $\beta = 1$.

Analisando o efeito do número de Péclet sobre a magnitude do erro de discretização obtido com a utilização de MER verificou-se que os melhores resultados são observados para $Pe = 0,1$.

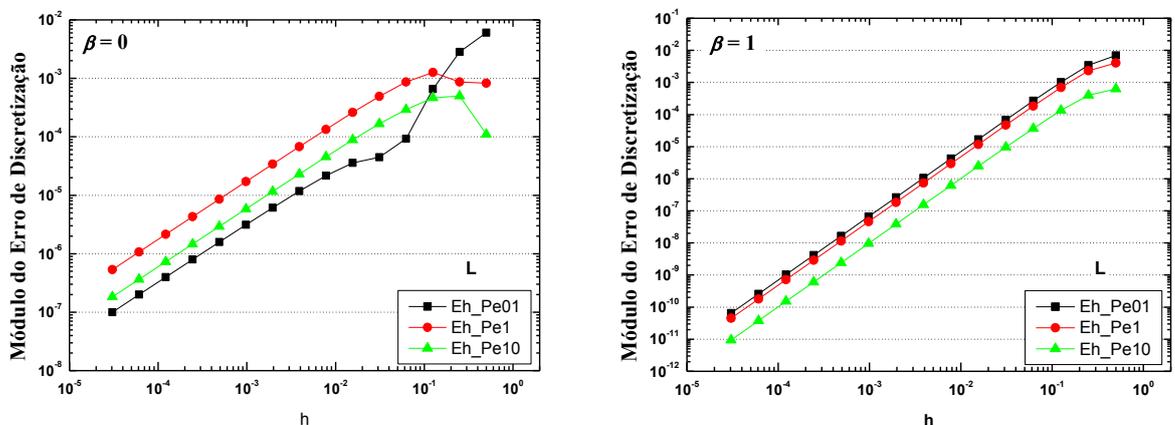


Figura 5.20 Gráfico do módulo do erro de discretização para a variável L versus h para alguns valores de Péclet.

Novamente salienta-se aqui que MER pode ser aplicado em variáveis locais e em variáveis globais, desde que esta aplicação interfira para melhor na acurácia da solução. Como a variável L , mede a norma do erro, não há sentido em aplicar MER sobre essa variável, pois assim estaríamos melhorando a acurácia da norma do erro, e não o erro, ou seja, MER não estaria melhorando de fato a solução.

5.3 EQUAÇÃO DE FOURIER 2D

O estudo do comportamento da condução de calor bidimensional transiente submetida a uma condição inicial e condição de contorno, dados pelas Eqs. (4.136) a (4.138), é analisado numericamente nessa seção.

Por meio da representação numérica dada pelas Eqs. (4.144) e (4.156) a (4.159), a distribuição da temperatura é verificada por meio de sua variação com a posição no espaço e no tempo, obtendo assim, o conhecimento do campo de temperatura para que a taxa de transferência de calor possa ser avaliada em qualquer ponto pela aplicação da lei de Fourier.

Com esse intuito foram estudadas quatro variáveis de interesse, a saber, a temperatura no centro do domínio, a temperatura média, o fluxo de calor através da superfície da placa ao leste e a média da norma l_1 do erro numérico como apresentado no capítulo 4, seção 4.4.3.1.

Para a implementação computacional, considerou-se:

- Método de Diferenças Finitas;
- Domínio bidimensional com $D = \{(x, y) | 0 < x < 1, 0 < y < 1\}$ e $t \in]0, T]$;
- Sistema de coordenadas cartesianas;
- Discretização do espaço considerando malhas estruturadas e uniformes;
- Condições de contorno de Dirichlet dada pela Eq. (4.137);
- Condição inicial dada pela Eq. (4.138);
- Número ímpar de nós;
- dez malhas computacionais;
- $t_f = 0,1s$, para análise dos erros de discretização e verificação da solução;
- $\theta = 1$ e $\theta = 1/2$, para análise do fator de mistura (θ) dado pela Eq. (4.120);

Neste contexto, inicialmente são apresentados resultados referentes às ordens obtidas pela análise *a priori*, seguida pelos resultados referentes às ordens obtidas pela análise *a posteriori*, pela aplicação da extrapolação de Richardson e, com isso, confrontar seus valores.

As indicações encontradas nas legendas de cada gráfico referem-se ao método de obtenção da respectiva ordem, isto é, para $p_E(Th)$ (ordem efetiva) e $p_U(Th)$ (ordem aparente)

utilizaram-se as Eqs. (3.58) e (3.59) respectivamente; Ti_pU é a solução extrapolada uma vez com base em pU e Tbi_pU é a solução extrapolada duas vezes com base em pU , ou seja, é a solução de Ti_pU com mais uma extrapolação.

Na sequência, são apresentados os erros de discretização com e sem MER para verificação e análise de seu comportamento segundo o fator de mistura (θ) utilizado.

5.3.1 Análise *a Priori* da Ordem do Erro de Discretização das Aproximações para Obtenção das Variáveis de Interesse para a Equação de Fourier

Nas seções 4.4.2 e 4.4.4, foram deduzidas as ordens verdadeiras do erro de discretização, por meio da aplicação da série de Taylor, para os casos uni e bidimensional, respectivamente. Foi obtida a expressão do erro de truncamento com pelo menos três termos para cada variável de interesse indicando as ordens verdadeiras do erro de discretização. O desenvolvimento para o caso unidimensional foi obtido a fim de elucidação do caso bidimensional verificando assim que o primeiro caso é facilmente estendido para o segundo, valendo assim, os mesmos resultados. A fim de validar esses resultados apresentam-se os mesmos para os dois casos nas seções a seguir.

Inicialmente, nas Tabs. 5.4 e 5.5, são apresentadas as ordens verdadeiras de cada função de interpolação utilizada na aproximação de cada variável de interesse, que são as mesmas para os casos 1D (Tab. 5.4) e 2D (Tab. 5.5). A importância da apresentação destes dados deve-se ao interesse nas combinações das ordens dessas funções efetuadas devido à necessidade de mistura das mesmas na discretização do modelo.

Vale ressaltar que nas aproximações obtidas têm-se derivadas mistas de espaço e tempo (por exemplo, T_{4x2t}^{vi} ou T_{4y3t}^{vii}), com isso, surgem diversas combinações entre os passos de tempo e espaço (por exemplo, $k^2 h_x^2$ ou $k^3 h_y^2$). Sendo assim, ao analisar as Eqs. (4.130) e (4.153) verifica-se a diversidade entre as ordens espaciais e temporais. Com exceção da ordem assintótica (que é evidente), e foi demonstrada, as ordens verdadeiras seguintes não definem qual delas é predominante, isto é, a expressão do erro de truncamento apresenta termos como k^n , h^m , $k^n h^m$, onde n são números naturais e m são números inteiros pares.

Tabela 5.4 Ordens verdadeiras das funções de interpolação utilizadas na aproximação das variáveis de interesse referentes a equação de Fourier 1D.

| VARIÁVEL DE INTERESSE | FUNÇÃO DE INTERPOLAÇÃO | ORDENS VERDADEIRAS | ORDEM ASSINTÓTICA |
|-----------------------|----------------------------------|---------------------------|-------------------|
| T_c | DDS (Tempo) | $p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ | $p_L = 1$ |
| | CDS-2 (Espaço) | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| | Crank-Nicolson (Tempo/Espaço) | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| T_m | Regra do trapézio | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| I | UDS-2 | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $p_L = 2$ |

Tabela 5.5 Ordens verdadeiras das funções de interpolação utilizadas na aproximação das variáveis de interesse para a equação de Fourier 2D.

| VARIÁVEL DE INTERESSE | FUNÇÃO DE INTERPOLAÇÃO | ORDENS VERDADEIRAS | ORDEM ASSINTÓTICA |
|-----------------------|----------------------------------|---------------------------|-------------------|
| T_c | DDS (Tempo) | $p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ | $p_L = 1$ |
| | CDS-2 (Espaço) | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| | Crank-Nicolson (Tempo/Espaço) | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| T_m | Regra do trapézio | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| q_e | UDS-2 | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $p_L = 2$ |
| | Regra do Trapézio | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |

Como já mencionado, a determinação das ordens verdadeiras obtidas *a priori* traz grande vantagem em relação ao comportamento da solução numérica de um problema físico em estudo. Estas podem indicar qual a magnitude do erro numérico presente na solução contribuindo para a obtenção de resultados mais acurados. Com isso a verificação da solução

torna-se viável nos casos em que não há estimativa *a priori* ou a solução analítica é desconhecida.

As ordens do erro de discretização encontradas *a priori*, para as variáveis de interesse T_c e q_e , pela mistura das técnicas utilizadas conforme apresentado na Tab. 5.5, estão relacionadas na Tab. 5.6.

Tabela 5.6 Ordens verdadeiras obtidas *a priori* das aproximações finais para as variáveis de interesse referentes a equação de Fourier 1D e 2D.

| VARIÁVEL DE INTERESSE | ORDENS VERDADEIRAS | ORDEM ASSINTÓTICA |
|-----------------------|--|--|
| T_c | $\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2$ p_V para $V = 2, 3, 4, \dots$ não definido | $\theta = 1 \Rightarrow p_L = 1$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_L = 2$ |
| T_m | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $p_L = 2$ |
| q_e | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $p_L = 2$ |
| L | $\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2$ p_V para $V = 2, 3, 4, \dots$ não definido | $\theta = 1 \Rightarrow p_L = 1$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_L = 2$ |

Analisando as Tabs. 5.4 a 5.6 verifica-se que:

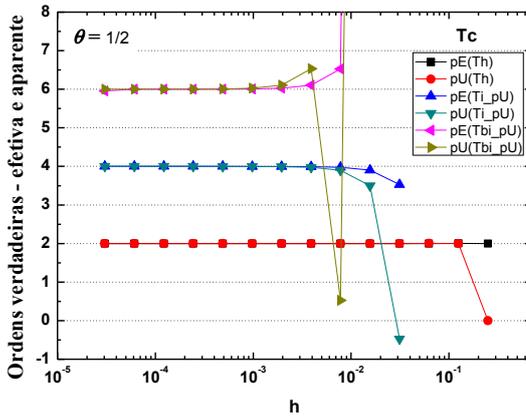
- Para a variável T_c , somente a ordem assintótica está bem definida;
- Para a variável T_m , as ordens verdadeiras predominantes são as obtidas com a regra do trapézio;
- Para a variável q_e , as ordens verdadeiras são as ordens da função de interpolação UDS-2;
- A variável L tem suas ordens verdadeiras definidas como para a variável T_c .

Importante salientar que na Tab. 5.6 a variável L tem suas ordens de erro definidas como para a variável T_c , pois não há relação que agregue considerações adicionais referentes ao erro de truncamento, a não ser aquela deduzida para a própria variável primária T .

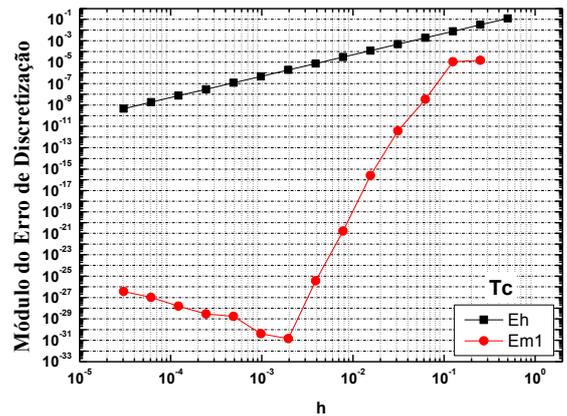
5.3.2 Resultados da Equação de Fourier 1D

As Figs. 5.21 a 5.24 mostram os resultados das ordens verdadeiras e o módulo do erro de discretização com e sem MER para cada variável de interesse da equação de Fourier 1D. Estes resultados foram obtidos para $\theta = \frac{1}{2}$ para efeito de análise do comportamento do método Crank-Nicolson e posterior verificação do caso 2D.

Na Fig. 5.21 observa-se que o módulo do erro com MER já apresenta significativa redução desde a primeira malha até a 8ª (256x256) quando os resultados são afetados pelo erro de arredondamento.

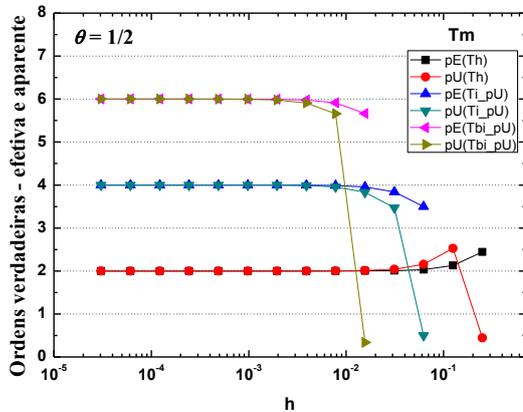


(a)

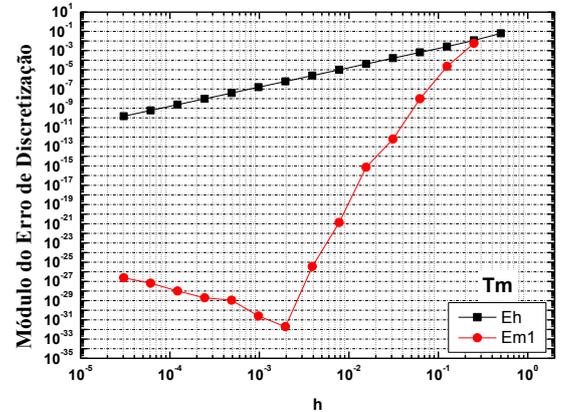


(b)

Figura 5.21 (a) Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_c obtidas para $\theta = \frac{1}{2}$; (b) Módulo do erro de discretização sem MER (Eh) e com MER (Em1).

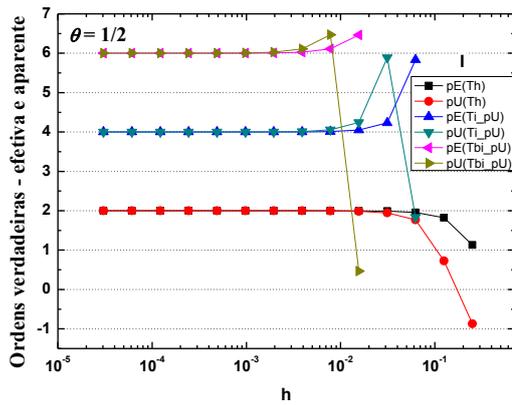


(a)

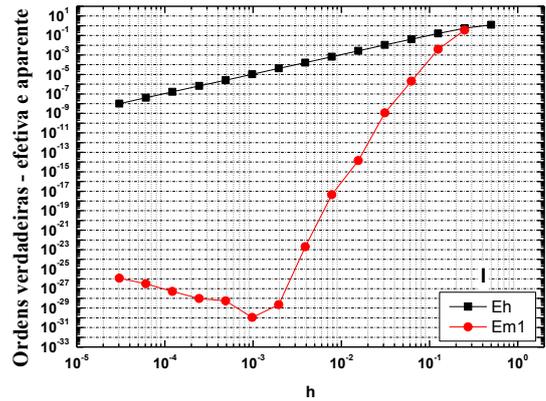


(b)

Figura 5.22 (a) Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_m obtidas para $\theta = \frac{1}{2}$; (b) Módulo do erro de discretização sem MER (Eh) e com MER (Em1).

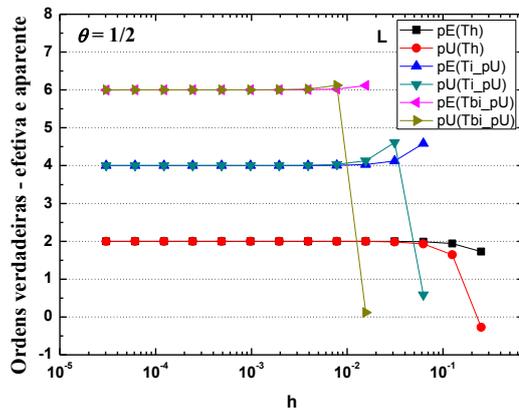


(a)

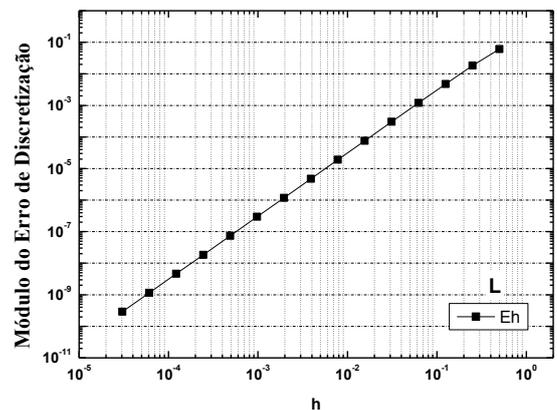


(b)

Figura 5.23 (a) Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável I obtidas para $\theta = \frac{1}{2}$; (b) Módulo do erro de discretização sem MER (Eh) e com MER (Em1).



(a)



(b)

Figura 5.24 (a) Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável L obtidas para $\theta = \frac{1}{2}$; (b) Módulo do erro de discretização (Eh).

Comparando os resultados obtidos *a posteriori* com a análise feita *a priori*, pode-se constatar que o método de Crank-Nicolson ($\theta = \frac{1}{2}$) é de segunda ordem em ambos tempo e espaço.

Analisando todos os resultados nota-se que com exceção da ordem assintótica que corrobora com a análise *a priori*, todos os outros resultados indicam que as ordens verdadeiras são as mesmas da função de interpolação do tipo CDS-2. Com a análise da derivada primeira dada pela variável I (inclinação) somente a ordem assintótica é corroborada por meio da ordem efetiva e também aparente.

O módulo do erro de discretização sem MER obtido para todas as variáveis confirmam a ordem assintótica. Quando MER é utilizado este reduz significativamente o erro de

discretização até a 8ª malha (256x256) para todas as variáveis até que o erro de arredondamento começa a afetar os resultados.

5.3.3 Análise *a Posteriori* da Ordem do Erro de Discretização da Equação de Fourier 2D.

Entre as dificuldades encontradas na solução numérica de equações diferenciais transientes, como a equação de Fourier, é o de encontrar um esquema de diferenças finitas que permita obter uma solução acurada e livre de oscilações. Sabe-se que esquemas implícitos (ou totalmente implícitos) tendem a ser estáveis. No entanto, a dificuldade de resolver as equações algébricas resultantes desses esquemas, principalmente em mais de uma dimensão espacial, leva muitos pesquisadores a investigar o comportamento acurado da solução. Nesse sentido, e devido a sua estabilidade incondicional, o método Crank-Nicolson é comumente utilizado na solução de equações diferenciais transientes.

Nesse contexto, a escolha do valor do parâmetro de mistura (θ) para o estudo desta tese se restringe aos métodos implícito (Crank-Nicolson) e totalmente implícito determinados pela Eq. (4.120). Os resultados dessas aproximações foram avaliados pela determinação das ordens verdadeiras, efetiva e aparente, para cada variável de interesse com o programa Richardson 3.2, baseado no estimador de Richardson, conforme visto na seção 3.6.2.1. Estes resultados são apresentados a seguir e mostram a tendência das ordens verdadeiras do erro de discretização obtidas *a posteriori*. As ordens obtidas desta forma podem ser corroboradas com aquelas obtidas na estimativa *a priori* apresentadas na Tab. 5.6.

5.3.3.1 Temperatura no centro do domínio - T_c

Os resultados obtidos para a variável de interesse T_c , tanto para $\theta = 1$ como para $\theta = \frac{1}{2}$ podem ser verificados na Fig. 5.25. Vê-se que a ordem assintótica obtida *a priori* é confirmada para $\theta = 1$ (técnica totalmente implícita) indicando que as ordens verdadeiras são as mesmas da técnica de interpolação UDS-1. No caso de $\theta = \frac{1}{2}$ (Crank-Nicolson) as ordens

obtidas *a posteriori* são $p_V = 2, 4, 6, \dots$, indicando que as ordens verdadeiras são as mesmas da técnica CDS-2.

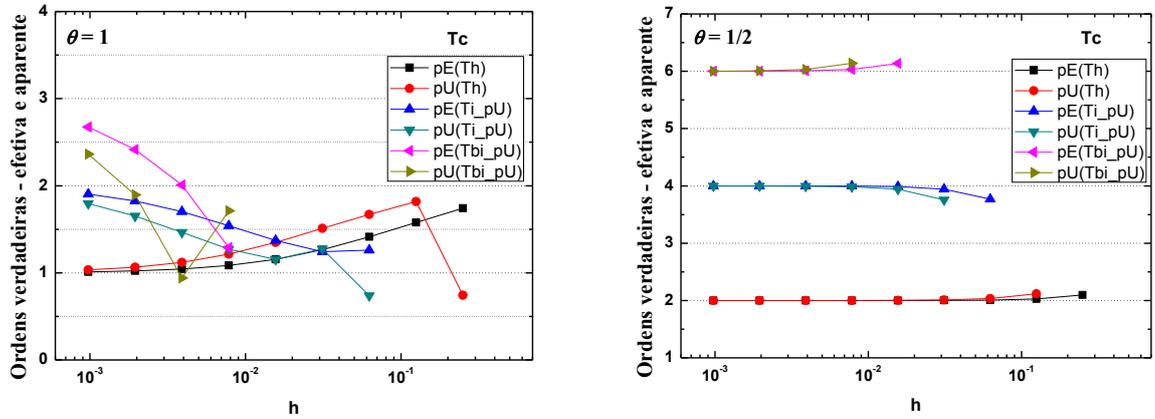


Figura 5.25 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_c .

5.3.3.2 Temperatura média - T_m

A análise da Fig. 5.26 mostra que as tendências das ordens verdadeiras, determinadas pelos resultados da variável de interesse T_m , são confirmadas para $\theta = \frac{1}{2}$, porém no caso em que $\theta = 1$ as ordens verdadeiras ficam degeneradas e a ordem assintótica cai para a unidade como era esperado. Isso pode ser explicado pela influência do método totalmente implícito utilizado.

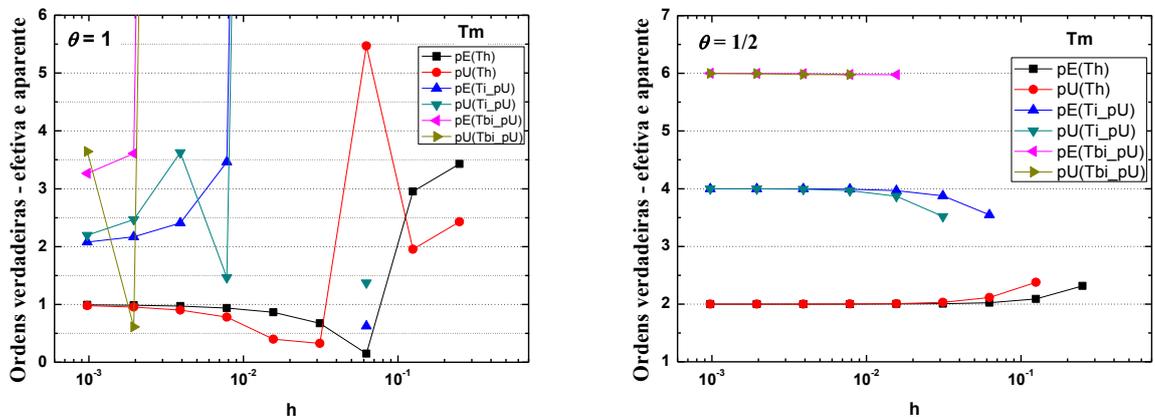


Figura 5.26 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_m .

5.3.3.3 Fluxo de calor ao leste - q_e

No caso da variável de interesse q_e , os resultados apresentados na Fig. 5.27 mostram que as tendências das ordens verdadeiras não são confirmadas pela análise *a priori* para o caso em que $\theta = 1$. Esse efeito pode estar relacionado ao erro de poluição (ver seção 4.5). No caso em que $\theta = \frac{1}{2}$, somente a ordem assintótica (p_L) é confirmada, visto que as ordens verdadeiras esperadas para esta variável são $p_V = 2, 3, 4, \dots$. Nota-se que, com exceção de p_L , as ordens verdadeiras seguintes mostram menor erro com a aplicação do método de Crank-Nicolson.

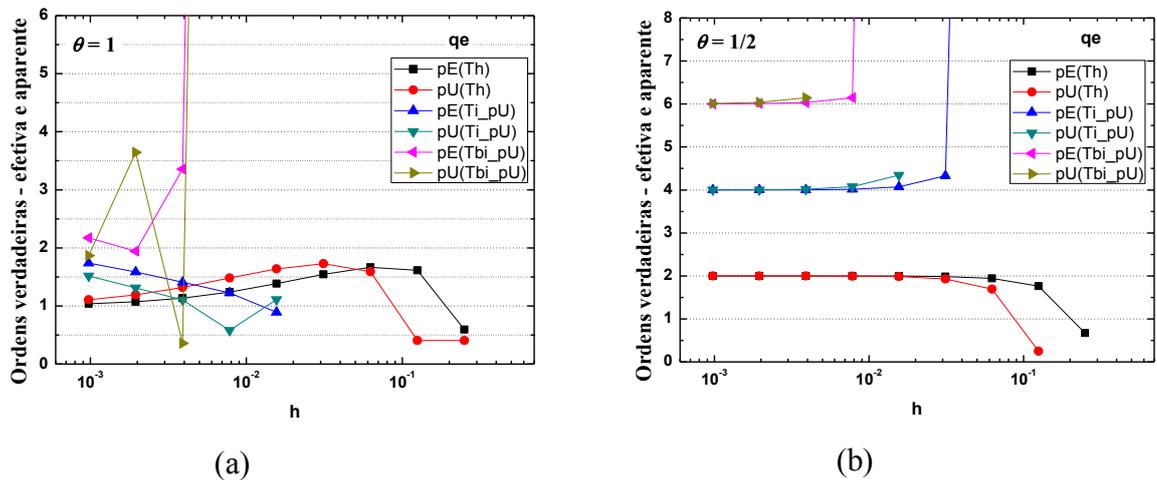


Figura 5.27 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável q_e .

5.3.3.4 Média da norma $l_1 - L$

Como era de se esperar, as ordens obtidas *a posteriori* para a variável L podem ser verificadas na Fig. 5.28. Estas seguem as mesmas análises feitas para a variável T_c não apresentando nenhuma alteração adicional.

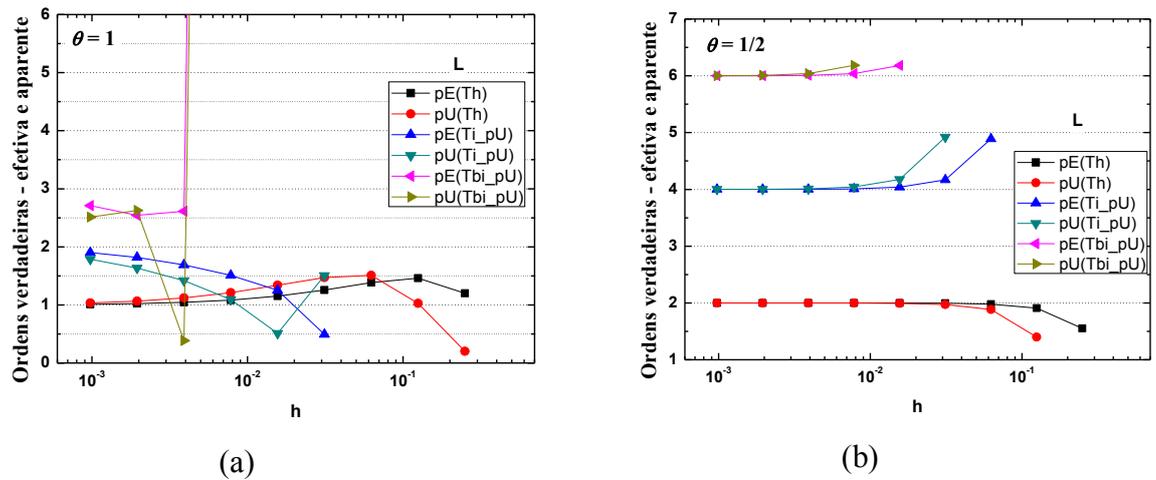


Figura 5.28 Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável L .

Em geral, verificou-se nos resultados de todas as variáveis que para $h \rightarrow 0$, $p_E, p_U \rightarrow p_L$ de acordo com as previsões realizadas *a priori*.

5.3.4 Efeito do Parâmetro Numérico θ no Refinamento do Erro de Discretização dos Resultados com e sem MER

A Fig. 5.29 mostra o desempenho do módulo do erro de discretização com e sem MER para cada variável de interesse em função da malha h . Considerando as ordens de magnitude dos erros, pode-se perceber que em geral, para $h \rightarrow 0$, $Eh\left(\theta = \frac{1}{2}\right) < Eh(\theta = 1)$ e $Em1\left(\theta = \frac{1}{2}\right) < Em1(\theta = 1)$, como era esperado. Conclui-se, portanto, que a eficiência de MER não é afetada pelo parâmetro θ utilizado.

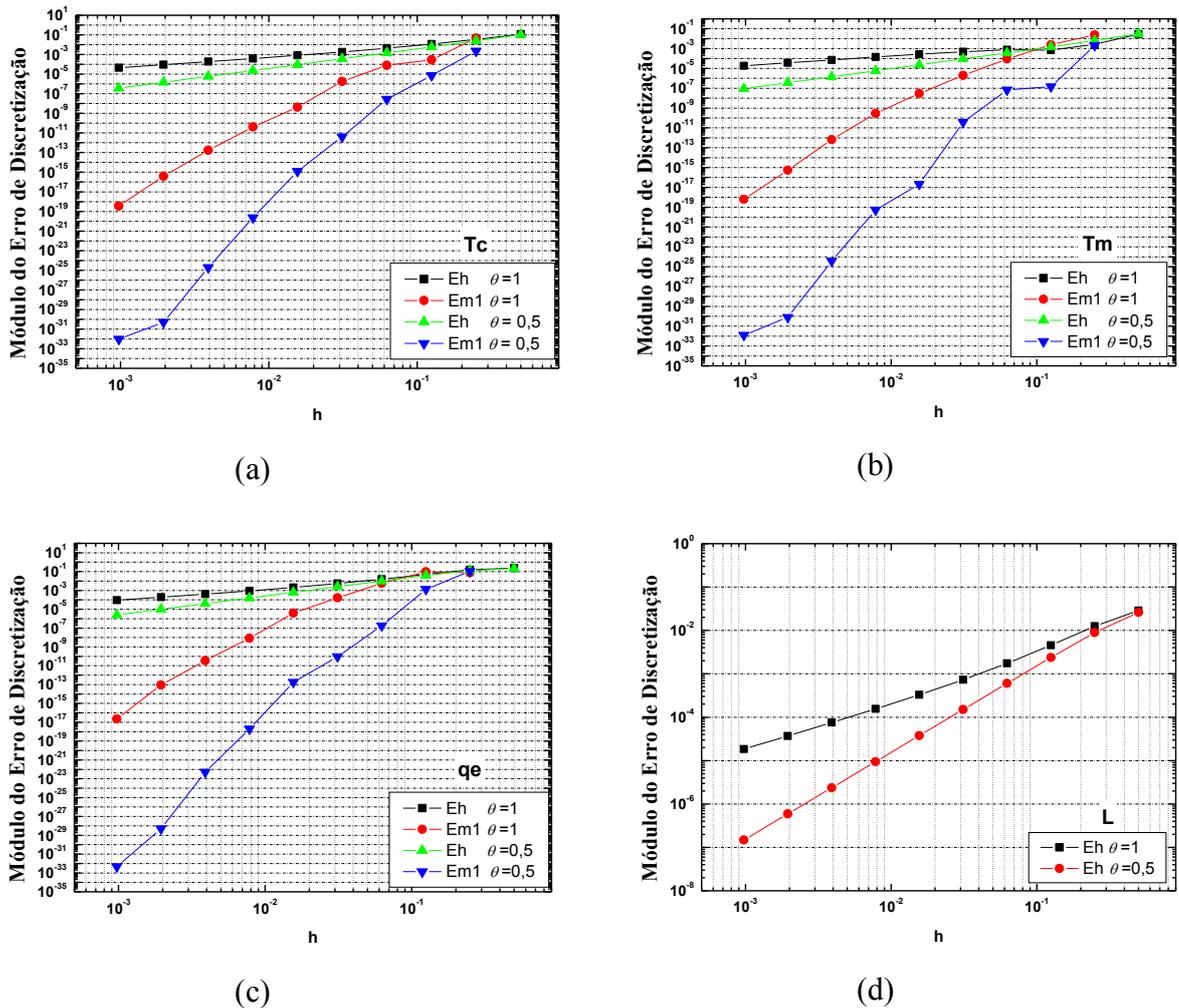


Figura 5.29 Módulo do erro de discretização com MER (Em1) e sem MER (Eh) das variáveis de interesse (a) T_c , (b) T_m , (c) q_e e (d) L . Resultados obtidos para θ .

5.4 Resumo e considerações do capítulo 5

O objetivo principal desse trabalho foi verificar a influência de esquemas mistos (ou híbridos), e de parâmetros físicos e numéricos sobre a redução do erro de discretização com o uso de MER. Para atingir esse objetivo foram utilizados dois modelos matemáticos usuais em CFD que apresentam esquemas mistos (equação de advecção-difusão utilizando-se correção adiada e equação de Fourier utilizando-se Crank-Nicolson), ambos bidimensionais, com termo fonte, um em regime permanente e outro transiente. No caso da correção adiada para a equação de advecção-difusão, o esquema se mostra híbrido devido a escolha do parâmetro $0 \leq \beta \leq 1$ (em particular, esquema UDS-1 para $\beta = 0$ e esquema CDS-2 para $\beta = 1$). No

caso da equação de Fourier, o esquema se mostra híbrido devido a escolha do parâmetro $0 \leq \theta \leq 1$ (em particular, esquema totalmente implícito para $\theta = 1$ e esquema Crank-Nicolson para $\theta = \frac{1}{2}$). Utilizam-se também variáveis de interesse pertinentes a cada um dos modelos, como a temperatura no ponto central do domínio (T_c), temperatura média (T_m) fluxo de calor nos contornos (q_e e q_n) e média da norma l_1 do erro de discretização.

Para a verificação do código e da solução, inicialmente, problemas simples como a equação de Fourier 1D (seção 5.3.2) e a equação de Laplace 2D (ver Apêndice A) foram utilizadas como base para a dedução das ordens verdadeiras do erro de discretização das equações propostas nesta tese por meio da expansão da série de Taylor. Tais equações foram testadas apenas para depurar a modelagem numérica e o programa com o intuito de analisar se ele é executado corretamente para os problemas em questão. Resultados mostram que o problema 1D é facilmente estendido para 2D.

As simulações numéricas foram realizadas para as equações propostas, e para as quais se conhecem os resultados a partir da solução analítica obtida com o método das soluções fabricadas (MSF). Isso possibilitou testar tanto a parte numérica como também o modelo matemático. Em outras palavras, buscou-se verificar se os resultados teóricos relativos ao modelo matemático são observados numericamente.

A Tab. 5.7 apresenta os resultados das ordens verdadeiras obtidas *a priori* e *a posteriori* para o caso da equação de advecção-difusão 2D.

Analisando a Tab. 5.7 verifica-se que:

- Para a variável T_c as ordens verdadeiras predominantes são aquelas envolvidas nos termos advectivos;
- Para a variável T_m as ordens verdadeiras predominantes são as mesmas verificadas para a variável T_c ;
- Para a variável q_e as ordens verdadeiras se reduzem as ordens da função de interpolação UDS-2 para o caso em que $\beta = 1$;
- Para a variável q_n as ordens verdadeiras se reduzem as ordens da função de interpolação UDS-2 para o caso em que $\beta = 1$;
- A variável L tem suas ordens verdadeiras definidas como para a variável T_c .

Tabela 5.7 Ordens verdadeiras obtidas *a priori* e *a posteriori* das aproximações para a equação de advecção-difusão 2D variáveis de interesse T_c , T_m , q_e , q_n e L .

| VARIÁVEL DE INTERESSE | ORDENS VERDADEIRAS <i>A PRIORI</i> | ORDENS VERDADEIRAS <i>A POSTERIORI</i> |
|-----------------------|---|---|
| T_c | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ |
| T_m | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ |
| q_e | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ |
| q_n | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ |
| L | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $0 \leq \beta < 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\beta = 1 \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ |

Nota-se que o valor do parâmetro de mistura (β) tem grande influência na ordem do erro de discretização para todas as variáveis de interesse. Por exemplo, nas variáveis que avaliam a temperatura média e a derivada de primeira ordem da temperatura, a ordem degenerou quando utilizados esquemas de primeira ordem.

A eficiência de MER não é afetada pelo parâmetro β utilizado, porém é reduzida nos casos das variáveis T_m , q_e e q_n .

A Tab. 5.8 apresenta os resultados das ordens verdadeiras obtidas *a priori* e *a posteriori* para o caso da equação de Fourier 2D.

Como já mencionado, nas aproximações obtidas existem derivadas mistas de espaço e tempo (por exemplo, T_{4x2t}^{vi} ou T_{4y3t}^{vii}), ao analisar as Eqs. (4.130) e (4.153) verifica-se a diversidade entre as ordens espaciais e temporais (por exemplo, $k^2 h_x^2$ ou $k^3 h_y^2$). Com exceção da ordem assintótica (que é evidente), e foi demonstrada, as ordens verdadeiras seguintes não definem qual delas é predominante, isto é, a expressão do erro de truncamento apresenta

termos como k^n , h^m , $k^n h^m$, onde n são números naturais e m são número inteiros pares. Sendo assim, não se tem conhecimento definido *a priori* dessas ordens.

Tabela 5.8 Ordens verdadeiras obtidas *a priori* e *a posteriori* das aproximações para a equação de Fourier 2D e para as variáveis de interesse T_c , T_m , q_e e L .

| VARIÁVEL DE INTERESSE | ORDENS VERDADEIRAS <i>A PRIORI</i> | ORDENS VERDADEIRAS <i>A POSTERIORI</i> |
|-----------------------|--|--|
| T_c | $\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2$ p_V para $V = 2, 3, 4, \dots$ não definido | $\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ |
| T_m | $p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ | $\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ |
| q_e | $p_V = 2, 3, 4, 5, \dots$ | $\theta = 1 \Rightarrow p_L = 1$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ |
| L | $\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2$ p_V para $V = 2, 3, 4, \dots$ não definido | $\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$ $\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$ |

Mas como já mencionado, as ordens verdadeiras obtidas *a priori* trazem grandes vantagens em relação à perspectiva do comportamento da solução numérica de um problema físico em estudo. Estas podem indicar as ordens do erro a serem verificadas *a posteriori*, uma vez que as ordens de erro *a priori* devem ser confirmadas pelas ordens obtidas *a posteriori*. Esta ideia pode ser ampliada para a verificação da solução dos casos em que não há estimativa *a priori* ou a solução analítica é desconhecida.

Com os resultados da Tab. 5.8 pode-se ter uma ideia do desempenho do erro de discretização pela análise *a posteriori* visto que as ordens assintóticas conferem seus resultados. Verifica-se que θ exerce grande influência nos resultados. Um exemplo disso é o

fato de que quando $\theta = \frac{1}{2}$ (método de Crank-Nicolson) seu efeito potencializa a redução dos erros gerando alta acurácia dos resultados.

Da Tab 5.8 e da análise das Eqs. (4.130) e (4.153) pode-se concluir que, conforme o valor de θ , as ordens predominantes são as ordens do esquema utilizado na aproximação.

Analisando a Tab. 5.8 verifica-se que:

- Para a variável T_c as ordens verdadeiras predominantes são aquelas envolvidas nas aproximações conforme o valor de θ ;
- Para a variável T_m as ordens verdadeiras predominantes são as mesmas verificadas para a variável T_c ;
- Para a variável q_e as ordens verdadeiras são as ordens da regra do trapézio para o caso em que $\theta = \frac{1}{2}$. Para $\theta = 1$ pode-se afirmar somente que a ordem assintótica é $p_L = 1$;
- A variável L tem suas ordens verdadeiras definidas como para a variável T_c e T_m .

Comprovou-se que esses resultados trazem vantagens quanto à análise *a priori* e *a posteriori* das ordens verdadeiras dos erros de discretização envolvidos na solução numérica. Outro fator importante a ser considerado é que na medida em que a malha é refinada as ordens aparentes do erro tendem as ordens verdadeiras obtidas *a priori* e, conseqüentemente, tendem a ordem assintótica.

Como visto na seção 3.5, a análise da ordem aparente é importante considerando que para os casos em que a solução analítica é inexistente, e também para os casos em que a análise *a priori* não é definida, esta se torna referencial confiável para verificar a acurácia da solução numérica.

Os resultados obtidos com o uso de MER para estimar e reduzir o erro de discretização mostram a sua eficiência contribuindo significativamente para a acurácia da solução na medida em que o parâmetro de malha h tende a zero.

A contribuição de MER também é verificada na análise do desempenho de técnicas mistas na solução de uma EDP que envolva parâmetros físicos e numéricos (relevantes na solução de problemas mais complexos). Isso pode ser visto na comparação dos parâmetros β (numérico) e Pe (físico) no modelo de advecção-difusão.

Em todos os resultados apresentados na seção 5.2.3 pode-se verificar que para o esquema híbrido proposto, o valor do módulo do erro fica entre os dois esquemas puros. Uma exceção é o caso da análise de β em malhas muito grossas, pois a proximidade do valor do módulo do erro entre o esquema híbrido e o esquema de maior ordem depende do valor usado para o fator β .

As análises realizadas sobre o efeito do fator de mistura nos resultados obtidos com MER mostram o mesmo comportamento verificado nos resultados obtidos sem MER, ou seja, para valores de $0 < \beta < 1$, a redução da magnitude do erro de discretização é aproximadamente a mesma observada para o caso em que $\beta = 0$. Mas os melhores resultados são observados para $\beta = 1$.

Na análise do parâmetro físico Pe , pelos resultados apresentados na seção 5.2.4, nota-se claramente a eficiência de MER em casos onde a ordem do erro é menor. O efeito do número de Péclet sobre o erro de discretização obtido com a utilização de MER apresenta melhor resultado observado para $Pe = 0,1$.

Comprovou-se que MER é uma ferramenta capaz de potencializar a acurácia das soluções numéricas reduzindo o seu custo computacional principalmente no caso de condução de calor transiente (equação de Fourier) bidimensional. Esta verificação só é possível com a aplicação da técnica *multigrid* devido a sua capacidade de aceleração de convergência. Enquanto na solução do problema 1D os resultados com malhas bem finas são obtidos de forma rápida com o método TDMA a solução do problema 2D exige uma técnica robusta como o método *multigrid* para se obter soluções em tempos aceitáveis

Comprovou-se também a eficiência de MER com relação ao parâmetro θ utilizado quando se verifica o desempenho do método Crank-Nicolson comparado a técnica totalmente implícita. Considerando as ordens de magnitude dos erros, pode-se perceber que em geral, para $h \rightarrow 0$, $Eh\left(\theta = \frac{1}{2}\right) < Eh(\theta = 1)$ e $Em1\left(\theta = \frac{1}{2}\right) < Em1(\theta = 1)$, como era esperado. Conclui-se, portanto, que a eficiência de MER não é afetada pelo parâmetro θ utilizado.

6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O cumprimento dos objetivos propostos nesta tese é relevante no meio científico e acadêmico pelo fato de trazer contribuições específicas inerentes tanto para a análise teórica como para a análise numérica de fatores concernentes aos problemas tratados em CFD.

A análise de erros *a posteriori* é objeto de investigação importante para a acurácia de resultados numéricos, mas em geral são desconsiderados alguns fatores que podem influenciar as simulações numéricas, como é o caso da mistura de aproximações numéricas com ordens de acurácia distintas no tratamento da solução do problema de advecção-difusão. Neste caso, na execução deste trabalho, o método de correção adiada (MCA) apresenta vantagens para uma análise de sensibilidade do efeito do fator de mistura (β).

O método das soluções fabricadas (MSF) é um processo que possibilita a investigação de valores analíticos e numéricos de forma a contribuir para a verificação da solução. A importância do estudo de multiextrapolação de Richardson (MER) na solução de problemas com solução analítica conhecida provê subsídios para os casos em que não se consegue estimar *a priori* ou *a posteriori* as ordens do erro numérico de problemas onde na prática não se conhece a solução analítica e conseqüentemente o erro verdadeiro.

Na análise teórica do erro de discretização, principalmente de problemas de condução de calor transiente (equação de Fourier), as deduções das ordens verdadeiras do erro de discretização *a priori* não são encontradas na literatura (seção 4.4.2. e 4.4.4.). Em alguns casos são apresentados somente os termos referentes à ordem assintótica e ainda, em particular, para modelos que não possuem termo fonte. Em problemas com termo fonte há pouca informação sobre a discretização no caso da aplicação da técnica de Crank-Nicolson. Isso é importante no momento em que se busca a solução numérica por meio da simulação. Uma formulação errada compromete o desempenho da solução e, conseqüentemente, a análise das ordens do erro numérico.

O método de Crank-Nicolson é comumente empregado em diversas aplicações, confiando seu resultado somente ao conhecimento teórico da ordem assintótica. Verificou-se que a princípio só a ordem assintótica pode ser corroborada *a priori*, para as outras ordens verdadeiras ainda não se pode afirmar corretamente a sua prioridade devido à aproximação de derivadas mistas envolvendo espaço e tempo. Com o emprego de MER o resultado de sua

aplicação pode ser comprovado e, além disso, verificado seu comportamento com a redução sistemática da malha. Isto evita, por exemplo, custo computacional desnecessário.

Finalmente com todos os resultados obtidos o objetivo geral foi cumprido e com isso são constatadas as seguintes contribuições que podem ser resumidas nos tópicos abaixo:

- Foram deduzidas as ordens verdadeiras *a priori* do erro de discretização do esquema β (com o MCA) aplicado na solução da equação de advecção-difusão 2D com termo fonte;
- Foram deduzidas as ordens verdadeiras *a priori* do erro de discretização do esquema θ aplicado na solução da equação de Fourier 1D e 2D ambos com termo fonte;
- Para todas as variáveis de interesse estudadas foram deduzidas as ordens verdadeiras *a priori* do erro de discretização com pelo menos três termos;
- Foram deduzidas as ordens verdadeiras do erro de truncamento da regra do trapézio 1D e 2D;
- A análise das ordens do erro de discretização obtidas *a posteriori* com MER, em ambas as equações teste e variáveis de interesse, comprova a sua utilidade e eficiência para a estimativa de erros de discretização;
- Para esquemas híbridos, o valor do módulo do erro fica entre os dos esquemas puros, exceto em malhas muito grossas. A proximidade do valor do módulo do erro entre o esquema híbrido e o esquema de maior ordem depende do valor usado para o fator β ;
- A ordem assintótica do esquema híbrido é igual à ordem assintótica do esquema puro de menor ordem, exceto para o caso em que o método de Crank-Nicolson é aplicado, o qual mantém sua ordem;
- Analisando o efeito do número de Péclet sobre o erro de discretização obtido com a utilização de MER, verificou-se que melhores resultados são observados para Pe pequenos;
- Verificou-se que resultados 1D valem para 2D;
- O método de correção adiada (MCA) apresenta vantagens para uma análise de sensibilidade do efeito do fator de mistura (β);
- Foi deduzido o esquema correto de aplicação do método de Crank-Nicolson, teórico e numérico, para o caso em que o modelo apresenta termo fonte.

6.1 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Com a finalidade de complementar e expandir os estudos deste trabalho, são sugeridos os seguintes temas:

- Assumir o estado transiente das equações de advecção-difusão para verificação do comportamento das ordens dos erros *a priori* e *a posteriori*;
- Análise de sensibilidade em parâmetros físicos considerando a física do problema;
- Expansão das equações governantes para o caso 3D para verificação da teoria empregada;
- Resolver outras equações, como equações de Navier-Stokes com escoamento laminar bidimensional;
- Desenvolver metodologia para análise do efeito do erro de arredondamento nos esquemas híbridos (β e θ) em resultados com MER.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AIAA, **Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations**. AIAA G-077-1998. Reston, 1998.

ALTAS, I., BURRAGE, K. A High Accuracy Defect-Correction Multigrid Method for the Steady Incompressible Navier-Stokes Equations. **Journal of Computational Physics** Vol. 114, 227-233, 1994.

ASME/JFE. **Journal of Fluids Engineering Editorial Policy Statement on the Control of Numerical Accuracy**. ASME Journal of Fluid Engineering. Disponível em: <<http://journaltool.asme.org/Content/JFENumAccuracy.pdf>>. Acesso em: 15 jan 2009.

AMES, W. F. **Numerical Methods for Partial Differential Equations**. Academic Press, Inc., 1977.

BABUSKA, L., IHLENBURG, F., STROUBOULIS, T., GANGARAJ, S.K., A posteriori error estimation for finite element solutions of Helmholtz's equation. Part I: the quality of local indicators and estimators. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**. Vol. 40, p. 3443-3462, 1997.

BENJAMIN, A. S., DENNY, V. N. On the Convergence of Numerical Solutions for 2-D Flows in a Cavity at Large Re. **Journal of Computational Physics** Vol. 33, 340-358, 1979.

BEJAN, A. **Convection Heat Transfer**. John Wiley & Sons, Inc., 1995.

BJÖRCK, A., DAHLQUIST, G. **Numerical Methods in Scientific Computing – volume I**. SIAM, 2008.

BLANCAS, F. E., CELIK, I. B. **Verification of various measures for numerical uncertainty using manufactured solutions**. 2nd Workshop on CFD Uncertainty Analysis – Lisboa – Portugal, 2006.

BOYCE, W. E., DiPRIMA, R. C. **Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems**. John Wiley & Sons, Inc., 2001.

BREZINSKI, C., MATOS, A. C. A Derivation of Extrapolation Algorithms Based on Error Estimates. **J. Comput. Appl. Math.** Vol. 66, 5-26, 1996.

BREZINSKI, C. **Numerical analysis 2000 – Vol. II: Interpolation and extrapolation**. Journal of Computational and Applied Mathematics, 122, 2000.

BRIGGS, W.L., HENSON, V.E., MCCORMICK, S.F., “**A Multigrid Tutorial**”, 2^a ed., SIAM, 2000.

BROOKS, A. N., HUGHES, T. R. J. Streamline Upwind Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations. **Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.**, Vol. 32, pp. 199-259, 1982.

BURDEN, R. L., FAIRES, J. D. **Análise Numérica**. Thomson, 2003.

BURG, C., ERWIN, T. **Application of Richardson Extrapolation to the Numerical Solution of Partial Differential Equations**. **Numerical Methods for Partial Differential Equations** -Wiley, 2008.

CARNAHAN, B., LUTHER, H. A., WILKES, J. O. **Applied Numerical Methods**. John Wiley and Sons, Inc., 1990.

CARPENTER, M. H., CASPER, J. H. Accuracy of Shock Capturing in Two Spatial Dimensions, **AIAA Journal**, Vol. 37, No. 9, pp. 1072-1079, 1999.

CAWOOD, M. E., ERVIN, E. J., LAYTON, W. J., MAUBACH, J. M. Adaptive Defect Correction Methods for Convection Dominated, Convection Diffusion Problems. **Journal of Computational and Applied Mathematics** Vol. 116, 1-21, 2000.

CELIK, I., ZHANG, W. M. Calculation of Numerical Uncertainty Using Richardson Extrapolation: Application to Some Simple Turbulent Flow Calculations. **Journal of Fluids Engineering**, Vol. 117, 1995.

CELIK, I., KARATEKIN, O. Numerical Experiments on Application of Richardson Extrapolation with Nonuniform Grids. **Journal of fluids engineering**., Vol. 119, no3, pp. 584-590, 1997.

CELIK, I. Procedure for Estimation and Reporting of Discretization Error in CFD Applications. **Journal of Fluids Engineering**, Vol. 130, 2008.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Métodos Numéricos para Engenharia**. 5 ed. Tradução: Helena Castro. São Paulo: McGraw-Hill, 2008.

CHENEY, W., KINCAID, D. **Numerical Mathematics and Computing**. 6^a ed., Cengage Learning, 2008.

CHISHOLM, T. **Multigrid Acceleration of an Approximately-Factored Algorithm for Steady Aerodynamic Flows**. Dissertação de mestrado. University of Toronto, 1997.

CHRISTIANSEN, E., PETERSEN, H. G. Estimation of Convergence Orders in Repeated Richardson Extrapolation. **BIT Numerical Mathematics**, Vol. 29-, 48-59, 1989.

DEHGHAN, M. Numerical Solution of the Three-Dimensional Advection–Diffusion Equation. **Applied Mathematics and Computation**, Vol. 150, 5–19, 2004.

DEMME, J. W., GANNON, D., GROSSE, E., KENNEDY, K., MORÉ, J. J. **Accuracy and Reliability in Scientific Computing**. SIAM, Einarsson, Philadelphia, 2005.

DEUFLHARD, P., HAIRER, E., ZUGCK, J. One-Step and Extrapolation Methods for Differential-Algebraic Systems. **Numerische Mathematik**. Vol. 51, 501-516, 1987.

- DE VAHL DAVIS, G. Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, Vol. 3, p. 249-264, 1983.
- DURANTE, F., RIEDEL, V. Round Robin Numerical Flow Simulation in Wind Energy, Part 1: Description of Test. **DEWI GmbH, Wilhelmshaven, Dewi-Magazin** Vol. 31, 2007.
- DURANTE, F., RIEDEL, V. Round Robin Numerical Flow Simulation in Wind Energy, Part 2: Description of Test. **DEWI GmbH, Wilhelmshaven, Dewi-Magazin** Vol. 32, 2008.
- EÇA, L., HOEKSTRA, M. Evaluation of Numerical Error Estimation Based on Grid Refinement Studies with the Method of the Manufactured Solutions. **Computers & Fluids** Vol. 38, 1580–1591, 2009.
- ERTURK, E., CORKE, T. C., GOKÇOL, C. Numerical Solutions of 2-D Steady Incompressible Driven Cavity Flow at High Reynolds Numbers. **International Journal for Numerical Methods in Fluids** Vol. 48:747–774, 2005.
- FEIJÓ, V. **Modelagem do Fluxo Sanguínio na Aorta Abdominal Utilizando Interação Fluido-Estrutura**. Dissertação de Mestrado – São Paulo – SP - Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, 2007.
- FERZIGER, J.H., PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 3^a ed., Berlin: Springer-Verlag, 2002.
- FLETCHER, C. A. J. **Computational Techniques for Fluid Dynamics 1 –Fundamental and General Techniques** 2ed., Springer Verlag, 1992.
- FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos**. Edusp, 2000.
- FRAYSSE, F., VICENTE, E., VALERO, E. The Estimation of Truncation Error by τ - Estimation Revisited. **Journal of Computational Physics**, Vol. 231, 3457-3482, 2012.
- FREITAS, C. J. Editorial ASME, **Journal of Fluids Engineering**, Vol. 115, 1993.
- GOLDBERG, D. **What Every Computer Scientist Should Know About Floating-Point Arithmetic**. Association for Computing Machinery, Inc., 1991.
- GOLUB, G. H. e ORTEGA, J. M. **Scientific Computing and Differential Equations: an Introduction to Numerical Methods**. Academic Press, Inc., 1992.
- GROSSMANN, C., ROOS, H. G., STYNES, M. **Numerical Treatment of Partial Differential Equations**. Springer, New York, 2007.
- HIRSCH, C. **Numerical computational of internal and external flows**. Wiley, v. 1, 2007.
- HOFFMANN, K. A., CHIANG, S. T. **Computational fluid dynamics – volume I**. 4^a ed., **Engineering Education System**, Wichita- USA, 2000.

HUNT, J. C. R. Lewis Fry Richardson and His Contributions to Mathematics, Meteorology, and Models of Conflict. **Annu. Rev. Fluid Mech.** 30:xiii–xxxvi, 1998.

INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P., BERGMAN, T. L., LAVINE, A. S. **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa.** Rio de Janeiro: LTC, 2008.

JOYCE, D. C. Survey of extrapolation processes in numerical analysis. **SIAM**, Vol. 13, no. 4, 1971.

KELLY, D. W., MILLS, R. J., REIZES, J. A., MILLER, A. D. A Posteriori Estimates of the Solution Error Caused by Discretization in the Finite Element, Finite Difference and Boundary Element Methods. **International Journal for Methods in Engineering**, Vol. 24, 1921- 1939,1987.

KHOSLA, P. K., RUBIN, S. G. A Diagonally Dominant Second-Order Accurate Implicit Scheme. **Computers and Fluids. Pergamon Press**, v 2, 207-209, 1974.

KNUPP, P. M., SALARI, K, S. **Verification of Computer Codes in Computational Science and Engineering.** Chapman & Hall/CRC, 2003.

KOU, H., LEE, C. Implementation of Generalized Finite Difference Formulas and Truncation Errors for Each Derivative. **International Commtnications in Heat and Mass Transfer**, Vol. 21, No. 3, pp. 359-370, 1994.

KREYSZIG, E. **Advanced Engineering Mathematics.** 9^a ed., Wiley, 2006.

LAPIDUS, L., PINDER, G.F. **Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering.** John Wiley & Sons, Inc., 1999.

LEONARD, B. P. Order of Accuracy of Quick and Related Convection-Diffusion Schemes. **Appl. Math. Modelling.** Vol. 19, 1995.

LINSS, T., KOPTEVA, N. A Posterior Error Estimation for a Defect-Correction Method Applied to Convection-Diffusion Problems. **Internation Journal of Numerical Analysis and Modeling.** Vol. 1, Number 1, Pages 1–16, 2009.

LOMAX, H., PULLIAM, T. H., ZINGG, D. W. **Fundamentals of Computational Fluid Dynamics.** 2 Ed. Springer, 2010.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional,** 2^a Ed., Editora LTC, Rio de Janeiro, 2004.

MARCHI, C. H., SILVA, A. F. C. Condições Suficientes para estimar com acurácia e Confiabilidade Erros de Discretização em CFD. **In: XX Iberian Latin-American Congress on computational Methods for Engineering,** São Paulo, SP, 1999.

MARCHI, C. H. Esquemas de Alta Ordem para a Solução de Escoamentos de Fluidos sem Dispersão Numérica. **RBCM - J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences** Vol. XV n^o 3, 231-249, 1993.

MARCHI, C. H., NOVAK, L. A., SANTIAGO, C. D., VARGAS, A. P. S. Highly Accurate Numerical Solutions with Repeated Richardson Extrapolation for CHT and CFD. **Applied Mathematical Modelling**. Vol. 37, PP. 7386–7397, 2013.

MARCHI, C. H., SILVA, A. F. C., Multi-dimensional discretization error estimation for convergent apparent order, **J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng.**, Vol. XXVII, PP. 442-449, 2005.

MARCHI, C. H., NOVAK, L. A., SANTIAGO, C. D., Múltiplas extrapolações de Richardson para Reduzir e Estimar o erro da equação de Laplace. **CILAMCE**, 2008.

MARCHI, C. H., SILVA, A. F. C., Previsão de erros de truncamento de modelos numéricos em malhas não-uniformes. **Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional - IV SIMMEC**, 2000.

MARCHI, C. H., SILVA, A. F. C., Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. **Numerical Heat Transfer**, Part B, Vol. 42, pp. 167-188, 2002.

MARCHI, C. H., **Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos. Tese de Doutorado**, Florianópolis – Santa Catarina – UFSC, 281 p, 2001.

MARCHI, C. H., GERMER, E. M., Verificação de Esquemas Advectivos-Difusivos 1D Com e Sem Múltiplas extrapolações de Richardson. **CILAMCE**, 2009.

MARCHI, C. H., Notas de Aula. <ftp://ftp.demec.ufpr.br/CFD/bibliografia/erros_numericos/, 2010> Acesso em 05/11.

MARTINS, M. A., MARCHI, C. H. Estimate of Iteration Errors in Computational Fluid Dynamics. **Numerical Heat Transfer**, Part B, Vol. 53: 234–245, 2008.

MOIN, P. **Fundamentals of Engineering Numerical Analysis**. Cambridge University Press, New York, 2010.

MOURA, D., **Condições do Escoamento e de Conforto Térmico em Cabine de Aeronave**. Dissertação de Mestrado, São Paulo – SP - USP, 2009.

MÜLLER, B. Control Errors in CFD! **Scientific Literature Digital Library and Search Engine - CiteSeer^x beta**, 2002.

OBERKAMPF, W. L., BLOTTNER, F. G. Issues in Computational Fluid Dynamics Code Verification and Validation. **AIAA Journal**, Vol. 36, No. 5, 1998.

OBERKAMPF, W. L., TRUCANO, T. G., Verification and validation in computational fluid dynamics. **Progress in Aerospace Sciences**, p. 209-272, 2002.

ODEN, J. T. Finite element applications in mathematical physics. The mathematics of finite elements and applications. **Whitman, Academic Press** – London and New York, p. 239-282, 1973.

ODEN, J. T., RESSY, J. N. **Variational Methods in Theoretical Mechanics**. Springer – Verlag – Berlin Heidelberg – New York, 1976.

PATEL, M. K., CROSS, M., MARKATOS, N. C. Method of Reducing False-Diffusion Errors in Convection-Diffusion Problems. **Applied Mathematical Modelling**. Vol. 9, pp. 302-6, 1985.

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

PEREYRA, V. On Improving an Approximate Solution of a Functional Equation by Deferred Corrections. **Numerische Mathematik** Vol. 8, 376-391, 1966.

PEREIRA, F. H., NABETA, S. I. **Uma Nova Abordagem Baseada em Wavelets PA o Método Multigrid Algébrico: parte 1 – algoritmo seqüencial**. Revista Exacta, São Paulo, Vol. 5, no. 001, p. 93-103, 2007.

PINTO, M. A. V., **Comportamento do Multigrid Geométrico em Problemas de Transferência de Calor**. Tese de Doutorado, Curitiba – Paraná – UFPR, 238 p, 2006.

PINTO, M. A. V., MARCHI, C. H., Optimum Parameters of a Geometric Multigrid for the Two-Dimensional Laplace's Equation. **Proceedings of COBEM**, 2007.

QUARTERONI, A., SACCO, R., SALERI, F. **Méthodes Numériques – Algorithmes, analyse et applications**. Springer-Verlag Italia, Milano, 2007.

QUARTERONI, A. **Numerical Models for Differential Problems**. Vol. 2, Springer-Verlag Italia, Milan 2009.

RAHUL, K., BHATTACHARYYA, S. N. One-Sided Finite-Difference Approximations Suitable for use with Richardson Extrapolation. **Journal of Computational Physics**. Elsevier. Vol. 219, 13-20, 2006.

RESENDE, L. B., PLUCENIO, A., PAGANO, D. J., CFD com controle aplicado na modelagem de um separador gás-líquido em linha. **5º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás - 5º DPETRO**, 2009.

RIBEIRO, D. E. Simulação Numérica de Aerofólios de Alta Sustentação, **IV Congresso Nacional de Estudantes de Engenharia Mecânica – CREEM**, 2002.

RICE, J. G., SCHNIPKE, R. J. An Equal-Order Velocity-Pressure Formulation that does not Exhibit Spurious Pressure Modes. **Com. Meth. Appl. Eng.**, Vol. 58, pp. 135-149, 1986.

RICHARDSON, L. F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A**, Vol. 210, p.307-357, 1910.

RICHARDSON, L. F. GAUNT, J. A., The deferred approach to the limit. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A**, Vol. 226, p.299-361, 1927.

RICHARDS, S. A. Completed Richardson extrapolation in space and time. **Communications in numerical methods in engineering**, Vol. 13, 573-582, 1997.

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

ROACHE, P. J. Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics. **Annual Reviews Fluid Mechanical**, Vol. 29, 1997.

ROACHE, P. J. **Verification and Validation in computational Science and engineering**, **Hermosa Publishers**, Albuquerque, New Mexico, 1998.

ROY, C. J., SMITH, T. M. OBER, C. C. Verification of a Compressible CFD Code using the Method of Manufactured Solutions. **AIAA Paper**, 2002-3110, 2002.

ROY, C. J. Grid Convergence Error Analysis for Mixed-Order Numerical Schemes. **AIAA Journal**, 41, no 4, 2003.

ROY, C. J., NELSON, C. C., SMITH, T. M., OBER, C. C. Verification of Euler/Navier-Stokes Codes Using the Method of Manufactured Solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, Vol. 44:599-620, 2004.

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

ROY, C. J., SINCLAIR, A. J. On the Generation of Exact Solutions for Evaluating Numerical Schemes and Estimating Discretization Error. **Journal of Computational Physics** 228, 1790-1802, 2009.

ROY, C. J., OBERKAMPF, W. L. A Comprehensive Framework for Verification, Validation, and Uncertainty. Quantification in Scientific Computing. **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg**, Vol. 200, 2131-2144, 2011.

RUGGIERO, M. A. G., LOPES, V. L. R. **Cálculo Numérico – Aspectos Teóricos e Computacionais**. Makron Books do Brasil Editora Ltda, 2ª ed. São Paulo, SP, 1997.

RUS, F., VILLATORO, F. R. Métodos Numéricos Basados en Ecuaciones Modificadas para Ecuaciones de Evolución no Lineales con Soluciones de tipo Compactón. **XX Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones, X Congreso de Matematica Aplicada, Sevilla**, 24-28 septiembre, pp. 1(8), 2007.

SANTIAGO, C.D., MARCHI, C.H. Parâmetros Ótimos do Método *Multigrid* Geométrico CS e FAS para problemas 2D com 2 equações, Proceedings of the **XXIX Iberian Latin American Congress on the Computational Methods in Engineering (CILAMCE)**, Maceió, Brazil, 2008.

SCHREIBER, R., KELLER, H. B. Driven Cavity Flows by Efficient Numerical Techniques. **Journal of Computational Physics** Vol. 49, 310-333, 1983.

- SHIH, T. M., TAN, C. H., HWANG, B. C., Effects of Grid Staggering on Numerical Schemes, **International Journal of Numerical Methods in Fluids**, Vol. 9, No. 2, pp. 193-212., 1989.
- SHYY, W., GARBEY, M., APPUKUTTAN, A., WU, J., Evaluation of Richardson extrapolation in computational fluid dynamics. **Numerical Heat transfer**, Part B, Vol. 41, pp. 139-164, 2002.
- SIDI, A. **Practical extrapolation methods: theory and applications**. Cambridge, 2003.
- SKELL, R. D. Thirteen Ways to Estimate Global Error. **Numer. Math.** Vol. 48, 1-20, 1986.
- SMITH, G. D. **Numerical Solution of partial differential equations – Finite difference methods**. 3th ed. New York: Clarendon Press – Oxford, 1985.
- SOFRONIOU, M., SPALETTA, G. Extrapolation methods in mathematica. Journal of Numerical Analysis, **Industrial and Applied Mathematics (JNAIAM)**, Vol. 3, no. 1-2, pp. 105-121, 2008.
- SPALDING, D. B. A Novel Finite Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**. Wiley Blackwell (John Wiley & Sons), Vol. 4, 551-559, 1972.
- SPHAIER, L. A., Notas de Aula. < <http://sphaier.com/disciplinas/transcal/docs/TransCalTexto-2013-1-P1.pdf>> Acesso em 05/13.
- STEINBERG, S., ROACHE, P. J. Symbolic Manipulation and Computational Fluid Dynamics. **Journal of Computational Physics** Vol. 57, 251-284, 1985.
- STERBENZ, P. H., **Floating-point computation**. Prentice-Hall, 1974.
- STERN, F., MUSTE, M., BENINATI, M. L., EICHINGER, W. E. Summary of experimental uncertainty assessment methodology with example. **IHR Technical Report** No. 406, 1999.
- STETTER, H. J. Asymptotic Expansions for the Error of Discretization Algorithms for Non-linear Functional Equations. **Numerische Mathematik** Vol. 7, 18—31, 1965.
- STETTER, H. J. The Defect Correction Principle and Discretization Methods. **Numer. Math.** Vol. 29, 425-443, 1978.
- STOER, J., BULIRSCH, R. **Introduction to Numerical Analysis**. 3a ed., Springer, 2002.
- STRIKWERDA, J. C. **Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations**. 2^a ed., Philadelphia, SIAM, 2004.
- STRÖM, T. Practical Error Estimates for Repeated Richardson Extrapolation Schemes. **BIT Numerical Mathematics**- Springer, Vol. 18, 196-205, 1973.
- STÜBEN, K., “A Review of Algebraic *Multigrid*”, **Journal of Computation and Applied Mathematics**, Vol. 128, p. 281-309, 2001.

SUN, H., ZHANG, J. A High-Order Finite Difference Discretization Strategy Based on Extrapolation for Convection Diffusion Equations. **Wiley Periodicals, Inc.**, 2003.

TANNEHILL, J. C. ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H., **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. 2^a ed., Washington: Taylor & Francis, 1997.

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

TRUCANO, T. G., SWILER, L.P., IGUSA, T., OBERKAMPF, M. P. Calibration, validation, and sensitivity analysis: What's what. **Reliability Engineering and System Safety**, Vol. 91, 1331-1357, 2006.

VARGAS, A. P. S. **O Método dos Elementos Finitos Aplicado em um Problema Não Linear de Adsorção Líquida Monocomponente**. Dissertação de Mestrado – Curitiba – Paraná – UFPR, 2002a.

VARGAS, A. P. S., SCHEER, A. P., MARCHI, C. H. MACIEL, M. R. W., HECKE, M. B. Finite element method applied to mono component liquid adsorption with non-linear isotherm. In: **XXIII Latin Iberian American Congress on computational Methods for Engineering, AMC – GIMC/AIMETA**, Itália: University of L'aquila, 2002b.

VERSTEEG, H. K. MALALASEKERA, W., **An Introduction to Computational Fluid Dynamic, The Finite Volume Method**. 2^a ed., England: Pearson – Prentice Hall, 2007.

WARMING, R. F., HYETT, B. J. The Modified Equation Approach to the Stability and Accuracy Analysis of Finite-Difference methods, **Journal of computational physics** Vol. 14, 159-179, 1974.

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 Computational and Applied Mathematics** Vol. 128, 311–334, 2001.

WILKINSON, J. H. **Rounding errors in algebraic processes**. Dover publications, Inc. New York, 1994.

XING, T., STERN, F. Factors of safety for Richardson extrapolation. **Transactions of the ASME**, Vol. 132, 2010.

ZHANG, J., GENG, X., DAI, R. Analysis on Two Approaches for High Order Accuracy Finite Difference Computation. **Applied Mathematics Letters** Vol. 25, 2081–2085, 2012.

APÊNDICE A. ARTIGOS

Os resultados relacionados a equação de Laplace 2D podem ser encontrados no artigo intitulado “Highly Accurate Numerical Solutions with Repeated Richardson Extrapolation for 2D Laplace Equation” publicado na revista Applied Mathematical Modelling no ano de defesa desta tese conforme referência abaixo.

MARCHI, C. H., NOVAK, L. A., SANTIAGO, C. D., VARGAS, A. P. S. Highly Accurate Numerical Solutions with Repeated Richardson Extrapolation for CHT and CFD. Applied Mathematical Modelling. Vol. 37, PP. 7386–7397, 2013.

Resultados parciais deste trabalho foram resumidos no artigo intitulado “Multiextrapolação de Richardson e Verificação da Ordem de Acurácia de Esquemas Híbridos sobre a Equação 2D de Fourier com Termo Fonte” que foi aceito para publicação nos Anais do CMAC-Sul 2014.

Estes podem ser encontrados no diretório do grupo de pesquisa em CFD, cujo endereço é <ftp://ftp.demec.ufpr.br/CFD/>.