

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

**VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS
UNIDIMENSIONAIS EM DINÂMICA DOS FLUIDOS**

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE
SANTA CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE
DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA

Carlos Henrique Marchi

Florianópolis, julho de 2001.

**VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS
UNIDIMENSIONAIS EM DINÂMICA DOS FLUIDOS**

Carlos Henrique Marchi

ESTA TESE FOI JULGADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

DOUTOR EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL
PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. António Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.
(orientador)

Prof. Júlio César Passos, Dr.
(coordenador do programa)

BANCA EXAMINADORA

Prof. António Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.
(presidente)

Prof. João Luiz Filgueiras de Azevedo, Ph.D.
(relator)

Prof. Clóvis Raimundo Maliska, Ph.D.

Profa. Ângela Ourivio Nieckele, Ph.D.

Prof. César José Deschamps, Ph.D.

Aos meus pais

e à Jerusa.

AGRADECIMENTOS

Aos meus colegas do Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC), ao seu coordenador, Prof. Maliska, e ao seu gerente, Eng. Axel, pelo apoio fornecido durante o desenvolvimento deste trabalho. Agradeço aos meus colegas do SINMEC, Rafael Mendes, Fernando Laroca e Fábio Alencar Schneider pela leitura do manuscrito e sugestões fornecidas para melhorá-lo.

Aos membros da banca examinadora, Profs. Clovis R. Maliska, Ângela O. Nieckele, César J. Deschamps, agradeço pelas sugestões fornecidas para melhorar a redação deste trabalho, especialmente ao Prof. João L. F. Azevedo, relator, pela sua revisão meticulosa. Agradeço ao meu amigo Fábio Alencar Schneider pelas diversas discussões que tivemos e que me instigaram a provar vários pontos abordados no trabalho. Também agradeço ao meu estimado orientador, Prof. António Fábio Carvalho da Silva, por ter aceito o meu tema de tese e pela orientação realizada.

Agradeço aos meus colegas do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná (UFPR) pela oportunidade concedida para realizar o meu doutorado. Finalmente, agradeço às instituições que financiaram este trabalho: UFPR, CAPES, POSMEC/UFSC e SINMEC/UFSC.

SUMÁRIO

Lista de Símbolos	xi
Resumo	xv
Abstract	xvi

1.	INTRODUÇÃO	1
1.1	O Problema	1
	1.1.1 Métodos de solução	1
	1.1.2 Dinâmica dos fluidos computacional - <i>CFD</i>	4
	1.1.3 Erros dos métodos de solução e seus processos de quantificação	4
1.2	Motivação	7
1.3	Modelos Matemáticos	13
1.4	Variáveis de Interesse	14
1.5	Modelos Numéricos	15
1.6	Fontes de Erro das Soluções Numéricas	18
	1.6.1 Erros de truncamento	18
	1.6.2 Erros de iteração	22
	1.6.3 Erros de arredondamento	24
	1.6.4 Erros de programação	25
	1.6.5 Erros de discretização	26
1.7	Tipos de Estimativa do Erro de Discretização	26
	1.7.1 Estimativas de erro <i>a priori</i>	26
	1.7.2 Estimativas de erro <i>a posteriori</i>	27
1.8	Objetivos do Trabalho	27
1.9	Delineamento do Trabalho	28
1.10	Resumo do Capítulo 1	29

PARTE	ERRO DE APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS OBTIDAS	31
I	COM SOLUÇÕES ANALÍTICAS NODAIS	
2.	APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS E SEUS ERROS DE TRUNCAMENTO COM SOLUÇÃO ANALÍTICA NODAL	32
2.1	Ordens Verdadeiras e Assintótica do Erro de Truncamento	33
2.2	Série de Taylor	35
2.3	Derivada de 1ª Ordem com 1 Ponto a Montante	36
2.4	Derivada de 1ª Ordem com Diferença Central	37
2.5	Derivada de 1ª Ordem com 1 Ponto a Jusante	38
2.6	Derivada de 1ª Ordem com 2 Pontos a Jusante	39
2.7	Derivada de 2ª Ordem com Diferença Central	40
2.8	Média da Variável Dependente	41
2.9	Exemplos	43
	2.9.1 Derivadas de 1ª ordem	44

2.9.2	Derivada de 2 ^a ordem	44
2.9.3	Média da variável dependente	45
2.10	Resumo do Capítulo 2	49
3.	MÉTODOS PARA ESTIMAR, A POSTERIORI, O ERRO DE DISCRETIZAÇÃO	51
3.1	Características Desejáveis Para Uma Estimativa de Erro	52
3.1.1	A incerteza deve ser confiável	53
3.1.2	A incerteza deve ser acurada	53
3.2	Estimador de Richardson	55
3.2.1	Dedução da extrapolação de Richardson	57
3.2.2	Limitações do estimador de Richardson	58
3.2.3	Efetividade assintótica do estimador de Richardson	59
3.2.4	Representação da solução numérica	60
3.3	Estimador Delta	60
3.4	Estimador <i>GCI</i>	63
3.5	Estimadores Multicoeficiente	65
3.5.1	Estimador bicoeficiente	65
3.5.2	Estimador tricoeficiente	68
3.5.3	Estimador multicoeficiente	71
3.6	Exemplos	72
3.7	Resumo do Capítulo 3	78
4.	ORDENS EFETIVA E APARENTE	79
4.1	Ordem Efetiva	79
4.1.1	Ordem efetiva baseada em duas soluções numéricas	80
4.1.2	Ordem efetiva baseada em uma solução numérica	81
4.1.3	Valores possíveis para a ordem efetiva	83
4.2	Ordem Aparente	84
4.3	Exemplos	87
4.4	Resumo do Capítulo 4	92
5.	ESTIMADOR CONVERGENTE	94
5.1	Intervalos de Convergência da Ordem Aparente	94
5.1.1	Intervalo subconvergente	95
5.1.2	Intervalo superconvergente	96
5.1.3	Comentários e exemplos	96
5.2	Envolventes da Solução Analítica e do Erro	98
5.2.1	Dedução de envolvente do erro de discretização	99
5.2.2	Dedução de envolvente da solução analítica exata	101
5.2.3	Exemplos de envolventes	103
5.3	Solução Numérica Convergente e Sua Incerteza	104
5.3.1	Exemplos	108
5.3.2	Ordem assintótica do erro da solução numérica convergente	111
5.4	Resumo do Capítulo 5	112
6.	CONDIÇÕES SUFICIENTES PARA ESTIMATIVAS DE ERRO CONFIÁVEIS NO INTERVALO CONVERGENTE	114
6.1	Estimador de Richardson	114

6.2	Estimador Delta	115
6.3	Estimador <i>GCI</i>	117
6.4	Resumo do Capítulo 6	120
	FECHAMENTO DA PARTE I	121
I.1	Escopo da Parte I	121
I.2	Síntese da Parte I	121
I.3	Contribuições na Parte I	125
<hr/>		
PARTE II	ERRO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS OBTIDAS EM MALHAS UNIFORMES	126
7.	APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS E SEUS ERROS DE TRUNCAMENTO E DE POLUIÇÃO EM MALHAS UNIFORMES	127
7.1	Derivada de 1ª Ordem com 1 Ponto a Montante	128
7.2	Derivada de 1ª Ordem com Diferença Central	129
7.3	Derivada de 1ª Ordem com 1 Ponto a Jusante	130
7.4	Derivada de 1ª Ordem com 2 Pontos a Jusante	131
7.5	Derivada de 2ª Ordem com Diferença Central	132
7.6	Média da Variável Dependente	133
7.7	Resumo do Capítulo 7	134
8.	CASOS 1 E 2: ADVECCÃO COM <i>UDS</i> EM MALHA UNIFORME	136
8.1	Modelo Matemático do Caso 1	137
8.2	Solução Analítica do Caso 1	138
8.3	Solução Numérica do Caso 1	138
	8.3.1 Variável dependente	138
	8.3.2 Média da variável dependente	141
	8.3.3 Derivada de primeira ordem da variável dependente com 1 ponto a jusante	141
	8.3.4 Derivada de primeira ordem da variável dependente com 2 pontos a jusante	142
8.4	Cálculo do Erro de Discretização, <i>a Posteriori</i> , do Caso 1	144
8.5	Estimativa do Erro de Discretização, <i>a Priori</i> , do Caso 1 Sem Solução Analítica	147
8.6	Cálculo do Erro de Discretização, <i>a Priori</i> , do Caso 1 Com Solução Analítica	150
	8.6.1 Variável dependente	150
	8.6.2 Média da variável dependente	151
	8.6.3 Derivada de primeira ordem da variável dependente com 1 ponto a jusante	153
	8.6.4 Derivada de primeira ordem da variável dependente com 2 pontos a jusante	153
8.7	Erro de Truncamento da Equação Discretizada do Caso 1	155
	8.7.1 Sem solução analítica	155
	8.7.2 Com solução analítica	156
8.8	Caso 2	156
8.9	Resumo do Capítulo 8	158

9.	CASO 3: ADVECCÃO COM UDS EM MALHA UNIFORME	160
9.1	Solução Analítica	161
9.2	Solução Numérica	161
9.3	Cálculo do Erro de Discretização, <i>a Posteriori</i>	163
9.4	Resumo do Capítulo 9	167
10.	CASOS 4 E 5: ADVECCÃO COM UDS EM MALHA UNIFORME	168
10.1	Modelo Matemático do Caso 4	168
10.2	Solução Analítica do Caso 4	169
10.3	Solução Numérica do Caso 4	170
10.4	Cálculo do Erro de Discretização, <i>a Posteriori</i> , do Caso 4	171
10.5	Caso 5	177
10.6	Resumo do Capítulo 10	179
11.	CASO 6: ADVECCÃO COM CDS EM MALHA UNIFORME	180
11.1	Definição do Problema e Solução Analítica	180
11.2	Solução Numérica	180
11.3	Cálculo do Erro de Discretização, <i>a Posteriori</i>	182
11.4	Degeneração da Ordem do Erro de Discretização	183
11.5	Resumo do Capítulo 11	184
12.	CASOS 7 E 8: DIFUSÃO COM CDS EM MALHA UNIFORME	185
12.1	Modelo Matemático do Caso 7	185
12.2	Solução Analítica do Caso 7	186
12.3	Solução Numérica do Caso 7	186
12.4	Cálculo do Erro de Discretização, <i>a Posteriori</i> , do Caso 7	188
12.5	Degeneração da Ordem do Erro do Caso 7	193
12.6	Caso 8	194
12.7	Resumo do Capítulo 12	199
13.	CASOS 9 E 10: ADVECCÃO-DIFUSÃO EM MALHA UNIFORME	200
13.1	Solução Analítica	200
13.2	Caso 9	201
13.3	Caso 10	204
13.4	Resumo do Capítulo 13	209
	FECHAMENTO DA PARTE II	210
II.1	Escopo da Parte II	210
II.2	Conclusão da Parte II	210
II.3	Contribuições na Parte II	213
PARTE III	ERRO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS OBTIDAS EM MALHAS NÃO-UNIFORMES	215
14.	APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS E SEUS ERROS DE TRUNCAMENTO E DE POLUIÇÃO EM MALHAS NÃO-UNIFORMES	216
14.1	Derivada de 1ª Ordem com 1 Ponto a Montante	217

14.2	Derivada de 1ª Ordem com Diferença Central	218
14.3	Derivada de 1ª Ordem com 1 Ponto a Jusante	219
14.4	Derivada de 1ª Ordem com 2 Pontos a Jusante	220
14.5	Derivada de 2ª Ordem com Diferença Central	221
14.6	Média da Variável Dependente	222
14.7	Resumo do Capítulo 14	223
15.	TIPOS DE REFINO DE MALHAS NÃO-UNIFORMES	225
15.1	Refino Por Subdivisão Uniforme	225
15.2	Refino Irregular	226
15.3	Refino Com Progressão Geométrica	227
15.4	Refino Com Δh Constante	229
15.5	Previsões da Literatura	230
16.	CASO 11: ADVECCÃO COM UDS EM MALHA NÃO-UNIFORME	232
16.1	Solução Numérica	233
16.2	Cálculo do Erro de Discretização, <i>a Priori</i>	234
16.3	Análise de Subcasos	235
16.4	Resumo do Capítulo 16	239
17.	CASO 12: ADVECCÃO COM CDS EM MALHA NÃO-UNIFORME	240
17.1	Solução Numérica	240
17.2	Degeneração da Ordem do Erro de Discretização	242
17.3	Análise de Subcasos	243
17.4	Ordem do Erro de Discretização de Problemas Advectivos Com CDS em Malha Não-Uniforme	247
17.5	Resumo do Capítulo 17	250
18.	CASO 13: DIFUSÃO COM CDS EM MALHA NÃO-UNIFORME	251
18.1	Solução Numérica	251
18.2	Degeneração da Ordem do Erro de Discretização	253
18.3	Análise de Subcasos	253
18.4	Ordem do Erro de Discretização de Problemas Difusivos Com CDS em Malha Não-Uniforme	255
18.5	Resumo do Capítulo 18	258
19.	CASO 14: ADVECCÃO-DIFUSÃO EM MALHA NÃO-UNIFORME	259
19.1	Solução Numérica	259
19.2	Verificação da Ordem Efetiva do Erro de Discretização	260
	19.2.1 Refino de malha por subdivisão uniforme	260
	19.2.2 Refino irregular de malha	262
19.3	Resumo do Capítulo 19	263
20.	SOLUÇÕES NUMÉRICAS COERENTES	264
20.1	Definição de Soluções Numéricas Coerentes	264
20.2	Verificação de Soluções Numéricas Coerentes	266
20.3	Exemplo da Parte I	268
20.4	Exemplos da Parte II	269
	20.4.1 Variável dependente	270

20.4.2	Média da variável dependente	270
20.4.3	Derivada de 1ª ordem da variável dependente	271
20.5	Resumo do Capítulo 20	271

	FECHAMENTO DA PARTE III	272
III.1	Escopo da Parte III	272
III.2	Conclusão e Contribuições da Parte III	272

21.	CONCLUSÃO	274
21.1	Escopo do Trabalho	274
21.2	Conclusão Geral	275
21.3	Contribuições	278
21.4	Trabalhos Futuros	279
21.5	Comentários Finais	280

	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	281
--	-----------------------------------	------------

LISTA DE SÍMBOLOS

A	coeficientes do sistema de equações algébricas da variável dependente
B	termos independentes do sistema de equações algébricas da variável dependente
c	coeficientes da equação geral do erro de truncamento
C	coeficientes da equação geral do erro de discretização
Cap.	capítulo
CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFD	Dinâmica dos Fluidos Computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
DDS	<i>Downstream Differencing Scheme</i>
e	erro de poluição da solução numérica
E	erro verdadeiro ou erro de discretização da solução numérica
Eq.	equação
Fig.	figura
F_S	fator de segurança do estimador GCI
h	tamanho de um elemento da malha, que é igual à distância entre dois nós consecutivos da malha (m)
j	número do nó de uma malha unidimensional
K	coeficientes da equação da incerteza de uma solução numérica
L	comprimento do domínio de cálculo (m)
N	número de elementos da malha, que é igual ao número de nós da malha menos a unidade
p_E	ordem efetiva do erro (adimensional)
p_L	ordem assintótica do erro (adimensional)
p_U	ordem aparente da incerteza (adimensional)

p_V	ordens verdadeiras do erro (adimensional)
q	razão de refino de malha (adimensional)
S	termo fonte genérico das equações diferenciais
Tab.	tabela
<i>TDMA</i>	<i>TriDiagonal Matrix Algorithm</i>
U	incerteza ou erro estimado da solução numérica
U_{bi}	incerteza da solução numérica segundo o estimador bicoeficiente
U_C	incerteza da solução numérica segundo o estimador convergente
U_{Δ}	incerteza da solução numérica segundo o estimador delta
U_{GCI}	incerteza da solução numérica segundo o estimador <i>GCI</i>
U_{mc}	incerteza da solução numérica segundo o estimador multicoeficiente
U_{Ri}	incerteza da solução numérica segundo o estimador de Richardson
U_{tri}	incerteza da solução numérica segundo o estimador tricoeficiente
<i>UDS</i>	<i>Upwind Differencing Scheme</i>
V	velocidade do escoamento do fluido (m/s)
x	coordenada espacial (m)

Letras Gregas

ε	erro de truncamento
ε_n	erro de iteração
ε_p	erro de programação
ε_{π}	erro de arredondamento
ε_{τ}	erro de truncamento
ϕ	solução numérica de uma variável genérica

Φ	solução analítica exata de uma variável genérica
ϕ_C	solução numérica convergente
ϕ_∞	estimativa da solução analítica exata (Φ) obtida por extrapolação
λ	solução numérica da variável dependente do problema (variável primária)
λ_m	solução numérica da média de λ
λ_{CDS}^i	solução numérica da derivada de 1ª ordem de Λ obtida por diferença central
λ_{DDS}^i	solução numérica da derivada de 1ª ordem de Λ obtida com 1 ponto a jusante
λ_{DDS-2}^i	solução numérica da derivada de 1ª ordem de Λ obtida com 2 pontos a jusante
λ_{UDS}^i	solução numérica da derivada de 1ª ordem de Λ obtida com 1 ponto a montante
λ_{CDS}^{ii}	solução numérica da derivada de 2ª ordem de Λ obtida por diferença central
Λ	solução analítica exata da variável dependente do problema (variável primária)
Λ_m	solução analítica exata da média de Λ
Λ^i	solução analítica exata da derivada de 1ª ordem de Λ
Λ^o	solução analítica exata da derivada de ordem ‘o’ de Λ , onde ‘o’ é grafado com algarismos romanos e assume os valores <i>i</i> , <i>ii</i> , <i>iii</i> , <i>iv</i> , <i>v</i> , etc.
θ	efetividade de um estimador de erro: razão entre incerteza (U) e erro (E)
ψ_E	razão de redução do erro de discretização da solução numérica
ψ_U	razão de convergência da solução numérica para a solução analítica exata

Subscritos

1	malha fina
2	malha grossa
3	malha supergrossa

j	número do nó de uma malha unidimensional
$j-1$	nó à esquerda do nó j
$j+1$	nó à direita do nó j

RESUMO

O objetivo principal deste trabalho é calcular a incerteza (U) de soluções numéricas, onde a incerteza é definida como uma estimativa do erro (E) de discretização. Para uma variável de interesse qualquer, este erro é a diferença entre a solução analítica exata e a solução numérica. O erro de discretização é causado apenas por erros de truncamento, portanto, não são considerados os erros de arredondamento, de iteração e de programação. As soluções numéricas são obtidas com o método de diferenças finitas sobre malhas unidimensionais uniformes e não-uniformes, empregando-se diversos tipos de aproximações numéricas. São resolvidos problemas básicos de transferência de calor e de mecânica dos fluidos. O cálculo da incerteza é feito com três tipos de estimadores de erro disponíveis na literatura e outros quatro introduzidos neste trabalho. Estes estimadores são avaliados quanto à confiabilidade ($U/E \geq 1$) e quanto à acurácia ($U/E \approx 1$). São obtidas as condições suficientes para os estimadores serem confiáveis quando os tamanhos dos elementos da malha tendem a zero. Verificou-se que nenhum dos estimadores analisados garante incerteza confiável em malhas grossas. Para sanar esta dificuldade, foi proposto um procedimento que funcionou em todos os testes efetuados.

Palavras-chave: simulação numérica, erros numéricos, dinâmica dos fluidos, diferenças finitas, verificação, malhas não-uniformes.

ABSTRACT

The main purpose of this work is to calculate the uncertainty (U) of the numerical solutions, where the uncertainty is defined as the estimated discretization error (E). This error is the difference between exact analytic solution and the numerical solution of the variable of interest. The discretization error is caused only by the truncation error, while the round-off, iteration and programming errors are not taken into account. The numerical solutions are obtained by the finite difference method with uniform and non-uniform unidimensional grids and also several types of numerical approximations. Basic problems of heat transfer and fluid mechanics are solved. The uncertainty is calculated with three types of error estimators found in the literature and other four estimators introduced in this work. These estimators are examined for reliability ($U/E \geq 1$) and accuracy ($U/E \approx 1$). Sufficient conditions to get reliable estimators are obtained when the grid elements size vanish. It was verified that no estimator warrants reliable uncertainty on coarse grids. To overcome this limitation, it was proposed a procedure that worked on all performed tests (coarse grids included).

Keywords: numerical simulation, numerical error, fluid dynamics, finite difference, verification, non-uniform grids.

INTRODUÇÃO

Neste capítulo introdutório é definido o problema abordado neste trabalho. São apresentados a sua motivação, os modelos matemáticos e numéricos considerados. São definidos os tipos de variáveis de interesse, as fontes de erro que atuam sobre as suas soluções numéricas e as formas de estimar seus erros. Finalmente, são apresentados os objetivos do trabalho, o delineamento deste documento e um resumo do capítulo.

1.1 O PROBLEMA

O problema tratado neste trabalho é a estimativa do erro de discretização de soluções numéricas em dinâmica dos fluidos. Para esclarecer o significado disto, primeiro é preciso classificar os métodos atualmente empregados na solução de problemas. Definir o que se entende aqui por dinâmica dos fluidos computacional (*Computational Fluid Dynamics – CFD*). Depois, definir os erros destes métodos de solução e, por fim, os erros que são considerados neste trabalho.

1.1.1 Métodos de Solução

Três tipos de métodos podem ser empregados na solução de um problema: experimentais, analíticos e numéricos, conforme representado na Fig. 1.1. Cada um destes tipos de métodos apresenta vantagens e desvantagens sobre os demais dependendo do problema e dos recursos disponíveis para resolvê-lo. Discussões a respeito podem ser vistas nos textos de Roache (1972), Maliska (1995), Fortuna (2000) e Tannehill *et al.* (1997). Com base nestas referências, são apresentadas a seguir as características principais que distinguem cada tipo de método e fornecidos alguns exemplos.

Os **métodos experimentais**, modernamente, tiveram início no século XVII com os trabalhos de Galileu Galilei sobre o movimento dos corpos. Suas características principais são:

- trabalham com o fenômeno real, por exemplo, a determinação do arrasto e da sustentação de um avião voando em diversas velocidades;
- cada problema é resolvido ou estudado com base num “experimento”, realizado em laboratório, com o uso de modelos em escala reduzida, como um avião em túnel de vento, ou em campo, em geral envolvendo problemas na escala real, como a evolução estelar com base em observações do Sol e de outras estrelas ou a circulação sanguínea no corpo humano; e
- empregam equipamentos de medição para medir o valor das grandezas de interesse, isto é, para obter os **resultados experimentais**, que podem ser globais, por exemplo, a força de arrasto sobre um avião, ou locais, como a velocidade do sangue dentro de uma artéria do corpo humano numa determinada posição.

Os **métodos analíticos**, modernamente, tiveram início também no século XVII com o livro *Principia* (1687) de Isaac Newton, que formulou suas três leis do movimento e realizou estudos sobre a gravitação e a luz. Suas características principais são:

- trabalham com uma representação matemática do fenômeno real, isto é, com um modelo matemático; as equações de Navier-Stokes (Tannehill *et al.*, 1997) para o movimento de fluidos como o ar são um exemplo;
- as **soluções analíticas**, isto é, as soluções dos problemas, de forma bastante simplificada, são obtidas com o emprego de papel e lápis;
- as soluções analíticas são contínuas sobre o domínio de cálculo e em forma fechada, tanto para variáveis locais quanto globais;
- aplicam-se a problemas com equações, geometrias e condições de contorno e iniciais muito simples, ou seja, os problemas que conseguem resolver são as exceções; e
- não se aplicam a problemas para os quais não existem modelos matemáticos.

Roache (1972) considera que os **métodos numéricos** tiveram início com o trabalho de Richardson (1910), que resolveu, entre outras, a equação de Laplace bidimensional (Incropera e DeWitt, 1996) antes da era do computador digital. Suas características principais são:

- também trabalham com uma representação matemática do fenômeno real, isto é, com um modelo matemático; novamente, as equações de Navier-Stokes para o movimento de fluidos como o ar são um exemplo;

- as **soluções numéricas**, isto é, as soluções dos problemas são obtidas com o emprego de computadores, tanto para variáveis locais quanto globais;
- as soluções numéricas são discretas, isto é, são obtidas em pontos específicos do domínio de cálculo;
- aplicam-se a problemas com equações, geometrias e condições de contorno e iniciais mais gerais do que aqueles resolvidos através de métodos analíticos; e
- também não se aplicam a problemas para os quais não existem modelos matemáticos.

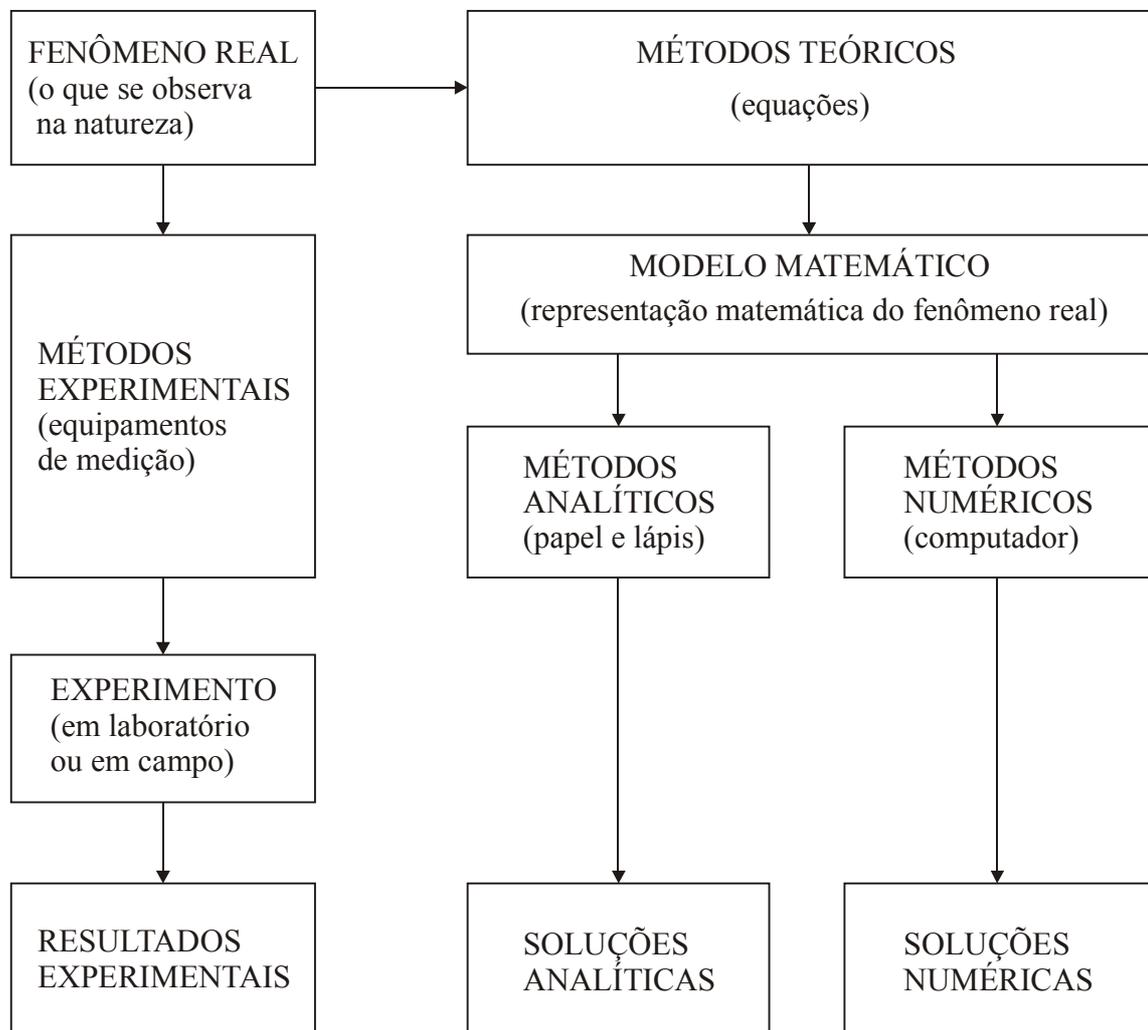


Figura 1.1 Métodos de solução de problemas.

Os métodos analíticos e numéricos também são denominados de **métodos teóricos** (Maliska, 1995) porque ambos trabalham com modelos matemáticos. Aeschliman e Oberkampf (1998), Barber (1998), Oberkampf e Aeschliman (1992) e Walker e Oberkampf (1992) são exemplos de trabalhos que tratam da interação entre os métodos experimentais e numéricos para maximizar as vantagens de cada um na solução de problemas, isto é, para minimizar suas desvantagens e diminuir seus erros. Este tipo de interação entre métodos experimentais e numéricos também é empregado no aprimoramento e concepção de novos modelos matemáticos; a modelagem da turbulência é um exemplo.

1.1.2 Dinâmica dos Fluidos Computacional - *CFD*

Na área do conhecimento denominada *CFD*, trata-se da solução de problemas de dinâmica dos fluidos através de métodos numéricos. A **dinâmica dos fluidos** envolve a modelagem de fenômenos físico-químicos nas áreas de mecânica dos fluidos, transferência de calor e massa e combustão, entre outras, que são representados por modelos matemáticos (Oberkampf e Blottner, 1998). Estes modelos são resolvidos através de **métodos numéricos** que incluem, por exemplo, os métodos de **diferenças finitas**, **volumes finitos** e **elementos finitos** (Minkowycz *et al.*, 1988). *CFD* é aplicado em projetos de engenharia, no entendimento da dinâmica dos fluidos, no desenvolvimento de novos modelos matemáticos e de simulação, em decisões políticas, etc (Rizzi e Vos, 1998). *CFD* também é aplicado em problemas multidisciplinares (Habashi *et al.*, 1998): escoamento e transferência de calor (transferência de calor conjugada); escoamento e estrutura (aeroelasticidade); escoamento e ruído (aeroacústica); escoamento e reações químicas (aerodinâmica); escoamento e acumulação de gelo sobre superfícies de sustentação (aerocongelamento); e aviões com invisibilidade a ondas eletromagnéticas (aeroeletromagnetismo).

1.1.3 Erros dos Métodos de Solução e Seus Processos de Quantificação

Na Fig. 1.2 é apresentada a definição prática dos erros envolvidos nos métodos de solução de problemas e que são os erros experimental, de modelagem e numérico, definidos a seguir. A diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e o seu resultado experimental constitui o **erro experimental** (ISO, 1993; ABNT, 1997). Este erro é causado basicamente pelas dificuldades de controle dos parâmetros e leis de similaridade que definem o experimento e pelo uso de equipamentos de medição. Em geral, o valor verdadeiro é desconhecido e, portanto, consegue-se apenas estimar o valor do erro experimental. Este valor

estimado é denominado **incerteza**, e o processo que o quantifica, **análise de incerteza**. Formas de quantificar a incerteza de resultados experimentais podem ser vistas nas normas ISO (1993), ABNT (1997) e AIAA (1995), assim como nos textos de Coleman e Steele (1999) e Holman (1994).

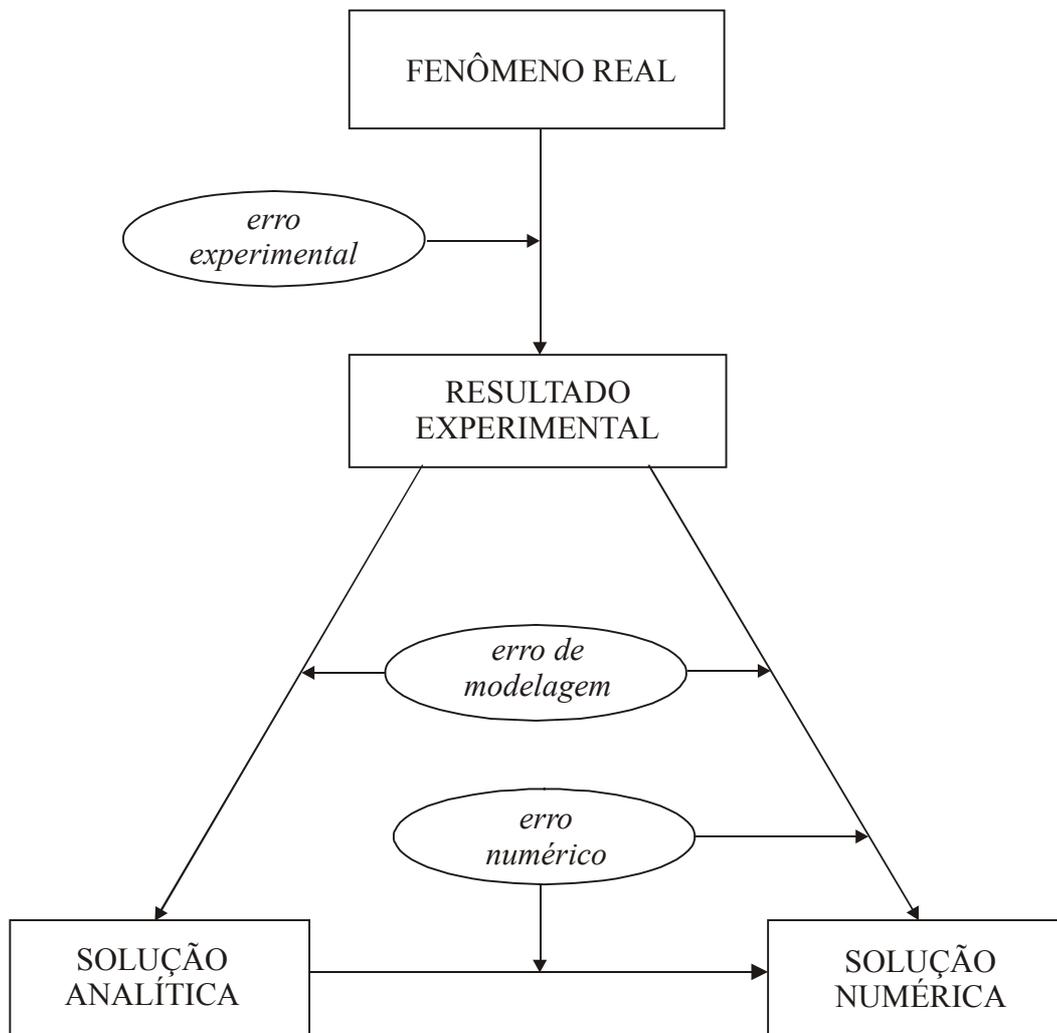


Figura 1.2 Erros dos métodos de solução de problemas.

A diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse, de um fenômeno real, e a sua solução analítica ou a sua solução numérica exata é denominada **erro de modelagem** (Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998; Ferziger e Peric, 1999). Novamente, em geral, o valor verdadeiro é desconhecido e, portanto, consegue-se apenas estimar o valor do erro de modelagem. Isso é feito através da comparação das soluções analíticas e numéricas com

resultados experimentais. O erro de modelagem é causado pelas simplificações feitas sobre o fenômeno real na concepção dos modelos matemáticos. O processo que quantifica este tipo de erro tem sido denominado recentemente de **validação** (Blottner, 1990; Mehta, 1996; Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998; AIAA, 1998; Jameson e Martinelli, 1998; Rizzi e Voss, 1998; Fortuna, 2000) ou validação física (Maliska, 1995). O objetivo da validação é determinar em que medida um modelo matemático representa um determinado fenômeno real. O processo de validação é tratado, por exemplo, por Coleman e Stern (1997), Aeschliman e Oberkampf (1998) e Barber (1998).

A diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ) é denominada por Ferziger e Peric (1999) de **erro da solução numérica** (E), ou simplesmente, **erro numérico**, isto é,

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

Portanto, a **solução numérica ideal** é igual à solução analítica exata do problema, ou seja, é aquela em que o erro numérico é nulo. O erro numérico é causado por diversas fontes de erro, conforme ilustrado na Fig. 1.3, e que são: erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação. Estas fontes de erro são explicadas na seção 1.6. O processo que quantifica o erro numérico tem sido denominado recentemente de **verificação** (Blottner, 1990; Mehta, 1996; Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998; AIAA, 1998; Jameson e Martinelli, 1998; Rizzi e Voss, 1998; Fortuna, 2000) ou validação numérica (Maliska, 1995). O objetivo da verificação é determinar em que medida um modelo matemático é resolvido adequadamente através de um método numérico.

O valor do erro numérico independe de resultados experimentais mas só pode ser obtido quando a solução analítica de um modelo matemático é conhecida. Porém, em termos práticos, isto é, para soluções numéricas de modelos matemáticos cuja solução analítica é desconhecida, não é possível obter o erro numérico. Nestes casos é necessário estimar qual seria o valor da solução analítica. Assim, em vez do erro numérico calcula-se o **erro estimado**, que também é chamado de **incerteza** (U) por Mehta (1996) e Chapra e Canale (1994). A incerteza da solução numérica de uma variável de interesse é avaliada pela diferença entre a sua solução analítica estimada (ϕ_∞) e a própria solução numérica (ϕ), ou seja,

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

Algumas formas de obter o valor da solução analítica estimada são vistas neste trabalho. A maioria delas se baseia na extrapolação de Richardson (Roache, 1998). A incerteza de uma solução numérica é calculada com os chamados **estimadores de erro** dos quais dois exemplos são os estimadores de Richardson e *GCI* (Roache, 1998). A palavra incerteza é usada neste trabalho para caracterizar o erro estimado de uma solução numérica, motivado pela analogia com a incerteza de resultados experimentais. Porém, a incerteza de uma solução numérica é causada por fontes de erro totalmente diferentes das fontes de erro que atuam na incerteza de um resultado experimental.

O presente trabalho se concentra apenas nos efeitos dos erros de truncamento sobre as soluções numéricas. Nesse caso, o erro numérico calculado através da Eq. (1.1) passa a ser denominado de **erro de discretização (*E*)**, de acordo com Ferziger e Peric (1999) e conforme ilustrado na Fig. 1.3.

1.2 MOTIVAÇÃO

Os processos de análise de incerteza de resultados experimentais e de verificação de soluções numéricas são feitos de formas distintas e encontram-se em níveis diferentes de desenvolvimento. De um lado, para os métodos experimentais existem padrões disponíveis, largamente aceitos e aplicados (ISO, 1993; Holman, 1994; AIAA, 1995; Coleman e Steele, 1999), seja em dinâmica dos fluidos ou outras áreas do conhecimento. Por exemplo, a divulgação de resultados de pesquisas de opinião pública normalmente é acompanhada de uma margem de erro ou incerteza. De outro lado, na área de dinâmica dos fluidos computacional (*CFD*), a situação atual sobre quantificação da incerteza de soluções numéricas pode ser assim resumida:

- 1) geralmente não se relatam as incertezas das soluções numéricas, conforme Celik *et al.* (1993) e Douglass e Ramshaw (1994); outro exemplo do cotidiano, mas que emprega métodos numéricos, é a previsão meteorológica diária: as previsões de temperatura não são acompanhadas de suas incertezas; recentemente, observa-se que alguns pesquisadores apresentam duas ou três soluções numéricas em malhas diferentes, mostrando graficamente o efeito do refino de malha sobre os resultados; o trabalho de Roy e Edwards (2000) é um exemplo deste procedimento atual;

- 2) segundo Freitas (1993), Celik (1993), Mehta (1996), Rizzi e Vos (1998) não existem padrões aceitos para efetuar o processo de verificação em *CFD*; o que existem são apenas propostas iniciais pouco testadas, conforme Oberkampf e Blottner (1998) e AIAA (1998);

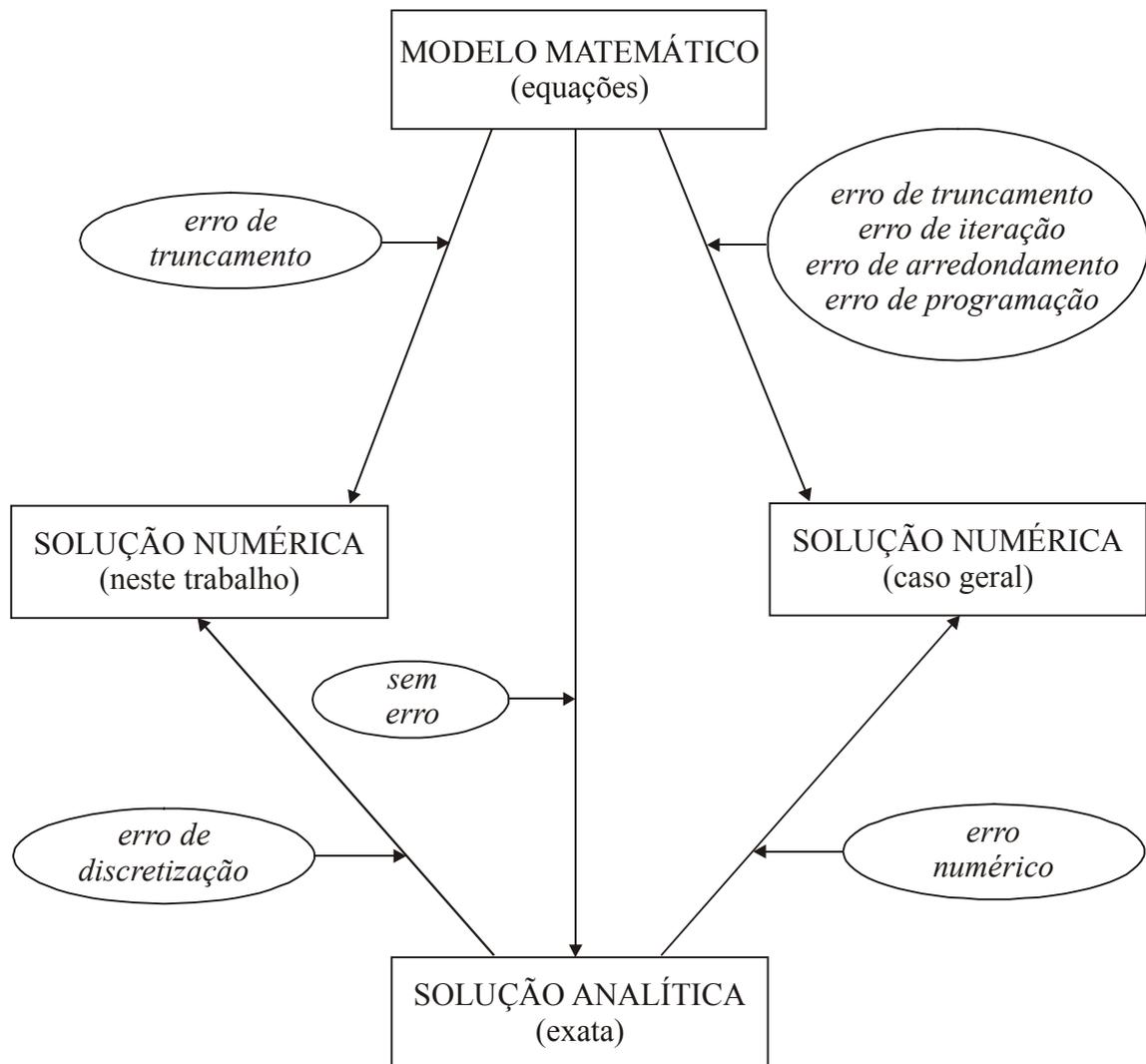


Figura 1.3 Erros da solução numérica de um modelo matemático e suas fontes.

- 3) há discordâncias na nomenclatura, de acordo com Celik e Zhang (1995), como se observa pelos termos diferentes usados por Blottner (1990), Rudy *et al.* (1991), Oreskes *et al.* (1994), Maliska (1995), Mehta (1996), Rizzi e Vos (1998), Roache (1998) e AIAA (1998);

- 4) é comum concluir a respeito do desempenho de modelos numéricos e modelos matemáticos com base em soluções numéricas obtidas com uma única malha; isto foi feito, por exemplo, por Amaladas e Kamath (1998) na avaliação de seis modelos numéricos diferentes, ao resolverem o escoamento sobre um aerofólio com uma malha de 128x32 pontos; outros exemplos são relatados por Celik *et al.* (1993) e Freitas (1995);
- 5) Rizzi e Vos (1998) afirmam que exceto em trabalhos de referência (*benchmarks*), praticamente todas as soluções numéricas são apresentadas e comparadas apenas através de gráficos, sem tabelas, aumentando e propagando seus níveis de erro;
- 6) muitos dos trabalhos numéricos de referência (*benchmarks*), por exemplo, De Vahl Davis (1983), Hortmann *et al.* (1990) e Demirdzic *et al.* (1992) apresentam incertezas obtidas com procedimentos inadequados ou sem avaliação de incertezas, como no trabalho de Ghia *et al.* (1982);
- 7) há pouco entendimento dos efeitos de multidimensionalidade, malhas não-uniformes e não-estruturadas sobre os erros numéricos e o desempenho dos estimadores de erro nestes casos; para malhas não-uniformes e não-estruturadas, por exemplo, conforme Ferziger e Peric (1999), Santos *et al.* (1996) e Strauss *et al.* (1999), são relatadas diferenças entre previsões teóricas e resultados práticos para os erros numéricos; e
- 8) segundo Douglass e Ramshaw (1994), é necessário desenvolver novas metodologias para estimar, limitar e minimizar os erros de discretização em aplicações práticas da engenharia, isto é, quando se é forçado a usar malhas muito grossas, por exemplo, em problemas tridimensionais.

Segundo diversos pesquisadores (Roache, 1994; Celik e Zhang, 1995; Marvin, 1995; Coleman e Stern, 1997; Oberkampf e Blottner, 1998), as atividades de pesquisa em *CFD* encontram-se no meio de um processo que busca estabelecer padrões para quantificar a incerteza de soluções numéricas. Este processo tem sido fomentado por simpósios: *Stanford Conference on Complex Turbulent Flows* (Kline *et al.*, 1981) e *Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics* (Celik *et al.*, 1993); e políticas editoriais de diversas revistas, incluindo o *Journal of Fluids Engineering* (Roache *et al.*, 1986; Freitas, 1993), *Journal of Heat Transfer* (ASME, 1994), *International Journal for Numerical Methods in Fluids* (Gresho e Taylor, 1994) e *AIAA Journal* (AIAA, 1994). Nesta última revista publicou-se em sua edição de maio de 1998 uma seção especial (*Credible Computational Fluid Dynamics Simulations*) com 12 artigos dedicados à quantificação de incertezas em *CFD* (AIAA, 1998).

A magnitude aceitável para o erro numérico depende, entre outros, da finalidade da solução numérica, dos recursos financeiros envolvidos, do tempo permitido para realizar as simulações e dos recursos computacionais disponíveis. Sabendo-se que as soluções numéricas contêm erros, é importante estimá-los pelos seguintes motivos:

- 1) quando o erro é maior do que o aceitável, compromete-se a confiabilidade do uso da solução numérica;
- 2) quando o erro é menor do que o necessário, há desperdício de recursos computacionais, isto é, de tempo de processamento e de quantidade de memória;
- 3) para validar e desenvolver modelos matemáticos que visem explicar fenômenos físico-químicos ainda não modelados adequadamente e cujas soluções analíticas são desconhecidas; um exemplo típico é a modelagem de escoamentos turbulentos;
- 4) para otimizar o uso da malha, isto é, adaptá-la visando homogeneizar o nível de erro no domínio de cálculo; e
- 5) para evitar interpretações equivocadas dos tipos relatados a seguir.

Celik *et al.* (1993) comentam sobre uma frase muito comum na conclusão de diversos trabalhos: “foi obtida ótima concordância entre os resultados experimentais e numéricos”, em geral usando-se malha única e sem estimativa de erros. Isso pode levar a conclusões incorretas porque existem diversos tipos de erros que, dependendo da situação, podem se cancelar ou se minimizar (Ferziger e Peric, 1999). Um exemplo é mostrado no trabalho de Rudy *et al.* (1991) onde a solução numérica com malha 51x51 ficou mais próxima dos resultados experimentais do que com a malha 101x101.

Freitas (1995) relata comparações do desempenho de oito códigos comerciais de *CFD* na solução de cinco problemas: três de escoamentos laminares e dois de escoamentos turbulentos. Os resultados foram obtidos pelos próprios fabricantes dos códigos, sendo que, em geral, cada um deles empregou uma única malha para resolver cada um dos cinco problemas, isto é, não se realizou estudo de refino de malha. Além disso não foram apresentadas estimativas do erro numérico. Um dos problemas resolvidos é a determinação do coeficiente de arrasto (C_d) para o escoamento bidimensional laminar sobre um cilindro, cujo resultado experimental é 1,47. Na Tab. 1.1 são apresentadas as soluções numéricas obtidas por cinco programas comerciais, os métodos usados e as malhas empregadas. Diante destas soluções, sem suas estimativas de erro, não é possível concluir qual é a melhor solução, isto é, a que tem o menor erro numérico.

Tabela 1.1 Soluções numéricas do coeficiente de arrasto (C_d) para o escoamento bidimensional laminar sobre um cilindro (Freitas, 1995).

programa	método numérico	malha (nós)	C_d
<i>FLOTRAN</i>	elementos finitos	21500	1,44
<i>FLUENT</i>	volumes finitos	20300	1,57
<i>FLOW-3D</i>	diferenças finitas	15800	1,77
<i>NISA/3D</i>	elementos finitos	3600	1,34
<i>CFDS</i>	volumes finitos	3400	0,04

A simples apresentação de resultados em gráficos visando comparar o desempenho de modelos numéricos diferentes, sem as suas respectivas incertezas, pode levar a conclusões equivocadas. Por exemplo: Hayase *et al.* (1992) mostram a ótima concordância visual (gráfica) entre os seus resultados obtidos com malha 80x80 e os resultados de Ghia *et al.* (1982) com malha 257x257. A relação do número total de volumes de controle entre estas duas malhas é de 1 para 10, aproximadamente. No entanto, os erros ou as incertezas dos resultados destes dois trabalhos, que não foram apresentadas, revelariam que a solução de Ghia *et al.* (1982) tem incerteza muito menor, portanto, sua qualidade ou confiabilidade é muito maior. Esse tipo de problema é comum quando se usam soluções de referência (*benchmark*) em comparações, principalmente se as incertezas destes resultados não são conhecidas, que é o caso habitual. A Fig. 1.4 ilustra essa questão. Nela estão representadas as soluções numéricas da equação de Poisson unidimensional obtidas com o método de diferenças finitas para 10 e 100 nós. O erro numérico máximo ocorre em $x = 1/2$. Graficamente as duas soluções podem ser consideradas como tendo ótima concordância, como é comum se mencionar na literatura. Entretanto, a razão entre o erro das soluções com 10 e 100 pontos, em $x = 1/2$, é igual a 100. Quanto mais refinada é a malha, o que é comum nas soluções de referência (*benchmark*), maior é esta razão entre o erro de uma solução numérica em comparação e a solução de referência. Assim, as comparações gráficas devem ser evitadas. O que se deve fazer é comparar valores de estimativas de erro.

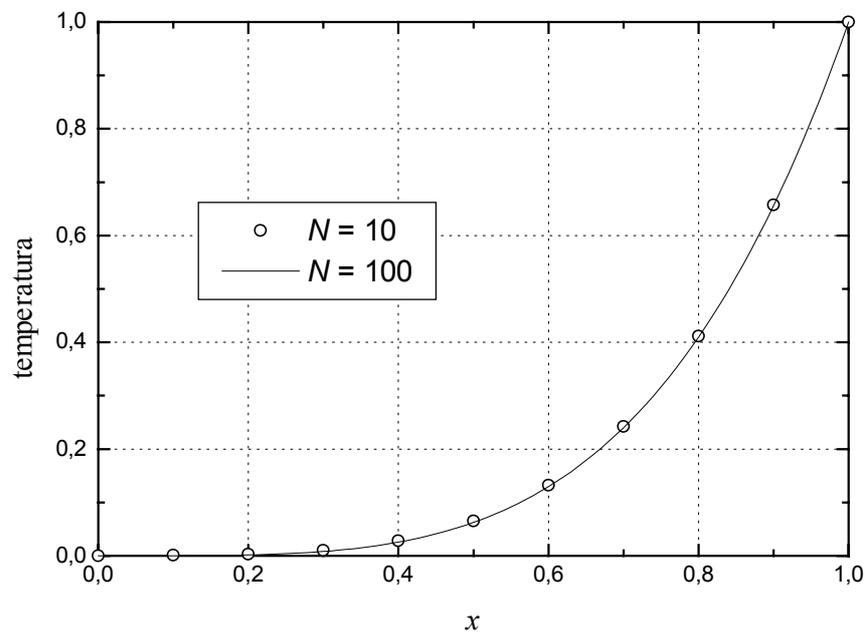


Figura 1.4 Solução numérica da equação de Poisson unidimensional.

O problema do escoamento supersônico sobre uma cunha (Settles *et al.*, 1976; Settles e Dodson, 1994), usado na validação de modelos de turbulência, exemplifica dois procedimentos não recomendados mas comuns na literatura: extrair conclusões sobre o desempenho de novos modelos matemáticos e ajustar seus parâmetros a partir de soluções numéricas obtidas com uma malha única. Esses procedimentos foram seguidos por Baldwin e Lomax (1978) ao proporem seu modelo de turbulência algébrico, e não estão restritos apenas à década de 70, como se pode ver nos artigos de Visbal e Knight (1984) e Bui (1993). Sem quantificar as incertezas das soluções numéricas não é possível validar modelos matemáticos com a acurácia e a confiabilidade exigidas.

Gresho *et al.* (1993) relatam a controvérsia ocorrida no início da década de 90 sobre o problema do escoamento bidimensional num duto com ressalto a montante. Alguns autores, baseados em suas soluções numéricas, afirmavam que para número de Reynolds 800 o escoamento era transiente, enquanto outros autores, também com base em soluções numéricas, afirmavam que era permanente. Para eliminar a controvérsia, um grupo de pesquisadores resolveu o problema empregando três métodos numéricos diferentes e com refino de malha até

1920x128 (Gresho *et al.*, 1993). Concluíram que o escoamento é permanente em Reynolds 800. Estes mesmos pesquisadores recomendaram às revistas técnicas e seus revisores para terem mais cuidado com demonstrações de acurácia e convergência de soluções numéricas, principalmente quando novos fenômenos de mecânica dos fluidos são propostos ou explicados.

Nas próximas seções são apresentados os modelos matemáticos e numéricos que são usados no trabalho, os tipos de variáveis utilizados, as fontes de erro das soluções numéricas e uma classificação geral dos estimadores de erro. Estas seções descrevem os pressupostos, abordagens e limitações sob os quais o trabalho é desenvolvido.

1.3 MODELOS MATEMÁTICOS

Os modelos matemáticos que são empregados representam problemas básicos de transferência de calor e de mecânica dos fluidos. Alguns exemplos deles são

$$V \frac{d\Lambda}{dx} = S \quad (\text{advecção}) \quad (1.3)$$

$$\frac{d^2\Lambda}{dx^2} = S \quad (\text{difusão}) \quad (1.4)$$

$$Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2} \quad (\text{advecção-difusão}) \quad (1.5)$$

com condições de contorno de Dirichlet (Incropera e DeWitt, 1996) para a variável dependente (Λ), onde S é um termo fonte que pode ser uma constante ou função de x ou de Λ , V é a velocidade do fluido e Pe é o número de Peclet. Estes **modelos matemáticos são unidimensionais**, isto é, apresentam apenas uma variável independente (x). Modelos matemáticos não-lineares também são abordados.

Para que seja possível avaliar a confiabilidade e a acurácia dos estimadores de erro no cálculo da incerteza das soluções numéricas, **todos os modelos matemáticos usados têm solução analítica exata**, contínua, única e conhecida para as variáveis de interesse. Estas variáveis são definidas na seção a seguir.

1.4 VARIÁVEIS DE INTERESSE

De forma genérica, a solução analítica exata de qualquer variável de interesse é representada por Φ , e a solução numérica por ϕ . Neste trabalho, as estimativas de erro de soluções numéricas são feitas para três tipos de variáveis, conforme a Tab. 1.2, visando analisar suas influências sobre a confiabilidade e a acurácia dos estimadores de erro.

Tabela 1.2 Definição das variáveis de interesse.

tipo de variável	solução analítica (Φ)	solução numérica (ϕ)	tipo de variável em relação à variável independente (x)	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}^i λ_{DDS-2}^i	local	secundária

O primeiro tipo é a própria **variável dependente nos modelos matemáticos**. Ela é referenciada também por variável primária. Sua solução analítica exata é representada por Λ e a solução numérica por λ . Em meteorologia, por exemplo, é de interesse conhecer o valor da temperatura em função da **variável independente (x)**.

O segundo tipo é a integral ou 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 . Em aplicações gerais, este tipo de variável está associado, por exemplo, a fluxos de massa e vazões que são calculados em função de velocidades médias numa área do domínio de cálculo.

O terceiro tipo é a **derivada da variável dependente** avaliada no contorno esquerdo do domínio, isto é, em $x = 0$. Sua solução analítica exata é representada por Λ^i e a solução numérica é obtida de duas formas diferentes, representadas por λ_{DDS}^i e 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.

As variáveis Λ_m , λ_m , Λ^i , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i também são referenciadas como variáveis secundárias por serem obtidas a partir da variável primária (Λ ou λ). As variáveis Λ , λ , Λ^i , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i também podem ser referenciadas por variáveis locais porque seus valores dependem de cada coordenada x , enquanto que Λ_m e λ_m podem ser referenciadas por variáveis globais porque seus valores correspondem ao domínio de cálculo inteiro.

1.5 MODELOS NUMÉRICOS

Simplificadamente, a obtenção de uma solução numérica pode ser dividida em quatro etapas:

- 1) **formulação do problema:** são definidos o modelo matemático, ou seja, as equações com suas condições de contorno e iniciais, a geometria do domínio de cálculo e as propriedades dos meios sólidos e fluidos envolvidos no problema;
- 2) **discretização do domínio de cálculo:** gera-se a **malha**, que consiste num conjunto de **nós (j)** sobre os quais a solução numérica é obtida; o comprimento entre dois nós consecutivos da malha (**h**) é denominado neste trabalho de **elemento da malha**; embora este conceito não seja comumente empregado no método de diferenças finitas, ele é muito adequado neste trabalho; a soma do comprimento de todos os elementos (**N**) de uma malha resulta no comprimento total do domínio de cálculo (**L**), conforme pode ser visto na Fig. 1.5;
- 3) **discretização do modelo matemático:** os termos das equações que constituem o modelo matemático e suas condições de contorno e iniciais são aproximados numericamente através de um **método numérico**, gerando um sistema de equações algébricas, também denominado de **equações discretizadas**; e
- 4) **obtenção da solução numérica:** as equações discretizadas são resolvidas com algum método direto ou iterativo (Ferziger e Peric, 1999; Maliska, 1995; Patankar, 1980) para solução de sistemas de equações.

A forma específica com que as etapas 2 a 4 são usadas para obter uma solução numérica é denominado neste trabalho de **modelo numérico**. Os modelos matemáticos considerados, por exemplo as Eqs. (1.3) a (1.5), são resolvidos com o **método de diferenças finitas** (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 1999). Basicamente, este método consiste em aproximar os termos dos modelos matemáticos com a série de Taylor (Kreyszig, 1999). Entre outras, são empregadas

as aproximações numéricas *UDS* (*Upstream Differencing Scheme*) e *CDS* (*Central Differencing Scheme*) descritas por Ferziger e Peric (1999). As equações discretizadas são resolvidas analiticamente, quando possível, ou com o método *TDMA* (*TriDiagonal Matrix Algorithm*). O domínio de cálculo é discretizado com malhas uniformes, Fig. 1.5, e não-uniformes, Fig. 15.1. Nas malhas não-uniformes, o tamanho (h) dos elementos da malha é variável, conforme será visto na Parte III deste trabalho.

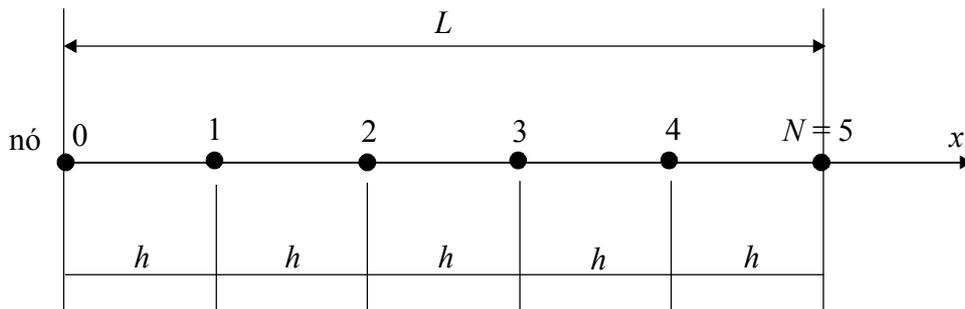


Figura 1.5 Malha unidimensional uniforme.

Para exemplificar a obtenção de uma solução numérica, considere-se a seguinte equação diferencial:

$$V \frac{d\lambda}{dx} = \frac{\lambda^2}{5} \quad (1.6)$$

Com o método de diferenças finitas e V unitário, entre várias possibilidades, das quais algumas são apresentadas no Cap. 2, uma forma de se aproximar numericamente o termo de advecção da Eq. (1.6) é usar diferença a montante (*UDS*), o que resulta em

$$\frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} = \frac{\lambda_j^2}{5} \quad (1.7)$$

onde λ é a variável dependente do problema cuja solução numérica deseja-se obter, a letra j representa qualquer nó da malha sobre o qual se aproxima a Eq. (1.6), e ' $j-1$ ' é o seu nó vizinho à

esquerda, conforme a Fig. 1.6. A Eq. (1.7) é a forma discretizada da Eq. (1.6) e representa um sistema de equações algébricas que pode ser expresso genericamente por

$$A_{j-1}\lambda_{j-1} + A_j\lambda_j + A_{j+1}\lambda_{j+1} = B_j \quad (1.8)$$

ou

$$[A][\lambda] = [B] \quad (1.9)$$

onde

$$A_{j-1} = -1, \quad A_j = 1, \quad A_{j+1} = 0, \quad B_j = \frac{\lambda_j^2}{5} h \quad (1.10)$$

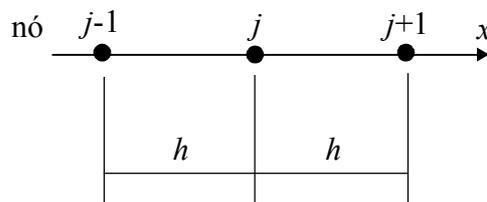


Figura 1.6 Definição dos nós genéricos de uma malha unidimensional.

Na Eq. (1.9), $[A]$ representa uma matriz tridiagonal que pode ser resolvida através do método *TDMA* (Ferziger e Peric, 1999; Maliska, 1995; Patankar, 1980). Quando os coeficientes (A) desta matriz e seus termos fontes (B) não são função da própria variável dependente (λ), a solução da Eq. (1.9) com o método *TDMA* é direta, isto é, sem iterações. Mas no caso da Eq. (1.10), onde o termo fonte (B) depende da própria variável, a solução é iterativa. Para as condições de contorno desejadas, a solução da Eq. (1.9) com o método *TDMA* resulta na solução numérica de λ sobre cada nó (j) da malha. Em termos gerais, esta solução numérica pode conter várias fontes de erro, conforme explica-se na seção a seguir.

1.6 FONTES DE ERRO DAS SOLUÇÕES NUMÉRICAS

Com base nos trabalhos de Ferziger e Peric (1999), Oberkampf e Blottner (1998), Roache (1998), AIAA (1998), Tannehill *et al.* (1997), Celik e Zhang (1995) e Demuren e Wilson (1994), o erro da solução numérica (ϕ) de uma variável de interesse, calculado conforme a definição dada na Eq. (1.1), é gerado por quatro fontes principais: erros de truncamento (ε_τ), erros de iteração (ε_n), erros de arredondamento (ε_π) e erros de programação (ε_p); que estão representados na Fig. 1.3. Simbolicamente, tem-se

$$E(\phi) = E(\varepsilon_\tau, \varepsilon_n, \varepsilon_\pi, \varepsilon_p) \quad (1.11)$$

onde a variável de interesse (ϕ) pode ser qualquer uma daquelas mostradas na Tab. 1.2, ou seja, local ou global, primária ou secundária. Genericamente, essas quatro fontes de erro podem ter magnitudes e sinais diferentes. Conseqüentemente, podem haver cancelamentos parciais ou totais entre esses erros. A definição, o efeito e a origem de cada uma destas quatro fontes de erro são explicados a seguir de forma isolada, isto é, o erro da solução numérica (E) em cada exemplo depende apenas de uma fonte de erro (ε).

1.6.1 Erros de Truncamento

Tannehill *et al.* (1997), Ferziger e Peric (1999) e Roache (1998) são exemplos de trabalhos que discutem sobre erros de truncamento e de discretização. O erro de truncamento (ε_τ) de uma equação diferencial é o resíduo que resulta quando se substitui a solução analítica exata da variável dependente (Λ) na equação discretizada do modelo matemático. Formalmente, ele é igual ao valor negativo do operador numérico aplicado à solução analítica exata da variável dependente (Λ), de acordo com Tannehill *et al.* (1997) e Ferziger e Peric (1999). Esta definição é demonstrada a seguir com base no exemplo da seção 1.5.

Define-se o **operador diferencial (D)** como um ente que representa as operações matemáticas envolvidas numa equação diferencial escrita em forma implícita (Kreyszig, 1999). Portanto, o operador diferencial (D) da Eq. (1.6) aplicado sobre a solução analítica exata da variável dependente (Λ) resulta em

$$D(\Lambda) = V \frac{d\Lambda}{dx} - \frac{\Lambda^2}{5} = 0 \quad (1.12)$$

Define-se o **operador numérico (d)** como um ente que representa as operações matemáticas envolvidas numa equação discretizada escrita em forma implícita (Kreyszig, 1999). Portanto, o operador numérico (d) da Eq. (1.7) aplicado sobre a solução numérica da variável dependente (λ) resulta em

$$d(\lambda) = \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} - \frac{\lambda_j^2}{5} = 0 \quad (1.13)$$

Em outras palavras, os operadores diferencial e numérico aplicados à solução analítica (Λ) e à solução numérica (λ), respectivamente, resultam em zero porque eles representam as equações que são resolvidas analiticamente e numericamente, isto é, as Eqs. (1.6) e (1.7). Portanto, nos casos gerais em que as soluções analítica e numérica são diferentes, a aplicação do operador numérico (d) sobre a solução analítica exata da variável dependente (Λ) resulta num valor diferente de zero, ou seja, com Λ substituindo λ na Eq. (1.13), obtém-se

$$d(\Lambda) = \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h} - \frac{\Lambda_j^2}{5} \neq 0 \quad (1.14)$$

onde o resíduo da Eq. (1.14) é denominado erro de truncamento da equação diferencial. De forma mais genérica, tem-se

$$D(\Lambda) = d(\Lambda) + \varepsilon_\tau = 0 \quad (1.15)$$

e, finalmente,

$$\varepsilon_\tau = -d(\Lambda) \quad (1.16)$$

concluindo a demonstração.

Conhecendo-se a solução analítica exata da variável dependente (Λ), o valor do erro de truncamento pode ser obtido de duas formas. A primeira é aplicar diretamente a Eq. (1.16), ou a Eq. (1.14), no caso do exemplo usado. A segunda forma é substituir a variável dependente (Λ) em termos da série de Taylor (Kreyszig, 1999) para os nós que estão envolvidos na equação discretizada, exceto para o próprio nó j . Com isso, e para o tamanho (h) dos elementos da malha tendendo a zero, isto é, $h \rightarrow 0$, obtém-se

$$\varepsilon_\tau = ch^p \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (1.17)$$

onde c é um coeficiente cujo valor é admitido ser constante e p é a **ordem do erro de truncamento**. Esta segunda forma de cálculo do erro de truncamento permite analisar qual é a sua sensibilidade ao tamanho (h) dos elementos da malha e ao tipo de aproximação numérica empregada, que caracteriza o coeficiente c e a ordem p .

Para ilustrar o efeito do erro de truncamento (ε_τ) sobre o erro da solução numérica (E), considere-se o seguinte modelo matemático:

$$\frac{d^2\Lambda}{dx^2} = 12x^2 \quad (1.18)$$

com as condições de contorno $\Lambda(0) = 0$ e $\Lambda(1) = 1$. Sua solução analítica exata é $\Lambda = x^4$. Portanto, $\Lambda(1/2) = 1/16$. Empregando-se malha uniforme, o método de diferenças finitas e diferença central na aproximação numérica da derivada de 2ª ordem, a única fonte de erro sobre a solução numérica da Eq. (1.18) é devido ao erro de truncamento. Nesse caso, conforme ilustrado na Fig. 1.3, o erro da solução numérica recebe uma denominação especial: erro de discretização. Na Parte II deste trabalho é demonstrado que o erro de truncamento da Eq. (1.18), em sua forma discretizada, é

$$\varepsilon_\tau = -2h^2 \quad (1.19)$$

enquanto que o erro de discretização (E) da solução numérica (λ), em qualquer nó (j) é

$$E(\lambda_j) = x_j(x_j - L)h^2 \quad (1.20)$$

Para $L = 1$ e $x = 1/2$, a Eq. (1.20) se reduz a

$$E(\lambda_{x=1/2}) = -\frac{h^2}{4} \quad (1.21)$$

Devido ao fato do expoente de h , na Eq. (1.19), ser igual a dois, é dito que o erro de truncamento é de 2ª ordem, ou que o modelo numérico empregado é de 2ª ordem. Conforme a Eq. (1.20), pode-se dizer também que o erro de discretização da variável dependente é de 2ª ordem.

A função dada na Eq. (1.21) é representada graficamente na Fig. 1.7. Observa-se que quanto menor é o tamanho (h) dos elementos da malha, o que equivale a aumentar o número de nós da malha, menor é o erro de discretização. No limite inatingível de uma malha com um número infinito de nós, ou seja, com $h = 0$, seria obtida a solução analítica da Eq. (1.18).

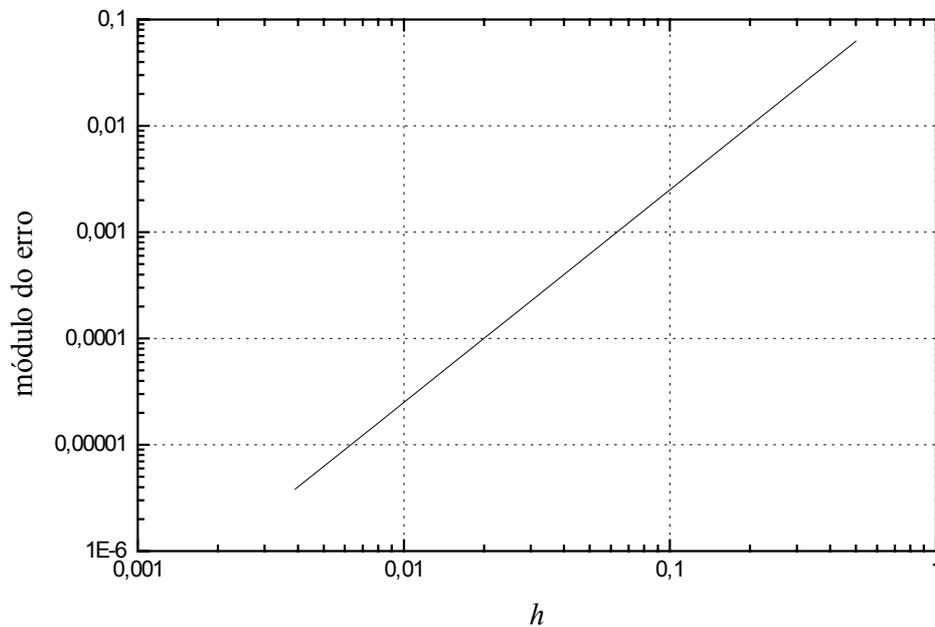


Figura 1.7 Erro da solução numérica da Eq. (1.18), em $x = 1/2$, causado pelos erros de truncamento.

1.6.2 Erros de Iteração

Ferziger e Peric (1999), Roache (1998), Kim *et al.* (1998) e Demuren e Wilson (1994) são exemplos de trabalhos que discutem sobre erros de iteração. De acordo com Ferziger e Peric (1999), o erro de iteração (ε_n) é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica (λ) em uma determinada iteração. As equações discretizadas resultam da aplicação de um modelo numérico sobre um modelo matemático, conforme já visto na seção 1.5. Matematicamente, tem-se

$$\varepsilon_n(\lambda_j) = \lambda_{j,k \rightarrow \infty} - \lambda_{j,k} \quad (1.22)$$

onde k representa o número da iteração corrente no processo de solução do sistema de equações algébricas, gerado pelas equações discretizadas do modelo matemático. O símbolo ' $k \rightarrow \infty$ ' é usado para representar a solução exata das equações discretizadas. Entre outros, alguns fatores que geram erros de iteração são:

- 1) o emprego de métodos iterativos para resolver as equações discretizadas, ou o sistema de equações algébricas;
- 2) o uso de métodos segregados na obtenção da solução de modelos matemáticos constituídos por mais de uma equação diferencial;
- 3) a existência de não-linearidades no modelo matemático; e
- 4) a utilização de métodos *multigrid* na solução do sistema de equações algébricas.

Problemas muito simples, como aquele exemplificado na Eq. (1.18), não apresentam erros de iteração porque a solução do sistema de equações algébricas pode ser obtida diretamente pelo método *TDMA* e a equação diferencial é linear. Contudo, em *CFD*, isso é uma exceção pois o comum é a existência de modelos matemáticos constituídos por sistemas de equações não-lineares acoplados, como as equações de Navier-Stokes. Portanto, em geral, existem erros de iteração nas soluções numéricas.

Para exemplificar o efeito dos erros de iteração sobre o erro da solução numérica, considere-se o modelo matemático dado pela Eq. (1.6) e sua forma discretizada, Eq. (1.7). Para o caso de $\lambda_{j-1} = \frac{6}{5}$ ser a condição de contorno e $h = 1$, a Eq. (1.7) resulta em

$$\lambda_j = \frac{(6 + \lambda_j^2)}{5} \quad (1.23)$$

Nesta equação, λ_j depende de si mesmo, o que resulta numa solução numérica iterativa. A solução de λ_j pode ser obtida estimando-se um valor inicial para a sua solução e resolvendo-se a Eq. (1.23) até que seja atingido um número desejado de iterações k ou uma tolerância especificada. A Eq. (1.23) pode ser posta na seguinte forma

$$\lambda_{j,k} = \frac{(6 + \lambda_{j,k-1}^2)}{5} \quad (1.24)$$

onde k representa o número da iteração atual e ' $k-1$ ', a iteração anterior. Com a estimativa inicial $\lambda_{j,0} = 0$, obtém-se a solução de $\lambda_{j,k}$ ao longo das iterações cuja curva de erro é mostrada na Fig. 1.8. Este exemplo mostra a característica principal dos erros iterativos: em geral, seu valor diminui com o aumento do número de iterações. No limite de um número infinito de iterações, é atingida a solução exata do sistema de equações algébricas, que neste exemplo é dois.

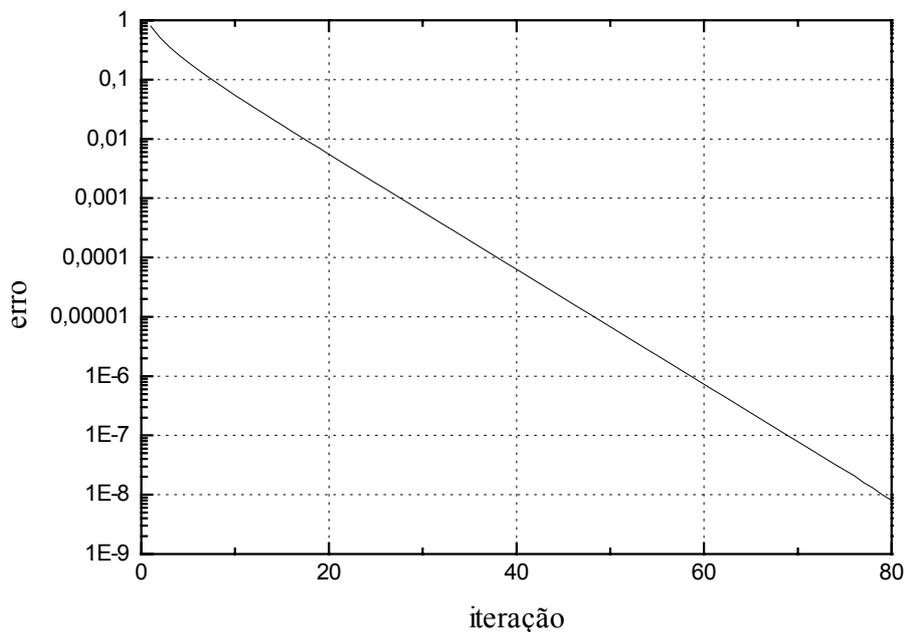


Figura 1.8 Erro da solução numérica da Eq. (1.6), em $x = 1$, causado pelos erros de iteração.

1.6.3 Erros de Arredondamento

Dorn e McCracken (1981) e Hamming (1973) são exemplos de trabalhos que discutem sobre erros de arredondamento. Os erros de arredondamento (ε_π) são os erros que ocorrem principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações. Eles dependem do compilador (*software*) usado para gerar o código computacional e do computador (*hardware*) empregado em sua execução. Estão relacionados ao número de algarismos (*bytes*) usados para representar as variáveis nos computadores e ao número de termos empregados no cálculo de séries infinitas de funções pré-definidas da linguagem de programação. Na linguagem Fortran90, por exemplo, pode-se usar precisão simples com quatro *bytes*, precisão dupla com oito *bytes* ou precisão quádrupla com 16 *bytes* por variável do tipo real. Quanto maior é a precisão usada para representar as variáveis, menores são os erros de arredondamento; entretanto, maior é a memória computacional necessária para o armazenamento destas variáveis. Dorn e McCracken (1981) exemplificam diversos tipos de erros de arredondamento e como minimizá-los ou evitá-los quando possível. Os erros de arredondamento também podem ocorrer na entrada de dados para a execução de um programa computacional, via arquivos ou caixas de diálogo, devido ao emprego de formatos incompatíveis com a precisão usada.

Para ilustrar o efeito dos erros de arredondamento sobre o erro da solução numérica, considere-se o modelo matemático dado por

$$\frac{d^2\Lambda}{dx^2} = 0 \quad (1.25)$$

Para o método de diferenças finitas, com o uso de diferença central na aproximação da derivada de 2ª ordem numa malha uniforme, não existem erros de truncamento nem de iteração na solução da Eq. (1.25). Portanto, em princípio, a solução numérica deveria ser igual à analítica. Porém, como se pode ver na Fig. 1.9, isso não se verifica devido à existência dos erros de arredondamento, que, de forma geral, aumentam com o número de operações envolvidas na computação da solução numérica. Isso significa, simplificadamente, que ε_π aumenta com a diminuição de h , conforme se pode ver na Fig. 1.9. Esse é o comportamento inverso dos erros de truncamento (Fig. 1.7). O erro mostrado na Fig. 1.9 é para a solução numérica da Eq. (1.25) em $x = \frac{1}{2}$, obtida com precisão dupla e com as condições de contorno $\Lambda(0) = 0$ e $\Lambda(1) = 1$. A solução analítica é $\Lambda(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}$.

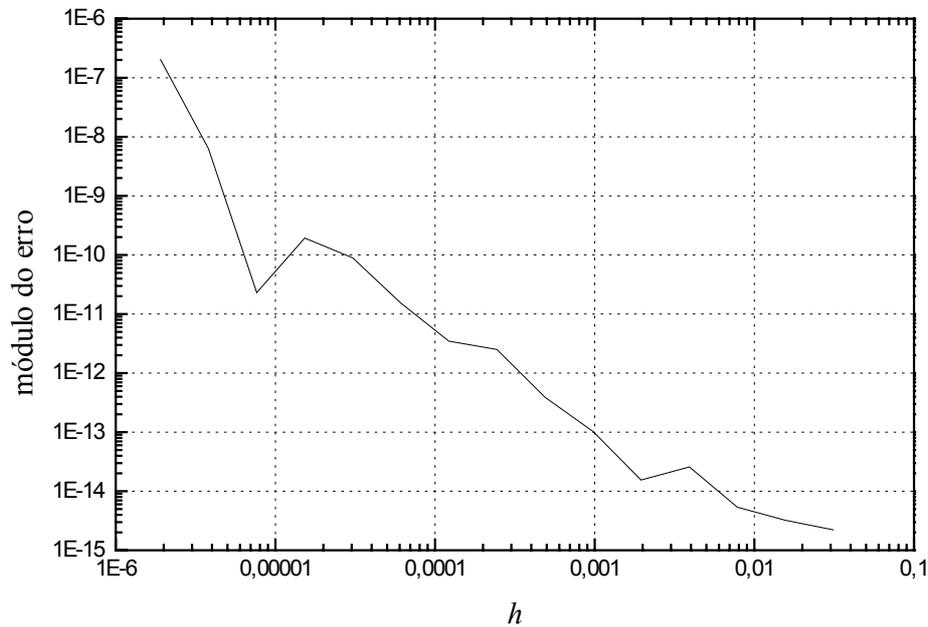


Figura 1.9 Erro da solução numérica da Eq. (1.25), em $x = \frac{1}{2}$, causado pelos erros de arredondamento.

Conforme visto acima, os erros de truncamento se reduzem com a diminuição de h e os erros de arredondamento aumentam com a redução de h . Assim, para um caso geral em que se realiza um número de iterações suficiente para tornar os erros de iteração (ε_n) muito pequenos, existe uma malha ótima com $h \neq 0$ em que o erro da solução numérica é mínimo.

1.6.4 Erros de Programação

Shih (1985), Maliska (1995) e Roache (1998) são exemplos de trabalhos que apresentam procedimentos para se detectar erros de programação. Na categoria de erros de programação (ε_p) incluem-se basicamente (Roache, 1998):

- 1) os erros resultantes do uso incorreto de um modelo numérico na aproximação de um modelo matemático;
- 2) os erros gerados na implementação do modelo numérico num programa computacional;
- 3) os erros cometidos no uso do programa computacional durante a obtenção da solução numérica; e
- 4) qualquer outra eventual fonte de erro.

1.6.5 Erros de Discretização

Ao longo deste trabalho é presumido que não existem erros de programação porque os problemas são muito simples, isto é, equações unidimensionais não-acopladas. Portanto, os programas implementados para resolvê-los são curtos, minimizando as chances de haver erros de programação. Além disso, para cada modelo numérico implementado neste trabalho, sempre foram obtidas curvas de erro do tipo da Fig. 1.7 para comprovar que o erro numérico tendia a zero com a redução de h até o nível dos erros de arredondamento. Os erros de arredondamento são controlados ao se empregar a precisão adequada na obtenção das soluções numéricas, isto é, eles são muito menores do que os erros de truncamento. Os erros de iteração, quando existem, são minimizados ao se realizar um grande número de iterações.

O interesse central deste trabalho é estimar erros de soluções numéricas causados pelos erros de truncamento, conforme representado na Fig. 1.3. Neste caso, quando o erro (E) da solução numérica é gerado apenas por erros de truncamento, ele é denominado de erro de discretização (Ferziger e Peric, 1999). As formas de se estimar o erro de discretização (E) são introduzidas na seção a seguir.

1.7 TIPOS DE ESTIMATIVA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

As estimativas do erro de discretização, gerado por erros de truncamento, podem ser divididas em dois tipos básicos (Szabó e Babuska, 1991): estimativas *a priori* ou *a posteriori* da obtenção da solução numérica.

1.7.1 Estimativas de Erro *a Priori*

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 (ε_τ) do modelo matemático do problema através da série de Taylor, conforme explicado na seção 1.6.1, e admitindo-se que o erro de discretização (E) tenha a mesma forma funcional quando o tamanho (h) dos elementos da malha tende a zero. Portanto, a partir da Eq. (1.17), tem-se

$$E = Ch^p \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (1.26)$$

onde C é um coeficiente cujo valor é admitido ser constante mas desconhecido e p é a **ordem do erro de discretização**, que é um valor conhecido. Tanto C quanto p dependem das aproximações

numéricas empregadas. A partir da Eq. (1.26), isto é, com uma estimativa de erro *a priori*, 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 . Também é possível avaliar qual é o efeito da redução do tamanho (h) dos elementos da malha sobre o erro de discretização (E) da solução numérica. Por exemplo, para $p = 2$, a redução de h à metade reduz o erro a $\frac{1}{4}$ do valor anterior. Portanto, as estimativas de erro *a priori* proporcionam uma análise qualitativa do erro de discretização.

1.7.2 Estimativas de Erro *a Posteriori*

As estimativas de erro *a posteriori* são usadas para estimar efetivamente a magnitude do erro de discretização. Com este fim, existem vários métodos que podem ser empregados. Com base na revisão bibliográfica efetuada, verificou-se que eles podem ser divididos em dois grandes conjuntos. No primeiro, as estimativas de erro são baseadas na solução numérica obtida sobre uma única malha. O método de elementos finitos, em geral, se enquadra neste conjunto, conforme se pode ver nos trabalhos de Zhu e Zienkiewicz (1990), Ainsworth e Oden (1997) e Babuska *et al.* (1997). No segundo conjunto, as estimativas de erro são baseadas em soluções numéricas obtidas em duas ou mais malhas diferentes, isto é, com valores de h distintos entre elas. As estimativas de erro realizadas para as soluções numéricas obtidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos, comumente, se encaixam neste segundo conjunto. Exemplos pertinentes são os trabalhos de Blottner (1990) e Hortmann *et al.* (1990).

No presente trabalho, as estimativas de erro *a posteriori* são feitas com base em soluções numéricas obtidas em várias malhas. Também são realizadas estimativas de erro *a priori*. Ambos os tipos de estimativa de erro são abordados visando os objetivos descritos na seção a seguir.

1.8 OBJETIVOS DO TRABALHO

O objetivo geral deste trabalho é contribuir para que as estimativas do erro de discretização das soluções numéricas se tornem mais confiáveis e acuradas. Considerando-se isso e a delimitação do trabalho descrita nas seções 1.3 a 1.7, os objetivos específicos se concentram em quatro linhas principais:

1) Estimativas de Erro *a Priori*

Realizar estimativas de erro *a priori* para diversos tipos de aproximações numéricas em malhas uniformes e não-uniformes. Para modelos matemáticos com termos de advecção e difusão, demonstrar por que são relatadas diferenças entre a ordem do erro de discretização, prevista *a priori* (teórica), e a ordem verificada *a posteriori* (prática), de soluções numéricas obtidas em malhas não-uniformes.

2) Estimativas de Erro *a Posteriori*

Para soluções numéricas obtidas em malhas uniformes e não-uniformes, analisar a confiabilidade, a acurácia e as limitações de três estimadores de erro *a posteriori* empregados com o método de diferenças finitas: estimadores delta, de Richardson e *GCI*; bem como para os estimadores do tipo multicoeficiente, que são introduzidos neste trabalho.

3) Intervalo Convergente

Introduzir o conceito de intervalo convergente para a ordem do erro de discretização. Para este intervalo, propor um novo estimador de erro, analisar o comportamento dos estimadores de erro *a posteriori* e mostrar que é possível calcular dois valores de incerteza que se constituem em limites inferior e superior do erro de discretização.

4) Erros de Truncamento *Versus* Erros de Discretização

Analisar a correspondência entre a expressão do erro de truncamento de uma equação diferencial e a expressão do erro de discretização da variável dependente, bem como a relação entre as ordens destes erros.

1.9 DELINEAMENTO DO TRABALHO

Este documento está dividido em três partes constituídas por diversos capítulos, conforme descreve-se a seguir.

Parte I: Erro de Aproximações Numéricas Obtidas com Soluções Analíticas Nodais

A Parte I envolve os capítulos 2 a 6. Nela, a variável dependente é dada por funções analíticas conhecidas, isto é, ela não é proveniente de soluções numéricas e, portanto, não apresenta erros de discretização. Essa simplificação facilita e é suficiente para apresentar os

conceitos básicos e a nomenclatura empregados no trabalho. São deduzidas as aproximações numéricas usadas neste trabalho e seus erros de truncamento. São apresentados alguns estimadores do erro de discretização disponíveis na literatura: estimadores delta, de Richardson e *GCI*. São definidos vários tipos de ordens do erro: ordens assintótica, verdadeiras, efetiva e aparente. Também são definidos os intervalos de convergência da ordem aparente, as envolventes da solução analítica e do erro, e a solução numérica convergente e sua incerteza. Finalmente, analisa-se o desempenho dos estimadores de erro no intervalo convergente.

Parte II: Erro de Soluções Numéricas em Malhas Uniformes

A situação prática, na qual as aproximações numéricas são calculadas com valores nodais obtidos das próprias soluções numéricas e, portanto, com erros, é examinada na Parte II, que envolve os capítulos 7 a 13. Inicialmente, são reescritas as seis aproximações numéricas apresentadas na Parte I. Em seguida são analisados os erros das soluções numéricas de diversos modelos matemáticos. Estes modelos incluem problemas lineares e não-lineares de advecção, difusão e advecção-difusão de um escalar.

Parte III: Erro de Soluções Numéricas em Malhas Não-Uniformes

As análises feitas na Parte II para malhas uniformes são generalizadas para malhas não-uniformes na Parte III, que envolve os capítulos 14 a 20. Inicialmente, são reescritas, para malhas não-uniformes, as seis aproximações numéricas apresentadas na Parte II. Em seguida são definidos alguns tipos de refino de malhas não-uniformes. Finalmente, são analisados os erros das soluções numéricas de diversos modelos matemáticos que incluem problemas lineares e não-lineares de advecção, difusão e advecção-difusão de um escalar. Também é definido o conceito de soluções numéricas coerentes, são apresentados o procedimento para verificar quando duas soluções numéricas atendem a este conceito e exemplos de aplicação deste procedimento. O objetivo é aumentar a confiabilidade das estimativas de erro, principalmente em malhas muito grossas.

1.10 RESUMO DO CAPÍTULO 1

Conforme foi visto, o problema tratado neste trabalho é a estimativa do erro de discretização de soluções numéricas em dinâmica dos fluidos. Foi descrito o contexto dentro do qual ele é resolvido, bem como a sua motivação. Foram apresentadas as expressões e definidos

os conceitos de erro (E), Eq. (1.1), e de incerteza (U) de uma solução numérica, Eq. (1.2). Foram apresentados os modelos matemáticos que são usados no trabalho, que incluem problemas lineares, Eqs. (1.3) a (1.5), e não-lineares de advecção, difusão e advecção-difusão de um escalar.

Mostrou-se que, neste trabalho, as estimativas de erro das soluções numéricas são feitas para três tipos de variáveis (Tab. 1.2), visando analisar suas influências sobre a confiabilidade e a acurácia dos estimadores de erro. São elas: a própria variável dependente nos modelos matemáticos, a média da variável dependente sobre o domínio de cálculo e a derivada da variável dependente avaliada no contorno esquerdo do domínio, isto é, em $x = 0$. De forma genérica, neste trabalho, a solução analítica exata de qualquer variável de interesse é representada por Φ e a solução numérica, obtida através do método de diferenças finitas, por ϕ .

Através de um exemplo, foram apresentadas as etapas envolvidas na obtenção de uma solução numérica: formulação do problema, discretização do domínio de cálculo, discretização do modelo matemático e obtenção da solução numérica. Foram definidas e exemplificadas as quatro fontes principais do erro da solução numérica de uma variável de interesse: erros de truncamento (ε_τ), erros de iteração (ε_n), erros de arredondamento (ε_r) e erros de programação (ε_p). Conforme foi visto, neste trabalho, o interesse se concentra em problemas nos quais o erro de truncamento é a fonte principal ou a única fonte que gera o erro (E) da solução numérica, que neste caso passa a ser denominado de erro de discretização (E). Foram divididas as estimativas do erro de discretização, gerado por erros de truncamento, em dois tipos básicos: estimativas *a priori* e *a posteriori* da obtenção da solução numérica.

Foram apresentadas as quatro linhas principais que compõem os objetivos deste trabalho: estimativas de erro *a priori*, estimativas de erro *a posteriori*, intervalo convergente da ordem do erro de discretização e a correspondência entre as expressões dos erros de truncamento e dos erros de discretização das soluções numéricas. Finalmente, apresentou-se o delineamento deste documento que está dividido em vários capítulos que compõem três partes: parte I, erro de aproximações numéricas obtidas com soluções analíticas nodais; parte II, erro de soluções numéricas em malhas uniformes; e parte III, erro de soluções numéricas em malhas não-uniformes.

Parte I.

**ERRO DE APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS OBTIDAS
COM SOLUÇÕES ANALÍTICAS NODAIS**

A Parte I deste trabalho envolve os capítulos 2 a 6. Nela, os valores da variável dependente nos nós da malha, que discretiza o domínio de cálculo, são provenientes de funções analíticas conhecidas, isto é, eles não são oriundos de soluções numéricas. Esta simplificação facilita e é suficiente para a apresentação dos conceitos básicos e da nomenclatura empregados neste trabalho. Também são apresentados o procedimento usado para o cálculo do erro de truncamento e vários tipos de estimadores do erro de discretização.

**APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS E SEUS ERROS DE TRUNCAMENTO
COM SOLUÇÃO ANALÍTICA NODAL**

A solução dos modelos matemáticos de interesse, citados na seção 1.3, é obtida através da aproximação numérica de cada um de seus termos. Algumas formas de realizar estas aproximações e as expressões genéricas de seus erros de truncamento são apresentadas nesse capítulo. Para tanto, considera-se que os valores nodais usados nestas aproximações numéricas são obtidos de soluções analíticas, isto é, o erro nos nós é nulo. Também são apresentados exemplos de cálculo dos erros de truncamento e são definidos os conceitos de suas ordens verdadeiras e assintótica.

A Tab. 2.1 relaciona os três tipos de variáveis para os quais são apresentados seis tipos de aproximações numéricas usados neste trabalho e os símbolos utilizados para referenciar suas soluções analíticas (Φ) e numéricas (ϕ). A primeira variável é a **derivada de primeira ordem da variável dependente**. Sua solução analítica é referenciada pelo símbolo Λ^i . As aproximações numéricas são feitas de quatro formas diferentes e referenciadas pelos símbolos λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i . A segunda variável é a **derivada de segunda ordem da variável dependente**. Sua solução analítica é referenciada pelo símbolo Λ^{ii} e a aproximação numérica por λ_{CDS}^{ii} . A terceira variável é a **média da variável dependente** ao longo do domínio de cálculo inteiro. Sua solução analítica é referenciada pelo símbolo Λ_m e a aproximação numérica por λ_m .

Por analogia à definição do erro de truncamento de uma equação diferencial, apresentada na seção 1.6.1, pode-se definir o erro de truncamento (ε) de uma variável (ϕ) qualquer pela diferença entre o seu valor exato (Φ) e o seu valor aproximado numericamente (ϕ), isto é,

$$\varepsilon(\phi) = \Phi - \phi \tag{2.1}$$

Neste caso, quando se tem apenas uma aproximação numérica, o erro de discretização coincide com o erro de truncamento. Conhecendo-se a solução analítica exata da variável (Φ) e o seu valor aproximado (ϕ), o valor do erro de truncamento pode ser obtido de duas formas. A primeira é aplicar diretamente a Eq. (2.1) e obter um valor numérico para ε . A segunda forma é substituir na Eq. (2.1) a expressão exata da variável (Φ), obtida da série de Taylor, e a expressão usada na aproximação numérica (ϕ). Neste caso, obtém-se uma expressão genérica para o erro de truncamento em função de coeficientes que multiplicam potências do tamanho (h) dos elementos da malha. Estes expoentes de h estão ligados aos conceitos de ordens verdadeiras e assintótica do erro de truncamento, definidos na seção a seguir.

2.1 ORDENS VERDADEIRAS E ASSINTÓTICA DO ERRO DE TRUNCAMENTO

Conforme será visto neste capítulo, o erro de truncamento (ε) de uma equação diferencial ou de uma aproximação numérica qualquer pode ser representado genericamente por (Ferziger e Peric, 1999)

$$\varepsilon(\phi) = c_1 h^{p_L} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + c_4 h^{p_4} + \dots \quad (2.2)$$

onde os coeficientes c_i podem ser positivos ou negativos e podem ser função da variável dependente (Λ) e de suas derivadas, isto é, podem variar com a coordenada x , mas independem do tamanho (h) dos elementos da malha. Neste trabalho, a Eq. (2.2) é denominada de **equação geral do erro de truncamento**.

Por definição, as **ordens verdadeiras (p_L)** são os expoentes de h dos termos não-nulos na equação do erro de truncamento. No caso da Eq. (2.2) são dados por p_L, p_2, p_3 e p_4 . As ordens verdadeiras seguem a relação $p_L < p_2 < p_3 < p_4 < \dots$. São números inteiros positivos que geralmente constituem uma série aritmética, isto é, a diferença entre ordens subsequentes é constante. Para um caso geral, o número de ordens verdadeiras é infinito pois o erro de truncamento (ε) é constituído por uma quantidade infinita de termos não-nulos.

Por definição, o menor expoente de h na equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), é chamado de **ordem assintótica (p_L)**. É um número inteiro positivo e satisfaz a condição $p_L \geq 1$. Quando o tamanho (h) dos elementos da malha tende a zero, ou seja, $h \rightarrow 0$, o primeiro termo do

erro de truncamento é o principal componente, isto é, ele domina o valor total de ε . Neste caso, em gráficos logarítmicos de ε versus h , como aqueles apresentados na seção 2.9, a inclinação em relação ao eixo das abscissas da curva de ε para $h \rightarrow 0$ tende ao valor da ordem assintótica. Quanto maior é esta inclinação, maior é o valor da ordem assintótica e, conseqüentemente, maior é a taxa de redução de ε com a diminuição de h . Isso ficará mais claro no Cap. 4 onde são definidas e deduzidas a ordem efetiva do erro de discretização e a ordem aparente da incerteza.

Tabela 2.1 Definição das aproximações numéricas usadas no trabalho.

tipo de variável	solução analítica (Φ)	solução numérica (ϕ)	tipo de aproximação numérica
derivada de 1ª ordem da variável dependente	Λ^i	λ_{UDS}^i	um ponto a montante
		λ_{CDS}^i	diferença central
		λ_{DDS}^i	um ponto a jusante
		λ_{DDS-2}^i	dois pontos a jusante
derivada de 2ª ordem da variável dependente	Λ^{ii}	λ_{CDS}^{ii}	diferença central
média da variável dependente	Λ_m	λ_m	regra do trapézio

Na Parte II deste trabalho são mostrados exemplos de erros de truncamento de equações diferenciais que correspondem à forma genérica dada na Eq. (2.2). Já para as aproximações numéricas da Tab. 2.1, suas expressões gerais para ε são apresentadas nas seções 2.3 a 2.8 e exemplificadas na seção 2.9. Antes, porém, apresenta-se na próxima seção a definição da série de Taylor.

2.2 SÉRIE DE TAYLOR

Tanto as aproximações numéricas quanto seus erros de truncamento podem ser obtidos a partir da série de Taylor, que é uma série infinita e definida genericamente por (Kreyszig, 1999; Fortuna, 2000)

$$\Lambda_x = \Lambda_j + \Lambda_j^i(x-x_j) + \Lambda_j^{ii}\frac{(x-x_j)^2}{2!} + \dots + \Lambda_j^M\frac{(x-x_j)^M}{M!} \quad (2.3)$$

onde Λ é a variável dependente nos modelos matemáticos, Λ_x é o valor analítico exato obtido em qualquer coordenada x com a expansão da série de Taylor a partir do nó j , onde são conhecidos os valores analíticos exatos de Λ_j e suas derivadas ($\Lambda_j^i, \Lambda_j^{ii}, \dots, \Lambda_j^M$). A Eq. (2.3) é válida se Λ é uma função contínua de x no intervalo fechado $[x_0, x_L]$ e possui derivadas contínuas até a ordem M neste mesmo intervalo.

Expandindo-se a série de Taylor, Eq. (2.3), para os nós ' $j-1$ ', ' $j+1$ ' e ' $j+2$ ' da malha uniforme mostrada na Fig. 2.1, obtém-se

$$\Lambda_{j-1} = \Lambda_j - \Lambda_j^i h + \Lambda_j^{ii}\frac{h^2}{2} - \Lambda_j^{iii}\frac{h^3}{6} + \dots \quad (2.4)$$

$$\Lambda_{j+1} = \Lambda_j + \Lambda_j^i h + \Lambda_j^{ii}\frac{h^2}{2} + \Lambda_j^{iii}\frac{h^3}{6} + \dots \quad (2.5)$$

$$\Lambda_{j+2} = \Lambda_j + \Lambda_j^i 2h + \Lambda_j^{ii} 2h^2 + \Lambda_j^{iii} \frac{4}{3} h^3 + \dots \quad (2.6)$$

onde j é o nó genérico sobre o qual se realizam as aproximações numéricas; os três pontos indicam uma série infinita; e h é a distância entre dois nós consecutivos numa malha uniforme, também denominado de tamanho dos elementos da malha, sendo definido por

$$h = x_j - x_{j-1} \quad (2.7)$$

Nas próximas seções são deduzidas as aproximações numéricas para as variáveis da Tab. 2.1 e seus respectivos erros de truncamento. Aproximações para estas mesmas variáveis e outras são dadas por Fletcher (1997), Ferziger e Peric (1999) e Tannehill *et al.* (1997).

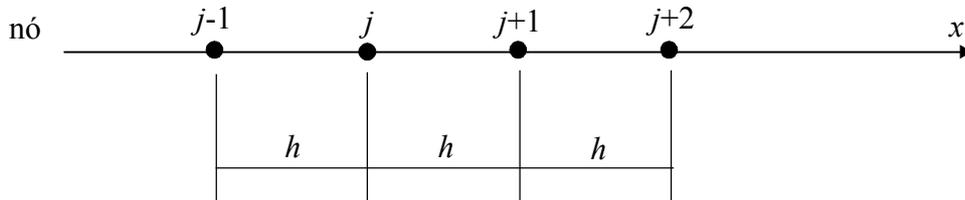


Figura 2.1 Malha unidimensional uniforme.

2.3 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 1 PONTO A MONTANTE: λ_{UDS}^i

Isolando-se Λ_j^i da Eq. (2.4), obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h} + \Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (2.8)$$

onde Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª, 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j e h é o tamanho dos elementos da malha. A Eq. (2.8) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{UDS}^i)_j + \varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j \quad (2.9)$$

onde o primeiro termo do segundo membro da Eq. (2.8) se constitui na aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a montante, isto é,

$$(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h} \quad (2.10)$$

e os demais termos da Eq. (2.8) representam o erro de truncamento (ε) de λ_{UDS}^i , cuja expressão é

$$\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j = \Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (2.11)$$

Este erro de truncamento também pode ser obtido de acordo com a sua definição, Eq. (2.1). Para isso basta subtrair a Eq. (2.10) de (2.8).

Comparando-se as Eqs. (2.2) e (2.11), verifica-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)$ são $p_V = 1, 2, 3$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 1$. Desta forma, diz-se que **o erro de truncamento da aproximação numérica λ_{UDS}^i é de 1ª ordem**. Além disso, $c_1 = \Lambda_j^{ii}/2$, $c_2 = -\Lambda_j^{iii}/6$, $c_3 = \Lambda_j^{iv}/24$, etc, ou seja, os coeficientes c_i são função de x e de derivadas da variável dependente (Λ), e têm sinais positivos e negativos.

2.4 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM DIFERENÇA CENTRAL: λ_{CDS}^i

Com a subtração da Eq. (2.4) de (2.5) e o isolamento de Λ_j^i do resultado, obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1})}{2h} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_j^v \frac{h^4}{120} - \Lambda_j^{vii} \frac{h^6}{5040} - \dots \quad (2.12)$$

onde Λ_j^{iii} , Λ_j^v e Λ_j^{vii} são, respectivamente, as derivadas de 3ª, 5ª e 7ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . A Eq. (2.12) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{CDS}^i)_j + \varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j \quad (2.13)$$

onde o primeiro termo do segundo membro da Eq. (2.12) se constitui na aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com diferença central, isto é,

$$(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1})}{2h} \quad (2.14)$$

e os demais termos da Eq. (2.12) representam o erro de truncamento (ε) de λ_{CDS}^i , cuja expressão é

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j = -\Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_j^v \frac{h^4}{120} - \Lambda_j^{vii} \frac{h^6}{5040} - \dots \quad (2.15)$$

Comparando-se as Eqs. (2.2) e (2.15), verifica-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)$ são $p_V = 2, 4, 6$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 2$. Desta forma, diz-se que **o erro de truncamento da aproximação numérica λ_{CDS}^i é de 2ª ordem**. Além disso, $c_1 = -\Lambda_j^{iii}/6$, $c_2 = -\Lambda_j^v/120$, $c_3 = -\Lambda_j^{vii}/5040$, etc, ou seja, os coeficientes c_i são função de x e de derivadas da variável dependente (Λ), e têm sinal negativo.

2.5 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 1 PONTO A JUSANTE: λ_{DDS}^i

Isolando-se Λ_j^i da Eq. (2.5), obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_j)}{h} - \Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (2.16)$$

onde Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª, 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . A Eq. (2.16) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{DDS}^i)_j + \varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_j \quad (2.17)$$

onde o primeiro termo do segundo membro da Eq. (2.16) se constitui na aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a jusante, isto é,

$$(\mathcal{L}_{DDS}^i)_j = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_j)}{h} \quad (2.18)$$

e os demais termos da Eq. (2.16) representam o erro de truncamento (ε) de \mathcal{L}_{DDS}^i , cuja expressão é

$$\varepsilon(\mathcal{L}_{DDS}^i)_j = -\Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (2.19)$$

Comparando-se as Eqs. (2.2) e (2.19), verifica-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\mathcal{L}_{DDS}^i)$ são $p_V = 1, 2, 3$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 1$. Desta forma, diz-se que **o erro de truncamento da aproximação numérica \mathcal{L}_{DDS}^i é de 1ª ordem**. Além disso, $c_1 = -\Lambda_j^{ii}/2$, $c_2 = -\Lambda_j^{iii}/6$, $c_3 = -\Lambda_j^{iv}/24$, etc, ou seja, os coeficientes c_i são função de x e de derivadas da variável dependente (Λ), e têm sinal negativo.

2.6 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 2 PONTOS A JUSANTE: \mathcal{L}_{DDS-2}^i

Subtraindo-se a Eq. (2.6) da Eq. (2.5), multiplicada por quatro, e isolando-se Λ_j^i do resultado, obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(4\Lambda_{j+1} - 3\Lambda_j - \Lambda_{j+2})}{2h} + \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{3} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{4} + \Lambda_j^v \frac{7h^4}{60} + \dots \quad (2.20)$$

onde Λ_j^{iii} , Λ_j^{iv} e Λ_j^v são, respectivamente, as derivadas de 3ª, 4ª e 5ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . A Eq. (2.20) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\Lambda_j^i = (\mathcal{L}_{DDS-2}^i)_j + \varepsilon(\mathcal{L}_{DDS-2}^i)_j \quad (2.21)$$

onde o primeiro termo do segundo membro da Eq. (2.20) se constitui na aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com dois pontos a jusante, isto é,

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \frac{(4\Lambda_{j+1} - 3\Lambda_j - \Lambda_{j+2})}{2h} \quad (2.22)$$

e os demais termos da Eq. (2.20) representam o erro de truncamento (ε) de λ_{DDS-2}^i , cuja expressão é

$$\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{3} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{4} + \Lambda_j^v \frac{7h^4}{60} + \dots \quad (2.23)$$

Comparando-se as Eqs. (2.2) e (2.23), verifica-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$ são $p_V = 2, 3, 4$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 2$. Desta forma, diz-se que **o erro de truncamento da aproximação numérica λ_{DDS-2}^i é de 2ª ordem**. Além disso, $c_1 = \Lambda_j^{iii}/3$, $c_2 = \Lambda_j^{iv}/4$, $c_3 = 7\Lambda_j^v/60$, etc, ou seja, os coeficientes c_i são função de x e de derivadas da variável dependente (Λ), e têm sinal positivo.

2.7 DERIVADA DE 2ª ORDEM COM DIFERENÇA CENTRAL: λ_{CDS}^{ii}

Com a adição das Eqs. (2.4) e (2.5) e o isolamento de Λ_j^{ii} do resultado, obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 2ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^{ii} = \frac{(\Lambda_{j-1} + \Lambda_{j+1} - 2\Lambda_j)}{h^2} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^2}{12} - \Lambda_j^{vi} \frac{h^4}{360} - \Lambda_j^{viii} \frac{h^6}{20160} - \dots \quad (2.24)$$

onde Λ_j^{iv} , Λ_j^{vi} e Λ_j^{viii} são, respectivamente, as derivadas de 4ª, 6ª e 8ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . A Eq. (2.24) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\Lambda_j^{ii} = (\lambda_{CDS}^{ii})_j + \varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})_j \quad (2.25)$$

onde o primeiro termo do segundo membro da Eq. (2.24) se constitui na aproximação numérica da derivada de 2ª ordem com diferença central, isto é,

$$(\lambda_{CDS}^{ii})_j = \frac{(\Lambda_{j-1} + \Lambda_{j+1} - 2\Lambda_j)}{h^2} \quad (2.26)$$

e os demais termos da Eq. (2.24) representam o erro de truncamento (ε) de λ_{CDS}^{ii} , cuja expressão é

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})_j = -\Lambda_j^{iv} \frac{h^2}{12} - \Lambda_j^{vi} \frac{h^4}{360} - \Lambda_j^{viii} \frac{h^6}{20160} - \dots \quad (2.27)$$

Comparando-se as Eqs. (2.2) e (2.27), verifica-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})$ são $p_V = 2, 4, 6$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 2$. Desta forma, diz-se que **o erro de truncamento da aproximação numérica λ_{CDS}^{ii} é de 2ª ordem**. Além disso, $c_1 = -\Lambda_j^{iv}/12$, $c_2 = -\Lambda_j^{vi}/360$, $c_3 = -\Lambda_j^{viii}/20160$, etc, ou seja, os coeficientes c_i são função de x e de derivadas da variável dependente (Λ), e têm sinal negativo.

2.8 MÉDIA DA VARIÁVEL DEPENDENTE: λ_m

Define-se a solução analítica exata da média da variável dependente (Λ_m), ao longo do domínio de cálculo, por

$$\Lambda_m = \frac{1}{L} \int_0^L \Lambda dx \quad (2.28)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo sobre o qual se realiza a média da variável dependente (Λ) e x é a variável independente. A solução analítica exata da integração numérica da variável dependente (Λ), obtida pela regra do trapézio (Pletcher *et al.*, 1988) ao longo do domínio de cálculo, resulta em

$$\Lambda_m = \frac{h}{2L} \sum_{j=1}^N (\Lambda_{j-1} + \Lambda_j) - \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \left(\Lambda_{j-1/2}^{ii} \frac{h^3}{12} + \Lambda_{j-1/2}^{iv} \frac{h^5}{480} + \dots \right) \quad (2.29)$$

onde Λ_j^{ii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) em ' $j-1/2$ ', isto é, na coordenada média entre os nós ' $j-1$ ' e j ; h é o tamanho dos elementos da malha; N é o número total de elementos da malha; e o primeiro ($j = 0$) e o último nós ($j = N$) da malha estão sobre os contornos do domínio. A Eq. (2.29) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\Lambda_m = \lambda_m + \varepsilon(\lambda_m) \quad (2.30)$$

onde o termo com o primeiro somatório no segundo membro da Eq. (2.29) se constitui na aproximação numérica da média da variável dependente (λ_m), obtida pela regra do trapézio ao longo do domínio de cálculo, isto é,

$$\lambda_m = \frac{h}{2L} \sum_{j=1}^N (\Lambda_{j-1} + \Lambda_j) \quad (2.31)$$

e os demais termos da Eq. (2.29) representam o erro de truncamento (ε) de (λ_m), cuja expressão é

$$\varepsilon(\lambda_m) = -\frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \left(\Lambda_{j-1/2}^{ii} \frac{h^3}{12} + \Lambda_{j-1/2}^{iv} \frac{h^5}{480} + \dots \right) \quad (2.32)$$

Comparando-se as Eqs. (2.2) e (2.32), verifica-se que em princípio as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_m)$ seriam $p_V = 3, 5$, etc, e a ordem assintótica seria $p_L = 3$. Mas, conforme demonstrado por Pletcher *et al.* (1988), exemplificado na subseção 2.9.3 e demonstrado nas subseções 8.6.1 e 8.6.2 para casos semelhantes, os valores das ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_m)$ são $p_V = 2, 4$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 2$. Esta redução ou **degeneração de ordem do erro de truncamento** ocorre devido ao efeito do somatório dos erros de cada elemento da malha para obter $\varepsilon(\lambda_m)$; assim, **o erro de truncamento da aproximação numérica λ_m é de 2ª ordem**. Maiores explicações sobre degeneração de ordem do erro, incluindo demonstrações, são apresentadas a partir do Cap. 8, na Parte II deste trabalho.

Exemplos com as seis aproximações numéricas descritas acima e seus erros de truncamento são apresentados na seção a seguir.

2.9 EXEMPLOS

Nos casos efetivamente práticos de *CFD*, isto é, quando se deseja obter a solução numérica de um problema, a solução analítica é desconhecida. Mas, para os exemplos desta seção, considera-se que a solução analítica da variável dependente (Λ) e suas derivadas são conhecidas. O objetivo é exemplificar o procedimento de cálculo dos erros de truncamento com a série de Taylor. Além disso, as expressões analíticas dos erros de truncamento, obtidas nesta seção, são usadas nos demais capítulos da Parte I. A função empregada é

$$\Lambda = x^4 \quad (2.33)$$

conseqüentemente, suas derivadas são

$$\Lambda^i = 4x^3 \quad (2.34)$$

$$\Lambda^{ii} = 12x^2 \quad (2.35)$$

$$\Lambda^{iii} = 24x \quad (2.36)$$

$$\Lambda^{iv} = 24 \quad (2.37)$$

$$\Lambda^v = \Lambda^{vi} = \dots = 0 \quad (2.38)$$

Esta função foi escolhida porque permite ilustrar vários conceitos e aspectos que são discutidos a seguir, bem como nos próximos capítulos da Parte I. Além disso, suas derivadas, Eqs. (2.34) a (2.38), levam a um número pequeno de termos nos erros de truncamento, facilitando os cálculos e as explicações dos conceitos. Os exemplos são específicos para o nó $x_j = 8$ e $h = 4, 2, 1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{256}$.

2.9.1 Derivadas de 1ª Ordem

A solução analítica exata da derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ^i) em qualquer coordenada x é dada pela Eq. (2.34). Portanto, para $x_j = 8$, tem-se $\Lambda_j^i = 2048$. As aproximações numéricas são dadas pelas Eqs. (2.10), (2.14), (2.18) e (2.22). Por exemplo, no caso da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a montante, a partir da Eq. (2.10), considerando-se a Eq. (2.33) e a Fig. 2.1, obtém-se

$$(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{[x_j^4 - (x_j - h)^4]}{h} \quad (2.39)$$

Os valores resultantes para as aproximações numéricas da derivada de 1ª ordem são listados nas Tabs. 2.2 a 2.5, assim como os seus erros de truncamento, que também são apresentados na Fig. 2.2. Considerando a função dada pela Eq. (2.33) e suas derivadas, Eqs. (2.34) a (2.38), de acordo com as definições dos erros de truncamento, Eqs. (2.11), (2.15), (2.19) e (2.23), obtém-se

$$\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j = 6x_j^2h - 4x_jh^2 + h^3 \quad (2.40)$$

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j = -4x_jh^2 \quad (2.41)$$

$$\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_j = -6x_j^2h - 4x_jh^2 - h^3 \quad (2.42)$$

$$\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_j = 8x_jh^2 + 6h^3 \quad (2.43)$$

2.9.2 Derivada de 2ª Ordem

A solução analítica exata da derivada de 2ª ordem da variável dependente (Λ^{ii}) é dada pela Eq. (2.35). Portanto, para $x_j = 8$, tem-se $\Lambda_j^{ii} = 768$. A aproximação numérica é dada pela Eq. (2.26). Seu valor em função de h é listado na Tab. 2.6, bem como seu erro de truncamento que também é mostrado na Fig. 2.3 com a legenda “derivada”. Considerando-se a função dada pela Eq. (2.33) e suas derivadas, Eqs. (2.34) a (2.38), de acordo com a definição do erro de truncamento, Eq. (2.27), obtém-se

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j = -2h^2 \quad (2.44)$$

Tabela 2.2 Aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a montante (λ_{UDS}^i) e seu erro de truncamento (ε).

h	λ_{UDS}^i	ε
4,000000000E+00	9,600000000E+02	1,088000000E+03
2,000000000E+00	1,400000000E+03	6,480000000E+02
1,000000000E+00	1,695000000E+03	3,530000000E+02
5,000000000E-01	1,863875000E+03	1,841250000E+02
2,500000000E-01	1,953984375E+03	9,401562500E+01
1,250000000E-01	2,000498047E+03	4,750195313E+01
6,250000000E-02	2,024124756E+03	2,387524414E+01
3,125000000E-02	2,036031219E+03	1,196878052E+01
1,562500000E-02	2,042007809E+03	5,992191315E+00
7,812500000E-03	2,045001953E+03	2,998047352E+00
3,906250000E-03	2,046500488E+03	1,499511778E+00

Tabela 2.3 Aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com diferença central (λ_{CDS}^i) e seu erro de truncamento (ε).

h	λ_{CDS}^i	ε
4,000000000E+00	2,560000000E+03	-5,120000000E+02
2,000000000E+00	2,176000000E+03	-1,280000000E+02
1,000000000E+00	2,080000000E+03	-3,200000000E+01
5,000000000E-01	2,056000000E+03	-8,000000000E+00
2,500000000E-01	2,050000000E+03	-2,000000000E+00
1,250000000E-01	2,048500000E+03	-5,000000000E-01
6,250000000E-02	2,048125000E+03	-1,250000000E-01
3,125000000E-02	2,048031250E+03	-3,125000000E-02
1,562500000E-02	2,048007813E+03	-7,812500000E-03
7,812500000E-03	2,048001953E+03	-1,953125000E-03
3,906250000E-03	2,048000488E+03	-4,882812500E-04

2.9.3 Média da Variável Dependente

A solução analítica exata da média da variável dependente (Λ_m) é obtida com a substituição da Eq. (2.33) em (2.28). Considerando-se $L = 8$, isso resulta em $\Lambda_m = 819,2$. A

aproximação numérica é dada pela Eq. (2.31). Seu valor em função de h é listado na Tab. 2.7, bem como seu erro de truncamento que também é mostrado na Fig. 2.3 referenciado pela legenda “média”. Considerando-se a função dada pela Eq. (2.33) e suas derivadas, Eqs. (2.34) a (2.38), de acordo com a definição do erro de truncamento, Eq. (2.32), obtém-se

Tabela 2.4 Aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto

a jusante (λ_{DDS}^i) e seu erro de truncamento (ε).

h	λ_{DDS}^i	ε
4,00000000E+00	4,16000000E+03	-2,11200000E+03
2,00000000E+00	2,95200000E+03	-9,04000000E+02
1,00000000E+00	2,46500000E+03	-4,17000000E+02
5,00000000E-01	2,24812500E+03	-2,00125000E+02
2,50000000E-01	2,14601562E+03	-9,80156250E+01
1,25000000E-01	2,09650195E+03	-4,85019531E+01
6,25000000E-02	2,07212524E+03	-2,41252441E+01
3,12500000E-02	2,06003128E+03	-1,20312805E+01
1,56250000E-02	2,05400781E+03	-6,00781631E+00
7,81250000E-03	2,05100195E+03	-3,00195360E+00
3,90625000E-03	2,04950048E+03	-1,50048834E+00

Tabela 2.5 Aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 2 pontos

a jusante (λ_{DDS-2}^i) e seu erro de truncamento (ε).

h	λ_{DDS-2}^i	ε
4,00000000E+00	6,40000000E+02	1,40800000E+03
2,00000000E+00	1,74400000E+03	3,04000000E+02
1,00000000E+00	1,97800000E+03	7,00000000E+01
5,00000000E-01	2,03125000E+03	1,67500000E+01
2,50000000E-01	2,04390625E+03	4,09375000E+00
1,25000000E-01	2,04698828E+03	1,01171875E+00
6,25000000E-02	2,04774853E+03	2,51464843E-01
3,12500000E-02	2,04793731E+03	6,26831054E-02
1,56250000E-02	2,04798435E+03	1,56478881E-02
7,81250000E-03	2,04799609E+03	3,90911102E-03
3,90625000E-03	2,04799902E+03	9,76920127E-04

$$\varepsilon(\lambda_m) = -\frac{L^2}{3}h^2 + \frac{1}{30}h^4 \quad (2.45)$$

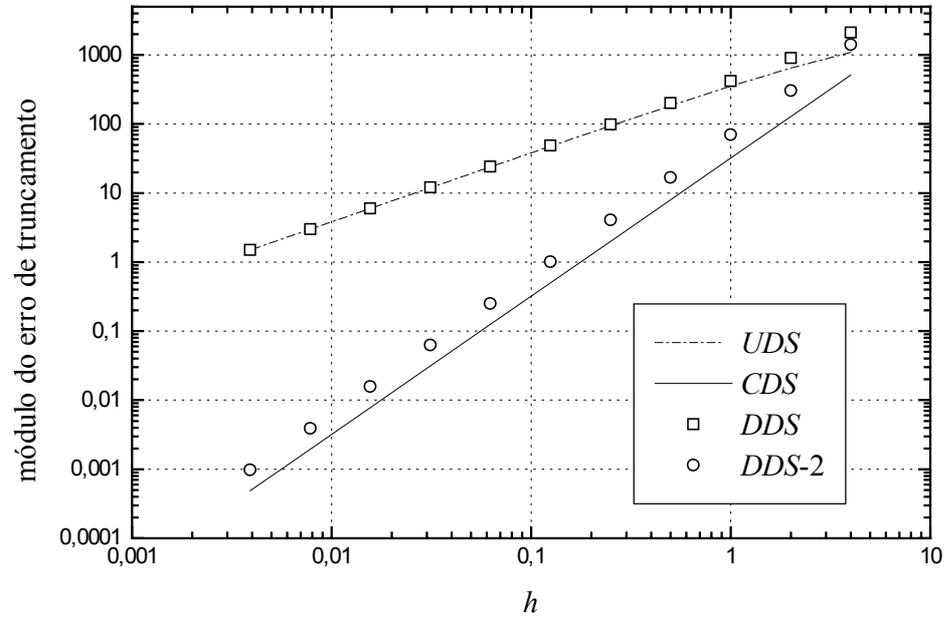


Figura 2.2 Erros de truncamento das aproximações numéricas λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i representadas na legenda, respectivamente, por *UDS*, *CDS*, *DDS* e *DDS-2*.

Tabela 2.6 Aproximação numérica da derivada de 2ª ordem com diferença central (λ_{CDS}^{ii}) e seu erro de truncamento (ε).

h	λ_{CDS}^{ii}	ε
4,00000000E+00	8,00000000E+02	-3,20000000E+01
2,00000000E+00	7,76000000E+02	-8,00000000E+00
1,00000000E+00	7,70000000E+02	-2,00000000E+00
5,00000000E-01	7,68500000E+02	-5,00000000E-01
2,50000000E-01	7,68125000E+02	-1,25000000E-01
1,25000000E-01	7,68031250E+02	-3,12500000E-02
6,25000000E-02	7,68007812E+02	-7,81250000E-03
3,12500000E-02	7,68001953E+02	-1,95312500E-03
1,56250000E-02	7,68000488E+02	-4,88281250E-04
7,81250000E-03	7,68000122E+02	-1,22070312E-04
3,90625000E-03	7,68000030E+02	-3,05175781E-05

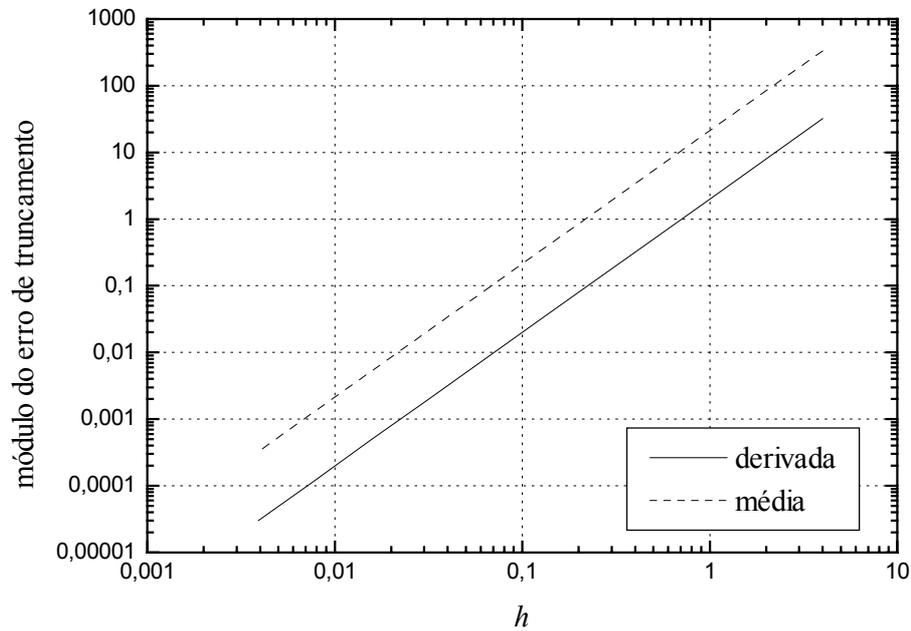


Figura 2.3 Erros de truncamento das aproximações numéricas λ_{CDS}^{ii} e λ_m representadas na legenda, respectivamente, por derivada e média.

Tabela 2.7 Aproximação numérica da média da variável dependente (λ_m) e seu erro de truncamento (ε).

h	λ_m	ε
4,00000000E+00	1,15200000E+03	-3,32800000E+02
2,00000000E+00	9,04000000E+02	-8,48000000E+01
1,00000000E+00	8,40500000E+02	-2,13000000E+01
5,00000000E-01	8,24531250E+02	-5,33125000E+00
2,50000000E-01	8,20533203E+02	-1,33320312E+00
1,25000000E-01	8,19533325E+02	-3,33325195E-01
6,25000000E-02	8,19283332E+02	-8,33328247E-02
3,12500000E-02	8,19220833E+02	-2,08333015E-02
1,56250000E-02	8,19205208E+02	-5,20833134E-03
7,81250000E-03	8,19201302E+02	-1,30208320E-03
3,90625000E-03	8,19200325E+02	-3,25520825E-04

2.10 RESUMO DO CAPÍTULO 2

Foram apresentados seis tipos de aproximações numéricas (λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m) para três tipos de variáveis diferentes: as derivadas de primeira e segunda ordem da variável dependente (Λ) nos modelos matemáticos (Λ^i e Λ^{ii}); e a média da variável dependente ao longo do domínio de cálculo (Λ_m). Também foram apresentadas as expressões genéricas para o erro de truncamento (ε) destas seis aproximações numéricas, ou seja, as estimativas de erro *a priori*, e a equação geral do erro de truncamento de uma aproximação numérica ou de uma equação diferencial. Foram definidas as ordens assintótica (p_L) e verdadeiras (p_V) dos erros de truncamento. Finalmente, exemplos de cálculo das aproximações numéricas e de seus erros de truncamento foram apresentados. Na Tab. 2.8, apresenta-se um resumo das ordens verdadeiras e assintótica do erro de truncamento previstas com o uso da série de Taylor para as seis aproximações numéricas definidas neste capítulo.

Tabela 2.8 Valores previstos para as ordens verdadeiras (p_V) e assintótica (p_L) dos erros de truncamento.

tipo de variável	solução numérica (ϕ)	tipo de aproximação numérica	ordens verdadeiras (p_V)	ordem assintótica (p_L)
derivada de 1ª ordem da variável dependente	λ_{UDS}^i	um ponto a montante	1, 2, 3, ...	1
	λ_{CDS}^i	diferença central	2, 4, 6, ...	2
	λ_{DDS}^i	um ponto a jusante	1, 2, 3, ...	1
	λ_{DDS-2}^i	dois pontos a jusante	2, 3, 4, ...	2
derivada de 2ª ordem da variável dependente	λ_{CDS}^{ii}	diferença central	2, 4, 6, ...	2
média da variável dependente	λ_m	regra do trapézio	2, 4, 6, ...	2

Aproximações numéricas diferentes para a mesma variável resultam em erros de truncamento também diferentes. Isso pode ser observado através da comparação, para um mesmo tamanho (h) dos elementos da malha, dos valores para os quatro tipos de aproximação numérica da derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ^i) e seus erros de truncamento apresentados nas Tabs. 2.2 a 2.5.

Aproximações numéricas calculadas com soluções analíticas exatas nos nós da malha apresentam erros de truncamento. Por exemplo, a aproximação numérica λ_{UDS}^i calculada através da Eq. (2.10) ou (2.39) com valores da solução analítica exata nos nós j e ' $j-1$ ', isto é, com Λ_j e Λ_{j-1} , tem o erro de truncamento dado pela Eq. (2.11) ou (2.40). As implicações de se fazer as aproximações numéricas dos termos dos modelos matemáticos com valores obtidos da própria solução numérica (λ) são mostradas na Parte II deste trabalho.

As expressões para o erro de truncamento das aproximações numéricas, obtidas através da série de Taylor, avaliam corretamente o seu valor, na magnitude e no sinal, qualquer que seja o tamanho (h) dos elementos da malha, desde que se tenha a solução analítica para calculá-lo. Isso é facilmente verificável: em quaisquer das Tabs. 2.2 a 2.7, a soma do valor da aproximação numérica com o seu erro de truncamento resulta na solução analítica exata. O valor do erro de truncamento tende monotonicamente a zero quando $h \rightarrow 0$. Portanto, todas as aproximações numéricas usadas neste trabalho são consistentes.

Nos casos efetivamente práticos de *CFD*, ou seja, quando se deseja obter a solução numérica de um problema e a solução analítica é desconhecida, o uso da série de Taylor nas aproximações numéricas empregadas permite prever, *a priori*, o valor das ordens assintótica e verdadeiras do erro de truncamento, isto é, antes mesmo de se obter qualquer solução numérica. Isso pode ser verificado comparando-se as previsões genéricas das ordens do erro de truncamento, dadas nas Eqs. (2.11), (2.15), (2.19) e (2.23), (2.27) e (2.32), ou na Tab. 2.8, com os resultados numéricos obtidos no exemplo da seção 2.9 e dados pelas Eqs. (2.40) a (2.45). Com a ordem assintótica é possível prever a taxa de redução do erro de truncamento em função da diminuição do tamanho dos elementos da malha.

Explicações sobre a importância de se definir as ordens verdadeiras e assintótica do erro de truncamento são apresentadas no Cap. 3, a seguir, onde são abordados os estimadores do erro de discretização.

Capítulo 3.

MÉTODOS PARA ESTIMAR, *A POSTERIORI*, O ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

No Cap. 2 foi visto um procedimento que permite fazer análises qualitativas do erro de truncamento. Nesse capítulo, são apresentados três estimadores para o erro de discretização que estão disponíveis na literatura: os estimadores de Richardson, delta e *GCI*. Com estes estimadores é possível prever quantitativamente o erro de discretização. Além disso, são apresentados mais três estimadores que são introduzidos neste trabalho: os estimadores bicoeficiente, tricoeficiente e multicoeficiente. Todos eles se baseiam em soluções numéricas obtidas sobre duas ou mais malhas diferentes, isto é, são estimadores *a posteriori*. Ainda nesse capítulo, estes estimadores são aplicados aos exemplos do Cap. 2.

Quando o erro da solução numérica é provocado apenas por erros de truncamento (ε), a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável e a sua solução numérica (ϕ) é denominada **erro de discretização (E)**, que é definido por

$$E(\phi) = \Phi - \phi \tag{3.1}$$

onde os símbolos Φ e ϕ representam, respectivamente, as soluções analítica e numérica das variáveis mostradas nas Tabs. 1.2 e 2.1, isto é: a variável dependente nos modelos matemáticos, sua média ao longo do domínio de cálculo ou suas derivadas de 1^a e 2^a ordens. Conforme já visto, estas variáveis podem ser: locais, por dependerem da coordenada x ; globais, por representarem um valor para o domínio de cálculo inteiro; primária, no caso da variável dependente nos modelos matemáticos; ou secundária, por serem obtidas a partir da variável dependente.

Além da Eq. (3.1), outra forma de calcular o erro de discretização é admitir por analogia à equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), que (Richardson, 1910; Roache, 1998; Ferziger e Peric, 1999)

$$E(\phi) = C_1 h^{p_1} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + C_4 h^{p_4} + \dots \quad (3.2)$$

onde os coeficientes C_i podem ser iguais ou diferentes dos coeficientes c_i da Eq. (2.2), podem ser positivos ou negativos e ser função da variável dependente (Λ) e de suas derivadas, isto é, podem variar com a coordenada x , mas se admite que sejam independentes do tamanho (h) dos elementos da malha. Neste trabalho, a Eq. (3.2) é chamada de **equação geral do erro de discretização**. Da mesma forma que no caso da equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), podem ser definidas as ordens verdadeiras e assintótica para a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), cujas definições são idênticas àquelas da seção 2.1.

Seja através da Eq. (3.1) ou da Eq. (3.2), o valor do erro de discretização só pode ser calculado quando a solução analítica do modelo matemático é conhecida. Mas, em termos práticos, isto é, para soluções numéricas de modelos matemáticos cuja solução analítica é desconhecida, isso não é possível. Conseqüentemente, 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 também é chamada de **incerteza (U) da solução numérica** (Mehta, 1996; Chapra e Canale, 1994) e é calculada pela diferença entre a solução analítica estimada (ϕ_∞) para a variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (3.3)$$

A incerteza de uma solução numérica é calculada com os chamados **estimadores de erro**, que são apresentados nesse capítulo. Antes, porém, são definidas duas características que se considera, neste trabalho, desejáveis para uma estimativa de erro.

3.1 CARACTERÍSTICAS DESEJÁVEIS PARA UMA ESTIMATIVA DE ERRO

As Figs. 3.1 a 3.5 ilustram alguns casos que podem ocorrer ao se realizar uma estimativa de erro. A qualidade de uma estimativa de erro pode ser avaliada através da sua **efetividade (θ)**, que é definida pela razão entre a incerteza e o erro (Zhu e Zienkiewicz, 1990):

$$\theta = \frac{U}{E} \quad (3.4)$$

Uma **estimativa de erro ideal** é aquela cuja efetividade é igual à unidade ($\theta = 1$), isto é, quando a incerteza é igual ao erro ($U = E$). Neste caso, a estimativa de erro é confiável e tem a máxima acurácia possível, conforme as definições apresentadas a seguir.

3.1.1 A Incerteza Deve Ser Confiável

Uma **estimativa de erro é confiável** quando a magnitude da incerteza é maior do que a magnitude do erro de discretização e ambos têm o mesmo sinal. Em outras palavras, uma estimativa de erro confiável é aquela cuja incerteza é um limite superior do erro. Matematicamente isto significa que

$$\theta \geq 1 \quad (3.5)$$

Conforme será mostrado ao longo deste trabalho, as estimativas de erro podem resultar em efetividades que são próximas da unidade, muito maiores do que a unidade ou negativas. Isso também ocorre com o método de elementos finitos que usa estimadores de erro baseados em malha única: mesmo em problemas unidimensionais, são relatados (Babuska *et al.*, 1997) valores de efetividade entre 0,06 e muito maiores do que a unidade. As **estimativas de erro** são consideradas **sem confiança** quando:

- $0 < \theta < 1$: neste caso a incerteza subestima o erro mas ambos têm o mesmo sinal; e
- $\theta < 0$: neste caso a incerteza tem sinal oposto ao erro; se constitui na pior previsão de erro.

3.1.2 A Incerteza Deve Ser Acurada

Uma **estimativa de erro é acurada** ou tem acurácia elevada quando a magnitude da incerteza é aproximadamente igual à magnitude do erro de discretização (Chapra e Canale, 1994). Quanto maior é a acurácia da estimativa de erro, mais próximas estão as magnitudes da incerteza e do erro. Matematicamente, uma estimativa de erro com acurácia elevada significa que

$$\theta \approx 1 \quad (3.6)$$

A definição quantitativa do que é uma estimativa de erro acurada, isto é, o quão próximo da unidade deve estar a efetividade, depende da fixação de um valor desejado ou admitido. Uma **estimativa de erro** de acurácia baixa ou **inacurada** significa que:

- $\theta \gg 1$: a incerteza é confiável mas de acurácia baixa; e
- $\theta \ll 1$: a incerteza não tem confiança e é inacurada.

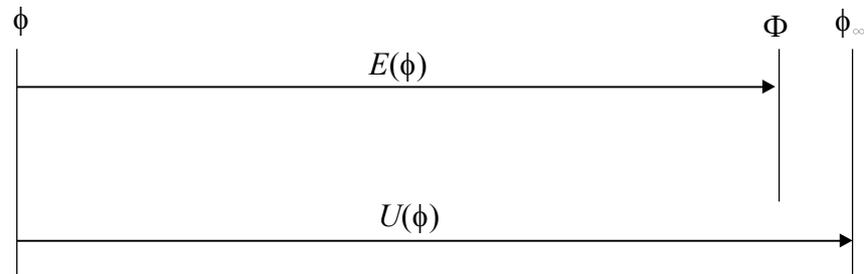


Figura 3.1 Incerteza confiável ($\theta \geq 1$) e acurada ($\theta \approx 1$).

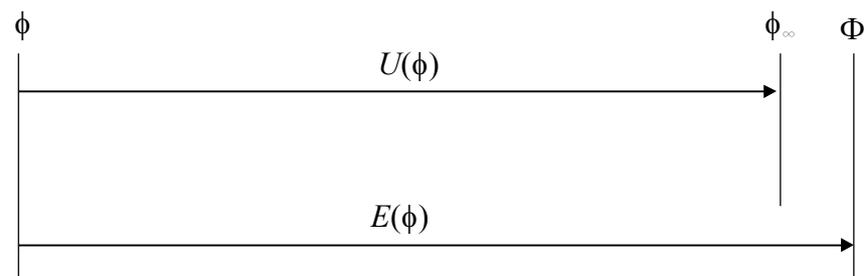


Figura 3.2 Incerteza sem confiança ($\theta < 1$) mas acurada ($\theta \approx 1$).

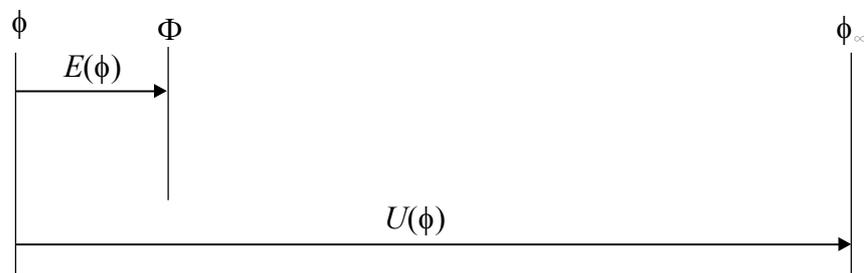


Figura 3.3 $\theta \gg 1$: incerteza confiável mas inacurada.

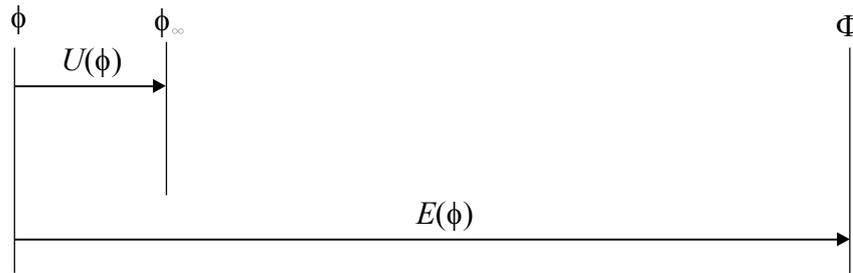


Figura 3.4 $0 < \theta \ll 1$: incerteza sem confiança e inacurada.

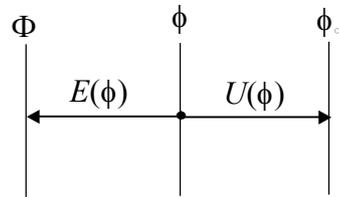


Figura 3.5 $\theta < 0$: incerteza sem confiança e inacurada.

Nas seções a seguir são apresentados os estimadores de Richardson, delta, *GCI* e multicoeficientes, e avaliadas as suas confiabilidades e acurácia, de forma genérica e com exemplos numéricos.

3.2 ESTIMADOR DE RICHARDSON

De acordo com o estimador de Richardson (Richardson e Gaunt, 1927; Blottner, 1990), a incerteza (U_{Ri}) de uma solução numérica (ϕ) é calculada através de

$$U_{Ri}(\phi) = \phi_{\infty} - \phi \quad (3.7)$$

onde ϕ representa a solução numérica de qualquer variável de interesse das Tabs. 1.2 e 2.1 e o símbolo ϕ_{∞} designa a estimativa do valor da solução analítica. O valor de ϕ_{∞} é obtido através da extrapolação de Richardson (Richardson, 1910; Richardson e Gaunt, 1927) generalizada (Roache, 1994), que é dada por

$$\phi_{\infty} = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (3.8)$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 são as soluções numéricas obtidas com malhas fina e grossa, isto é, 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 q é a **razão de refino de malha**, definida por

$$q = \frac{h_2}{h_1} \quad (3.9)$$

Com a substituição da Eq. (3.8) em (3.7), o estimador de Richardson resulta em

$$U_{Ri}(\phi_1) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (3.10)$$

Caso seja de interesse, a substituição da Eq. (3.8) e de ϕ_2 na Eq. (3.7) fornece a incerteza da solução numérica obtida na malha grossa (h_2).

O estimador de Richardson fornece, além da magnitude da incerteza, o seu sinal, isto é, se ϕ_{∞} é maior ou menor do que ϕ_1 . A diferença entre ϕ_1 e ϕ_2 define o sinal de U_{Ri} pois a razão de refino de malha (q) e a ordem assintótica (p_L) sempre são maiores do que a unidade, fazendo com que o denominador da Eq. (3.10) seja sempre positivo. Portanto, se $\phi_1 > \phi_2$, $U_{Ri} > 0$, e se $\phi_1 < \phi_2$, $U_{Ri} < 0$.

De acordo com a definição dada na Eq. (3.5), para que uma incerteza calculada com o estimador de Richardson seja confiável, deve-se ter $U_{Ri}/E \geq 1$. Isto equivale a dizer que a solução analítica (Φ) deve estar entre ϕ_1 e ϕ_{∞} . Na Fig. 3.6 exemplifica-se uma incerteza (U_{Ri}) confiável que foi obtida com o estimador de Richardson. Mas também podem ocorrer previsões como aquelas representadas nas Figs. 3.2 a 3.5.

A partir da Eq. (3.10), a previsão do estimador de Richardson para alguns casos particulares é

$$U_{Ri}(\phi_1) = \phi_1 - \phi_2 \quad (\text{para } q = 2 \text{ e } p_L = 1) \quad (3.11)$$

$$U_{Ri}(\phi_1) = \frac{1}{3}(\phi_1 - \phi_2) \quad (\text{para } q = 2 \text{ e } p_L = 2) \quad (3.12)$$

$$U_{Ri}(\phi_1) = 4,8(\phi_1 - \phi_2) \quad (\text{para } q = 1,1 \text{ e } p_L = 2) \quad (3.13)$$

Portanto, dependendo dos valores da razão de refino de malha (q) e da ordem assintótica (p_L), U_{Ri} pode ser uma fração ou um múltiplo da diferença entre as soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 , obtidas com as malhas fina e grossa.

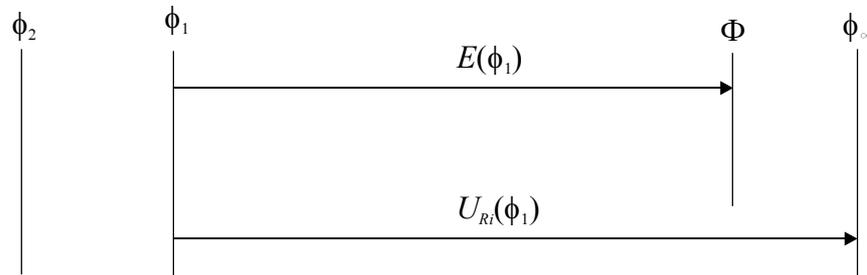


Figura 3.6 Exemplo de incerteza (U_{Ri}) confiável obtida com o estimador de Richardson.

Os valores de U_{Ri} e de ϕ_∞ , dados pelas Eqs. (3.10) e (3.8), respectivamente, são exatamente iguais ao erro de discretização (E) e à solução analítica (Φ) no caso particular da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), ser constituída por um único termo, conforme mostra-se nos exemplos da seção 3.6 e nas três subseções a seguir.

3.2.1 Dedução da Extrapolação de Richardson

A expressão da extrapolação de Richardson, Eq. (3.8), é obtida considerando-se que a incerteza (U) de uma solução numérica (ϕ) seja dada por

$$U(\phi) = K_U h^{p_L} \quad (3.14)$$

onde K_U é um coeficiente que se admite ter valor constante, portanto, independente de h , que é o tamanho dos elementos da malha, e p_L é a ordem assintótica do erro de discretização. Com a Eq.

(3.14) aplicada a duas malhas diferentes, h_1 e h_2 , cujas soluções numéricas são respectivamente ϕ_1 e ϕ_2 , tem-se

$$U(\phi_1) = K_U h_1^{p_L} \quad (3.15)$$

$$U(\phi_2) = K_U h_2^{p_L} \quad (3.16)$$

Com a substituição da Eq. (3.3) nas Eqs. (3.15) e (3.16), obtém-se

$$\phi_\infty - \phi_1 = K_U h_1^{p_L} \quad (3.17)$$

$$\phi_\infty - \phi_2 = K_U h_2^{p_L} \quad (3.18)$$

As Eqs. (3.17) e (3.18) formam um sistema de duas equações a duas incógnitas, K_U e ϕ_∞ . Nestas equações, são conhecidas as soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 e os valores de h_1 e h_2 ; e presume-se que seja conhecida também a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização, que é admitida igual à ordem do erro de truncamento. Isolando-se ϕ_∞ a partir das Eqs. (3.17) e (3.18), chega-se à expressão da extrapolação de Richardson dada na Eq. (3.8), concluindo a sua dedução. Conforme já mencionado, com a substituição da Eq. (3.8) em (3.7), obtém-se a expressão do estimador de Richardson, Eq. (3.10).

3.2.2 Limitações do Estimador de Richardson

A incerteza calculada através do estimador de Richardson, Eq. (3.10), só fornece o valor correto do erro de discretização se

$$E(\phi) = C_E h^{p_L} \quad (3.19)$$

onde C_E é um coeficiente, definido na Eq. (3.20). Mas isso ocorre apenas em três situações de exceção:

- 1) quando a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), é composta por um único termo, se reduzindo à Eq. (3.19); mas isto acontece apenas em problemas muito simples;

- 2) quando o tamanho (h) dos elementos da malha é muito pequeno, isto é, quando $h \rightarrow 0$; neste caso, mesmo que a equação geral do erro de discretização tenha vários termos, o valor do erro tende ao valor do primeiro termo desta equação; mas usar uma malha cujo $h \rightarrow 0$ não é factível do ponto de vista prático; ou
- 3) quando o valor do erro de discretização é aproximadamente igual ao valor do primeiro termo da equação geral do erro de discretização, mesmo para $h \neq 0$.

Sem dispor da solução analítica do problema, não é possível saber se alguma das três situações de exceção acima é válida. Portanto, para um caso prático qualquer, deve-se admitir que a equação do erro de discretização é dada pela Eq. (3.2). Se ela for posta na forma da Eq. (3.19), verifica-se que

$$C_E = C_1 + C_2 h^{p_2 - p_L} + C_3 h^{p_3 - p_L} + C_4 h^{p_4 - p_L} + \dots \quad (3.20)$$

ou seja, o coeficiente C_E também depende do tamanho (h) dos elementos da malha. Portanto, a hipótese de K_U ser um coeficiente de valor constante e independente de h , conforme admitido na Eq. (3.14), é incorreta pois ele desempenha o mesmo papel do coeficiente C_E . Isso implica que na maioria das aplicações é de se esperar que a incerteza calculada através do estimador de Richardson, Eq. (3.10), seja diferente do erro de discretização. O quão diferente vai depender da complexidade de cada problema e do h usado.

3.2.3 Efetividade Assintótica do Estimador de Richardson

Define-se a **efetividade do estimador de Richardson** (θ_{Ri}) pela razão entre a sua incerteza (U_{Ri}) e o erro de discretização (E), ou seja,

$$\theta_{Ri} = \frac{U_{Ri}}{E} \quad (3.21)$$

A efetividade assintótica é definida para a situação limite em que $h \rightarrow 0$. Neste caso, o coeficiente $C_E \rightarrow C_1$ na Eq. (3.20). Como C_1 é independente de h , a razão entre a incerteza (U_{Ri}), dada pela Eq. (3.14), e o erro de discretização (E), dado pela Eq. (3.19), resulta em

$$\theta_{Ri} \rightarrow 1 \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (3.22)$$

Este resultado é corroborado pelos exemplos da seção 3.6.

3.2.4 Representação da Solução Numérica

De acordo com as Eqs. (3.7) e (3.8), a representação correta da solução numérica (ϕ) e sua incerteza (U_{Ri}) obtida com o estimador de Richardson é

$$\phi = \phi_1 + U_{Ri}(\phi_1) \quad (3.23)$$

onde ϕ_1 é a solução numérica obtida com a malha fina, isto é, com uma malha cujo tamanho (h) dos elementos é h_1 ; e lembrando-se que o cálculo da incerteza (U_{Ri}) também envolve ϕ_2 que é a solução numérica obtida com a malha grossa, isto é, com uma malha cujo tamanho (h) dos elementos é h_2 . Também conforme já visto, U_{Ri} pode ser positivo ou negativo.

Existe pelo menos uma alternativa à representação dada na Eq. (3.23). Considerando-se que U_{Ri} seja acurado, em princípio se poderia admitir que a solução numérica fosse igual à solução extrapolada (ϕ_∞), dada na Eq. (3.8), em vez da solução obtida na malha fina (ϕ_1), eliminando-se assim o erro estimado (U_{Ri}). Mas com este procedimento não se teria a previsão do erro de ϕ_∞ , caindo-se no mesmo problema de obter uma solução numérica e apresentá-la como resposta sem qualquer incerteza. Para resolver esta dificuldade, uma possibilidade é considerar a solução numérica igual à solução extrapolada (ϕ_∞) e a incerteza igual ao módulo de U_{Ri} , isto é,

$$\phi = \phi_\infty \pm |U_{Ri}(\phi_1)| \quad (3.24)$$

3.3 ESTIMADOR DELTA

De acordo com o estimador delta (U_Δ) usado por Demirdzic *et al.* (1992), a incerteza de uma solução numérica (ϕ_1) é calculada com

$$U_\Delta(\phi_1) = |\phi_1 - \phi_2| \quad (3.25)$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 seguem as definições da seção 3.2. A incerteza calculada com a Eq. (3.25) representa uma banda ou um intervalo em torno da solução numérica (ϕ_1), conforme

representado na Fig. 3.7. Demirdzic *et al.* (1992) não utilizam a denominação “estimador delta” para a estimativa do erro calculada através da Eq. (3.25); mas esta denominação é adotada no presente trabalho.

De acordo com a definição dada na Eq. (3.5), para que uma incerteza calculada com o estimador delta seja confiável, deve-se ter $U_\Delta/|E| \geq 1$. Isto equivale a dizer que a solução analítica (Φ) deve estar entre ϕ_∞^- e ϕ_∞^+ , representados na Fig. 3.7, e que são dados por $\phi_\infty^- = \phi_2$ e

$$\phi_\infty^+ = 2\phi_1 - \phi_2 \quad (3.26)$$

O cálculo da incerteza segundo o estimador delta também usa duas soluções numéricas (ϕ_1 e ϕ_2) obtidas em duas malhas diferentes (h_1 e h_2), conforme a Eq. (3.25), da mesma forma que o estimador de Richardson. Mas ao contrário deste, U_Δ não leva em conta a razão de refino de malha (q), ou os valores de h_1 e h_2 , nem a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização. Conseqüentemente, U_Δ pode ser feito arbitrariamente muito pequeno, quando $q \rightarrow 1$, ou muito grande, quando $q \gg 1$. Uma relação facilmente verificável é que a magnitude do estimador delta (U_Δ) coincide com o resultado do estimador de Richardson (U_{Ri}) para o caso em que $q = 2$ e $p_L = 1$, conforme pode ser visto comparando-se as Eqs. (3.11) e (3.25).

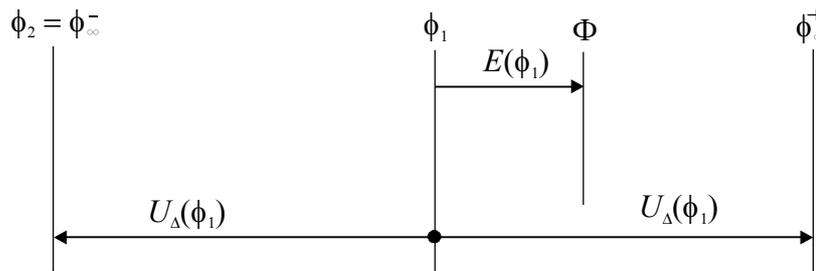


Figura 3.7 Exemplo de incerteza (U_Δ) confiável obtida com o estimador delta.

Define-se a **efetividade do estimador delta** (θ_Δ) pela razão entre a sua incerteza (U_Δ) e o módulo do erro de discretização (E), ou seja,

$$\theta_{\Delta} = \frac{U_{\Delta}}{|E|} \quad (3.27)$$

A efetividade assintótica é definida para a situação limite em que $h \rightarrow 0$. Neste caso, pode-se considerar o resultado da Eq. (3.22), ou seja, o erro de discretização (E) pode ser substituído pela incerteza de Richardson (U_{Ri}), pois $U_{Ri} \rightarrow E$ para $h \rightarrow 0$. Assim

$$\frac{U_{\Delta}}{|E|} \rightarrow \frac{U_{\Delta}}{|U_{Ri}|} \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (3.28)$$

Então, com as Eqs. (3.10) e (3.25) na Eq. (3.28), obtém-se

$$\theta_{\Delta} \rightarrow q^{p_L} - 1 \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (3.29)$$

Para $p_L = 1$ e $q = 2$, por exemplo, da Eq. (3.29), $U_{\Delta}/|E| \rightarrow 1$. Já no caso de $p_L = 2$ e $q = 2$, $U_{\Delta}/|E| \rightarrow 3$. Nestes dois casos, U_{Δ} é confiável, de acordo com a definição da Eq. (3.5). Mas, por exemplo, para $p_L = 2$ e $q = 1,1$, da Eq. (3.29), $U_{\Delta}/|E| \rightarrow 0,21$, isto é, U_{Δ} não é confiável porque subestima a magnitude do erro, representando apenas cerca de $\frac{1}{5}$ do seu valor. O resultado da Eq. (3.29) é corroborado pelos exemplos da seção 3.6.

De acordo com a Eq. (3.25), a representação correta da solução numérica (ϕ) e sua incerteza (U_{Δ}) obtida com o estimador delta é

$$\phi = \phi_1 \pm U_{\Delta}(\phi_1) \quad (3.30)$$

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

3.4 ESTIMADOR *GCI*

De acordo com o estimador *GCI* (*Grid Convergence Index*), a incerteza de uma solução numérica é calculada através de (Roache, 1998)

$$U_{GCI}(\phi_1) = F_S \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(q^{p_L} - 1)} \quad (3.31)$$

onde F_S é um fator de segurança com valor igual a três para aplicações em geral; os demais parâmetros da Eq. (3.31) seguem as definições dadas na seção 3.2. Zienkiewicz e Taylor (1989) também usam fatores de correção nos seus métodos de estimar erros, baseados em malha fixa e em soluções numéricas obtidas com o método de elementos finitos; seus fatores variam conforme a classe de problemas: para problemas bidimensionais, eles ficam entre 1,1 e 1,6 sobre a efetividade calculada. O resultado proveniente da Eq. (3.31) representa uma banda ou um intervalo de incerteza em torno da solução numérica ϕ_1 , conforme representado na Fig. 3.8; neste exemplo, a incerteza (U_{Ri}) obtida com o estimador de Richardson não é confiável. De acordo com a definição dada na Eq. (3.5), para que uma incerteza calculada com o estimador *GCI* seja confiável, deve-se ter $U_{GCI}/|E| \geq 1$. Isto equivale a dizer que a solução analítica (Φ) deve estar entre ϕ_{∞}^- e ϕ_{∞}^+ , representados na Fig. 3.8, e que são dados por

$$\phi_{\infty}^- = \phi_1 - U_{GCI}(\phi_1) \quad (3.32)$$

$$\phi_{\infty}^+ = \phi_1 + U_{GCI}(\phi_1) \quad (3.33)$$

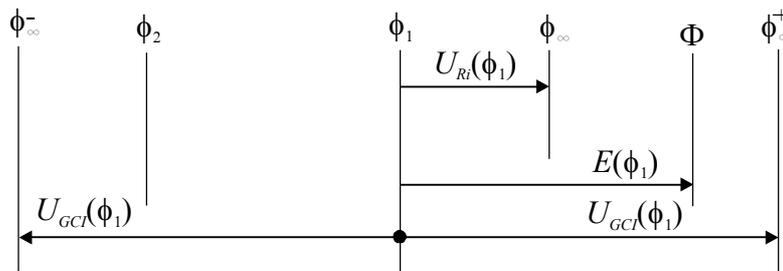


Figura 3.8 Exemplo de incerteza (U_{GCI}) confiável obtida com o estimador *GCI*.

Define-se a **efetividade do estimador GCI** (θ_{GCI}) pela razão entre a sua incerteza (U_{GCI}) e o módulo do erro de discretização (E), ou seja,

$$\theta_{GCI} = \frac{U_{GCI}}{|E|} \quad (3.34)$$

A efetividade assintótica é definida para a situação limite em que $h \rightarrow 0$. Neste caso, pode-se considerar o resultado da Eq. (3.22), ou seja, o erro de discretização (E) pode ser substituído pela incerteza de Richardson (U_{Ri}), pois $U_{Ri} \rightarrow E$ para $h \rightarrow 0$. Assim

$$\frac{U_{GCI}}{|E|} \rightarrow \frac{U_{GCI}}{|U_{Ri}|} \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (3.35)$$

Então, com as Eqs. (3.10) e (3.31) na Eq. (3.35), obtém-se

$$\theta_{GCI} \rightarrow F_S \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (3.36)$$

Isto é, quaisquer que sejam a razão de refino de malha (q) e a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização, a razão entre o valor da incerteza calculada pelo estimador GCI e o erro de discretização tende ao valor do fator de segurança (F_S) quando $h \rightarrow 0$. Portanto, para o valor recomendado por Roache (1994) para F_S , três, a acurácia do estimador GCI , mesmo para $h \rightarrow 0$, nunca é muito boa pois tende a três. O resultado da Eq. (3.36) é corroborado pelos exemplos da seção 3.6.

De acordo com a Eq. (3.31), a representação correta da solução numérica (ϕ) e sua incerteza (U_{GCI}) obtida com o estimador GCI é

$$\phi = \phi_1 \pm U_{GCI}(\phi_1) \quad (3.37)$$

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

A Eq. (3.31) pode ser reescrita de forma a relacionar os três estimadores de erro vistos acima, U_{GCI} , U_{Δ} e U_{Ri} , o que resulta em

$$U_{GCI} = \frac{F_S U_{\Delta}}{(q^{p_L} - 1)} = F_S |U_{Ri}| \quad (3.38)$$

O estimador GCI foi concebido por Roache (1994) de tal forma que o seu resultado seja igual ao do estimador delta quando $q = p_L = 2$ para $F_S = 3$, o que se verifica diretamente da Eq. (3.38).

3.5 ESTIMADORES MULTICOEFICIENTE

A seguir são introduzidos três novos estimadores do erro de discretização: o estimador bicoeficiente (U_{bi}), o estimador tricoeficiente (U_{tri}) e o estimador multicoeficiente (U_{mc}). Eles seguem a mesma concepção usada na obtenção da extrapolação de Richardson, Eq. (3.8), e no estimador de Richardson, Eq. (3.10). Isto é, conforme mostrado na seção 3.2, o valor estimado para a solução analítica exata (ϕ_{∞}), Eq. (3.8), foi obtido considerando-se: um único coeficiente (K_U) na expressão da incerteza, Eq. (3.14); duas soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 obtidas em duas malhas h_1 e h_2 ; e o valor da ordem assintótica (p_L) do erro de discretização. Este procedimento pode ser generalizado para levar em conta o número de coeficientes desejado, de acordo com a própria sugestão feita por Richardson (1910), mas não explorada por ele. Quanto mais coeficientes são usados, espera-se que o valor da incerteza se aproxime mais do valor dado pela equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2). Porém, para fazer isso, um número maior de soluções numéricas da mesma variável é necessário, assim como o conhecimento das ordens verdadeiras do erro de discretização. De forma geral, o número de coeficientes possível de considerar é igual ao número de soluções numéricas menos a unidade, conforme se mostra a seguir.

3.5.1 Estimador Bicoeficiente

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

$$U_{bi}(\phi) = \phi_{\infty} - \phi \quad (3.39)$$

onde ϕ é a solução numérica calculada com uma malha cujo tamanho de seus elementos é h ; e ϕ_∞ é o valor estimado para a solução analítica exata, conforme expressões fornecidas abaixo. Neste estimador, considera-se que a incerteza é dada por dois coeficientes, isto é,

$$U_{bi} = K_1 h^{p_L} + K_2 h^{p_L + \Delta p} \quad (3.40)$$

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. (3.2), ou seja, é a segunda ordem verdadeira.

Com a Eq. (3.40) aplicada a três malhas diferentes (h_1 , h_2 e h_3) e considerando-se a Eq. (3.39), tem-se

$$\begin{aligned} \phi_\infty - \phi_1 &= K_1 h_1^{p_L} + K_2 h_1^{p_L + \Delta p} \\ \phi_\infty - \phi_2 &= K_1 h_2^{p_L} + K_2 h_2^{p_L + \Delta p} \\ \phi_\infty - \phi_3 &= K_1 h_3^{p_L} + K_2 h_3^{p_L + \Delta p} \end{aligned} \quad (3.41)$$

Os dados para o sistema de Eqs. (3.41) são: ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 ; h_1 , h_2 e h_3 ; p_L e $(p_L + \Delta p)$; e as incógnitas são: ϕ_∞ , K_1 e K_2 . Aqui, esse sistema é resolvido apenas para o caso particular em que a razão de refino (q) entre as três malhas é constante, isto é,

$$q = \frac{h_2}{h_1} = \frac{h_3}{h_2} \quad (3.42)$$

Neste caso, apresentam-se a seguir três soluções para ϕ_∞ que correspondem a três casos de ordens verdadeiras (p_V) na equação do erro de discretização. São elas:

$$\phi_\infty = \frac{[q^3 \phi_1 - q(q+1)\phi_2 + \phi_3]}{(q^3 - q^2 - q + 1)} \quad (p_V = 1 \text{ e } 2) \quad (3.43)$$

$$\phi_\infty = \frac{[q^5 \phi_1 - q^2(q+1)\phi_2 + \phi_3]}{(q^5 - q^3 - q^2 + 1)} \quad (p_V = 2 \text{ e } 3) \quad (3.44)$$

$$\phi_{\infty} = \frac{[q^6\phi_1 - q^2(q^2+1)\phi_2 + \phi_3]}{(q^6 - q^4 - q^2 + 1)} \quad (p_V = 2 \text{ e } 4) \quad (3.45)$$

Tendo-se obtido ϕ_{∞} com uma das Eqs. (3.43) a (3.45), de acordo com cada caso de ordens verdadeiras, a incerteza de cada uma das três soluções numéricas ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 pode ser calculada através da Eq. (3.39). Conforme a Eq. (3.42), ϕ_1 é a solução numérica obtida na malha mais fina e ϕ_3 , na malha mais grossa, enquanto que ϕ_2 é a solução numérica da malha intermediária. Para o caso particular da razão de refino de malha (q) igual a dois, as Eqs. (3.43) a (3.45) se reduzem a

$$\phi_{\infty} = \frac{(8\phi_1 - 6\phi_2 + \phi_3)}{3} \quad (q = 2, p_V = 1 \text{ e } 2) \quad (3.46)$$

$$\phi_{\infty} = \frac{(32\phi_1 - 12\phi_2 + \phi_3)}{21} \quad (q = 2, p_V = 2 \text{ e } 3) \quad (3.47)$$

$$\phi_{\infty} = \frac{(64\phi_1 - 20\phi_2 + \phi_3)}{45} \quad (q = 2, p_V = 2 \text{ e } 4) \quad (3.48)$$

A incerteza calculada através do estimador bicoeficiente, Eq. (3.40), só fornece o valor correto do erro de discretização se

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} + C_E h^{p_2} \quad (3.49)$$

onde C_1 e C_E são coeficientes. Para a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), ser colocada na forma da Eq. (3.49), é necessário que

$$C_E = C_2 + C_3 h^{p_3 - p_2} + C_4 h^{p_4 - p_2} + \dots \quad (3.50)$$

Através desta equação, observa-se que o coeficiente C_E também depende do tamanho (h) dos elementos da malha. Na Eq. (3.40) foram admitidos dois coeficientes: K_1 e K_2 . Comparando-se as Eqs. (3.2), (3.40), (3.49) e (3.50), verifica-se que K_1 tem o mesmo papel de C_1 , isto é, independe de h . Mas a hipótese de K_2 também ser independente de h é incorreta porque ele desempenha o mesmo papel do coeficiente C_E , Eq. (3.50), que depende de h . Isso implica que na

maioria das aplicações é de se esperar que a incerteza calculada através do estimador bicoeficiente, Eq. (3.40), seja diferente do erro de discretização. O quão diferente vai depender da complexidade de cada problema e do h usado.

Define-se a **efetividade do estimador bicoeficiente** (θ_{bi}) pela razão entre a sua incerteza (U_{bi}) e o erro de discretização (E), ou seja,

$$\theta_{bi} = \frac{U_{bi}}{E} \quad (3.51)$$

A efetividade assintótica é definida para a situação limite em que $h \rightarrow 0$. Neste caso, o coeficiente C_E , da Eq. (3.50), tende a C_2 . Assim, a incerteza (U_{bi}), dada pela Eq. (3.40), tende ao erro de discretização (E), dado pela Eq. (3.49), resultando em

$$\theta_{bi} \rightarrow 1 \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (3.52)$$

Este resultado é corroborado pelos exemplos da seção 3.6.

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

$$\phi = \phi_1 + U_{bi}(\phi_1) \quad (3.53)$$

onde ϕ_1 é a solução numérica obtida com a malha fina, isto é, com uma malha cujo tamanho (h) dos elementos é h_1 ; e lembrando-se que o cálculo da incerteza (U_{bi}) também envolve ϕ_2 e ϕ_3 .

3.5.2 Estimador Tricoeficiente

Para o estimador tricoeficiente (U_{tri}), a incerteza é calculada com

$$U_{tri}(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (3.54)$$

onde ϕ é a solução numérica calculada com uma malha cujo tamanho de seus elementos é h ; e ϕ_∞ é o valor estimado para a solução analítica exata, conforme expressões fornecidas abaixo. Neste estimador, considera-se que a incerteza é dada por três coeficientes, isto é,

$$U_{tri} = K_1 h^{p_L} + K_2 h^{p_L+\Delta p} + K_3 h^{p_L+2\Delta p} \quad (3.55)$$

onde K_1 , K_2 e K_3 são os três coeficientes da incerteza que são admitidos serem independentes de h , e p_L , $(p_L+\Delta p)$ e $(p_L+2\Delta p)$ são as três primeiras ordens verdadeiras (p_V) da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), admitindo-se que a diferença entre elas seja constante e igual a Δp .

Com a Eq. (3.55) aplicada a quatro malhas diferentes (h_1 , h_2 , h_3 e h_4) e considerando-se a Eq. (3.54), tem-se

$$\begin{aligned} \phi_\infty - \phi_1 &= K_1 h_1^{p_L} + K_2 h_1^{p_L+\Delta p} + K_3 h_1^{p_L+2\Delta p} \\ \phi_\infty - \phi_2 &= K_1 h_2^{p_L} + K_2 h_2^{p_L+\Delta p} + K_3 h_2^{p_L+2\Delta p} \\ \phi_\infty - \phi_3 &= K_1 h_3^{p_L} + K_2 h_3^{p_L+\Delta p} + K_3 h_3^{p_L+2\Delta p} \\ \phi_\infty - \phi_4 &= K_1 h_4^{p_L} + K_2 h_4^{p_L+\Delta p} + K_3 h_4^{p_L+2\Delta p} \end{aligned} \quad (3.56)$$

Os dados para o sistema de Eqs. (3.56) são: ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 e ϕ_4 ; h_1 , h_2 , h_3 e h_4 ; p_L , $(p_L+\Delta p)$ e $(p_L+2\Delta p)$; e as incógnitas são: ϕ_∞ , K_1 , K_2 e K_3 . Aqui, o sistema de Eqs. (3.56) é resolvido apenas para o caso particular em que a razão de refino (q) entre as quatro malhas é constante, isto é,

$$q = \frac{h_2}{h_1} = \frac{h_3}{h_2} = \frac{h_4}{h_3} \quad (3.57)$$

Apenas para diminuir a extensão das expressões de ϕ_∞ , também é considerado que $q = 2$. Desta forma, obtém-se

$$\phi_\infty = \frac{(192\phi_1 - 168\phi_2 + 42\phi_3 - 3\phi_4)}{63} \quad (q=2 \text{ e } p_V = 1, 2 \text{ e } 3) \quad (3.58)$$

$$\phi_\infty = \frac{(1536\phi_1 - 672\phi_2 + 84\phi_3 - 3\phi_4)}{945} \quad (q=2 \text{ e } p_V = 2, 3 \text{ e } 4) \quad (3.59)$$

$$\phi_\infty = \frac{(552960\phi_1 - 181440\phi_2 + 11340\phi_3 - 135\phi_4)}{382725} \quad (q=2 \text{ e } p_V = 2, 4 \text{ e } 6) \quad (3.60)$$

Obtido ϕ_∞ com uma das Eqs. (3.58) a (3.60), de acordo com cada caso de ordens verdadeiras (p_V), a incerteza de cada uma das quatro soluções numéricas (ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 e ϕ_4) pode ser calculada conforme as Eqs. (3.54). De acordo com a Eq. (3.57), ϕ_1 é a solução numérica obtida na malha mais fina e ϕ_4 , na malha mais grossa, enquanto que ϕ_2 e ϕ_3 são soluções numéricas provenientes de malhas intermediárias.

A incerteza calculada através do estimador tricoeficiente, Eq. (3.55), só fornece o valor correto do erro de discretização se

$$E(\phi) = C_1 h^{p_1} + C_2 h^{p_2} + C_E h^{p_3} \quad (3.61)$$

onde C_E é um coeficiente. Para a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), ser colocada na forma da Eq. (3.61), é necessário que

$$C_E = C_3 + C_4 h^{p_4 - p_3} + C_5 h^{p_5 - p_3} + \dots \quad (3.62)$$

Através desta equação, observa-se que o coeficiente C_E também depende do tamanho (h) dos elementos da malha. Na Eq. (3.55) foram admitidos três coeficientes: K_1 , K_2 e K_3 . Comparando-se as Eqs. (3.2), (3.55), (3.61) e (3.62), verifica-se que K_1 e K_2 têm o mesmo papel de C_1 e C_2 , isto é, independem de h . Mas a hipótese de K_3 também ser independente de h é incorreta porque ele desempenha o mesmo papel do coeficiente C_E , Eq. (3.62), que depende de h . Isso implica que na maioria das aplicações é de se esperar que a incerteza calculada através do estimador tricoeficiente, Eq. (3.55), seja diferente do erro de discretização. O quão diferente vai depender da complexidade de cada problema e do h usado.

Define-se a **efetividade do estimador tricoeficiente** (θ_{tri}) pela razão entre a sua incerteza (U_{tri}) e o erro de discretização (E), ou seja,

$$\theta_{tri} = \frac{U_{tri}}{E} \quad (3.63)$$

A efetividade assintótica é definida para a situação limite em que $h \rightarrow 0$. Neste caso, o coeficiente C_E , da Eq. (3.62), tende a C_3 . Assim, a incerteza (U_{tri}), dada pela Eq. (3.55), tende ao erro de discretização (E), dado pela Eq. (3.61), resultando em

$$\theta_{tri} \rightarrow 1 \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (3.64)$$

Este resultado é corroborado pelos exemplos da seção 3.6.

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

$$\phi = \phi_1 + U_{tri}(\phi_1) \quad (3.65)$$

onde ϕ_1 é a solução numérica obtida com a malha fina, isto é, com uma malha cujo tamanho (h) dos elementos é h_1 ; e lembrando-se que o cálculo da incerteza (U_{tri}) também envolve ϕ_2 , ϕ_3 e ϕ_4 .

3.5.3 Estimador Multicoeficiente

Para o estimador multicoeficiente (U_{mc}), a incerteza é calculada com

$$U_{mc}(\phi) = \phi_{\infty} - \phi \quad (3.66)$$

onde ϕ é a solução numérica calculada com uma malha cujo tamanho dos elementos é h ; e ϕ_{∞} é o valor estimado para a solução analítica exata, conforme expressões fornecidas abaixo. Neste estimador, considera-se que a incerteza é dada por “ $m-1$ ” coeficientes, isto é,

$$U_{mc}(\phi) = K_1 h^{p_L} + K_2 h^{p_2} + K_3 h^{p_3} + \dots + K_{m-1} h^{p_{m-1}} \quad (3.67)$$

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

Com a Eq. (3.67) aplicada a m malhas diferentes ($h_1, h_2, h_3, \dots, h_m$) e considerando-se a Eq. (3.66), tem-se

$$\begin{aligned} \phi_{\infty} - \phi_1 &= K_1 h_1^{p_L} + K_2 h_1^{p_2} + K_3 h_1^{p_3} + \dots + K_{m-1} h_1^{p_{m-1}} \\ \phi_{\infty} - \phi_2 &= K_1 h_2^{p_L} + K_2 h_2^{p_2} + K_3 h_2^{p_3} + \dots + K_{m-1} h_2^{p_{m-1}} \\ \phi_{\infty} - \phi_3 &= K_1 h_3^{p_L} + K_2 h_3^{p_2} + K_3 h_3^{p_3} + \dots + K_{m-1} h_3^{p_{m-1}} \end{aligned} \quad (3.68)$$

$$\begin{aligned} \vdots &= \vdots = \vdots \\ \phi_\infty - \phi_m &= K_1 h_m^{p_1} + K_2 h_m^{p_2} + K_3 h_m^{p_3} + \dots + K_{m-1} h_m^{p_{m-1}} \end{aligned}$$

As incógnitas do sistema de Eqs. (3.68) são ϕ_∞ e os coeficientes $K_1, K_2, K_3, \dots, K_{m-1}$. A Eq. (3.68) pode ser posta em forma matricial, isto é,

$$[h][K] = [\phi] \quad (3.69)$$

ou

$$\begin{bmatrix} 1 & -h_1^{p_1} & -h_1^{p_2} & -h_1^{p_3} & \dots & -h_1^{p_{m-1}} \\ 1 & -h_2^{p_1} & -h_2^{p_2} & -h_2^{p_3} & \dots & -h_2^{p_{m-1}} \\ 1 & -h_3^{p_1} & -h_3^{p_2} & -h_3^{p_3} & \dots & -h_3^{p_{m-1}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & -h_m^{p_1} & -h_m^{p_2} & -h_m^{p_3} & \dots & -h_m^{p_{m-1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_\infty \\ K_1 \\ K_2 \\ \vdots \\ K_{m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_m \end{bmatrix} \quad (3.70)$$

Obtida a solução do sistema de Eqs. (3.70), a incerteza de cada solução numérica (ϕ) pode ser calculada conforme a Eq. (3.66). Nesta seção, h_1 representa a malha mais fina, h_2, h_3, \dots , são malhas sucessivamente mais grossas, e h_m é a malha mais grossa de todas.

3.6 EXEMPLOS

Nesta seção são apresentados exemplos de aplicação de cinco estimadores de erro, descritos neste capítulo, às seis aproximações numéricas da Tab. 2.1 que foram deduzidas nas seções 2.3 a 2.8. Como são aproximações numéricas isoladas, isto é, não se referem a equações diferenciais com duas ou mais aproximações, o erro de discretização (E) é igual ao erro de truncamento (ε).

Nas Tabs. 3.1 a 3.6 é mostrada a razão entre incerteza (U) e erro (ε), em função de h , para as aproximações numéricas λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m . Os valores destas aproximações numéricas e seus erros encontram-se nas Tabs. 2.2 a 2.7 e foram obtidos para $h = 4, 2, 1, \frac{1}{2}, \dots$. Nas Tabs. 3.1 a 3.6 não é apresentada a razão U/ε para $h = 4$. Isso ocorre porque são necessárias pelo menos duas soluções numéricas para calcular qualquer incerteza. Além disso, a

designação “não se aplica”, mencionada nas tabelas, deve-se também ao número mínimo necessário de soluções numéricas para calcular a incerteza, que varia conforme o estimador de erro usado. A incerteza é calculada com os estimadores delta (U_{Δ}), de Richardson (U_{Ri}), GCI (U_{GCI}), bicoeficiente (U_{bi}) e tricoeficiente (U_{tri}).

Constata-se nas Tabs. 3.1 a 3.6 que os estimadores de Richardson (U_{Ri}), bicoeficiente (U_{bi}) e tricoeficiente (U_{tri}) sempre tendem ao valor correto de ε quando $h \rightarrow 0$, ou até mesmo fornecem o seu valor correto em qualquer h . Estes resultados estão de acordo com as previsões: Eqs. (3.22), (3.52) e (3.64). Alguns casos específicos são comentados a seguir.

No caso da aproximação numérica λ_{UDS}^i , os valores mostrados na Tab. 3.1 também são exibidos na Fig. 3.9. Percebe-se nesta figura que $U_{GCI}/|\varepsilon| \rightarrow 3$ para $h \rightarrow 0$, enquanto que para os demais estimadores, $U/|\varepsilon| \rightarrow 1$. Estes resultados estão de acordo com as previsões: Eqs. (3.22), (3.29), (3.36), (3.52) e (3.64). Na Tab. 3.1, pode-se ver que o estimador tricoeficiente fornece o valor correto de ε em qualquer valor de h . Isso ocorre porque o erro de truncamento é função de três termos, conforme a Eq. (2.40) e, desta forma, todos os outros estimadores não fornecem o valor correto do erro.

Tabela 3.1 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε) para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a montante (λ_{UDS}^i).

h	U_{Δ} / ε	U_{Ri} / ε	U_{GCI} / ε	U_{bi} / ε	U_{tri} / ε
2,000000000E+00	6,790123457E-01	6,790123457E-01	2,037037037E+00	não se aplica	não se aplica
1,000000000E+00	8,356940510E-01	8,356940510E-01	2,507082153E+00	9,773371105E-01	não se aplica
5,000000000E-01	9,171758316E-01	9,171758316E-01	2,751527495E+00	9,945689070E-01	1,000000000E+00
2,500000000E-01	9,584510553E-01	9,584510553E-01	2,875353166E+00	9,986704338E-01	1,000000000E+00
1,250000000E-01	9,791949344E-01	9,791949344E-01	2,937584803E+00	9,996710662E-01	1,000000000E+00
6,250000000E-02	9,895902570E-01	9,895902570E-01	2,968770771E+00	9,999181946E-01	1,000000000E+00
3,125000000E-02	9,947933798E-01	9,947933798E-01	2,984380139E+00	9,999796019E-01	1,000000000E+00
1,562500000E-02	9,973962594E-01	9,973962594E-01	2,992188778E+00	9,999949071E-01	1,000000000E+00
7,812500000E-03	9,986980229E-01	9,986980229E-01	2,996094069E+00	9,999987276E-01	1,000000000E+00
3,906250000E-03	9,993489849E-01	9,993489849E-01	2,998046955E+00	9,999996820E-01	1,000000000E+00

As estimativas do valor de ε , referentes a λ_{CDS}^i , são mostradas na Tab. 3.2. Pode-se ver que os estimadores de Richardson, bicoeficiente e tricoeficiente fornecem o valor correto de ε

em qualquer valor de h . Isso ocorre porque o erro de truncamento é função de um único termo, conforme a Eq. (2.41).

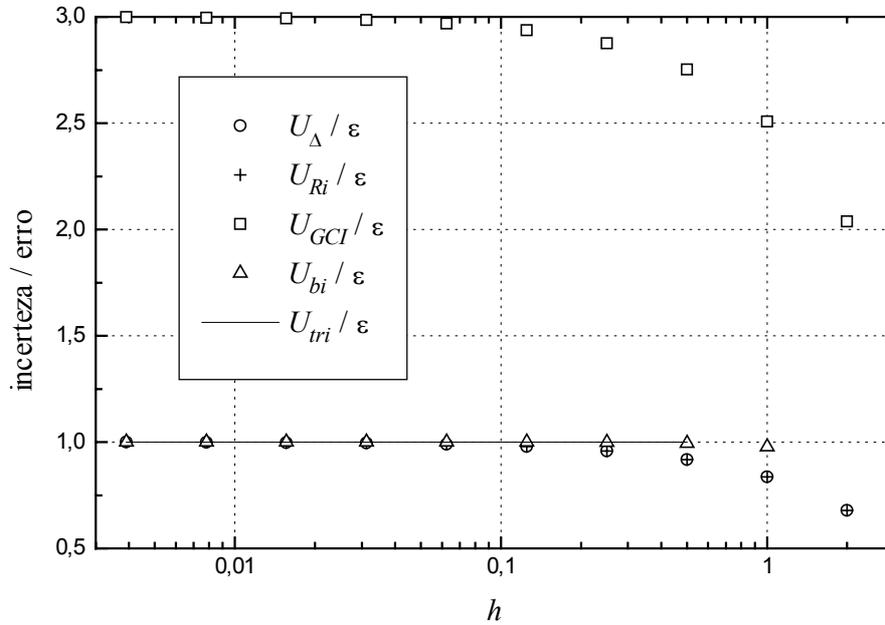


Figura 3.9 Razão entre incerteza (U) e erro (ε) para a aproximação numérica λ_{UDS}^i .

O caso de λ_{DDS}^i é muito semelhante a λ_{UDS}^i , que já foi comentado acima. Como ε apresenta três termos, Eq. (2.42), apenas o estimador tricoeficiente consegue prever seu valor correto em qualquer h , conforme a Tab. 3.3. U_{Ri} e U_{bi} tendem a ε para $h \rightarrow 0$; mas para o mesmo h , o resultado do U_{bi} é mais próximo de ε do que U_{Ri} porque ele consegue representar erros com dois coeficientes.

No caso de λ_{DDS-2}^i , o erro de truncamento depende de dois coeficientes, de acordo com a Eq. (2.43). Assim, os estimadores bicoeficiente e tricoeficiente conseguem prever o valor correto de ε em qualquer h , conforme a Tab. 3.4. Isso não ocorre com o estimador de Richardson pois ele só consegue representar ε com apenas um coeficiente. Entretanto, à medida que $h \rightarrow 0$, o primeiro termo de ε da Eq. (2.43) torna-se o dominante e $U_{Ri} \rightarrow \varepsilon$, o que pode ser visto na Tab. 3.4.

Tabela 3.2 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε) para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com diferença central (λ_{CDS}^i).

h	U_{Δ} / ε	U_{Ri} / ε	U_{GCI} / ε	U_{bi} / ε	U_{tri} / ε
2,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	não se aplica	não se aplica
1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	não se aplica
5,00000000E-01	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	1,00000000E+00
2,50000000E-01	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	1,00000000E+00
1,25000000E-01	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	1,00000000E+00
6,25000000E-02	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	1,00000000E+00
3,12500000E-02	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	1,00000000E+00
1,56250000E-02	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	1,00000000E+00
7,81250000E-03	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	1,00000000E+00
3,90625000E-03	3,00000000E+00	1,00000000E+00	3,00000000E+00	1,00000000E+00	1,00000000E+00

Tabela 3.3 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε) para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a jusante (λ_{DDS}^i).

h	U_{Δ} / ε	U_{Ri} / ε	U_{GCI} / ε	U_{bi} / ε	U_{tri} / ε
2,00000000E+00	1,336283186E+00	1,336283186E+00	4,008849558E+00	não se aplica	não se aplica
1,00000000E+00	1,167865707E+00	1,167865707E+00	3,503597122E+00	9,808153477E-01	não se aplica
5,00000000E-01	1,083697689E+00	1,083697689E+00	3,251093067E+00	9,950031230E-01	1,00000000E+00
2,50000000E-01	1,041766300E+00	1,041766300E+00	3,125298900E+00	9,987246931E-01	1,00000000E+00
1,25000000E-01	1,020859340E+00	1,020859340E+00	3,062578021E+00	9,996778480E-01	1,00000000E+00
6,25000000E-02	1,010423308E+00	1,010423308E+00	3,031269923E+00	9,999190423E-01	1,00000000E+00
3,12500000E-02	1,005210011E+00	1,005210011E+00	3,015630033E+00	9,999797078E-01	1,00000000E+00
1,56250000E-02	1,002604588E+00	1,002604588E+00	3,007813765E+00	9,999949204E-01	1,00000000E+00
7,81250000E-03	1,001302189E+00	1,001302189E+00	3,003906567E+00	9,999987293E-01	1,00000000E+00
3,90625000E-03	1,000651068E+00	1,000651068E+00	3,001953204E+00	9,999996822E-01	1,00000000E+00

Para $p_L = 1$ e $q = 2$, da Eq. (3.29), a razão entre o valor da incerteza calculada com o estimador delta e o erro de truncamento tende à unidade quando $h \rightarrow 0$, isto é, $U_{\Delta}/|\varepsilon| \rightarrow 1$; é o que se observa nas Tabs. 3.1 e 3.3. No caso de $p_L = 2$ e $q = 2$, da Eq. (3.29), $U_{\Delta}/|\varepsilon| \rightarrow 3$; este é o resultado mostrado nas Tabs. 3.2, 3.4, 3.5 e 3.6.

A razão entre o valor da incerteza calculada pelo estimador GCI e o erro de truncamento tende ao valor do fator de segurança (F_S) quando $h \rightarrow 0$, conforme o resultado da Eq. (3.36). É exatamente o que se verifica nas Tabs. 3.1 a 3.6, lembrando-se que o valor usado para F_S foi três.

Tabela 3.4 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε) para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 2 pontos a jusante (λ_{DDS-2}^i).

h	U_{Δ} / ε	U_{Ri} / ε	U_{GCI} / ε	U_{bi} / ε	U_{tri} / ε
2,000000000E+00	3,631578947E+00	1,210526316E+00	3,631578947E+00	não se aplica	não se aplica
1,000000000E+00	3,342857143E+00	1,114285714E+00	3,342857143E+00	1,000000000E+00	não se aplica
5,000000000E-01	3,179104478E+00	1,059701493E+00	3,179104478E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
2,500000000E-01	3,091603053E+00	1,030534351E+00	3,091603053E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
1,250000000E-01	3,046332046E+00	1,015444015E+00	3,046332046E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
6,250000000E-02	3,023300971E+00	1,007766990E+00	3,023300971E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
3,125000000E-02	3,011684518E+00	1,003894839E+00	3,011684518E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
1,562500000E-02	3,005850804E+00	1,001950268E+00	3,005850804E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
7,812500000E-03	3,002927543E+00	1,000975848E+00	3,002927543E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
3,906250000E-03	3,001464308E+00	1,000488103E+00	3,001464308E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00

Tabela 3.5 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε) para a aproximação numérica da derivada central de 2ª ordem (λ_{CDS}^{ii}).

h	U_{Δ} / ε	U_{Ri} / ε	U_{GCI} / ε	U_{bi} / ε	U_{tri} / ε
2,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	não se aplica	não se aplica
1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	não se aplica
5,000000000E-01	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
2,500000000E-01	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
1,250000000E-01	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
6,250000000E-02	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
3,125000000E-02	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
1,562500000E-02	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
7,812500000E-03	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
3,906250000E-03	3,000000000E+00	1,000000000E+00	3,000000000E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00

Na Tab. 3.7 faz-se a representação da solução numérica de λ_{UDS}^i , obtida para $h = \frac{1}{2}$, e de sua incerteza de acordo com cinco tipos de estimadores de erro apresentados neste capítulo: Eqs. (3.23), (3.30), (3.37), (3.53) e (3.65). Também são apresentados os valores mínimo e máximo, isto é, a banda ou o intervalo dentro do qual se estima que está a solução analítica em função da incerteza calculada com cada estimador de erro. A solução analítica exata é $\Lambda^i = 2048$, conforme explicado na subseção 2.9.1 e, de acordo com a Tab. 2.2, a solução numérica é $\lambda_{UDS}^i =$

1863,875000 e o seu erro de truncamento é $\varepsilon = 184,125000$. Observa-se na Tab. 3.7 que as incertezas dos estimadores delta, de Richardson e bicoeficiente não são confiáveis, ou seja, seus limites superiores não limitam o erro, enquanto que o estimador *GCI*, sim. O estimador tricoeficiente fornece o valor exato do erro; este resultado era esperado já que ε é função de apenas três termos, conforme a Eq. (2.40).

Tabela 3.6 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε) para a aproximação numérica da média da variável dependente (λ_m).

h	U_{Δ} / ε	U_{Ri} / ε	U_{GCI} / ε	U_{bi} / ε	U_{tri} / ε
2,000000000E+00	2,924528302E+00	9,748427673E-01	2,924528302E+00	não se aplica	não se aplica
1,000000000E+00	2,981220657E+00	9,937402191E-01	2,981220657E+00	1,000000000E+00	não se aplica
5,000000000E-01	2,995310668E+00	9,984368894E-01	2,995310668E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
2,500000000E-01	2,998828011E+00	9,996093368E-01	2,998828011E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
1,250000000E-01	2,999707024E+00	9,999023414E-01	2,999707024E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
6,250000000E-02	2,999926757E+00	9,999755858E-01	2,999926757E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
3,125000000E-02	2,999981689E+00	9,999938965E-01	2,999981689E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
1,562500000E-02	2,999995422E+00	9,999984741E-01	2,999995422E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
7,812500000E-03	2,999998855E+00	9,999996185E-01	2,999998855E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00
3,906250000E-03	2,999999713E+00	9,999999044E-01	2,999999713E+00	1,000000000E+00	1,000000000E+00

Tabela 3.7 Representação da solução de λ_{UDS}^i , em $h = 1/2$, e de sua incerteza associada; erro de truncamento, $\varepsilon = 184,125000$; solução analítica exata, $\Lambda^i = 2048$.

estimador	solução numérica e incerteza	valor mínimo	valor máximo
delta	$1,863875000 \times 10^3 \pm 0,168875000 \times 10^3$	$1,695000000 \times 10^3$	$2,032750000 \times 10^3$
Richardson	$1,863875000 \times 10^3 + 0,168875000 \times 10^3$	$1,863875000 \times 10^3$	$2,032750000 \times 10^3$
<i>GCI</i>	$1,863875000 \times 10^3 \pm 0,506625001 \times 10^3$	$1,357249999 \times 10^3$	$2,370500001 \times 10^3$
bicoeficiente	$1,863875000 \times 10^3 + 0,183125000 \times 10^3$	$1,863875000 \times 10^3$	$2,047000000 \times 10^3$
tricoeficiente	$1,863875000 \times 10^3 + 0,184125000 \times 10^3$	$1,863875000 \times 10^3$	$2,048000000 \times 10^3$

Nos casos mais gerais em que a equação do erro de discretização, Eq. (3.2), é composta por mais de três termos, a efetividade do estimador tricoeficiente não resulta na unidade. Mas é

de se esperar, conforme se observa nas Tabs. 3.1 a 3.6, que quanto mais coeficientes são usados nos estimadores do tipo de Richardson (estimadores de Richardson, bicoeficiente, tricoeficiente e multicoeficiente), mais acurada seja a incerteza.

3.7 RESUMO DO CAPÍTULO 3

Foram definidos os conceitos de erro de discretização e incerteza de uma solução numérica, e os conceitos de efetividade, confiabilidade e acurácia de uma estimativa de erro ou incerteza. Foram descritos três estimadores de erros de discretização que estão disponíveis na literatura: os estimadores de Richardson, delta e *GCI*; e introduzidos outros três: os estimadores bicoeficiente, tricoeficiente e multicoeficiente. Foram apresentados exemplos de aplicação para os estimadores de erro com base nas aproximações numéricas do Cap. 2.

Foram apresentadas previsões do valor para o qual tende a efetividade dos estimadores de erro na situação limite do tamanho (h) dos elementos da malha tender a zero. Estas previsões foram corroboradas pelos exemplos apresentados. Verificou-se que para os estimadores do tipo de Richardson (estimadores de Richardson, bicoeficiente, tricoeficiente e multicoeficiente), quanto maior é o número de coeficientes considerados no cálculo da incerteza, mais acurada ela é.

ORDENS EFETIVA E APARENTE

Além dos conceitos de ordens verdadeiras e assintótica, vistas no Cap. 2, são apresentados, neste capítulo, os conceitos e expressões para o cálculo da ordem efetiva do erro de discretização e da ordem aparente da incerteza de soluções numéricas. Estes dois novos tipos de ordens permitem verificar *a posteriori* das soluções numéricas se a ordem assintótica dos erros de truncamento é atingida, lembrando-se que esta ordem é um resultado teórico e obtido *a priori* das soluções numéricas. Estas verificações só são possíveis de se realizar quando as demais fontes de erro, isto é, os erros de iteração, de arredondamento e de programação não existem ou são muito menores do que os erros de truncamento. Também são apresentados exemplos de cálculo de ordens efetiva e aparente.

4.1 ORDEM EFETIVA

A ordem efetiva (p_E) é definida como a inclinação local da curva do erro de discretização (E) da solução numérica (ϕ) *versus* o tamanho (h) dos elementos da malha num gráfico logarítmico; exemplos desta curva de erro podem ser vistos nas Figs. 2.2 e 2.3. Seu cálculo permite verificar na prática, isto é, *a posteriori* das soluções numéricas, se à medida que h é reduzido, a ordem do erro de discretização das soluções numéricas tende à ordem assintótica dos erros de truncamento, ordem esta que é um resultado teórico, obtido *a priori* das soluções numéricas. Matematicamente, a ordem efetiva (p_E) é obtida a partir de

$$C_E h^{p_E} = E(\phi) \tag{4.1}$$

onde C_E é um coeficiente que é admitido ser independente de h . A ordem efetiva pode ser obtida de duas formas: com o valor do erro de discretização dado pela Eq. (3.1), neste caso são necessárias duas soluções numéricas; ou com a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2),

usando-se apenas uma solução numérica. Estas duas formas são deduzidas nas duas subsecções a seguir.

4.1.1 Ordem Efetiva Baseada em Duas Soluções Numéricas

Aplicando-se a Eq. (4.1) a duas malhas diferentes, h_1 (malha fina) e h_2 (malha grossa), tem-se

$$C_E h_1^{p_E} = E(\phi_1) \quad (4.2)$$

$$C_E h_2^{p_E} = E(\phi_2) \quad (4.3)$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 são as soluções numéricas obtidas com as malhas fina e grossa, respectivamente. As Eqs. (4.2) e (4.3) formam um sistema de duas equações a duas incógnitas: C_E e p_E . Nestas duas equações, $E(\phi_1)$ e $E(\phi_2)$, h_1 e h_2 são conhecidos. Resolvendo-se este sistema, obtém-se

$$p_E = \frac{\log\left[\frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)}\right]}{\log(q)} \quad (4.4)$$

onde a razão de refino de malha (q) é

$$q = \frac{h_2}{h_1} \quad (4.5)$$

Considerando-se a definição do erro de discretização, Eq. (3.1), na Eq. (4.4), conclui-se que a ordem efetiva também pode ser calculada através de

$$p_E = \frac{\log\left(\frac{\Phi - \phi_2}{\Phi - \phi_1}\right)}{\log(q)} \quad (4.6)$$

onde Φ é a solução analítica exata.

A ordem efetiva (p_E) calculada através da Eq. (4.4) ou (4.6) precisa de duas soluções numéricas, ϕ_1 e ϕ_2 . Assim, seu valor representa a inclinação média da curva do erro de discretização, *versus* h , entre h_1 e h_2 . Conhecendo-se a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), é possível calcular a ordem aparente com base em apenas uma solução numérica, conforme se mostra na subseção a seguir.

4.1.2 Ordem Efetiva Baseada em Uma Solução Numérica

Aplicando-se a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), a duas malhas diferentes, h_1 (malha fina) e h_2 (malha grossa), tem-se

$$E(\phi_1) = C_1 h_1^{p_L} + C_2 h_1^{p_2} + C_3 h_1^{p_3} + \dots \quad (4.7)$$

$$E(\phi_2) = C_1 h_2^{p_L} + C_2 h_2^{p_2} + C_3 h_2^{p_3} + \dots \quad (4.8)$$

A Eq. (4.7) pode ser reescrita por

$$E(\phi_1) = h_1^{p_L} (C_1 + C_2 h_1^{p_2 - p_L} + C_3 h_1^{p_3 - p_L} + \dots) \quad (4.9)$$

Isolando-se h_2 na Eq. (4.5) e substituindo o resultado de forma conveniente na Eq. (4.8), obtém-se

$$E(\phi_2) = q^{p_L} h_1^{p_L} (C_1 + C_2 h_2^{p_2 - p_L} + C_3 h_2^{p_3 - p_L} + \dots) \quad (4.10)$$

Define-se a **razão de redução do erro de discretização** (ψ_E) por

$$\psi_E = \frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)} \quad (4.11)$$

Substituindo-se $E(\phi_1)$ e $E(\phi_2)$, dados pelas Eqs. (4.9) e (4.10), na Eq. (4.11), chega-se a

$$\psi_E = q^{p_L} G \quad (4.12)$$

onde

$$G = \frac{(C_1 + C_2 h_2^{p_2 - p_L} + C_3 h_2^{p_3 - p_L} + \dots)}{(C_1 + C_2 h_1^{p_2 - p_L} + C_3 h_1^{p_3 - p_L} + \dots)} \quad (4.13)$$

Empregando-se a definição da razão de redução do erro de discretização (ψ_E), Eq. (4.11), a Eq. (4.4) para cálculo da ordem efetiva (p_E) pode ser reescrita por

$$p_E = \frac{\log(\psi_E)}{\log(q)} \quad (4.14)$$

Assim, com a Eq. (4.12) em (4.14), obtém-se

$$p_E = p_L + \Delta p \quad (4.15)$$

onde

$$\Delta p = \frac{\log(G)}{\log(q)} \quad (4.16)$$

Para ser possível o cálculo da ordem efetiva com base numa única malha, deve-se fazer a razão de refino de malha (q), Eq. (4.5), tender à unidade, isto é, $q \rightarrow 1$. Mas, fazendo-se isso, verifica-se que $G \rightarrow 1$, na Eq. (4.13), e, portanto, Δp , calculado com a Eq. (4.16), resulta numa indeterminação. Eliminando-se esta indeterminação, obtém-se

$$\Delta p = \frac{[C_2(p_2 - p_L)h_1^{p_2 - p_L} + C_3(p_3 - p_L)h_1^{p_3 - p_L} + \dots]}{(C_1 + C_2 h_1^{p_2 - p_L} + C_3 h_1^{p_3 - p_L} + \dots)} \quad (4.17)$$

onde h_1 representa a malha fina e a Eq. (4.17) substitui a Eq. (4.16) no cálculo da ordem efetiva através da Eq. (4.15).

Na subseção, a seguir, são analisados três casos com relação aos coeficientes C_i , da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), que determinam todos os valores possíveis de se obter para a ordem efetiva (p_E).

4.1.3 Valores Possíveis para a Ordem Efetiva

Para verificar os valores que a ordem efetiva (p_E) pode assumir, basta que se considere as Eqs. (4.13), (4.15) e (4.16), conforme se segue.

Caso I. No primeiro caso, o mais simples, a equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2), é constituída por um único termo, isto é, $C_1 \neq 0$ e $C_2 = C_3 = \dots = 0$. Portanto, da Eq. (4.13), $G = 1$. Da Eq. (4.16), isto implica que $\Delta p = 0$ e, a partir da Eq. (4.15), que $p_E = p_L$. Este resultado é válido para qualquer valor de h . Neste caso, a curva E versus h tem inclinação constante; um exemplo é a Fig. 1.7 obtida a partir da Eq. 1.21.

Caso II. A equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2), é constituída por dois ou mais termos mas todos os coeficientes C_i apresentam o mesmo sinal, isto é, todos são positivos ou todos são negativos. Assim, a partir da Eq. (4.13), obtém-se $G > 1$, pois $h_2 > h_1$. Da Eq. (4.16), isto implica que $\Delta p > 0$, já que $q > 1$. Finalmente, a partir da Eq. (4.15), conclui-se que $p_E > p_L$ em qualquer $h \neq 0$.

Caso III. A equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2), é constituída por dois ou mais termos e pelo menos dois dos coeficientes C_i têm sinais opostos. Analisa-se o caso particular de dois coeficientes, $C_1 > 0$ e $C_2 < 0$, que é suficiente para mostrar todos os resultados possíveis para p_E , e que se dividem em quatro subcasos. Lembrando-se que $h > 0$ e todos os seus expoentes são positivos, quem determina o sinal de cada termo do erro é o respectivo coeficiente.

- **Subcaso III-a.** Os valores de C_1, C_2, h_1, h_2, p_L e p_2 são tais que $G > 1$. Este resultado recai no caso II, já analisado acima, e que resulta em $p_E > p_L$.
- **Subcaso III-b.** Os valores de C_1, C_2, h_1, h_2, p_L e p_2 são tais que $0 < G < 1$. Portanto, da Eq. (4.16), $\Delta p < 0$. Neste subcaso considera-se que $|\Delta p| < p_L$. Assim, com a Eq. (4.15), obtém-se $0 < p_E < p_L$.
- **Subcaso III-c.** Os valores de C_1, C_2, h_1, h_2, p_L e p_2 são tais que $0 < G < 1$. Portanto, da Eq. (4.16), $\Delta p < 0$. Neste subcaso considera-se que $|\Delta p| \geq p_L$. Assim, a partir da Eq. (4.15), obtém-se $p_E \leq 0$.
- **Subcaso III-d.** Os valores de C_1, C_2, h_1, h_2, p_L e p_2 são tais que $G \leq 0$. Portanto, com as Eqs. (4.15) e (4.16), conclui-se que p_E é indefinido.

Em resumo, a ordem efetiva (p_E) só é igual à ordem assintótica (p_L), em qualquer h , se a equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2), for constituída por um único termo. Porém, geralmente existem vários ou infinitos termos nesta equação para $h \neq 0$. Portanto, p_E

normalmente é diferente de p_L , podendo assumir valores maiores ou menores do que p_L , valores negativos ou até mesmo ser indefinido. Mas, para $h \rightarrow 0$, $p_E \rightarrow p_L$ porque o primeiro termo do erro passa a dominar o seu valor total, conforme explicado na subseção 3.2.2. Estas previsões são corroboradas pelos exemplos que são apresentados na seção 4.3.

De acordo com as Eqs. (4.4) e (4.6), é necessário conhecer a solução analítica exata (Φ) da variável de interesse para calcular a ordem efetiva (p_E). Nos casos práticos, porém, quando a solução analítica é desconhecida, a ordem assintótica (p_L) é verificada através da ordem aparente (p_U), explicada na seção a seguir.

4.2 ORDEM APARENTE

A ordem aparente (p_U) é definida como a inclinação local da curva de incerteza (U) da solução numérica (ϕ) versus o tamanho (h) dos elementos da malha num gráfico logarítmico. Seu cálculo permite verificar na prática, isto é, *a posteriori* das soluções numéricas, se à medida que h é reduzido, a ordem da incerteza das soluções numéricas tende à ordem assintótica dos erros de truncamento, ordem esta que é um resultado teórico, obtido *a priori* das soluções numéricas. Matematicamente, a ordem aparente (p_U) é obtida a partir de

$$K_U h^{p_U} = U(\phi) \quad (4.18)$$

onde K_U é um coeficiente que é admitido ser independente de h .

No Cap. 3 foi visto que a **incerteza (U) da solução numérica** é calculada pela diferença entre a solução analítica estimada (ϕ_∞) para a variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (4.19)$$

Assim, com a Eq. (4.19) em (4.18), tem-se

$$K_U h^{p_U} = \phi_\infty - \phi \quad (4.20)$$

Escrevendo-se a Eq. (4.20) para três soluções numéricas (ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3), obtidas em três malhas diferentes (h_1 , h_2 e h_3), chega-se a

$$\begin{aligned} K_U h_1^{p_U} &= \phi_\infty - \phi_1 \\ K_U h_2^{p_U} &= \phi_\infty - \phi_2 \\ K_U h_3^{p_U} &= \phi_\infty - \phi_3 \end{aligned} \quad (4.21)$$

onde as incógnitas deste sistema são ϕ_∞ , K_U e p_U . Com a solução deste sistema, obtém-se

$$p_U = \frac{\log \left[\psi_U \frac{(q_{21}^{p_U} - 1)}{(q_{32}^{p_U} - 1)} \right]}{\log(q_{21})} \quad (\text{para } q \text{ variável: } q_{21} \neq q_{32}) \quad (4.22)$$

sendo q_{32} a razão de refino (q) entre as malhas grossa (h_3) e intermediária (h_2), e q_{21} entre as malhas fina (h_1) e intermediária (h_2), dadas por

$$q_{21} = \frac{h_2}{h_1} \quad (4.23)$$

$$q_{32} = \frac{h_3}{h_2} \quad (4.24)$$

e ψ_U é a **razão de convergência da solução numérica para a solução analítica**, definida por

$$\psi_U = \frac{(\phi_2 - \phi_3)}{(\phi_1 - \phi_2)} \quad (4.25)$$

No caso particular da razão de refino de malha (q) ser constante, isto é, $q_{21} = q_{32}$, tem-se

$$p_U = \frac{\log(\psi_U)}{\log(q)} \quad (\text{para } q \text{ constante}) \quad (4.26)$$

$$\phi_{\infty} = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_U} - 1)} \quad (4.27)$$

onde a razão de refino de malha (q) é dada pela Eq. (4.5).

A expressão para ϕ_{∞} , dada na Eq. (4.27), é a própria extrapolação de Richardson, já apresentada na Eq. (3.8), apenas trocando-se nesta p_L por p_U . Para o estimador de Richardson (U_{Ri}), Eq. (3.7), e com a Eq. (4.27), a incerteza da solução numérica (ϕ_1) obtida na malha fina (h_1) é

$$U_{Ri}(\phi_1) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_U} - 1)} \quad (4.28)$$

No cálculo da solução analítica estimada (ϕ_{∞}) e do estimador de Richardson (U_{Ri}) através das Eqs. (3.8) e (3.10), admitiu-se que a ordem assintótica do erro de discretização é igual à ordem assintótica do erro de truncamento. Já com as Eqs. (4.27) e (4.28), relaxa-se esta hipótese para que p_U seja obtido em função das próprias soluções numéricas, isto é, seu valor não é conhecido *a priori*.

O valor de p_U representa a inclinação média das incertezas U_1 , U_2 e U_3 entre h_1 e h_3 num gráfico logarítmico de U versus h . Mas, ao contrário da ordem efetiva (p_E), o cálculo da ordem aparente (p_U) não envolve a solução analítica exata (Φ). Portanto, em princípio, p_U pode ser calculado para qualquer problema e variável de interesse. O mesmo vale para ϕ_{∞} calculado com a Eq. (4.27). Porém, para calcular ϕ_{∞} e p_U são necessárias três soluções numéricas, enquanto que para p_E , apenas duas, como visto nas Eqs. (4.4) e (4.6).

Conforme mostra-se na seção 4.3, p_U só é igual a p_L , em qualquer h , se a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), for constituída por um único termo. Porém, geralmente existem vários ou infinitos termos nesta equação para $h \neq 0$. Portanto, p_U normalmente é diferente de p_L e, em princípio, pode assumir todos os valores possíveis para p_E , conforme as deduções apresentadas na subseção 4.1.3. Mas, para $h \rightarrow 0$, $p_U \rightarrow p_L$ porque o primeiro termo do erro passa a dominar o seu valor total, conforme explicado na subseção 3.2.2. Estas previsões são corroboradas pelos exemplos que são apresentados na seção 4.3, a seguir.

4.3 EXEMPLOS

São apresentados, a seguir, exemplos de aplicação das três formas de cálculo das ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) vistas nas seções 4.1 e 4.2: Eq. (4.4) para cálculo de p_E baseado em duas soluções numéricas; Eqs. (4.15) e (4.17) para cálculo de p_E baseado em uma solução numérica; e Eqs. (4.25) e (4.26) para cálculo de p_U baseado em três soluções numéricas. Os cálculos de p_E e p_U são aplicados às seis aproximações numéricas da Tab. 2.1, descritas nas seções 2.3 a 2.8: λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m . Os valores destas aproximações numéricas e seus erros encontram-se nas Tabs. 2.2 a 2.7, e foram obtidos para $h = 4, 2, 1, 1/2, \dots$. Suas ordens assintóticas (p_L) podem ser vistas na Tab. 2.8. Como são aproximações numéricas isoladas, isto é, não se referem a equações diferenciais com duas ou mais aproximações, o erro de discretização (E) é igual ao erro de truncamento (ε).

Nas Tabs. 4.1 a 4.6 são apresentados os resultados das ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) para as aproximações numéricas λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m . Esses resultados foram obtidos para o tamanho dos elementos da malha $h = 4, 2, 1, 1/2, \dots$. Alguns destes resultados também são exibidos nas Figs. 4.1 e 4.2. A designação “não se aplica” nas tabelas deve-se ao número mínimo de soluções numéricas que é necessário para calcular cada tipo de ordem. Nas Tabs. 4.1 a 4.6: o símbolo $p_E(q=2)$ se refere ao cálculo da ordem efetiva (p_E) baseado em duas soluções numéricas com a Eq. (4.4); o símbolo $p_E(q=1)$ se refere ao cálculo de p_E baseado em uma solução numérica com as Eqs. (4.15) e (4.17); e o símbolo $p_U(q=2)$ se refere ao cálculo de p_U baseado em três soluções numéricas com as Eqs. (4.25) e (4.26); sendo que o valor de q , dentro dos parênteses, indica a razão de refino de malha usada. Na Tab. 4.7, é mostrado o efeito da razão de refino de malha (q) sobre a ordem efetiva para dois valores de h diferentes; estes resultados são para a aproximação numérica λ_{UDS}^i .

Conforme já mencionado, o cálculo de p_E , baseado em uma solução numérica, é feito por meio das Eqs. (4.15) e (4.17). Seu resultado é apresentado nas Tabs. 4.1 a 4.6 e referenciado pelo símbolo $p_E(q=1)$. Conforme se vê nas Tabs. 4.2 e 4.5, para as aproximações numéricas λ_{CDS}^i e λ_{CDS}^{ii} , $p_E = 2$, portanto, não é função de h . Mas para as aproximações numéricas λ_{UDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_m , obtém-se

$$p_E(\lambda_{UDS}^i) = 1 + \frac{2h(h-16)}{(384-32h+h^2)} \quad (4.29)$$

$$p_E(\lambda_{DDS}^i) = 1 + \frac{2h(h+16)}{(384+32h+h^2)} \quad (4.30)$$

$$p_E(\lambda_{DDS-2}^i) = 2 + \frac{6h}{(64+6h)} \quad (4.31)$$

$$p_E(\lambda_m) = 2 + \frac{2h^2}{(h^2-640)} \quad (4.32)$$

Com base nos exemplos apresentados nas Tabs. 4.1 a 4.7, verificou-se que:

- 1) No caso em que a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), é composta por dois ou mais termos, as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) tendem monotonicamente à ordem assintótica (p_L) à medida que h é reduzido, com todos os valores sempre inferiores ou sempre superiores a p_L . Em síntese: p_E e $p_U \rightarrow p_L$ para $h \rightarrow 0$. Isso pode ser observado nas Tabs. 4.1, 4.3, 4.4 e 4.6, nas Figs. 4.1 e 4.2, e nas Eqs. (4.29) a (4.32). Além disso, p_E e p_U nunca atingem p_L para $h \neq 0$.

Tabela 4.1 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a montante (λ_{UDS}^i). Ordem assintótica, $p_L = 1$.

h	$p_E (q = 2)$	$p_E (q = 1)$	$p_U (q = 2)$
4,000000000E+00	não se aplica	6,470588235E-01	não se aplica
2,000000000E+00	7,476128384E-01	8,271604938E-01	não se aplica
1,000000000E+00	8,763256296E-01	9,150141643E-01	5,767885693E-01
5,000000000E-01	9,389826582E-01	9,579090292E-01	8,047591849E-01
2,500000000E-01	9,697130736E-01	9,790593319E-01	9,062066523E-01
1,250000000E-01	9,849137130E-01	9,895563505E-01	9,540223788E-01
6,250000000E-02	9,924713478E-01	9,947849028E-01	9,772361462E-01
3,125000000E-02	9,962393202E-01	9,973941401E-01	9,886737098E-01
1,562500000E-02	9,981205745E-01	9,986974931E-01	9,943506888E-01
7,812500000E-03	9,990605162E-01	9,993488524E-01	9,971787935E-01
3,906250000E-03	9,995303154E-01	9,996744527E-01	9,985902578E-01

Tabela 4.2 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com diferença central (\mathcal{L}_{CDS}^i). Ordem assintótica, $p_L = 2$.

h	$p_E(q=2)$	$p_E(q=1)$	$p_U(q=2)$
4,000000000E+00	não se aplica	2,000000000E+00	não se aplica
2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00	não se aplica
1,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
5,000000000E-01	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
2,500000000E-01	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
1,250000000E-01	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
6,250000000E-02	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
3,125000000E-02	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
1,562500000E-02	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
7,812500000E-03	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
3,906250000E-03	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00

Tabela 4.3 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a jusante (\mathcal{L}_{DDS}^i). Ordem assintótica, $p_L = 1$.

h	$p_E(q=2)$	$p_E(q=1)$	$p_U(q=2)$
4,000000000E+00	não se aplica	1,303030303E+00	não se aplica
2,000000000E+00	1,224215157E+00	1,159292035E+00	não se aplica
1,000000000E+00	1,116275389E+00	1,081534772E+00	1,310626777E+00
5,000000000E-01	1,059145981E+00	1,041224235E+00	1,167058015E+00
2,500000000E-01	1,029817745E+00	1,020723737E+00	1,086748427E+00
1,250000000E-01	1,014968908E+00	1,010389401E+00	1,044216484E+00
6,250000000E-02	1,007499302E+00	1,005201534E+00	1,022323576E+00
3,125000000E-02	1,003753342E+00	1,002602469E+00	1,011216221E+00
1,562500000E-02	1,001877591E+00	1,001301659E+00	1,005621794E+00
7,812500000E-03	1,000939025E+00	1,000650936E+00	1,002814327E+00
3,906250000E-03	1,000469570E+00	1,000325494E+00	1,001408022E+00

- 2) Ainda para o caso em que a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), é composta por dois ou mais termos, para os mesmos h e q tem-se

$$|p_U - p_L| > |p_E - p_L| \quad (4.33)$$

Isso pode ser observado nas Tabs. 4.1, 4.3, 4.4 e 4.6, e nas Figs. 4.1 e 4.2. A Eq. (4.33) resulta do fato de que p_U é calculado com soluções numéricas obtidas em três malhas diferentes e uma delas é mais grossa do que uma ou duas envolvidas no cálculo de p_E .

Tabela 4.4 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 2 pontos a jusante (λ_{DS-2}^i). Ordem assintótica, $p_L = 2$.

h	$p_E (q = 2)$	$p_E (q = 1)$	$p_U (q = 2)$
4,000000000E+00	não se aplica	2,272727273E+00	não se aplica
2,000000000E+00	2,211504105E+00	2,157894737E+00	não se aplica
1,000000000E+00	2,118644496E+00	2,085714286E+00	2,238159737E+00
5,000000000E-01	2,063193826E+00	2,044776119E+00	2,135655099E+00
2,500000000E-01	2,032666189E+00	2,022900763E+00	2,072931522E+00
1,250000000E-01	2,016614714E+00	2,011583012E+00	2,037896608E+00
6,250000000E-02	2,008379666E+00	2,005825243E+00	2,019328261E+00
3,125000000E-02	2,004208156E+00	2,002921130E+00	2,009762111E+00
1,562500000E-02	2,002108690E+00	2,001462701E+00	2,004905939E+00
7,812500000E-03	2,001055502E+00	2,000731886E+00	2,002459240E+00
3,906250000E-03	2,000528041E+00	2,000366077E+00	2,001231194E+00

Tabela 4.5 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza para a aproximação numérica da derivada de 2ª ordem com diferença central (λ_{CDS}^i). Ordem assintótica, $p_L = 2$.

h	$p_E (q = 2)$	$p_E (q = 1)$	$p_U (q = 2)$
4,000000000E+00	não se aplica	2,000000000E+00	não se aplica
2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00	não se aplica
1,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
5,000000000E-01	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
2,500000000E-01	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
1,250000000E-01	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
6,250000000E-02	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
3,125000000E-02	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
1,562500000E-02	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
7,812500000E-03	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00
3,906250000E-03	2,000000000E+00	2,000000000E+00	2,000000000E+00

Tabela 4.6 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza para a aproximação numérica da média da variável dependente (λ_m). Ordem assintótica, $p_L = 2$.

h	$p_E(q=2)$	$p_E(q=1)$	$p_U(q=2)$
4,000000000E+00	não se aplica	1,949367089E+00	não se aplica
2,000000000E+00	1,972519264E+00	1,987421384E+00	não se aplica
1,000000000E+00	1,993210834E+00	1,996865204E+00	1,965511624E+00
5,000000000E-01	1,998307689E+00	1,999217527E+00	1,991505206E+00
2,500000000E-01	1,999577232E+00	1,999804535E+00	1,997884094E+00
1,250000000E-01	1,999894327E+00	1,999951153E+00	1,999471508E+00
6,250000000E-02	1,999973583E+00	1,999987791E+00	1,999867907E+00
3,125000000E-02	1,999993396E+00	1,999996948E+00	1,999966979E+00
1,562500000E-02	1,999998349E+00	1,999999237E+00	1,999991745E+00
7,812500000E-03	1,999999587E+00	1,999999809E+00	1,999997936E+00
3,906250000E-03	1,999999897E+00	1,999999952E+00	1,999999484E+00

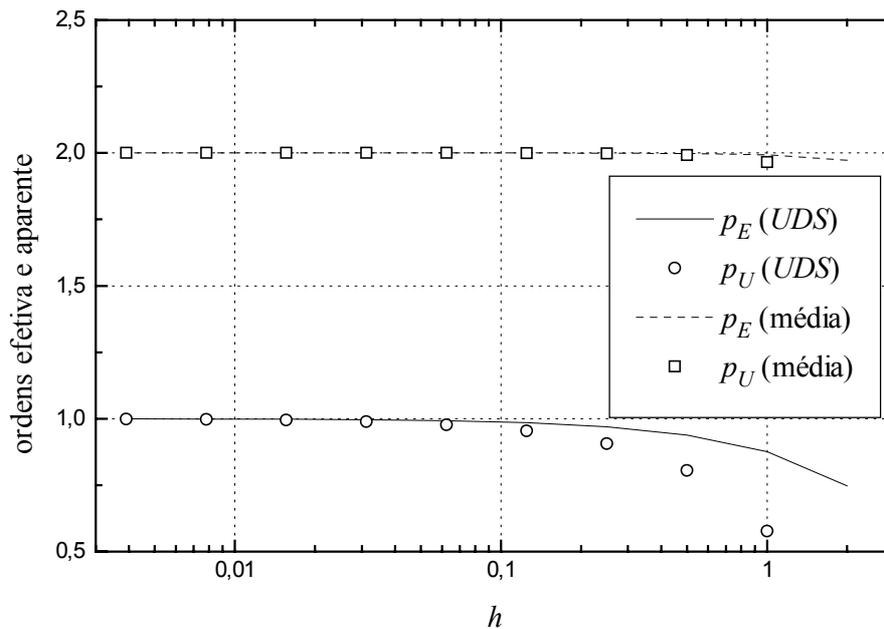


Figura 4.1 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza de λ_{UDS}^i e λ_m , representados na legenda, respectivamente, por UDS e média.

- 3) No caso particular em que a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), é constituída por um único termo, como nas Eqs. (2.41) e (2.44), $p_E = p_U = p_L$ quaisquer que sejam h e q . Isso pode ser constatado nas Tabs. 4.2 e 4.5.

- 4) Além do próprio tamanho (h) dos elementos da malha, os valores de p_E e p_U dependem da razão de refino de malha (q) usada, conforme se pode observar nas Tabs. 4.1 a 4.6, mas especialmente na Tab. 4.7. Porém, quanto menores são h , tendendo a zero, e q , tendendo à unidade, menores são os seus efeitos sobre p_E e p_U , conforme a Tab. 4.7.
- 5) Para uma mesma variável, a diferença entre p_U e p_L está diretamente relacionada à acurácia dos estimadores de erro do tipo de Richardson: estimadores de Richardson, bicoeficiente, tricoeficiente e multicoeficiente. Esta afirmação também é válida para a diferença entre p_E e p_L e pode ser verificada, por exemplo, comparando-se a efetividade (θ) dos estimadores de Richardson (U_{Ri}) e bicoeficiente (U_{bi}) da Tab. 3.1, de λ_{UDS}^i , com as ordens p_E e p_U mostradas na Tab. 4.1, e lembrando-se que $p_L = 1$, conforme a Tab. 2.8.

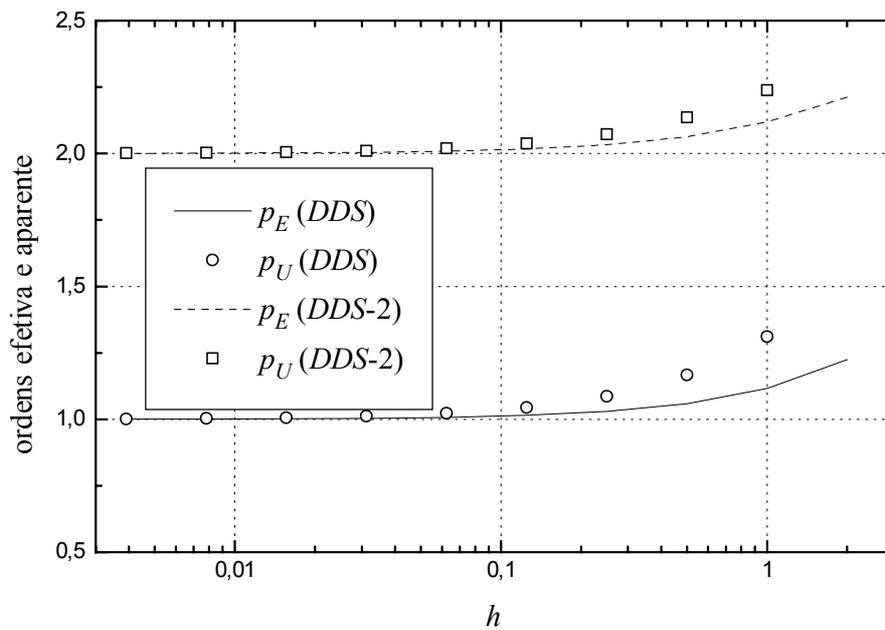


Figura 4.2 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza de λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , representados na legenda, respectivamente, por DDS e $DDS-2$.

4.4 RESUMO DO CAPÍTULO 4

Foram definidas a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização e a ordem aparente (p_U) da incerteza de soluções numéricas. Também foram apresentadas expressões para os seus cálculos e

deduzidos os seus valores possíveis de se obter. Estes dois tipos de ordem permitem verificar *a posteriori* das soluções numéricas se a ordem assintótica (p_L) dos erros de truncamento é atingida, lembrando-se que esta ordem é um resultado teórico e obtido *a priori* das soluções numéricas.

Quando a equação geral do erro de discretização (E) é composta por dois ou mais termos: p_E e $p_U \rightarrow p_L$ para $h \rightarrow 0$, onde h é o tamanho dos elementos da malha. No caso particular desta equação ser constituída por apenas um termo: $p_E = p_U = p_L$ quaisquer que sejam h e q , onde q é a razão de refino de malha. Além do próprio tamanho (h) dos elementos da malha, os valores de p_E e p_U dependem da razão de refino de malha (q). Para uma mesma variável, a diferença entre p_U e p_L está diretamente relacionada à acurácia dos estimadores de erro do tipo de Richardson: estimadores de Richardson, bicoeficiente, tricoeficiente e multicoeficiente. O mesmo se verifica para a diferença entre p_E e p_L .

Tabela 4.7 Ordem efetiva (p_E) do erro para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a montante (\mathcal{L}_{UDS}^i), em função da razão de refino de malha (q). Ordem assintótica, $p_L = 1$.

q	$h = 2$	$h = 0,125$
10	6,478174819E-01	9,587251535E-01
9	5,913291693E-01	9,615971734E-01
8	5,533833324E-01	9,645364816E-01
7	5,385493037E-01	9,675558932E-01
6	5,474112289E-01	9,706729284E-01
5	5,769472791E-01	9,739126734E-01
4	6,225562489E-01	9,773133933E-01
3	6,801438592E-01	9,809390779E-01
2	7,476128384E-01	9,849137130E-01
1,5	7,854035397E-01	9,871131376E-01
1,4	7,933793506E-01	9,875781623E-01
1,3	8,015227960E-01	9,880536278E-01
1,2	8,098517281E-01	9,885407613E-01
1,1	8,183883232E-01	9,890410543E-01
1,05	8,227429421E-01	9,892966949E-01
1,01	8,262717310E-01	9,895040840E-01
1	8,271604938E-01	9,895563505E-01

Capítulo 5.

ESTIMADOR CONVERGENTE

No Cap. 3 foram apresentados três estimadores de erro disponíveis na literatura: estimadores de Richardson, delta e *GCI*; e foram introduzidos os estimadores multicoeficiente. Com base na extrapolação de Richardson, vista nas seções 3.2 e 4.2, é introduzido neste capítulo um novo estimador de erro: o estimador convergente. Para tanto, inicialmente são definidos dois intervalos de convergência para os tipos de curva de ordem aparente (p_U) *versus* o tamanho (h) dos elementos da malha. Em seguida, demonstra-se que, dentro do intervalo convergente, as extrapolações de Richardson calculadas com a ordem assintótica e a ordem aparente envolvem a solução analítica exata. Conseqüentemente, o erro de discretização fica limitado pelas incertezas calculadas com o estimador de Richardson baseado nestas duas ordens. Finalmente, são apresentadas expressões para o cálculo da solução numérica convergente e de sua incerteza. Ao longo das seções desse capítulo, são dados exemplos de aplicação dos conceitos abordados.

5.1 INTERVALOS DE CONVERGÊNCIA DA ORDEM APARENTE

O conceito de ordem aparente (p_U) da incerteza de uma solução numérica foi apresentado na seção 4.2. A seguir, são definidos dois tipos de curva esperados para a ordem aparente quando o tamanho (h) dos elementos da malha tende a zero, isto é, quando $h \rightarrow 0$: intervalos subconvergente e superconvergente. Ao longo deste trabalho, ambos serão referenciados genericamente por ordem aparente convergente. O nome convergente se deve ao fato de que dentro do intervalo convergente, a ordem aparente (p_U) converge monotonicamente para a ordem assintótica (p_L) do erro da solução numérica quando $h \rightarrow 0$. Portanto, subconvergente refere-se ao caso dessa convergência se dar com valores de p_U inferiores a p_L , enquanto que superconvergente refere-se ao caso da convergência ocorrer com valores de p_U superiores a p_L .

5.1.1 Intervalo Subconvergente

O intervalo subconvergente, esboçado genericamente na Fig. 5.1, é definido como o intervalo $0 \leq h \leq h_C$ onde a ordem aparente, $p_U(h)$, é positiva, crescente com a diminuição do tamanho (h) dos elementos da malha, e menor ou igual à ordem assintótica (p_L), isto é,

$$0 < p_U(h_C) \leq p_U(h) \leq p_L \quad (0 \leq h \leq h_C) \quad (5.1)$$

$$\frac{dp_U}{dh} \leq 0 \quad (0 \leq h \leq h_C) \quad (5.2)$$

onde h_C é o valor máximo de h no intervalo subconvergente, ou seja, é o valor máximo de h até o qual as Eqs. (5.1) e (5.2) são válidas; p_L é a ordem assintótica do erro da solução numérica; e p_U é a ordem aparente da incerteza da solução numérica, que é decrescente com o aumento de h . Exemplos de curvas de p_U versus h , que são subconvergentes, podem ser vistas na Fig. 4.1.

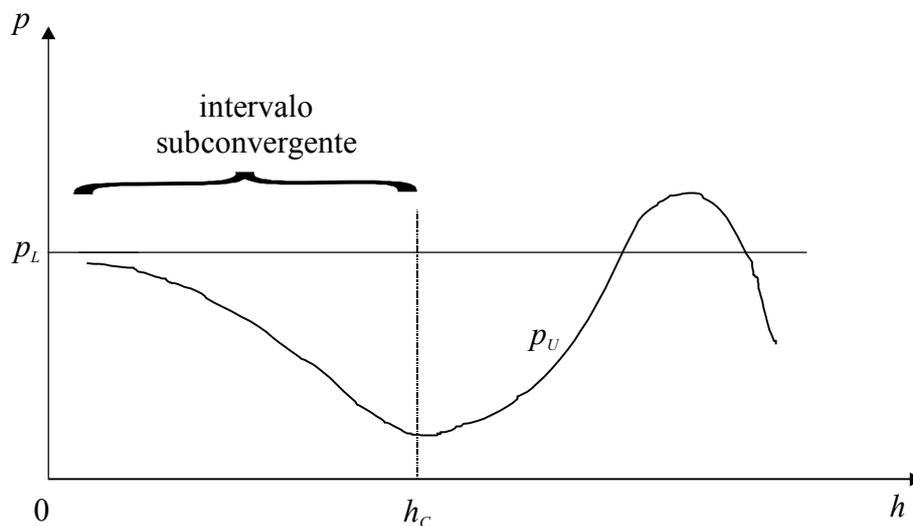


Figura 5.1 Definição do intervalo subconvergente da ordem aparente.

5.1.2 Intervalo Superconvergente

O intervalo superconvergente, esboçado genericamente na Fig. 5.2, é definido como o intervalo $0 \leq h \leq h_C$ onde a ordem aparente, $p_U(h)$, é positiva, decrescente com a diminuição do tamanho (h) dos elementos da malha, e maior ou igual à ordem assintótica (p_L), isto é,

$$0 < p_L \leq p_U(h) \leq p_U(h_C) \quad (0 \leq h \leq h_C) \quad (5.3)$$

$$\frac{dp_U}{dh} \geq 0 \quad (0 \leq h \leq h_C) \quad (5.4)$$

onde h_C é o valor máximo de h no intervalo superconvergente, ou seja, é o valor máximo de h até o qual as Eqs. (5.3) e (5.4) são válidas; p_L é a ordem assintótica do erro da solução numérica; e p_U é a ordem aparente da incerteza da solução numérica, que é crescente com o aumento de h . Exemplos de curvas de p_U versus h , que são superconvergentes, podem ser vistas na Fig. 4.2.

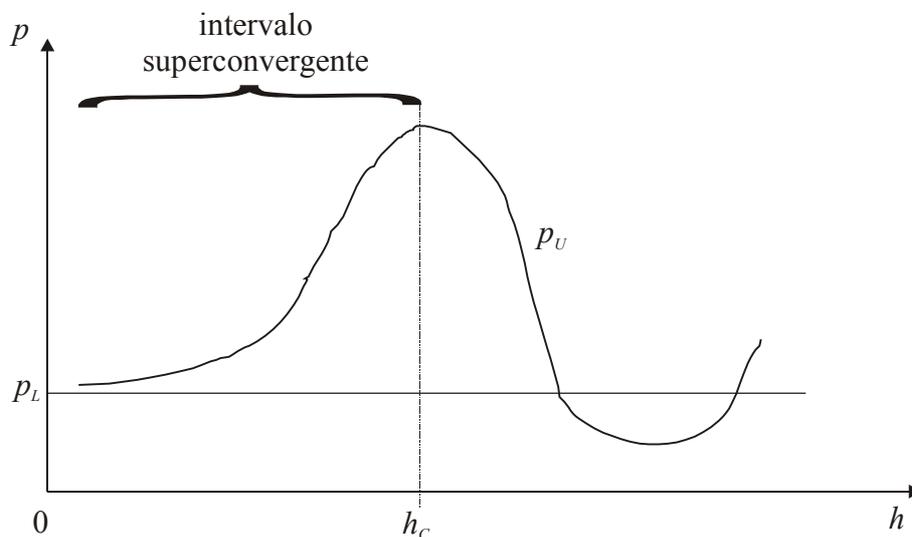


Figura 5.2 Definição do intervalo superconvergente da ordem aparente.

5.1.3 Comentários e Exemplos

Presume-se que todas as soluções numéricas, de qualquer variável de interesse, como aquelas das Tabs. 1.2 e 2.1, gerem curvas de p_U versus h que são subconvergente ou

superconvergente quando $h \rightarrow 0$. As curvas de p_U versus h , esboçadas nas Figs. 5.1 e 5.2 são apenas de caráter ilustrativo, ou seja, não representam todas os tipos de curva que são possíveis de se encontrar e que podem ser tão simples, como aquelas das Figs. 4.1 e 4.2, ou mais complexas, inclusive com subintervalos de h onde p_U é indefinido ou negativo. O valor máximo de h que define o intervalo convergente, isto é, h_C , depende da complexidade do modelo matemático e do modelo numérico empregado em sua solução. Mas qualquer que seja o seu valor, acredita-se que h_C caracteriza o ponto a partir do qual o primeiro termo da equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2), passa a dominar o valor total de E , isto é, quando o coeficiente C_E da Eq. (3.20) é aproximadamente igual ao coeficiente C_1 da Eq. (3.2). Não se vislumbrou, com o presente trabalho, um procedimento para estimar o valor de h_C , isto é, um procedimento que indicasse quando se está ou não dentro do intervalo convergente da ordem aparente para qualquer h dado.

Por definição, no caso particular de $p_U = p_L$, qualquer que seja h , p_U é subconvergente e superconvergente simultaneamente ou, simplesmente, convergido. Exemplos pertinentes podem ser vistos nas Tabs. 4.2 e 4.5. A partir dos exemplos apresentados nos Caps. 2, 3 e 4, verifica-se que:

- 1) para os exemplos da seção 4.3, a ordem aparente (p_U) é convergente em todos os valores de h mostrados nas tabelas e figuras;
- 2) quando a equação do erro é composta por um único termo, a ordem aparente (p_U) é convergida, isto é, $p_E = p_U = p_L$; isso pode ser observado nas Eqs. (2.41) e (2.44) para as variáveis λ_{CDS}^i e λ_{CDS}^{ii} , assim como nas Tabs. 4.2 e 4.5;
- 3) quando a equação do erro é composta por dois ou mais termos e os dois primeiros têm sinais opostos, a ordem aparente (p_U) é subconvergente; isso pode ser constatado nas Eqs. (2.40) e (2.45) para as variáveis λ_{UDS}^i e λ_m , bem como na Fig. 4.1 e nas Tabs. 4.1 e 4.6; e
- 4) quando a equação do erro é composta por dois ou mais termos e todos têm o mesmo sinal, a ordem aparente (p_U) é superconvergente; isso pode ser observado nas Eqs. (2.42) e (2.43) para as variáveis λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , assim como na Fig. 4.2 e nas Tabs. 4.3 e 4.4.

Os resultados relatados nos itens 2 a 4, acima, já eram esperados de acordo com as deduções feitas na seção 4.1. O estimador de Richardson, Eqs. (3.10) e (4.28), é válido apenas para valores das ordens assintótica (p_L) e aparente (p_U) maiores do que zero, isto é, $(p_L, p_U) > 0$. Esta condição é automaticamente satisfeita no caso da ordem assintótica para as aproximações numéricas geralmente empregadas; neste trabalho, por exemplo, tem-se $p_L = 1$ ou $p_L = 2$,

conforme a Tab. 2.8. Mas isso não acontece no caso da ordem aparente pois, da mesma forma como mostrado para a ordem efetiva (p_E) na subseção 4.1.3, ela também pode assumir valores negativos ou ser indefinida, conforme se apresenta na Parte II deste trabalho. O argumento para justificar o uso de ordens positivas é o seguinte: considere-se $p_U < 0$ sobre a Eq. (4.18), isto implica que

$$U(\phi) = \frac{K_U}{h^{|p_U|}} \quad (5.5)$$

Celik e Karatekin (1997) propõem o emprego do módulo da razão de convergência da solução numérica para a solução analítica (ψ_U), Eq. (4.25), quando p_U resulta em valores indefinidos, ou o uso do módulo de p_U quando este é negativo. Mas, a partir da Eq. (5.5), verifica-se que ao se refinar a malha, isto é, ao se reduzir o tamanho (h) dos elementos da malha, a incerteza aumenta quando se considera $p_U < 0$. Esse resultado é o oposto ao esperado para o comportamento do erro de truncamento ou do erro de discretização, pelo menos quando $h \rightarrow 0$ ou quando a equação do erro é constituída por um único termo. Conclusão: não faz sentido calcular incertezas com a ordem aparente negativa, ou usando o seu módulo, ou ainda empregando o módulo de ψ_U para calcular a ordem aparente quando ela é indefinida. Os conceitos e comentários da seção 5.1 também são aplicáveis à ordem efetiva (p_E).

5.2 ENVOLVENTES DA SOLUÇÃO ANALÍTICA E DO ERRO

Nesta seção são deduzidas e exemplificadas as envoltentes da solução analítica exata e do erro de discretização, definidas a seguir. Para qualquer variável de interesse, por definição, a **envolvente da solução analítica** exata (Φ) é um intervalo fechado $[\phi^-, \phi^+]$ que contém Φ , onde ϕ representa soluções numéricas calculadas ou extrapoladas. Um exemplo de envolvente da solução analítica é dado na Fig. 3.6, com ϕ_1 e ϕ_∞ representando os limites da envolvente, onde ϕ_1 é a solução numérica obtida com malha fina, isto é, com uma malha cujo tamanho (h) dos elementos é h_1 , e ϕ_∞ designa a estimativa do valor da solução analítica, obtida através da extrapolação de Richardson, Eq. (3.8).

Para qualquer variável de interesse, por definição, a **envolvente do erro de discretização** (E) é um intervalo fechado $[U^-, U^+]$ que contém E , onde U representa a incerteza de soluções

numéricas calculadas ou extrapoladas. Um exemplo de envolvente do erro de discretização também é dado na Fig. 3.6, com o intervalo entre zero e $U_{Ri}(\phi_1)$ representando os limites da envolvente, onde $U_{Ri}(\phi_1)$ designa a incerteza de ϕ_1 , ou a sua estimativa do erro, obtida através do estimador de Richardson, Eq. (3.10).

Nas duas subseções, a seguir, são deduzidas envolventes do erro de discretização e da solução analítica exata para os casos em que a ordem aparente é convergente, de acordo com a definição dada na seção 5.1.

5.2.1 Dedução de Envolvente do Erro de Discretização

Demonstra-se nesta subseção que o uso do estimador de Richardson permite calcular dois valores de incerteza (U_{Ri}) que constituem uma envolvente do erro de discretização (E) quando a ordem aparente (p_U) é convergente. Conseqüentemente, consegue-se obter garantidamente uma incerteza que seja confiável, isto é, $U/E \geq 1$.

Conforme visto nos Caps. 3 e 4, Eqs. (3.10) e (4.28), com o estimador de Richardson e dispondo-se de três soluções numéricas (ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3) obtidas em três malhas diferentes (h_1 , h_2 e h_3), é possível calcular incertezas (U_{Ri}) utilizando as ordens assintótica (p_L) e aparente (p_U), dadas por

$$U_{Ri}(p_L) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (5.6)$$

$$U_{Ri}(p_U) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_U} - 1)} \quad (5.7)$$

Considere-se um problema no qual $p_L = 2$ e cujos resultados das três soluções numéricas (ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3) forneçam $p_U = 0,5$. Qual destas ordens deve ser usada para o cálculo da incerteza? Qual é a confiança de U_{Ri} em relação ao erro de discretização (E)? Demonstra-se, a seguir, em que casos as Eqs. (5.6) e (5.7) devem ser usadas quando a ordem aparente é convergente para que a incerteza seja confiável e acurada, conforme as definições feitas na seção 3.1.

As incertezas calculadas com as Eqs. (5.6) e (5.7) referem-se à solução numérica ϕ_1 obtida sobre a malha h_1 . No cálculo da incerteza com a Eq. (5.6) está implícito que a ordem assintótica (p_L) é constante entre h_1 e $h \rightarrow 0$, conforme a dedução feita na subseção 3.2.1. Em

geral, esta consideração é correta uma vez que os tipos de aproximações numéricas usadas nos modelos numéricos são mantidos constantes; por exemplo: para $\lambda_{UDS}^i, p_L = 1$ e para $\lambda_{CDS}^i, p_L = 2$.

No cálculo da incerteza com a Eq. (5.7) está implícito que a ordem aparente (p_U) é constante entre h_1 e $h \rightarrow 0$, conforme a dedução feita na seção 4.2. Em geral, esta consideração é incorreta porque na prática, mesmo no intervalo convergente, p_U é função de h , isto é, em h_1 tem-se $p_U(h_1)$ que varia monotonicamente até atingir p_L em $h = 0$. Isso pode ser visto nas tabelas do Cap. 4 e nas Figs. 4.1 e 4.2.

Considerando-se inicialmente o caso de p_U subconvergente, pode-se definir uma ordem média (p_M) que representa a função desconhecida $p_U(h)$ entre h_1 e $h \rightarrow 0$ e cujo estimador de Richardson baseado nela, $U_{Ri}(p_M)$, seja igual ao erro de discretização (E) da solução numérica ϕ_1 na malha h_1 , ou seja,

$$U_{Ri}(p_M) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_M} - 1)} = E \quad (5.8)$$

onde

$$p_U(h_1) \leq p_M \leq p_L \quad (5.9)$$

Assim, considerando $U_{Ri}(p_M) = E$, a razão entre $U_{Ri}(p_L)$ e E , com as Eqs. (5.6) e (5.8), resulta em

$$\frac{U_{Ri}(p_L)}{E} = \frac{U_{Ri}(p_L)}{U_{Ri}(p_M)} = \frac{(q^{p_M} - 1)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (5.10)$$

e a razão entre $U_{Ri}(p_U)$ e E , com as Eqs. (5.7) e (5.8), em

$$\frac{U_{Ri}(p_U)}{E} = \frac{U_{Ri}(p_U)}{U_{Ri}(p_M)} = \frac{(q^{p_M} - 1)}{(q^{p_U} - 1)} \quad (5.11)$$

Subtende-se $U_{Ri}(p_U)$ como a incerteza calculada através da Eq. (5.7) com $p_U(h_1)$. Considerando-se a Eq. (5.9) e as Eqs. (5.10) e (5.11), e lembrando-se que a razão de refino de malha (q) é sempre superior à unidade, verifica-se que

$$\frac{(q^{p_M} - 1)}{(q^{p_L} - 1)} \leq 1 \leq \frac{(q^{p_M} - 1)}{(q^{p_U} - 1)} \quad (5.12)$$

onde, por exemplo, para $q = 2$, $p_U = 1$, $p_M = 1,8$ e $p_L = 2$, a Eq. (5.12) resulta em $0,83 \leq 1 \leq 2,5$.

Da Eq. (5.12), conclui-se que

$$\frac{U_{Ri}(p_L)}{E} \leq 1 \leq \frac{U_{Ri}(p_U)}{E} \quad (\text{se } p_U \text{ subconvergente}) \quad (5.13)$$

ou seja, $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ constituem uma envolvente do erro de discretização (E) da solução numérica (ϕ_1) quando p_U é subconvergente.

O mesmo raciocínio empregado para obter a Eq. (5.13) pode ser usado para demonstrar que no caso de p_U ser superconvergente, tem-se

$$\frac{U_{Ri}(p_U)}{E} \leq 1 \leq \frac{U_{Ri}(p_L)}{E} \quad (\text{se } p_U \text{ superconvergente}) \quad (5.14)$$

e, portanto, novamente $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ constituem uma envolvente do erro de discretização (E) da solução numérica (ϕ_1), mesmo quando p_U é superconvergente.

Com as Eqs. (5.13) e (5.14), conclui-se que o erro de discretização (E) é envolvido pelas incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ quando p_U é convergente. Em outras palavras, $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ representam limites inferior e superior do erro. Portanto, estas equações fornecem incertezas confiáveis, isto é, $U/E \geq 1$. Assim, se p_U é subconvergente, $U_{Ri}(p_U)$ é confiável, conforme a Eq. (5.13), e se p_U é superconvergente, $U_{Ri}(p_L)$ é confiável, conforme a Eq. (5.14). Com a Eq. (5.12) e sua análoga para p_U superconvergente, verifica-se que quanto mais próximo p_U estiver de p_L , mais próximas da unidade estarão as efetividades das incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$. Conseqüentemente, mais acuradas serão estas estimativas de erro.

5.2.2 Dedução de Envolvente da Solução Analítica Exata

Nos Caps. 3 e 4 foram obtidas expressões para calcular a extrapolação de Richardson com base nas ordens assintótica, Eq. (3.8), e aparente, Eq. (4.27), reescritas aqui,

$$\phi_{\infty}(p_L) = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (5.15)$$

$$\phi_{\infty}(p_U) = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(q^{p_U} - 1)} \quad (5.16)$$

A única diferença entre as expressões de U_{Ri} e ϕ_{∞} , isto é, entre as Eqs. (5.6) e (5.15), e entre as Eqs. (5.7) e (5.16) é a existência ou não de um termo com ϕ_1 . Portanto, com base na Eq. (5.13), também pode-se deduzir que

$$\frac{\phi_{\infty}(p_L)}{\Phi} \leq 1 \leq \frac{\phi_{\infty}(p_U)}{\Phi} \quad (\text{se } p_U \text{ subconvergente}) \quad (5.17)$$

ou seja, $\phi_{\infty}(p_L)$ e $\phi_{\infty}(p_U)$ constituem uma envolvente da solução analítica exata (Φ) quando p_U é subconvergente. Da mesma forma, com base na Eq. (5.14), também se pode deduzir que

$$\frac{\phi_{\infty}(p_U)}{\Phi} \leq 1 \leq \frac{\phi_{\infty}(p_L)}{\Phi} \quad (\text{se } p_U \text{ superconvergente}) \quad (5.18)$$

isto é, $\phi_{\infty}(p_L)$ e $\phi_{\infty}(p_U)$ novamente constituem uma envolvente da solução analítica exata (Φ) quando p_U é superconvergente. Com as Eqs. (5.17) e (5.18), conclui-se que a solução analítica exata (Φ) é envolvida pelas extrapolações de Richardson calculadas com a ordem assintótica $\phi_{\infty}(p_L)$, Eq. (5.15), e com a ordem aparente $\phi_{\infty}(p_U)$, Eq. (5.16), quando p_U é convergente. Em outras palavras, $\phi_{\infty}(p_L)$ e $\phi_{\infty}(p_U)$ representam limites inferior e superior da solução analítica exata (Φ). Aqui também, da mesma forma que ocorre entre $U_{Ri}(p_L)$ e E , quanto mais próximo p_U estiver de p_L , mais próximas da unidade estarão as razões de $\phi_{\infty}(p_L)$ e $\phi_{\infty}(p_U)$ em relação a Φ . Os sinais de igualdade usados nas Eqs. (5.13), (5.14), (5.17) e (5.18) aplicam-se apenas ao caso-limite em que a equação do erro de discretização, Eq. (3.2), é composta por um único termo e, portanto, $p_U = p_L$ em qualquer h , conforme visto e explicado no Cap. 4.

A Fig. 5.3 ilustra as envolventes da solução analítica exata, Eq. (5.17), e do erro de discretização, Eq. (5.13), para o caso de p_U ser subconvergente. Pode-se observar nesta figura, as soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 obtidas em duas malhas diferentes (h_1 e h_2), a solução analítica exata (Φ), a extrapolação de Richardson obtida através da Eq. (5.15) com a ordem assintótica (p_L),

$\phi_\infty(p_L)$, a extrapolação de Richardson obtida através da Eq. (5.16) com a ordem aparente (p_U), $\phi_\infty(p_U)$, o erro de discretização de ϕ_1 , $E(\phi_1)$, a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.6) com a ordem assintótica (p_L), $U_{Ri}(p_L)$, e a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.7) com a ordem aparente (p_U), $U_{Ri}(p_U)$. A Fig. 5.4 ilustra as envolturas da solução analítica exata, Eq. (5.18), e do erro de discretização, Eq. (5.14), para o caso de p_U ser superconvergente.

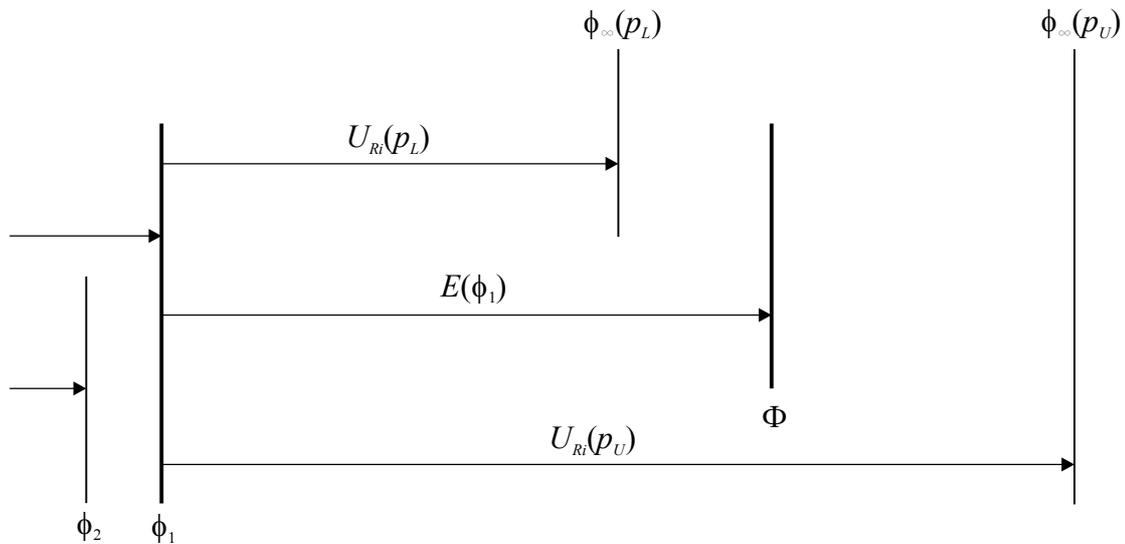


Figura 5.3 Envolturas da solução analítica exata (Φ) e do erro de discretização (E), para a ordem aparente (p_U) subconvergente.

5.2.3 Exemplos de Envolturas

Nas Tabs. 5.1 e 5.2 é mostrada a razão entre incerteza (U) e erro (ε), em função de h , para as aproximações numéricas λ_{UDS}^i e λ_{DDS}^i , definidas na Tab. 2.1. Nas Tabs. 5.1 e 5.2 tem-se um caso de ordem aparente (p_U) subconvergente, mostrado na Tab. 4.1, e um caso de p_U superconvergente, mostrado na Tab. 4.3, respectivamente para as variáveis λ_{UDS}^i e λ_{DDS}^i , onde suas ordens assintóticas são iguais a $p_L = 1$. Os resultados da Tab. 5.2 também podem ser vistos na Fig. 5.5. Os valores das aproximações numéricas λ_{UDS}^i e λ_{DDS}^i e seus erros encontram-se nas Tabs. 2.2 e 2.4, e foram obtidos para $h = 4, 2, 1, \frac{1}{2}, \dots$. Nas Tabs. 5.1 e 5.2 não são apresentados os resultados de U/ε para $h = 4$. Isso ocorre porque são necessárias pelo menos duas soluções numéricas para calcular $U_{Ri}(p_L)$. Além disso, a designação “não se aplica”, mencionada nas

tabelas, deve-se também ao número mínimo de três soluções numéricas que é necessário para calcular $U_{Ri}(p_U)$.

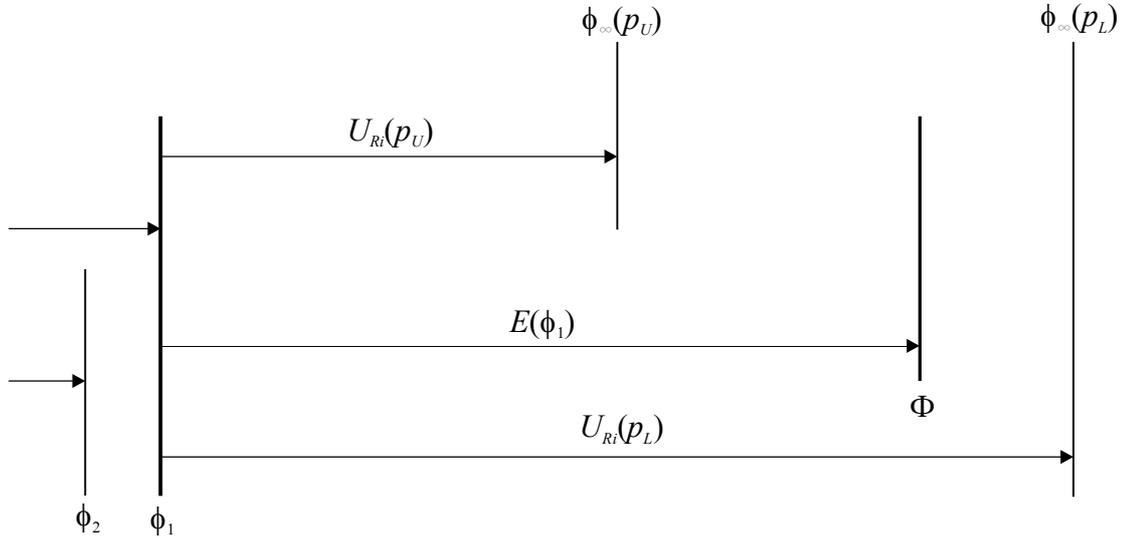


Figura 5.4 Envolventes da solução analítica exata (Φ) e do erro de discretização (E), para a ordem aparente (p_U) superconvergente.

Para as Tabs. 5.1 e 5.2 e a Fig. 5.5, conforme previsto na subseção 5.2.1, as incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ constituem uma envolvente do erro (ε) da solução numérica em qualquer tamanho (h) de malha, uma vez que p_U é sempre convergente nestes exemplos. Também conforme previsto na subseção 5.2.1, verifica-se nas Tabs. 5.1 e 5.2, com o auxílio das Tabs. 4.1 e 4.3, que quanto mais próximo p_U está de p_L , mais próximas da unidade estão as efetividades das incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$, o que resulta em incertezas mais acuradas.

5.3 SOLUÇÃO NUMÉRICA CONVERGENTE E SUA INCERTEZA

Com base no conceito de envolvente da solução analítica exata (Φ) de uma variável genérica, visto na seção anterior, nesta seção são introduzidos os conceitos de solução numérica convergente (ϕ_C) e sua respectiva incerteza (U_C). Além disso, são apresentados exemplos de cálculo e deduzida a ordem assintótica do erro de ϕ_C .

Conforme ilustrado nas Figs. 5.3 e 5.4, foi visto na seção anterior que a solução analítica exata (Φ) de uma variável genérica encontra-se entre $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$ quando a ordem aparente

(p_U) é convergente, de acordo com as definições da seção 5.1. Sabendo-se disso, define-se a solução numérica convergente (ϕ_C) como a média dos valores de $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$, ou seja,

$$\phi_C = \frac{[\phi_\infty(p_L) + \phi_\infty(p_U)]}{2} \quad (5.19)$$

onde $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$ são obtidos com a extrapolação de Richardson através das Eqs. (5.15) e (5.16), e a sua incerteza (U_C) é o módulo da metade do intervalo entre $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$ que envolve a solução analítica exata (Φ), isto é,

$$U_C = \frac{|\phi_\infty(p_L) - \phi_\infty(p_U)|}{2} \quad (5.20)$$

Para o uso de ϕ_C e U_C , a representação apropriada da solução numérica (ϕ) é

$$\phi = \phi_C \pm U_C \quad (5.21)$$

Tabela 5.1 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε) para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a montante (λ_{UDS}^i).

h	$U_{Ri}(p_L) / \varepsilon$	$U_{Ri}(p_U) / \varepsilon$
2,000000000E+00	6,790123457E-01	não se aplica
1,000000000E+00	8,356940510E-01	1,700205138E+00
5,000000000E-01	9,171758316E-01	1,228052080E+00
2,500000000E-01	9,584510553E-01	1,096486260E+00
1,250000000E-01	9,791949344E-01	1,044734885E+00
6,250000000E-02	9,895902570E-01	1,021575520E+00
3,125000000E-02	9,947933798E-01	1,010599251E+00
1,562500000E-02	9,973962594E-01	1,005253618E+00
7,812500000E-03	9,986980229E-01	1,002615443E+00
3,906250000E-03	9,993489849E-01	1,001304897E+00

As Figs. 5.6 e 5.7 ilustram a solução numérica convergente (ϕ_C), sua respectiva incerteza (U_C), bem como o seu erro de discretização (E_C), respectivamente, para os casos em que a ordem

aparente (p_U) é subconvergente e superconvergente. Estas duas figuras são iguais às Figs. 5.3 e 5.4, apenas acrescentadas dos parâmetros ϕ_C , U_C e E_C .

Tabela 5.2 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε) para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a jusante (λ_{DDS}^i).

h	$U_{Ri}(p_L) / \varepsilon$	$U_{Ri}(p_U) / \varepsilon$
2,000000000E+00	1,336283186E+00	não se aplica
1,000000000E+00	1,167865707E+00	7,888357830E-01
5,000000000E-01	1,083697689E+00	8,700673255E-01
2,500000000E-01	1,041766300E+00	9,268812486E-01
1,250000000E-01	1,020859340E+00	9,610384767E-01
6,250000000E-02	1,010423308E+00	9,798635989E-01
3,125000000E-02	1,005210011E+00	9,897602654E-01
1,562500000E-02	1,002604588E+00	9,948362448E-01
7,812500000E-03	1,001302189E+00	9,974070215E-01
3,906250000E-03	1,000651068E+00	9,987007192E-01

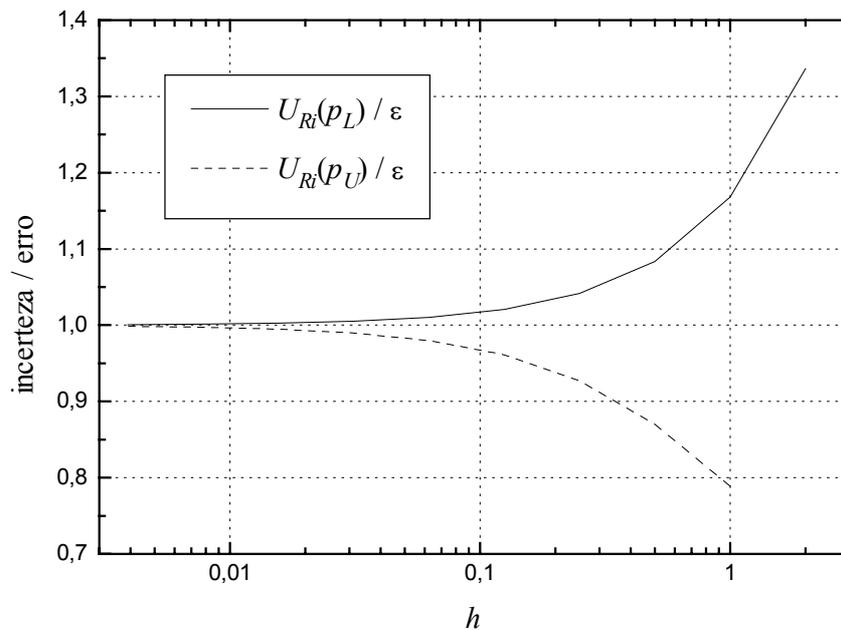


Figura 5.5 Razão entre incerteza (U_{Ri}) e erro (ε) para a aproximação numérica λ_{DDS}^i .

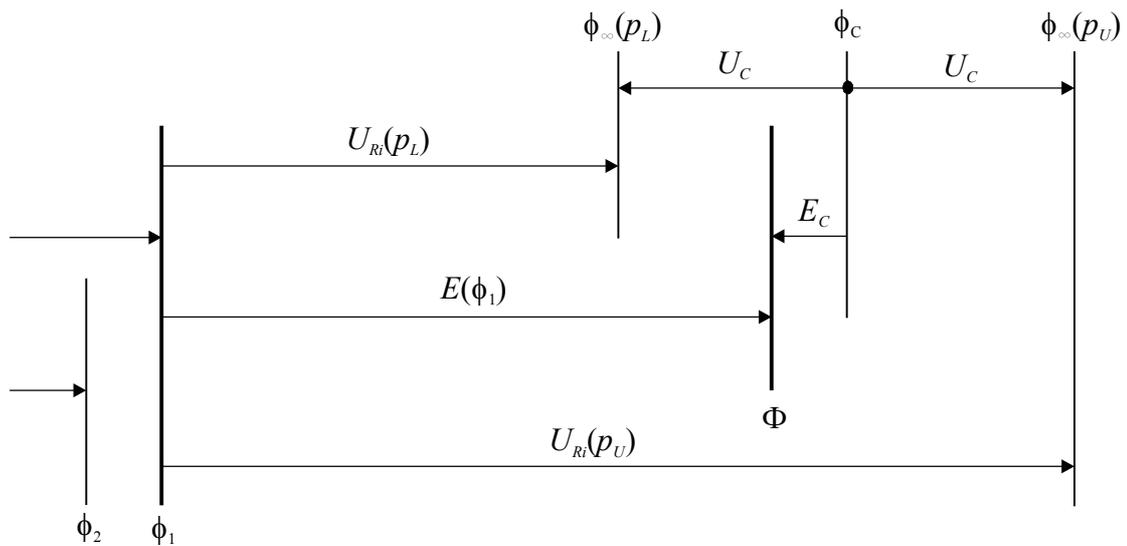


Figura 5.6 Solução numérica convergente (ϕ_c) para ordem aparente (p_U) subconvergente.

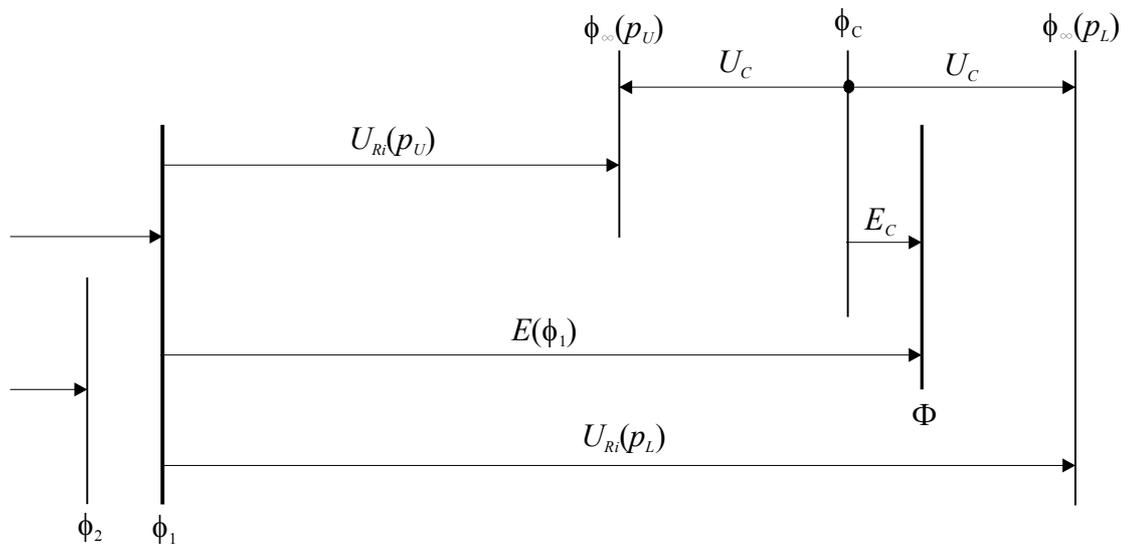


Figura 5.7 Solução numérica convergente (ϕ_c) para ordem aparente (p_U) superconvergente.

A Eq. (5.19) representa a proposta mais simples para obter uma nova solução numérica (ϕ_c) com erro de discretização menor do que aquele da solução ϕ_1 , obtida numa malha cujo tamanho dos elementos é h_1 . Outra consequência do uso da Eq. (5.19) é que a incerteza (U_c) é

simples de se calcular e informar, e que representa uma variação de mesma magnitude, para mais ou para menos de ϕ_C , conforme visto nas Eqs. (5.20) e (5.21).

Nas duas próximas subseções, são apresentados exemplos do uso da solução numérica convergente (ϕ_C) e de sua respectiva incerteza (U_C), e demonstra-se que a ordem do erro de discretização desta solução é superior à ordem do erro de ϕ_1 .

5.3.1 Exemplos

O primeiro dos dois exemplos que são apresentados nesta subseção referem-se aos resultados apresentados por Jameson e Martinelli (1998). Estes autores resolveram escoamentos subsônicos empregando três malhas diferentes e com um modelo numérico cuja ordem assintótica (p_L) é dois. Seus resultados para o coeficiente de arrasto (C_d) do aerofólio Korn e número de Mach = 0,75 são apresentados na Tab. 5.3 com quatro algarismos. A extrapolação de Richardson (ϕ_∞), Eq. (5.15), calculada com a ordem assintótica (p_L) e baseada nas malhas fina (160x32) e grossa (80x16), resulta em $\phi_\infty(p_L) = -0,00057$; devendo-se notar que para as malhas da Tab. 5.3, a razão de refino entre elas é $q = 2$. Nos cálculos são usados cinco algarismos significativos para ser possível realizar o exemplo; o uso de quatro algarismos, como no caso da Tab. 5.3, seria inviável. Devido ao valor de ϕ_1 , que é zero, a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.6) com a ordem assintótica (p_L) e baseada nas malhas fina (160x32) e grossa (80x16), também resulta em $U_{Ri}(p_L) = -0,00057$. A ordem aparente (p_U), calculada através das Eqs. (4.25) e (4.26) e usando-se as três soluções numéricas da Tab. 5.3 resulta em $p_U = 2,2524$, valor razoavelmente próximo da ordem assintótica (p_L) que é dois. A extrapolação de Richardson (ϕ_∞), Eq. (5.16), calculada com a ordem aparente (p_U) e baseada nas malhas fina (160x32) e grossa (80x16), resulta em $\phi_\infty(p_U) = -0,00045$. Novamente, devido ao valor de ϕ_1 , que é zero, a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.7) com a ordem aparente (p_U) e baseada nas malhas fina (160x32) e grossa (80x16), também resulta em $U_{Ri}(p_U) = -0,00045$. Em função do valor obtido para p_U , e considerando-se que se esteja no seu intervalo superconvergente, de acordo com a Eq. (5.14), a incerteza confiável para a solução numérica obtida com a malha fina é: $U_{Ri}(p_L) = -0,00057$. Portanto, de um lado, a representação da solução numérica e de seu erro estimado é, de acordo com a Eq. (3.23):

$$\phi = 0 - 0,00057 \quad (5.22)$$

Por outro lado, a solução numérica convergente (ϕ_C) e a sua respectiva incerteza (U_C), calculadas por meio das Eqs. (5.19) e (5.20) resultam em: $\phi_C = -0,00051$ e $U_C = \pm 0,00006$. Conseqüentemente, a representação da solução com a Eq. (5.21) é

$$\phi = -0,00051 \pm 0,00006 \quad (5.23)$$

Portanto, com a comparação das Eqs. (5.22) e (5.23), verifica-se que o uso da solução numérica convergente (ϕ_C) resulta numa incerteza que é cerca de 10 vezes menor que o simples uso do estimador de Richardson. Conforme mostra-se no próximo exemplo, quanto mais refinada é a malha, maior é esta relação, entre as incertezas, a favor da solução numérica convergente.

Tabela 5.3. Resultados do coeficiente de arrasto (C_d) do aerofólio Korn
(Jameson e Martinelli, 1998).

dimensão da malha	designação da malha	C_d
40 x 8	supergrossa (3)	0,0098
80 x 16	grossa (2)	0,0017
160 x 32	fina (1)	0,0000

O segundo exemplo é apresentado através das Tabs. 5.4 e 5.5. Elas relacionam para a variável λ_{DDS}^i , cujos resultados numéricos e seus erros (ε_i) são dados na Tab. 2.4, a solução numérica convergente (ϕ_C) e sua incerteza (U_C). O erro ε_C foi calculado pela diferença entre a solução analítica exata (Φ), dada no Cap. 2, e ϕ_C . Na Tab. 5.5 usa-se $U_{Ri}(p_L)$ porque, conforme a Tab. 5.4, ele é o limite superior esperado para o erro (ε_i). Os resultados da Tab. 5.5 também são mostrados na Fig. 5.8. Através deles pode-se notar que a efetividade da incerteza U_C , isto é, a razão entre U_C e ε_C , não tende à unidade, o que seria de se esperar para uma estimativa de erro acurada, de acordo com a definição dada na Eq. (3.6). Porém, na Tab. 5.4, pode-se notar a importante diminuição do valor de U_C em relação ao erro de truncamento (ε_i) à medida que o tamanho (h) dos elementos da malha é reduzido; e isso ocorre usando-se os mesmos resultados numéricos empregados para obter U_{Ri} . A ordem assintótica do erro de λ_{DDS}^i é $p_L = 1$, conforme a

Tab. 2.8. Mas para ϕ_C tem-se $p_L = 2$, o que pode ser visto na Fig. 5.8 onde as inclinações com o eixo das abscissas de ε_C e U_C , em relação a ε_τ e U_{Ri} , são maiores. Esse aumento de ordem do erro da solução numérica convergente (ϕ_C) é demonstrado na subsecção a seguir.

Tabela 5.4 Razão entre incerteza (U) e erro de truncamento (ε_τ) para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a jusante (λ_{DDS}^i).

h	$U_{Ri}(p_L) / \varepsilon_\tau$	$U_{Ri}(p_U) / \varepsilon_\tau$	U_C / ε_τ
2,000000000E+00	1,336283186E+00	não se aplica	não se aplica
1,000000000E+00	1,167865707E+00	7,888357830E-01	1,895149622E-01
5,000000000E-01	1,083697689E+00	8,700673255E-01	1,068151817E-01
2,500000000E-01	1,041766300E+00	9,268812486E-01	5,744252573E-02
1,250000000E-01	1,020859340E+00	9,610384767E-01	2,991043186E-02
6,250000000E-02	1,010423308E+00	9,798635989E-01	1,527985441E-02
3,125000000E-02	1,005210011E+00	9,897602654E-01	7,724872887E-03
1,562500000E-02	1,002604588E+00	9,948362448E-01	3,884171746E-03
7,812500000E-03	1,001302189E+00	9,974070215E-01	1,947583753E-03
3,906250000E-03	1,000651068E+00	9,987007192E-01	9,751744619E-04

Tabela 5.5 Módulo dos erros (ε_τ e ε_C) e das incertezas (U_{Ri} e U_C) para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com 1 ponto a jusante (λ_{DDS}^i).

h	ε_τ	$U_{Ri}(p_L)$	ε_C	U_C
4,000000000E+00	2,112000000E+03	não se aplica	não se aplica	não se aplica
2,000000000E+00	9,040000000E+02	1,208000000E+03	não se aplica	não se aplica
1,000000000E+00	4,170000000E+02	4,869999998E+02	9,027739000E+00	7,902773924E+01
5,000000000E-01	2,001250000E+02	2,168750000E+02	4,626388000E+00	2,137638824E+01
2,500000000E-01	9,801562500E+01	1,021093750E+02	1,536515000E+00	5,630265061E+00
1,250000000E-01	4,850195313E+01	4,951367186E+01	4,389960000E-01	1,450714364E+00
6,250000000E-02	2,412524414E+01	2,437670899E+01	1,171650000E-01	3,686302181E-01
3,125000000E-02	1,203128052E+01	1,209396362E+01	3,025700000E-02	9,294011267E-02
1,562500000E-02	6,007816315E+00	6,023464201E+00	7,688000000E-03	2,333539038E-02
7,812500000E-03	3,001953602E+00	3,005862713E+00	1,937000000E-03	5,846556062E-03
3,906250000E-03	1,500488341E+00	1,501465261E+00	4,859999999E-04	1,463237910E-03

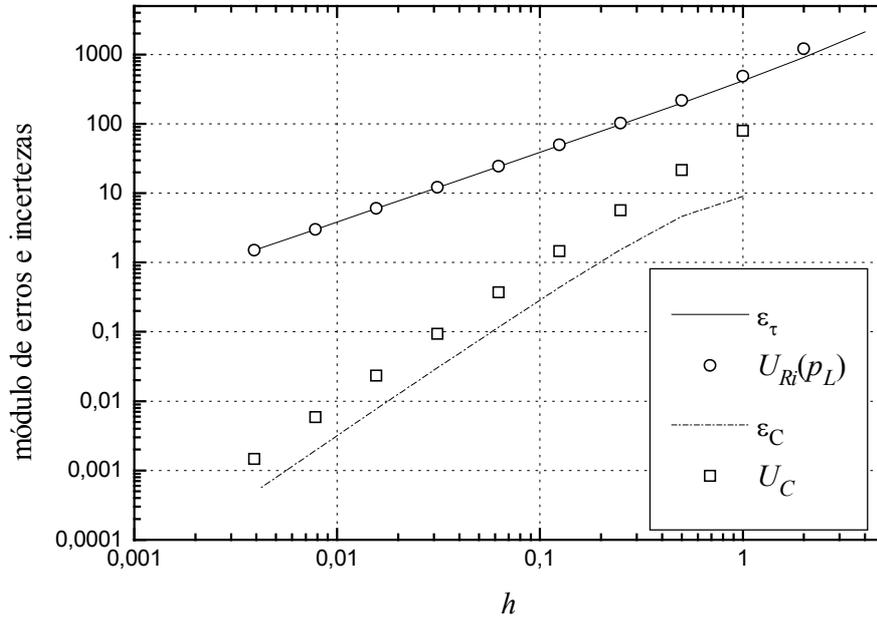


Figura 5.8 Módulo dos erros (ε_τ e ε_C) e das incertezas (U_{Ri} e U_C) da aproximação numérica λ_{DDS}^i .

5.3.2 Ordem Assintótica do Erro da Solução Numérica Convergente

Sabendo-se que o valor de ϕ_C se baseia em duas soluções numéricas extrapoladas, Eq. (5.19), basta demonstrar que a ordem assintótica do erro de qualquer solução ϕ_∞ obtida através da extrapolação de Richardson, Eq. (3.8), é maior do que a ordem assintótica do erro das soluções numéricas (ϕ_1, ϕ_2) usadas no cálculo de ϕ_∞ , o que é feito a seguir.

A partir das Eqs. (3.1) e (3.2), pode-se obter

$$\Phi = \phi_1 + C_1 h_1^{p_L} + C_2 h_1^{p_2} + C_3 h_1^{p_3} + C_4 h_1^{p_4} + \dots \quad (5.24)$$

onde ϕ_1 é a solução numérica obtida com uma malha cujo tamanho dos elementos é h_1 ; os coeficientes C_i independem de h_1 ; p_2, p_3 e p_4 são as ordens verdadeiras; e p_L é a ordem assintótica. Com a dedução apresentada na subseção 3.2.1, pode-se mostrar que a Eq. (5.24) se reduz a

$$\Phi = \phi_\infty + E(\phi_\infty) \quad (5.25)$$

onde

$$\phi_{\infty} = \phi_1 + C_1 h_1^{p_L} \quad (5.26)$$

$$E(\phi_{\infty}) = C_2 h_1^{p_2} + C_3 h_1^{p_3} + C_4 h_1^{p_4} + \dots \quad (5.27)$$

Portanto, com a definição de ordem assintótica do erro, dada acima, e a partir da Eq. (5.27), verifica-se que a ordem assintótica do erro de ϕ_{∞} , obtido através da extrapolação de Richardson, Eq. (3.8), é igual a p_2 . Esta ordem é maior do que a ordem assintótica do erro das soluções numéricas (ϕ_1, ϕ_2) usadas no cálculo de (ϕ_{∞}) , e que vale p_L . Deve-se notar que p_2 é a segunda ordem verdadeira do erro das soluções numéricas (ϕ_1, ϕ_2) usadas no cálculo de (ϕ_{∞}) . Procedimento semelhante pode ser usado para demonstrar que a ordem assintótica do erro da extrapolação de Richardson, obtida através da Eq. (5.16) com a ordem aparente (p_U), $\phi_{\infty}(p_U)$, também é igual a p_2 . Então, sabendo-se que o valor de ϕ_C se baseia em duas soluções numéricas extrapoladas, Eq. (5.19), finalmente, conclui-se que a ordem assintótica do erro da solução numérica convergente (ϕ_C) também é p_2 , que é maior do que a ordem assintótica do erro das soluções numéricas (ϕ_1, ϕ_2) usadas no cálculo de $\phi_{\infty}(p_L)$ e $\phi_{\infty}(p_U)$, encerrando a demonstração.

5.4 RESUMO DO CAPÍTULO 5

Foram definidos na seção 5.1 dois tipos de curva esperados para a ordem aparente (p_U) quando o tamanho (h) dos elementos da malha tende a zero, isto é, quando $h \rightarrow 0$: intervalos subconvergente e superconvergente; sendo ambos referenciados genericamente por ordem aparente convergente. Para os exemplos da seção 4.3, a ordem aparente (p_U) é convergente em todos os valores de h mostrados nas tabelas e figuras. Quando a equação do erro é composta por um único termo, a ordem aparente (p_U) é convergida, isto é, $p_E = p_U = p_L$; isso pode ser observado nas Eqs. (2.41) e (2.44) para as variáveis λ_{CDS}^i e λ_{CDS}^{ii} , assim como nas Tabs. 4.2 e 4.5. Quando a equação do erro é composta por dois ou mais termos e os dois primeiros têm sinais opostos, a ordem aparente (p_U) é subconvergente; isso pode ser constatado nas Eqs. (2.40) e (2.45) para as variáveis λ_{UDS}^i e λ_m , bem como na Fig. 4.1 e nas Tabs. 4.1 e 4.6. Quando a equação do erro é composta por dois ou mais termos e todos têm o mesmo sinal, a ordem

aparente (p_U) é superconvergente; isso pode ser observado nas Eqs. (2.42) e (2.43) para as variáveis λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , assim como na Fig. 4.2 e nas Tabs. 4.3 e 4.4. Não se vislumbrou, com o presente trabalho, um procedimento para estimar o valor de h_C , isto é, um procedimento que indicasse quando se está ou não dentro do intervalo convergente da ordem aparente para qualquer h dado.

Na seção 5.2, foram definidas, deduzidas e exemplificadas as envoltentes do erro de discretização (E) e da solução analítica exata (Φ) para os casos em que a ordem aparente é convergente. Com as Eqs. (5.13) e (5.14), concluiu-se que o erro de discretização (E) é envolvido pelas incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ quando p_U é convergente, onde $U_{Ri}(p_L)$ é a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.6) com a ordem assintótica (p_L), e $U_{Ri}(p_U)$ é a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.7) com a ordem aparente (p_U). Em outras palavras, $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ constituem limites inferior e superior do erro. Portanto, estas duas incertezas são confiáveis, isto é, $U/E \geq 1$. Assim, se p_U é subconvergente, $U_{Ri}(p_U)$ é confiável, conforme a Eq. (5.13), e se p_U é superconvergente, $U_{Ri}(p_L)$ é confiável, conforme a Eq. (5.14). Com a Eq. (5.12) e sua análoga para p_U superconvergente, verificou-se que quanto mais próximo p_U estiver de p_L , mais próximas da unidade estarão as efetividades das incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$. Conseqüentemente, mais acuradas serão estas estimativas de erro.

Com as Eqs. (5.17) e (5.18), concluiu-se que a solução analítica exata (Φ) é envolvida pelas extrapolações de Richardson calculadas com a ordem assintótica $\phi_\infty(p_L)$, Eq. (5.15), e com a ordem aparente $\phi_\infty(p_U)$, Eq. (5.16), quando p_U é convergente. Em outras palavras, $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$ constituem limites inferior e superior da solução analítica exata (Φ). Aqui também, da mesma forma que ocorre entre $U_{Ri}(p_L)$ e E , quanto mais próximo p_U estiver de p_L , mais próximo da unidade estarão as razões de $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$ em relação a Φ .

Na seção 5.3, com base no conceito de envolvente da solução analítica exata de uma variável genérica, foram introduzidos os conceitos de solução numérica convergente (ϕ_C) e sua respectiva incerteza (U_C). Além disso, foram apresentados exemplos de cálculo e deduzida a ordem assintótica do erro de ϕ_C , p_2 , que é maior do que a ordem assintótica do erro das soluções numéricas (ϕ_1, ϕ_2) usadas em seu cálculo, e que vale p_L , isto é, $p_2 > p_L$.

Capítulo 6.

**CONDIÇÕES SUFICIENTES PARA ESTIMATIVAS DE
ERRO CONFIÁVEIS NO INTERVALO CONVERGENTE**

São determinadas, nesse capítulo, as condições que são suficientes para realizar estimativas de erro que sejam confiáveis quando a ordem aparente é convergente. Em outras palavras, são determinadas as condições que são suficientes para que a efetividade (θ) ou a razão entre incerteza (U) e erro (E) seja maior ou igual à unidade, isto é, para que $U/E \geq 1$ quando a ordem aparente é subconvergente ou superconvergente, conforme as definições apresentadas no capítulo anterior. As condições são determinadas para os estimadores de erro de Richardson, delta e GCI , vistos nos Caps. 3 e 5.

6.1 ESTIMADOR DE RICHARDSON

Conforme demonstrado na seção 5.2, Eq. (5.13), **o estimador de Richardson é confiável se a ordem aparente (p_U) é subconvergente e a incerteza é calculada com base em p_U** , Eq. (5.7), isto é,

$$\frac{U_{Ri}(p_U)}{E} \geq 1 \quad (\text{se } p_U \text{ subconvergente}) \quad (6.1)$$

Também foi demonstrado na seção 5.2, Eq. (5.14), que **o estimador de Richardson é confiável se a ordem aparente (p_U) é superconvergente e a incerteza é calculada com base na ordem assintótica (p_L)**, Eq. (5.6), ou seja,

$$\frac{U_{Ri}(p_L)}{E} \geq 1 \quad (\text{se } p_U \text{ superconvergente}) \quad (6.2)$$

A acurácia das efetividades de $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ depende da diferença entre p_U e p_L , conforme já explicado na seção 5.2: quanto menor a diferença entre p_U e p_L , dentro do intervalo convergente, maior é a acurácia da efetividade do estimador de Richardson. Este fato pode ser verificado na Fig. 5.5 e nas Tabs. 5.1 e 5.2, com o auxílio das respectivas Tabs. 4.1 e 4.3; nestes dois casos $p_L = 1$.

De acordo com a Eq. (5.13), a estimativa de erro de $U_{Ri}(p_L)$, para p_U subconvergente, não é confiável. Isso pode ser visto por exemplo na Tab. 3.1, considerando-se os valores respectivos de p_U mostrados na Tab. 4.1, e lembrando-se que $p_L = 1$. Além disso, conforme a Eq. (5.14), no caso de p_U superconvergente, $U_{Ri}(p_U)$ não é confiável.

Conclusão: para se fazer uma estimativa de erro confiável, deve-se usar o estimador de Richardson com base na ordem aparente (p_U), Eq. (6.1), ou na ordem assintótica (p_L), Eq. (6.2), dependendo do comportamento de p_U ser subconvergente ou superconvergente, respectivamente. Exemplos são mostrados nas Tabs. 5.1 e 5.2 e na Fig. 5.1. No caso da Tab. 5.1, p_U é subconvergente, conforme a Tab. 4.1, e, portanto, aplica-se a Eq. (6.1). No caso da Tab. 5.2, p_U é superconvergente, de acordo com a Tab. 4.3, valendo então a Eq. (6.2). Para ambos os casos a ordem assintótica é $p_L = 1$.

6.2 ESTIMADOR DELTA

Para que a incerteza calculada com o estimador delta (U_Δ) seja confiável, deve-se garantir que

$$\frac{U_\Delta}{|E|} \geq 1 \quad (6.3)$$

O erro de discretização (E) pode ser substituído pela incerteza do estimador de Richardson (U_{Ri}) dependendo da ordem aparente (p_U) ser subconvergente ou superconvergente, conforme as Eqs. (6.1) e (6.2). Esta substituição pode ser feita porque U_{Ri} é confiável quando p_U é convergente. Assim, garantindo-se que $U_\Delta/|U_{Ri}| \geq 1$ também irá se garantir que $U_\Delta/|E| \geq 1$, embora com uma superestimativa.

Para p_U superconvergente, a razão entre o estimador delta, Eq. (3.25), e o estimador de Richardson, $U_{Ri}(p_L)$, dado pela Eq. (5.6) resulta em

$$\frac{U_{\Delta}}{|U_{Ri}(p_L)|} = q^{p_L} - 1 \quad (6.4)$$

onde q é a razão de refino de malha, definida na Eq. (3.9). Portanto, sabendo-se que $U_{Ri}(p_L)$ é um limite superior para E , com as Eqs. (6.3) e (6.4), conclui-se que **o estimador delta é confiável se for atendida a seguinte condição:**

$$q^{p_L} - 1 \geq 1$$

ou

$$q^{p_L} \geq 2 \quad (\text{se } p_U \text{ superconvergente}) \quad (6.5)$$

Um exemplo de que o estimador delta é confiável com $q = 2$ e $p_L = 1$ é mostrado na Tab. 3.3. Neste exemplo p_U é superconvergente, conforme pode ser visto na Tab. 4.3. Este caso de $q = 2$ e $p_L = 1$ satisfaz a condição dada na Eq. (6.5). Esta condição também é satisfeita para $q = 2$ e $p_L = 2$, cujos exemplos podem ser vistos nas Tabs. 3.4 e 3.6, com os respectivos p_U dados nas Tabs. 4.4 e 4.6.

Deve-se notar que qualquer $q < 2$ para aproximações numéricas cujo $p_L = 1$ deixa de satisfazer a Eq. (6.5). No caso de aproximações numéricas cujo $p_L = 2$, a Eq. (6.5) deixa de ser satisfeita para $q < 1,41$. Razões de refino de malha (q) menores do que 2 ou 1,5 são comuns na literatura, especialmente em problemas complexos e tridimensionais. Um exemplo é o trabalho de Stephens e Shih (1999): para verificar o efeito da malha sobre o escoamento tridimensional turbulento num duto, estes autores resolveram o problema numa malha 257x65x65 pontos e depois a refinaram com $q = 1,25$ em cada direção. Nesses casos, portanto, mesmo para p_U convergente, o estimador delta não é confiável.

No caso de p_U ser subconvergente, o estimador de Richardson baseado na ordem aparente $U_{Ri}(p_U)$, Eq. (5.7), é que representa o limite superior do erro de discretização (E), conforme a Eq. (6.1). Então, a razão entre o estimador delta e $U_{Ri}(p_U)$ fornece

$$\frac{U_{\Delta}}{|U_{Ri}(p_U)|} = q^{p_U} - 1 \quad (6.6)$$

Portanto, para que o estimador delta seja confiável, das Eqs. (6.3) e (6.6), conclui-se que deve ser atendida a seguinte condição:

$$q^{p_U} - 1 \geq 1$$

ou

$$q^{p_U} \geq 2 \quad (\text{se } p_U \text{ subconvergente}) \quad (6.7)$$

Na Tab. 3.1 são dados exemplos de que quando a condição da Eq. (6.7) não é satisfeita, obtém-se, conforme previsto, $U_\Delta/|E| < 1$; os valores respectivos de p_U são mostrados na Tab. 4.1. No caso específico de $h = 1$, com $q = 2$, obteve-se $p_U = 0,577$, portanto $q^{p_U} = 1,49$ e $U_\Delta/|E| = 0,84$, não satisfazendo a condição da Eq. (6.7). Para $h = 3,90 \times 10^{-3}$, $p_U = 0,999$, o que resulta em $q^{p_U} = 1,998$ e $U_\Delta/|E| = 0,999$; então, a acurácia de U_Δ , neste caso, é muito boa mas seu valor não é confiável pois não atende à Eq. (6.3).

Para p_U subconvergente, mesmo com razão de refino de malha $q = 2$, o valor obtido do estimador delta (U_Δ) pode subestimar muito o erro. Por exemplo, se $p_U = 0,1$, da Eq. (6.6), $U_\Delta/|E| = 0,07$, isto é, a estimativa do erro subestima muito o valor correto do erro; nesse caso o erro é cerca de 14 vezes o valor da incerteza.

6.3 ESTIMADOR GCI

Para que a incerteza calculada com o estimador GCI (U_{GCI}) seja confiável, deve-se garantir que

$$\frac{U_{GCI}}{|E|} \geq 1 \quad (6.8)$$

O erro de discretização (E) pode ser substituído pela incerteza do estimador de Richardson (U_{Ri}) dependendo da ordem aparente (p_U) ser subconvergente ou superconvergente, conforme as Eqs. (6.1) e (6.2). Esta substituição pode ser feita porque U_{Ri} é confiável quando p_U é convergente.

Assim, garantindo-se que $U_{GCI}/|U_{Ri}| \geq 1$ também irá se garantir que $U_{GCI}/|E| \geq 1$, embora com uma superestimativa.

Para p_U superconvergente, a razão entre o estimador GCI calculado com a ordem assintótica (p_L), Eq. (3.31), e o estimador de Richardson $U_{Ri}(p_L)$ dado pela Eq. (5.6) resulta em

$$\frac{U_{GCI}(p_L)}{|U_{Ri}(p_L)|} = F_S \quad (6.9)$$

onde F_S é o fator de segurança do estimador GCI . Portanto, sabendo-se que $U_{Ri}(p_L)$ é um limite superior para E , com as Eqs. (6.8) e (6.9), conclui-se que **o estimador GCI é confiável se for atendida a seguinte condição:**

$$F_S \geq 1 \quad (\text{se } p_U \text{ superconvergente}) \quad (6.10)$$

Esta condição é sempre satisfeita porque os valores usados para F_S são maiores do que a unidade (Roache, 1998), como o valor três usado neste trabalho. Se for usado $F_S = 1$, que é o valor mínimo que atende à Eq. (6.10), o estimador GCI recai no estimador de Richardson. Exemplos da validade da Eq. (6.10) são mostrados nas Tabs. 3.3 e 3.4: $U_{GCI}/|E| > 1$ em qualquer h ; nestes casos foi usado $F_S = 3$, e p_U é superconvergente, conforme pode-se ver respectivamente nas Tabs. 4.3 e 4.4, sendo $p_L = 1$ e 2, respectivamente.

No caso de p_U ser subconvergente, o estimador de Richardson baseado na ordem aparente, $U_{Ri}(p_U)$, é que representa o limite superior do erro de discretização (E), conforme a Eq. (6.1). Então, a razão entre o estimador GCI calculado com a ordem assintótica (p_L), Eq. (3.23) e $U_{Ri}(p_U)$, Eq. (5.7), resulta em

$$\frac{U_{GCI}(p_L)}{|U_{Ri}(p_U)|} = F_S \frac{(q^{p_U} - 1)}{(q^{p_L} - 1)} \quad (6.11)$$

Portanto, **para que o estimador GCI seja confiável**, das Eqs. (6.8) e (6.11), conclui-se que **a seguinte condição deve ser satisfeita:**

$$F_S \frac{(q^{p_U} - 1)}{(q^{p_L} - 1)} \geq 1$$

ou

$$F_S \geq \frac{(q^{p_L} - 1)}{(q^{p_U} - 1)} \quad (\text{se } p_U \text{ subconvergente}) \quad (6.12)$$

Para a variável λ_{UDS}^i , com $q = 2$ em $h = 1$ tem-se $p_U = 0,577$, conforme a Tab. 4.1. Para esta variável $p_L = 1$. Assim, da Eq. (6.12), verifica-se que o valor mínimo do fator de segurança que deve ser usado neste caso para que U_{GCI} seja confiável é $F_S = 2,03$. Foi usado $F_S = 3$, o que resultou em $U_{GCI}/|E| = 2,51$, conforme se pode ver na Tab. 3.1.

O F_S obtido da Eq. (6.12) é o valor mínimo que deve ser empregado para que U_{GCI} seja garantidamente confiável de acordo com as demonstrações matemáticas feitas neste capítulo e no anterior, quando p_U é subconvergente. Porém, valores de F_S menores do que o recomendado pela Eq. (6.12) podem eventualmente resultar em $U_{GCI}/|E| \geq 1$. Isso ocorre porque houve a substituição de E por U_{Ri} na Eq. (6.8). Portanto, a Eq. (6.12) representa uma condição suficiente mas não necessária para que U_{GCI} seja confiável.

Contudo, ainda no caso de p_U ser subconvergente, se o estimador GCI for calculado com a ordem aparente (p_U), a sua razão para $U_{Ri}(p_U)$ resulta em

$$\frac{U_{GCI}(p_U)}{|U_{Ri}(p_U)|} = F_S \quad (6.13)$$

Assim, **para que o estimador GCI seja confiável**, das Eqs. (6.8) e (6.13), **deve-se atender à seguinte condição:**

$$F_S \geq 1 \quad (\text{se } p_U \text{ subconvergente}) \quad (6.14)$$

isto é, obtém-se o mesmo resultado da Eq. (6.10) de p_U superconvergente.

Conclusão: pelo menos quando a ordem aparente é convergente, o estimador GCI é desnecessário. Isso ocorre porque se aplicado adequadamente, isto é, usando-se p_L ou p_U no seu cálculo para os casos superconvergente ou subconvergente, respectivamente, basta empregar $F_S = 1$, o que resulta em reduzi-lo ao estimador de Richardson, de acordo com a Eq. (3.38).

6.4 RESUMO DO CAPÍTULO 6

Foram determinadas as condições que são suficientes para realizar estimativas de erro que sejam confiáveis quando a ordem aparente é convergente. Em outras palavras, foram determinadas as condições que são suficientes para que a efetividade (θ) ou a razão entre incerteza (U) e erro (E) seja $U/E \geq 1$ quando a ordem aparente é subconvergente e superconvergente, conforme definições apresentadas no capítulo anterior. As condições foram determinadas para os estimadores de erro de Richardson, delta e GCI , vistos nos Caps. 3 e 5.

Para um determinado problema cuja malha tem elementos de tamanho h e cuja ordem aparente não está no intervalo convergente, neste h , não existe qualquer garantia de que as condições vistas neste capítulo sejam suficientes para realizar estimativas de erro confiáveis. Mas para os casos em que a ordem aparente é convergente, verificou-se que:

- 1) No caso do estimador de Richardson, para se fazer uma estimativa de erro confiável, deve-se usá-lo com base na ordem aparente (p_U), Eq. (6.1), ou na ordem assintótica (p_L), Eq. (6.2), dependendo do comportamento de p_U ser subconvergente ou superconvergente, respectivamente.
- 2) No caso do estimador delta, para se fazer uma estimativa de erro confiável, deve-se atender à condição dada na Eq. (6.7) se a ordem aparente (p_U) é subconvergente, ou à condição dada na Eq. (6.5) se a ordem aparente (p_U) é superconvergente.
- 3) Pelo menos quando a ordem aparente é convergente, o estimador GCI é desnecessário. Isso ocorre porque se aplicado adequadamente, isto é, usando-se p_L ou p_U no seu cálculo para os casos superconvergente ou subconvergente, respectivamente, basta empregar $F_S = 1$, o que resulta em reduzi-lo ao estimador de Richardson, de acordo com a Eq. (3.38).
- 4) Devido à sua concepção, a incerteza calculada com o estimador convergente, Eq. (5.20), é automaticamente confiável quando a ordem aparente (p_U) é convergente.

Parte I.

FECHAMENTO DA PARTE I

O fechamento da Parte I deste trabalho está dividido em três seções: escopo, síntese e contribuições; descritas a seguir.

I.1 ESCOPO DA PARTE I

Foram apresentados seis tipos de aproximações numéricas (λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m), definidos na Tab. 2.1, para três variáveis de interesse diferentes: as derivadas de primeira e segunda ordem da variável dependente (Λ) nos modelos matemáticos, Λ^i e Λ^{ii} ; e a média da variável dependente ao longo do domínio de cálculo, Λ_m ; onde a variável independente é a coordenada x , e, portanto, as malhas são unidimensionais. De forma genérica, a solução analítica exata de qualquer variável de interesse é representada pelo símbolo Φ e o seu valor aproximado por ϕ . Todas as aproximações numéricas foram obtidas considerando os valores nodais iguais à solução analítica da variável dependente (Λ), isto é, não existem erros nos valores nodais usados para obter as aproximações numéricas, e as variáveis de interesse são as próprias aproximações numéricas. Conseqüentemente, o erro de discretização das variáveis de interesse é igual ao erro de truncamento. Além disso, o tamanho (h) dos elementos da malha foi considerado constante, ou seja, as malhas eram uniformes.

I.2 SÍNTESE DA PARTE I

A Tab. I.1 apresenta os cinco tipos de análise de erros que são possíveis de fazer de acordo com o que foi visto na Parte I deste trabalho. O primeiro tipo de análise, *a priori* das soluções numéricas (ϕ) e sem a solução analítica exata da variável de interesse (Φ), isto é, sem ϕ e sem Φ , permite apenas a obtenção da ordem assintótica (p_L) e das ordens verdadeiras ($p_V = p_L$,

p_2, p_3, p_4, \dots) do erro de truncamento (ε_τ), a partir de sua equação geral, Eq. (2.2). Também é possível estimar a razão de redução do erro de truncamento (ψ_E), dado pela razão entre o erro de truncamento, assintótico, numa malha grossa (h_2) e numa malha fina (h_1). Os tipos de ordem de erros e de incertezas estão resumidos na Tab. I.2.

Tabela I.1 Tipos de análise de erros.

número	tipo de análise	parâmetros que podem ser calculados
1	<i>a priori</i> , sem Φ e sem ϕ	p_L e p_V de ε_τ , ψ_E
2	<i>a priori</i> , com Φ e sem ϕ	idem 1, ε_τ (equação geral), p_E (equação) de ε_τ
3	<i>a posteriori</i> , sem Φ e com ϕ nodal	idem 1, p_U , U , ψ_U
4	<i>a posteriori</i> , com Φ e com ϕ nodal	idem 1 a 3, $E(=\Phi-\phi)$, p_E , θ
5	<i>a posteriori</i> , com Φ e com ϕ contínuo	idem 1 a 4, E (equação geral), p_L e p_V de E (equação geral), p_E (equação) de E

O segundo tipo de análise, *a priori* das soluções numéricas (ϕ) e com a solução analítica exata da variável de interesse (Φ), isto é, sem ϕ e com Φ , além dos parâmetros já obtidos na primeira análise, permite a obtenção da equação geral do erro de truncamento (ε_τ), Eq. (2.2), ou seja, de todos os seus coeficientes. Também é possível obter uma expressão analítica para a ordem efetiva (p_E) do erro de truncamento (ε_τ), baseada em uma malha única, através das Eqs. (4.17) e (4.15).

No terceiro tipo de análise, *a posteriori* das soluções numéricas (ϕ) e sem a solução analítica exata da variável de interesse (Φ), isto é, com ϕ nodal conhecido e sem Φ , além dos parâmetros já obtidos na primeira análise, permite a obtenção da incerteza (U) da solução numérica através de quaisquer estimadores de erro descritos na Tab. I.3. Também é possível obter o valor da ordem aparente (p_U) da incerteza calculada. Finalmente, pode-se ainda calcular a razão de convergência da solução numérica para a solução analítica (ψ_U), através da Eq. (4.25).

No quarto tipo de análise, *a posteriori* das soluções numéricas (ϕ) e com a solução analítica exata da variável de interesse (Φ), isto é, com ϕ nodal conhecido e com Φ , além dos parâmetros já obtidos do primeiro ao terceiro tipo de análise, permite a obtenção do erro de discretização (E) através da Eq. (3.1). Também é possível obter o valor da ordem efetiva (p_E) com base no erro de discretização em duas malhas, através da Eq. (4.4). Pode-se obter, ainda, a efetividade (θ) da incerteza, com a Eq. (3.4).

Tabela I.2 Tipos de ordem dos erros de truncamento (ε_τ) e de discretização (E), e da incerteza (U).

tipo de ordem	símbolo	equação	de quem é	valores esperados
verdadeiras	p_V	(2.2)	ε_τ	1, 2, 3, ..., para λ_{UDS}^i
		(3.2)	E	2, 4, 6, ..., para λ_{CDS}^i
				2, 3, 4, ..., para λ_{DDS-2}^i
assintótica	p_L	(2.2)	ε_τ	1 ou 2
		(3.2)	E	
efetiva	p_E	(4.4) ou (4.17) com (4.15)	ε_τ E	$> p_L, < p_L, < 0$, indefinido
aparente	p_U	(4.25) com (4.26)	U	$> p_L, < p_L, < 0$, indefinido

O quinto tipo de análise, *a posteriori* das soluções numéricas (ϕ) e com a solução analítica exata da variável de interesse (Φ), isto é, com ϕ conhecido através de uma equação contínua em x e com Φ , além dos parâmetros já obtidos do primeiro ao quarto tipo de análise, permite a obtenção da equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2), ou seja, de todos os seus coeficientes sendo conhecidos. Além disso, permite obter a ordem assintótica (p_L) e as ordens verdadeiras ($p_V = p_L, p_2, p_3, p_4, \dots$) do erro de discretização a partir de sua equação geral,

Eq. (3.2). Também é possível obter uma expressão analítica para a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização, baseada em uma malha única, através das Eqs. (4.17) e (4.15).

Tabela I.3 Tipos de estimadores do erro de discretização (E).

tipo de estimador	símbolo	baseado em	equação	mínimo*	θ para $h \rightarrow 0$
de Richardson	$U_{Ri}(p_L)$	p_L	(3.10)	2	1
	$U_{Ri}(p_U)$	p_U	(4.28)	3	1
delta	U_Δ	---	(3.25)	2	$q^{p_L} - 1$
GCI	$U_{GCI}(p_L)$	p_L	(3.31)	2	F_S
	$U_{GCI}(p_U)$	p_U	Cap. 6	3	F_S
bicoeficiente	U_{bi}	p_L e p_2	(3.39)	3	1
tricoeficiente	U_{tri}	p_L, p_2 e p_3	(3.54)	4	1
multicoeficiente	U_{mc}	$p_L, p_2, p_3, \dots, p_{M-1}$	(3.66)	M	1
convergente	U_C	p_L e p_U	(5.20)	3	?

mínimo* = número mínimo de soluções numéricas (ϕ) para usá-lo

Os quatro tipos de ordem dos erros de truncamento (ε_τ) e de discretização (E), e da incerteza (U) são apresentados na Tab. I.2, assim como seus símbolos, equações de cálculo e de definição, e os valores típicos que podem assumir. Estes tipos de ordem são empregados nos estimadores do erro de discretização (E) descritos na Tab. I.3. Nesta tabela são apresentados os seus símbolos, mencionadas as equações usadas no cálculo de cada tipo de estimador de erro e o número mínimo de soluções numéricas necessárias para aplicar cada estimador. Na última coluna, apresenta-se a efetividade (θ) assintótica de cada estimador, isto é, a razão entre incerteza (U) e erro (E) para o limite em que o tamanho (h) dos elementos da malha tende a zero, onde q é a razão de refino de malha, e F_S é o fator de segurança do estimador GCI .

Nos casos efetivamente práticos de CFD , isto é, quando se deseja obter a solução numérica de um problema, a solução analítica é desconhecida. Mas, para os exemplos apresentados nos Caps. 2 a 5, considerou-se que a solução analítica da variável dependente (Λ) e de suas derivadas eram conhecidas. O objetivo foi: no Cap. 2, exemplificar o procedimento de cálculo dos erros de truncamento com a série de Taylor; no Cap. 3, avaliar o desempenho de

diversos estimadores de erro; no Cap. 4, calcular ordens efetiva e aparente; e, no Cap. 5, exemplificar o uso do estimador convergente.

I.3 CONTRIBUIÇÕES NA PARTE I

As contribuições realizadas ao longo da Parte I deste trabalho podem ser resumidas nos seguintes pontos:

- 1) Foram introduzidos quatro novos estimadores de erro, *a posteriori*, denominados bicoeficiente, tricoeficiente, multicoeficiente e convergente.
- 2) Foram demonstrados os valores que podem ser assumidos pela ordem efetiva (p_E) do erro de discretização e pela ordem aparente (p_U) da incerteza de soluções numéricas, conforme mostrado na Tab. I.2.
- 3) Foram definidos na seção 5.1 dois tipos de curva esperados para a ordem aparente (p_U) quando o tamanho (h) dos elementos da malha tende a zero: intervalos subconvergente e superconvergente; sendo ambos referenciados genericamente por ordem aparente convergente. Para os casos em que a ordem aparente é convergente, foi demonstrado que: o erro de discretização (E) é envolvido pelas incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$, onde $U_{Ri}(p_L)$ é a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.6) com a ordem assintótica (p_L), e $U_{Ri}(p_U)$ é a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.7) com a ordem aparente (p_U); e a solução analítica exata (Φ) é envolvida pelas extrapolações de Richardson calculadas com a ordem assintótica, $\phi_\infty(p_L)$, Eq. (5.15), e com a ordem aparente, $\phi_\infty(p_U)$, Eq. (5.16).
- 4) Para os estimadores de erro de Richardson, delta e GCI , disponíveis na literatura, foram demonstradas as condições que são suficientes para realizar estimativas de erro confiáveis quando a ordem aparente é convergente.

Parte II.

ERRO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS OBTIDAS EM MALHAS UNIFORMES

Na Parte I deste trabalho, as aproximações numéricas descritas no Cap. 2 foram feitas utilizando-se valores nodais obtidos de soluções analíticas exatas. Embora isso não represente a situação prática das simulações numéricas, esse recurso foi empregado apenas para facilitar a explicação dos conceitos básicos que são usados no presente trabalho.

A situação prática, na qual as aproximações numéricas são calculadas com valores nodais obtidos das próprias soluções numéricas e, portanto, com erros adicionais, é examinada na Parte II deste trabalho, que envolve os Caps. 7 a 13. No Cap. 7 são reescritas as seis aproximações numéricas apresentadas no Cap. 2. Nos Caps. 8 a 13 são apresentadas as soluções numéricas de oito equações diferenciais de advecção e de difusão de um escalar, bem como de advecção-difusão, sobre malhas uniformes. A Parte II serve de base para as análises que são feitas na Parte III onde são abordadas simulações numéricas em malhas não-uniformes.

Capítulo 7.

**APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS E SEUS ERROS
DE TRUNCAMENTO E DE POLUIÇÃO EM MALHAS UNIFORMES**

A Tab. 2.1 relaciona três tipos de variáveis para os quais foram apresentados seis tipos de aproximações numéricas ao longo do Cap. 2, seus erros de truncamento (ε) e os símbolos utilizados para referenciar suas soluções analíticas (Φ) e numéricas (ϕ). Na obtenção destas aproximações numéricas, considerou-se que os valores nodais da solução numérica (λ) da variável dependente nos modelos matemáticos fossem iguais aos valores nodais da solução analítica (Λ), isto é, o erro de discretização de λ , $E(\lambda)$, foi considerado nulo nos nós da malha, Fig. 2.1.

Porém, nas simulações numéricas em geral, as aproximações numéricas são calculadas com valores nodais obtidos das próprias soluções numéricas e, portanto, com erro de discretização. Assim, o objetivo deste capítulo é reescrever as seis aproximações numéricas apresentadas no Cap. 2 considerando-se nelas que

$$\Lambda = \lambda + E(\lambda) \tag{7.1}$$

onde Λ e λ representam, respectivamente, as soluções analítica e numérica da variável dependente nos modelos matemáticos, que são função da variável independente, isto é, da coordenada x , e $E(\lambda)$ é o erro de discretização de λ , conforme a definição geral apresentada na Eq. (3.1). O uso da Eq. (7.1) gera o aparecimento de um novo tipo de erro, o **erro de poluição (e)**. Esta denominação foi inspirada no trabalho de Babuska *et al.* (1997), embora estes autores a tenham usado com outro sentido. Esse novo tipo de erro é acrescentado aos conceitos de erro de truncamento (ε) e de erro de discretização (E), que foram vistos, respectivamente, nos Caps. 2 e 3.

As expressões para as aproximações numéricas da Tab. 2.1, e para seus erros de truncamento (ε) e de poluição (e), são deduzidas nas seções 7.1 a 7.6, a seguir, e aplicadas ao longo dos capítulos que compõem a Parte II deste trabalho.

7.1 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 1 PONTO A MONTANTE: λ_{UDS}^i

Isolando-se Λ_j^i da Eq. (2.4), obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h} + \Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (7.2)$$

onde Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª, 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j e h é o tamanho dos elementos da malha. Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (7.2), obtém-se

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{UDS}^i)_j + \varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j + e(\lambda_{UDS}^i)_j \quad (7.3)$$

onde a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a montante, λ_{UDS}^i , é

$$(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} \quad (7.4)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{UDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j = \Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (7.5)$$

$$e(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{(E_j - E_{j-1})}{h} \quad (7.6)$$

onde E_j e E_{j-1} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_j e λ_{j-1} , respectivamente.

Comparando-se as Eqs. (3.1) e (7.3), conclui-se que o erro de discretização da aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a montante, λ_{UDS}^i , é dado por

$$E(\lambda_{UDS}^i)_j = \varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j + e(\lambda_{UDS}^i)_j \quad (7.7)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição.

7.2 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM DIFERENÇA CENTRAL: λ_{CDS}^i

Com a subtração da Eq. (2.4) de (2.5) e o isolamento de Λ_j^i do resultado, obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1})}{2h} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_j^v \frac{h^4}{120} - \Lambda_j^{vii} \frac{h^6}{5040} - \dots \quad (7.8)$$

onde Λ_j^{iii} , Λ_j^v e Λ_j^{vii} são, respectivamente, as derivadas de 3ª, 5ª e 7ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (7.8), obtém-se

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{CDS}^i)_j + \varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j + e(\lambda_{CDS}^i)_j \quad (7.9)$$

onde a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com diferença central, λ_{CDS}^i , é

$$(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1})}{2h} \quad (7.10)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{CDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j = -\Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_j^v \frac{h^4}{120} - \Lambda_j^{vii} \frac{h^6}{5040} - \dots \quad (7.11)$$

$$e(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{(E_{j+1} - E_{j-1})}{2h} \quad (7.12)$$

onde E_{j+1} e E_{j-1} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_{j+1} e λ_{j-1} , respectivamente.

Comparando-se as Eqs. (3.1) e (7.9), conclui-se que o erro de discretização da aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com diferença central, λ_{CDS}^i , é dado por

$$E(\lambda_{CDS}^i)_j = \varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j + e(\lambda_{CDS}^i)_j \quad (7.13)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição.

7.3 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 1 PONTO A JUSANTE: λ_{DDS}^i

Isolando-se Λ_j^i da Eq. (2.5), obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_j)}{h} - \Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (7.14)$$

onde Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª, 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (7.14), obtém-se

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{DDS}^i)_j + \varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_j + e(\lambda_{DDS}^i)_j \quad (7.15)$$

onde a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i , é

$$(\lambda_{DDS}^i)_j = \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_j)}{h} \quad (7.16)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{DDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_j = -\Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (7.17)$$

$$e(\lambda_{DDS}^i)_j = \frac{(E_{j+1} - E_j)}{h} \quad (7.18)$$

Comparando-se as Eqs. (3.1) e (7.15), conclui-se que o erro de discretização da aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i , é dado por

$$E(\lambda_{DDS}^i)_j = \varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_j + e(\lambda_{DDS}^i)_j \quad (7.19)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição.

7.4 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 2 PONTOS A JUSANTE: λ_{DDS-2}^i

Subtraindo-se a Eq. (2.6) da Eq. (2.5), multiplicada por quatro, e isolando-se Λ_j^i do resultado, obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(4\Lambda_{j+1} - 3\Lambda_j - \Lambda_{j+2})}{2h} + \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{3} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{4} + \Lambda_j^v \frac{7h^4}{60} + \dots \quad (7.20)$$

onde Λ_j^{iii} , Λ_j^{iv} e Λ_j^v são, respectivamente, as derivadas de 3ª, 4ª e 5ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (7.20), obtém-se

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{DDS-2}^i)_j + \varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_j + e(\lambda_{DDS-2}^i)_j \quad (7.21)$$

onde a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i , é,

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \frac{(4\lambda_{j+1} - 3\lambda_j - \lambda_{j+2})}{2h} \quad (7.22)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{DDS-2}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{3} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{4} + \Lambda_j^v \frac{7h^4}{60} + \dots \quad (7.23)$$

$$e(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \frac{(4E_{j+1} - 3E_j - E_{j+2})}{2h} \quad (7.24)$$

onde E_{j+1} , E_j e E_{j+2} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_{j+1} , λ_j e λ_{j+2} , respectivamente.

Comparando-se as Eqs. (3.1) e (7.21), conclui-se que o erro de discretização da aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i , é dado por

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_j + e(\lambda_{DDS-2}^i)_j \quad (7.25)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição.

7.5 DERIVADA DE 2ª ORDEM COM DIFERENÇA CENTRAL: λ_{CDS}^{ii}

Com a adição das Eqs. (2.4) e (2.5) e o isolamento de Λ_j^{ii} do resultado, obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 2ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^{ii} = \frac{(\Lambda_{j-1} + \Lambda_{j+1} - 2\Lambda_j)}{h^2} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^2}{12} - \Lambda_j^{vi} \frac{h^4}{360} - \Lambda_j^{viii} \frac{h^6}{20160} - \dots \quad (7.26)$$

onde Λ_j^{iv} , Λ_j^{vi} e Λ_j^{viii} são, respectivamente, as derivadas de 4ª, 6ª e 8ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (7.26), obtém-se

$$\Lambda_j^{ii} = (\lambda_{CDS}^{ii})_j + \varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})_j + e(\lambda_{CDS}^{ii})_j \quad (7.27)$$

onde a aproximação numérica da derivada de 2ª ordem com diferença central, λ_{CDS}^{ii} , é

$$(\lambda_{CDS}^{ii})_j = \frac{(\lambda_{j-1} + \lambda_{j+1} - 2\lambda_j)}{h^2} \quad (7.28)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})$, e de poluição, $e(\lambda_{CDS}^{ii})$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})_j = -\Lambda_j^{iv} \frac{h^2}{12} - \Lambda_j^{vi} \frac{h^4}{360} - \Lambda_j^{viii} \frac{h^6}{20160} - \dots \quad (7.29)$$

$$e(\lambda_{CDS}^{ii})_j = \frac{(E_{j-1} + E_{j+1} - 2E_j)}{h^2} \quad (7.30)$$

Comparando-se as Eqs. (3.1) e (7.27), conclui-se que o erro de discretização da aproximação numérica da derivada de 2ª ordem com diferença central, λ_{CDS}^{ii} , é dado por

$$E(\lambda_{CDS}^{ii})_j = \varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})_j + e(\lambda_{CDS}^{ii})_j \quad (7.31)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição.

7.6 MÉDIA DA VARIÁVEL DEPENDENTE: λ_m

Através da Eq. (2.28), define-se a solução analítica exata da média da variável dependente (Λ_m) ao longo do domínio de cálculo. Seu resultado, obtido pela regra do trapézio (Pletcher *et al.*, 1988), resulta na Eq. (2.29). Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (2.29), obtém-se

$$\Lambda_m = \lambda_m + \varepsilon(\lambda_m) + e(\lambda_m) \quad (7.32)$$

onde a aproximação numérica da média da variável dependente (λ_m), obtida pela regra do trapézio ao longo do domínio de cálculo, é

$$\lambda_m = \frac{h}{2L} \sum_{j=1}^N (\lambda_{j-1} + \lambda_j) \quad (7.33)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_m)$, e de poluição, $e(\lambda_m)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_m) = -\frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \left(\Lambda_{j-1/2}^{ii} \frac{h^3}{12} + \Lambda_{j-1/2}^{iv} \frac{h^5}{480} + \dots \right) \quad (7.34)$$

$$e(\lambda_m) = \frac{h}{2L} \sum_{j=1}^N (E_{j-1} + E_j) \quad (7.35)$$

Comparando-se as Eqs. (3.1) e (7.32), conclui-se que o erro de discretização da aproximação numérica da média da variável dependente (λ_m), é dado por

$$E(\lambda_m) = \varepsilon(\lambda_m) + e(\lambda_m) \quad (7.36)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição.

Comparando-se as Eqs. (2.2) e (7.34), verifica-se que em princípio as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_m)$ seriam $p_V = 3, 5$, etc, e a ordem assintótica seria $p_L = 3$. Mas, conforme demonstrado por Pletcher *et al.* (1988), exemplificado na subseção 2.9.3 e demonstrado para casos equivalentes nas subseções 8.6.1 e 8.6.2, os valores das ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_m)$ são $p_V = 2, 4$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 2$. Esta redução ou **degeneração de ordem do erro de truncamento** ocorre devido ao efeito do somatório dos erros de cada elemento da malha para obter $\varepsilon(\lambda_m)$; assim, **o erro de truncamento da aproximação numérica λ_m é de 2ª ordem**. Maiores explicações sobre degeneração de ordem do erro são apresentadas a partir do Cap. 8.

7.7 RESUMO DO CAPÍTULO 7

O caso prático das simulações numéricas, isto é, quando a própria variável dependente armazenada nos nós da malha contém erro de discretização, foi abordado genericamente neste capítulo. Neste caso, o erro de discretização de cada aproximação numérica é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição.

Foram apresentados seis tipos de aproximações numéricas (λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m) para três variáveis diferentes: as derivadas de primeira e segunda ordem da variável dependente (Λ) nos modelos matemáticos, Λ^i e Λ^{ii} ; e a média da variável dependente ao longo do domínio de cálculo, Λ_m . Também foram apresentadas as expressões genéricas para o erro de truncamento (ε) e o erro de poluição (e) destas seis aproximações numéricas, ou seja, as estimativas de erro *a priori*. Foram definidas e obtidas as ordens assintótica (p_L) e verdadeiras (p_V) dos erros de truncamento, resumidas na Tab. 2.8.

As expressões para os erros de truncamento (ε) das aproximações numéricas deste capítulo são iguais àsquelas do Cap. 2 porque ambas se baseiam em derivadas da solução analítica exata da variável dependente (Λ). Estes erros geram os erros de discretização (E), que por sua vez geram os erros de poluição (e), conforme será visto a partir do Cap. 8. Portanto, se os erros de discretização são nulos nos nós, os erros de poluição também são; este é exatamente o caso que foi visto na Parte I deste trabalho.

Aplicações das seis aproximações numéricas descritas acima, e de seus erros de truncamento e de poluição, são apresentadas a partir do Cap. 8, a seguir.

Capítulo 8.

CASOS 1 E 2: ADVECÇÃO COM UDS EM MALHA UNIFORME

Ao longo dos próximos capítulos, Caps. 8 a 13, são considerados oito equações diferenciais. Suas soluções numéricas são obtidas para $N = 2, 4, 8, \dots, 65536$ elementos, que correspondem a malhas com tamanho dos elementos de $h = 0,5; 0,25; 0,125, \dots, 1,53 \times 10^{-5}$. São feitos e apresentados os seguintes tipos de análises e resultados:

- 1) apresentação das soluções analíticas da variável dependente (Λ) nas equações diferenciais, sua derivada de primeira ordem (Λ^i) e a sua média ao longo do domínio de cálculo (Λ_m);
- 2) apresentação das soluções numéricas da variável dependente (λ), de sua derivada de primeira ordem, obtida de duas formas, λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , e da sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m); quando possível, as soluções numéricas são em forma fechada;
- 3) apresentação de gráficos do erro de discretização *versus* h para a variável dependente em $x = \frac{1}{2}$, $\lambda(\frac{1}{2})$, para sua derivada primeira em $x = 0$, obtida de duas formas, $(\lambda_{DDS}^i)_0$ e $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$, e sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m);
- 4) apresentação de gráficos e tabelas da ordem aparente (p_U), em função de h , para $\lambda(\frac{1}{2})$, $(\lambda_{DDS}^i)_0$, $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$ e λ_m ; e, quando possível, de equações da ordem efetiva (p_E) do erro de discretização destas quatro variáveis;
- 5) obtenção da ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de $\lambda(\frac{1}{2})$, $(\lambda_{DDS}^i)_0$, $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$ e λ_m com base na tendência da ordem aparente (p_U) quando $h \rightarrow 0$;
- 6) obtenção do erro de truncamento das equações discretizadas, de suas ordens verdadeiras (p_V) e assintóticas (p_L);
- 7) cálculo da razão entre incerteza (U) e erro de discretização (E), e apresentação de algumas tabelas para os estimadores de erro vistos nos Caps. 3 e 5: delta, de Richardson, GCI , bicoeficiente, tricoeficiente e convergente;

- 8) verificação da validade da analogia entre a equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2); e
- 9) definição de erros de discretização local e global, no Cap. 8, e verificação da degeneração de suas ordens assintóticas.

A maioria das equações diferenciais empregadas representa problemas muito simples, cujas soluções analíticas, em geral, são polinômios com poucos termos. Isso facilita as análises que são feitas, mas não restringe as conclusões que são obtidas, conforme será mostrado ao se abordar problemas mais complexos, isto é, cujos erros de discretização apresentam um número infinito de termos.

O problema da advecção de um escalar é abordado neste capítulo. O modelo numérico é constituído pelo método de diferenças finitas, com aproximação numérica de 1ª ordem a montante e malhas uniformes. Os objetivos são: exemplificar a aplicação de toda a teoria vista na Parte I e no Cap. 7 deste trabalho à solução numérica de um modelo matemático. Isto é, analisar erros e suas ordens, das três variáveis de interesse da Tab. 1.2, para o caso em que a variável dependente tem erro de discretização nos nós da malha; e introduzir os conceitos de erros de discretização local e global. Mostra-se que o erro de poluição, que ocorre devido ao erro de discretização nos nós da malha, pode alterar a ordem assintótica dos erros de truncamento das aproximações numéricas.

8.1 MODELO MATEMÁTICO DO CASO 1

O modelo matemático do Caso 1 é dado por

$$V \frac{d\Lambda}{dx} = 2x \quad (8.1)$$

com a seguinte condição de contorno de Dirichlet (Tannehill *et al.*, 1997):

$$\Lambda(0) = 0 \quad (8.2)$$

onde V é a velocidade do escoamento, que é admitida ser constante, Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar transportado por advecção, e x é a variável independente, a direção coordenada.

8.2 SOLUÇÃO ANALÍTICA DO CASO 1

A **solução analítica** exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2), **para a variável dependente** (Λ), é

$$\Lambda = \frac{x^2}{V} \quad (8.3)$$

Com a Eq. (8.3) em (2.28), a **solução analítica** exata **da média da variável dependente** resulta em

$$\Lambda_m = \frac{L^2}{3V} \quad (8.4)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo. A partir da Eq. (8.3), obtém-se que a **derivada de primeira ordem da variável dependente** é

$$\Lambda^i = \frac{2x}{V} \quad (8.5)$$

e, portanto, no contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, seu valor resulta em

$$\Lambda^i(0) = 0 \quad (8.6)$$

8.3 SOLUÇÃO NUMÉRICA DO CASO 1

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2) é obtida considerando-se (Ferziger e Peric, 1999): método de diferenças finitas, aproximação numérica da derivada de 1ª ordem da equação diferencial com um ponto a montante e malha uniforme.

8.3.1 Variável Dependente

Com a Eq. (7.4) em (8.1), tem-se

$$V \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} = 2x_j \quad (8.7)$$

ou

$$\lambda_j = \lambda_{j-1} + \frac{2}{V} x_j h \quad (8.8)$$

onde x_j é a coordenada do nó j , Fig. 2.1, h é a distância entre os nós j e ' $j-1$ ', também denominado de tamanho dos elementos da malha, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (8.8), λ_j depende de λ_{j-1} , além de x , V e h . De acordo com a condição de contorno dada pela Eq. (8.2), a Eq. (8.8) resulta em

$$\lambda_j = \sum_{k=1}^j \left(\frac{2}{V} x_k h \right) \quad (8.9)$$

Para uma malha uniforme, sabe-se que

$$x_j = jh \quad (8.10)$$

onde, por definição,

$$h = \frac{L}{N} \quad (8.11)$$

e, portanto,

$$L = Nh \quad (8.12)$$

com N sendo o número total de elementos da malha, que é igual ao número total de nós da malha menos a unidade. A partir das Eqs. (8.10) e (8.12), tem-se

$$j = 0 \rightarrow x_0 = 0 \quad (\text{contorno esquerdo do domínio de cálculo}) \quad (8.13)$$

$$j = N \rightarrow x_N = L \text{ (contorno direito do domínio de cálculo)} \quad (8.14)$$

Com a Eq. (8.10) em (8.9), obtém-se

$$\lambda_j = \sum_{k=1}^j \left(\frac{2}{V} kh^2 \right) = \frac{2}{V} h^2 \sum_{k=1}^j (k) \quad (8.15)$$

Sabendo-se que (Bronstein e Semendiaev, 1979)

$$\sum_{k=1}^j (k) = j \frac{(1+j)}{2} \quad (8.16)$$

a Eq. (8.15) resulta em

$$\lambda_j = j \frac{(1+j)}{V} h^2 = \frac{(j+j^2)}{V} h^2 \quad (8.17)$$

Esta equação pode ser reescrita por

$$\lambda_j = \frac{(jh)^2}{V} + \frac{(jh)}{V} h \quad (8.18)$$

Com a Eq. (8.10) em (8.18), chega-se à **solução numérica da variável dependente (λ)**, dada por

$$\lambda_j = \frac{x_j^2}{V} + \frac{x_j}{V} h \quad (8.19)$$

A Eq. (8.19) é a solução numérica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2), bem como do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (8.8). A Eq. (8.19) é chamada de solução numérica exata porque a sua única fonte de erro, dentre as quatro abordadas na seção 1.6, é devido aos erros de truncamento, isto é, não contém erros de iteração, de arredondamento e de programação.

8.3.2 Média da Variável Dependente

A solução numérica da média de λ , denominada λ_m , é obtida através da substituição da Eq. (8.17) em (7.33), ou seja,

$$\lambda_m = \frac{h}{2VL} \sum_{j=1}^N [(j-1)jh^2 + j(1+j)h^2] = \frac{h^3}{VL} \sum_{j=1}^N (j^2) \quad (8.20)$$

Sabendo-se que (Bronstein e Semendiaev, 1979)

$$\sum_{j=1}^N (j^2) = \frac{(N + 3N^2 + 2N^3)}{6} \quad (8.21)$$

a Eq. (8.20) resulta em

$$\lambda_m = \frac{(N + 3N^2 + 2N^3)}{6VL} h^3 \quad (8.22)$$

A Eq. (8.22) pode ser reescrita por

$$\lambda_m = \frac{(Nh)^3}{3VL} + \frac{(Nh)^2}{2VL} h + \frac{(Nh)}{6VL} h^2 \quad (8.23)$$

Com a Eq. (8.12) em (8.23), finalmente obtém-se a **solução numérica da média da variável dependente (λ_m)**, dada por

$$\lambda_m = \frac{L^2}{3V} + \frac{L}{2V} h + \frac{1}{6V} h^2 \quad (8.24)$$

8.3.3 Derivada de Primeira Ordem da Variável Dependente Com 1 Ponto a Jusante

A aproximação numérica da derivada de primeira ordem com um ponto a jusante, Eq. (7.16), aplicada ao contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, ou $j = 0$, resulta em

$$(\lambda_{DDS}^i)_0 = \frac{(\lambda_1 - \lambda_0)}{h} \quad (8.25)$$

A partir da Eq. (8.19), para $j = 1$ e 0 , obtém-se respectivamente

$$\lambda_1 = \frac{x_1^2}{V} + \frac{x_1}{V}h \quad (8.26)$$

$$\lambda_0 = \frac{x_0^2}{V} + \frac{x_0}{V}h \quad (8.27)$$

Com a Eq. (8.10), para $j = 1$, tem-se

$$x_1 = h \quad (8.28)$$

Então, com a substituição das Eqs. (8.13) e (8.28) em (8.26) e (8.27), obtém-se

$$\lambda_1 = \frac{h^2}{V} + \frac{h^2}{V} = \frac{2}{V}h^2 \quad (8.29)$$

$$\lambda_0 = 0 \quad (8.30)$$

Finalmente, com as Eqs. (8.29) e (8.30) em (8.25), chega-se à **solução numérica da derivada de primeira ordem da variável dependente, com um ponto a jusante**, λ_{DDS}^i , dada por

$$(\lambda_{DDS}^i)_0 = \frac{(2h^2 - 0)}{Vh} = \frac{2}{V}h \quad (8.31)$$

8.3.4 Derivada de Primeira Ordem da Variável Dependente Com 2 Pontos a Jusante

A aproximação numérica da derivada de primeira ordem com dois pontos a jusante, Eq. (7.22), aplicada ao contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, ou $j = 0$, resulta em

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = \frac{(4\lambda_1 - 3\lambda_0 - \lambda_2)}{2h} \quad (8.32)$$

A partir da Eq. (8.19), para $j = 2$, obtém-se

$$\lambda_2 = \frac{x_2^2}{V} + \frac{x_2}{V}h \quad (8.33)$$

Com a Eq. (8.10), para $j = 2$, tem-se

$$x_2 = 2h \quad (8.34)$$

Assim, com a Eq. (8.34) em (8.33), chega-se a

$$\lambda_2 = \frac{4h^2}{V} + \frac{2h^2}{V} = \frac{6}{V}h^2 \quad (8.35)$$

Finalmente, com as Eqs. (8.29), (8.30) e (8.35) em (8.32), obtém-se a **solução numérica da derivada de primeira ordem da variável dependente, com dois pontos a jusante**, λ_{DDS-2}^i , dada por

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = \frac{(8h^2 - 0 - 6h^2)}{2Vh} = \frac{1}{V}h \quad (8.36)$$

Observa-se diretamente na Eq. (8.19) que no limite quando o tamanho (h) dos elementos da malha tende a zero, ou seja, $h \rightarrow 0$, a solução numérica se iguala à solução analítica, Eq. (8.3). O mesmo ocorre entre as Eqs. (8.24) e (8.4), entre as Eqs. (8.31) e (8.6), e entre as Eqs. (8.36) e (8.6).

A Fig. 8.1 apresenta a ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtida com as Eqs. (4.25) e (4.26) para razão de refino (q) igual a dois. As soluções analíticas de $\Lambda^{(1/2)}$, Λ_m e Λ^i , para $L = V = 1$, são, respectivamente, $1/4$, $1/3$ e zero. As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 2, 4, 8, \dots, 65536$ elementos, o que equivale, de

acordo com a Eq. (8.11), a $h = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \dots, \frac{1}{65536} = 0,5; 0,25; 0,125; \dots; (\approx 1,53 \times 10^{-5})$. As ordens aparente de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i são convergidas (seção 5.1) em qualquer h , isto é, são iguais à ordem assintótica, que vale $p_L = 1$. A ordem aparente de λ_m é do tipo superconvergente (subseção 5.1.2) em qualquer h . Estes resultados estão de acordo com os erros de discretização apresentados na seção a seguir.

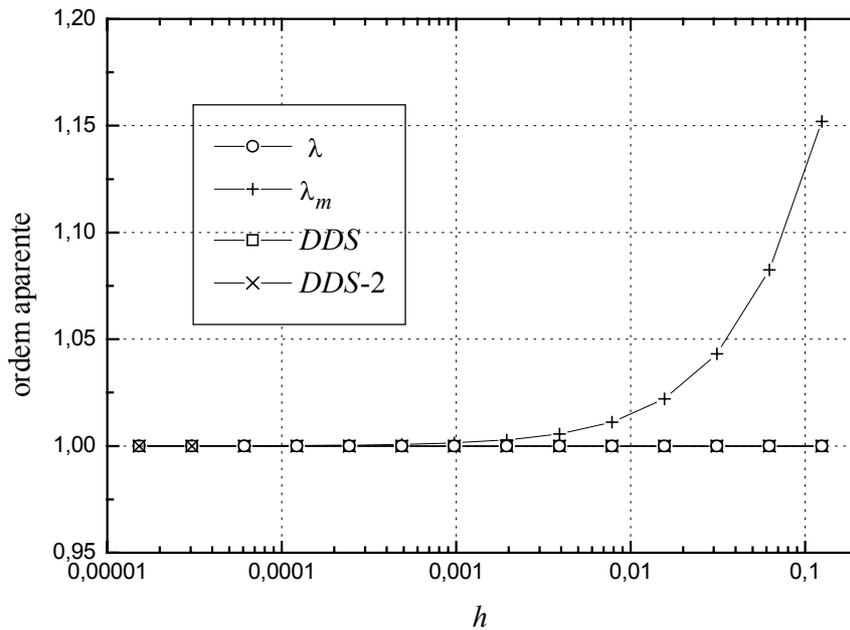


Figura 8.1 Ordem aparente das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

8.4 CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO, A POSTERIORI, DO CASO 1

Para os casos analisados neste trabalho, as variáveis são: a variável dependente no modelo matemático, cuja solução analítica é representada por Λ e a solução numérica por λ ; a média da variável dependente, cuja solução analítica é representada por Λ_m e a solução numérica por λ_m ; e a derivada de primeira ordem da variável dependente, cuja solução analítica é representada por Λ^i e as soluções numéricas, obtidas de duas formas diferentes, por λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i . Todas as três soluções analíticas são representadas genericamente pelo símbolo Φ e as quatro soluções numéricas por ϕ .

Conhecendo-se as soluções analíticas e numéricas das variáveis, as expressões genéricas de seus erros de discretização (E), *a posteriori*, de acordo com a Eq. (3.1), são dadas por

$$E(\lambda_j) = \Lambda_j - \lambda_j \quad (8.37)$$

$$E(\lambda_m) = \Lambda_m - \lambda_m \quad (8.38)$$

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = (\Lambda^i)_0 - (\lambda_{DDS}^i)_0 \quad (8.39)$$

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = (\Lambda^i)_0 - (\lambda_{DDS-2}^i)_0 \quad (8.40)$$

A Fig. 8.2 apresenta o módulo do erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtido com as Eqs. (8.37) a (8.40). O **erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente no modelo matemático (λ)** é obtido com a substituição das Eqs. (8.3) e (8.19) na Eq. (8.37), o que resulta em

$$E(\lambda_j) = -\frac{x_j}{V}h \quad (8.41)$$

O **erro de discretização (E) da média da variável dependente (λ_m)** é obtido com a substituição das Eqs. (8.4) e (8.24) na Eq. (8.38), o que resulta em

$$E(\lambda_m) = -\frac{L}{2V}h - \frac{1}{6V}h^2 \quad (8.42)$$

A respeito dele, observa-se que:

- 1) A Eq. (8.42), colocada na forma da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), resulta em $C_1 = -L/(2V)$, $C_2 = -1/(6V)$, $C_3 = C_4 = \dots = 0$, ou seja, o erro é constituído por apenas dois termos. Portanto, as ordens verdadeiras são $p_V = 1$ e 2 , e a ordem assintótica é de 1^a ordem, isto é, $p_L = 1$. Para estes coeficientes C_i , de acordo com a subsecção 4.1.3, as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) são do tipo superconvergente (subsecção 5.1.2), conforme pode ser visto também na Fig. 8.1 e na Eq. (8.43).

2) Usando-se o procedimento descrito na subseção 4.1.2, isto é, com as Eqs. (4.15), (4.17) e (8.42), deduz-se que a ordem efetiva de λ_m é dada por

$$p_E(\lambda_m) = 1 + \frac{h}{(3L + h)} \quad (8.43)$$

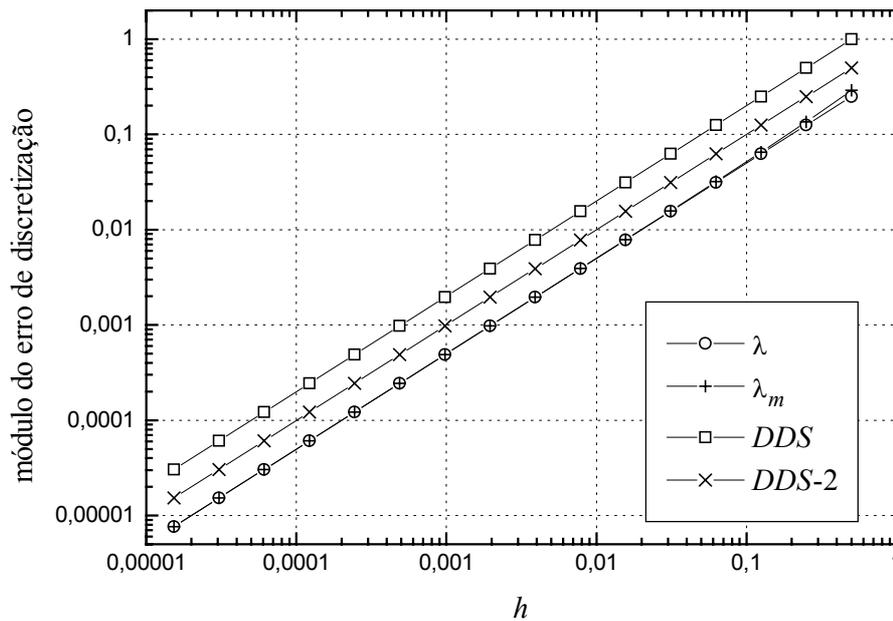


Figura 8.2 Erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

O erro de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente, com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i , é obtido com a substituição das Eqs. (8.6) e (8.31) na Eq. (8.39), o que resulta em

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = -\frac{2}{V} h \quad (8.44)$$

O erro de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente, com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i , é obtido com a substituição das Eqs. (8.6) e (8.36) na Eq. (8.40), o que resulta em

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = -\frac{1}{V}h \quad (8.45)$$

Sobre o erro de discretização (E) de λ , Eq. (8.41), de λ_m , Eq. (8.42), de λ_{DDS}^i , Eq. (8.44), de λ_{DDS-2}^i , Eq. (8.45), observa-se que:

- 1) Seus erros são função da coordenada (x), do tamanho (L) do domínio de cálculo, da velocidade do escoamento (V) e do tamanho (h) dos elementos da malha.
- 2) Para o limite de $h \rightarrow 0$, $E \rightarrow 0$ e, portanto, a solução numérica é consistente (Ferziger e Peric, 1999).
- 3) As ordens assintóticas do erro de discretização de λ e λ_{DDS}^i são iguais às ordens assintóticas de seus erros de truncamento, dadas na Tab. 2.8, e que valem $p_L = 1$.
- 4) As ordens assintóticas do erro de discretização de λ_m e λ_{DDS-2}^i ($p_L = 1$) são diferentes das ordens assintóticas de seus erro de truncamento, dadas na Tab. 2.8 e que valem $p_L = 2$. Esta constatação mostra que **a ordem assintótica do erro de discretização não é necessariamente igual à ordem assintótica do erro de truncamento de uma mesma variável**. O motivo desta diferença é explicado nas próximas seções desse capítulo e está ligado ao erro de poluição.
- 5) A Eq. (8.41), colocada na forma da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), resulta em $C_1 = -x_j/V$, $C_2 = C_3 = \dots = 0$, ou seja, o erro é constituído por apenas um termo. Portanto, as ordens verdadeiras (p_V) se reduzem à ordem assintótica (p_L), que é de 1ª ordem, isto é, $p_V = p_L = 1$. Para estes coeficientes C_i , de acordo com a subseção 4.1.3, as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) são do tipo convergida (seção 5.1) em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha ou, em outras palavras, são iguais à ordem assintótica, ou seja, $p_E = p_U = p_L = 1$, conforme pode ser visto na Fig. 8.1. O mesmo ocorre para as Eqs. (8.44) e (8.45).

8.5 ESTIMATIVA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO, *A PRIORI*, DO CASO 1 SEM SOLUÇÃO ANALÍTICA

Nesta seção é obtida uma estimativa do erro de discretização da variável dependente no modelo matemático, sem considerar as soluções analítica e numérica. Este tipo de análise permite que sejam deduzidas as ordens verdadeiras e assintótica do erro de discretização com base na série de Taylor. Isso se constitui na análise do tipo 1 mencionada na Tab. I.1. A

importância deste tipo de análise, ou seja, a previsão da ordem assintótica (p_L) do erro de discretização, pode ser avaliada pelo seu emprego nos estimadores de erro descritos nos Caps. 3 a 6 da Parte I. Nesta seção também são introduzidos o conceito de equação do erro de discretização e os conceitos dos erros de discretização local e global.

Substituindo-se a expressão exata para a derivada de 1ª ordem com um ponto a montante, Eq. (7.3), no modelo matemático que se deseja estimar o erro de discretização da variável dependente, Eq. (8.1), escrita para um nó (j) específico, tem-se

$$[(\lambda_{UDS}^i)_j + \varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j + e(\lambda_{UDS}^i)_j]V = 2x_j \quad (8.46)$$

Aplicando-se a definição do operador numérico (d), dada na subseção 1.6.1, à equação discretizada do modelo matemático, isto é, à Eq. (8.7), obtém-se

$$d(\lambda) = (\lambda_{UDS}^i)_j V - 2x_j = 0 \quad (8.47)$$

Portanto, com a substituição da Eq. (8.47) em (8.46), esta se reduz a

$$\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j + e(\lambda_{UDS}^i)_j = 0 \quad (8.48)$$

Isto é, a soma do erro de poluição (e) com o erro de discretização (ε) da aproximação numérica usada no modelo matemático do problema, Eq. (8.1), é igual a zero. Em outras palavras, o erro de truncamento gera o erro de poluição. Com as Eqs. (7.5) e (7.6) em (8.48), tem-se

$$\frac{(E_j - E_{j-1})}{h} + \Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots = 0 \quad (8.49)$$

Neste trabalho, equações que relacionam o erro de discretização (E) com o erro de truncamento, como na Eq. (8.49), são denominadas de **equações nodais do erro de discretização**. No caso da Eq. (8.49), a equação nodal do erro de discretização é constituída por um termo de advecção do erro (E), o primeiro termo, e termos de geração de erro, que são devidos ao erro de truncamento (ε) do nó j . A Eq. (8.49) pode ser reescrita da seguinte forma

$$E_j = E_{j-1} - \Lambda_j^{ii} \frac{h^2}{2} + \Lambda_j^{iii} \frac{h^3}{6} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^4}{24} + \dots \quad (8.50)$$

Neste trabalho, equações que explicitam o erro de discretização (E) no nó (j) de interesse, E_j , que considera os termos do erro de truncamento e desconsidera o erro de discretização (E) nos nós vizinhos ($j-1$), E_{j-1} , são denominadas de **equações do erro de discretização local**, que no caso da Eq. (8.50) resulta em

$$E_j \propto - \Lambda_j^{ii} \frac{h^2}{2} + \Lambda_j^{iii} \frac{h^3}{6} - \Lambda_j^{iv} \frac{h^4}{24} + \dots \quad (8.51)$$

Esta denominação foi inspirada no trabalho de LeVeque (1992), que usa o conceito de erro de truncamento local. A partir da Eq. (8.51), verifica-se diretamente que as ordens verdadeiras do erro de discretização local são $p_V = 2, 3, 4$, etc, e, portanto, a ordem assintótica é $p_L = 2$.

Mesmo sem considerar a solução analítica da variável dependente (Λ) e, portanto, de suas derivadas, é possível demonstrar através do teorema do valor médio (Kreyszig, 1999) que a solução da Eq. (8.50) resulta em

$$E_j = - \overline{\Lambda_j^{ii}} \frac{h}{2} + \overline{\Lambda_j^{iii}} \frac{h^2}{6} - \overline{\Lambda_j^{iv}} \frac{h^3}{24} + \dots \quad (8.52)$$

onde as barras indicam valores médios das derivadas entre os nós $k = 0$ e j . Da Eq. (8.52), verifica-se que o somatório que está implícito na Eq. (8.50), devido à dependência de E_j com E_{j-1} , produz uma **degeneração das ordens verdadeiras do erro de discretização local**, que resultam em $p_V = 1, 2, 3$, etc, e, portanto, a ordem assintótica é $p_L = 1$. Isso pode ser constatado pela comparação entre as Eqs. (8.51) e (8.52). A prova matemática da passagem da Eq. (8.50) para a Eq. (8.52) será apresentada na próxima seção. Neste trabalho, equações como a Eq. (8.52), que explicitam o erro de discretização (E) no nó (j) de interesse, E_j , em função apenas dos termos do erro de truncamento, tendo sido resolvidas as suas dependências de nós vizinhos, são denominadas de **equações do erro de discretização global** (LeVeque, 1992).

Em resumo, o erro de discretização local é o erro de discretização de um nó (j) específico, E_j , que resulta apenas do erro de truncamento gerado no mesmo nó. Já o erro de discretização global é o erro de discretização de um nó (j) específico, E_j , que resulta do erro de truncamento

gerado no mesmo nó, e da sua interação com os demais nós através dos erros de discretização de nós vizinhos, que estão envolvidos na equação nodal do erro de discretização. Para variáveis secundárias à variável dependente, como aquelas mencionadas na Tab. 1.2, também podem ser definidas equações nodais do erro de discretização, e erros de discretização locais e globais, conforme se mostra na próxima seção.

8.6 CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO, *A PRIORI*, DO CASO 1 COM SOLUÇÃO ANALÍTICA

Nesta seção mostra-se que o uso da série de Taylor permite calcular corretamente os erros de discretização das soluções numéricas da variável dependente, de sua média, e de sua derivada primeira num dos contornos do domínio de cálculo, mesmo quando existem erros nodais. Mas, para isso, é necessário conhecer a solução analítica exata (Λ) para a obtenção dos erros de truncamento (ε) envolvidos. Esta análise se enquadra nos tipos 2 e 5 da Tab. I.1. Esse não é o caso prático pois, se fosse sempre conhecida a solução analítica, não seria necessário obter a solução numérica. O caso prático foi abordado na seção anterior deste capítulo.

8.6.1 Variável Dependente

A partir da solução analítica exata da variável dependente, Eq. (8.3), obtém-se

$$\Lambda^{ii} = \frac{2}{V} \quad (8.53)$$

$$\Lambda^{iii} = \Lambda^{iv} = \dots = 0 \quad (8.54)$$

Com a substituição das Eqs. (8.53) e (8.54) em (8.50), chega-se a

$$E_j = E_{j-1} - \frac{1}{V} h^2 \quad (8.55)$$

Assim, com a substituição das Eqs. (8.53) e (8.54) em (7.5), obtém-se o erro de truncamento, dado por

$$\varepsilon(\lambda_{UDS})_j = \frac{1}{V}h \quad (8.56)$$

A condição de contorno dada pela Eq. (8.2) implica que o erro no contorno é nulo já que a solução neste nó ($j = 0$) é conhecida, ou seja, $E_0 = 0$. Sendo assim, a Eq. (8.55) resulta em

$$E_j = \sum_{k=1}^j \left(\frac{-h^2}{V} \right) = -\frac{h^2}{V} \sum_{k=1}^j (1) = -\frac{j}{V}h^2 \quad (8.57)$$

A Eq. (8.57) pode ser reescrita por

$$E_j = -\frac{(jh)}{V}h \quad (8.58)$$

Com a Eq. (8.10) em (8.58), obtém-se o erro da variável dependente (λ) em cada nó (j), e que é

$$E(\lambda_j) = -\frac{x_j}{V}h \quad (8.59)$$

Verifica-se que a ordem assintótica do erro de discretização local, $p_L = 2$, obtida da Eq. (8.55), é degenerada para $p_L = 1$ na equação do erro de discretização global, Eq. (8.59), devido ao somatório da Eq. (8.57), que se deve ao erro de poluição.

8.6.2 Média da Variável Dependente

Da Eq. (7.36), sabe-se que o erro de discretização da média da variável dependente (λ_m) é dado pela soma do seu erro de poluição com o seu erro de truncamento. Para o caso específico do erro de discretização nodal, E_j , dado pela Eq. (8.57), o erro de poluição, Eq. (7.35), resulta em

$$e(\lambda_m) = \frac{h}{2L} \sum_{j=1}^N \left[\frac{-(j-1)h^2 - jh^2}{V} \right] = \frac{h^3}{2LV} \sum_{j=1}^N (1) - \frac{h^3}{LV} \sum_{j=1}^N (j) \quad (8.60)$$

Com a substituição da Eq. (8.16) em (8.60), obtém-se

$$e(\lambda_m) = -\frac{N^2 h^3}{2VL} = -\frac{(Nh)^2 h}{2VL} \quad (8.61)$$

Assim, com a Eq. (8.12) em (8.61), tem-se

$$e(\lambda_m) = -\frac{L}{2V} h \quad (8.62)$$

Para o caso específico de Λ dado pela Eq. (8.3), e suas derivadas dadas pelas Eqs. (8.5), (8.53) e (8.54), o erro de truncamento dado pela Eq. (7.34) resulta em

$$\varepsilon(\lambda_m) = -\frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \left(\frac{h^3}{6V} \right) = -\frac{h^3}{6VL} \sum_{j=1}^N (1) = -\frac{Nh^3}{6VL} = -\frac{(Nh)h^2}{6VL} \quad (8.63)$$

Então, com a Eq. (8.12) em (8.63), chega-se a

$$\varepsilon(\lambda_m) = -\frac{1}{6V} h^2 \quad (8.64)$$

Este resultado exemplifica a degeneração da ordem assintótica da Eq. (7.34), $p_L = 3$, para $p_L = 2$ na Eq. (8.64), e que ocorre devido ao somatório da Eq. (8.63). Finalmente, com as Eqs. (8.62) e (8.64) em (7.36), obtém-se

$$E(\lambda_m) = -\frac{L}{2V} h - \frac{1}{6V} h^2 \quad (8.65)$$

Apesar do erro de discretização da variável dependente (λ), Eq. (8.59), conter apenas um termo de primeira ordem, o erro de discretização da média da variável dependente (λ_m), Eq. (8.65), contém dois termos, sendo um de segunda ordem. Isto ocorre porque o primeiro termo deve-se ao erro de poluição de λ_m e o segundo, ao erro de integração de λ pela regra do trapézio, ou seja, ao seu erro de truncamento. Da forma em que se trabalhou na Parte I, o primeiro termo não existiria. O erro de poluição de λ_m degenerou em uma unidade a sua ordem assintótica em

relação ao caso em que existissem apenas os erros de truncamento, que foi o caso do exemplo mostrado na subsecção 2.9.3.

8.6.3 Derivada de Primeira Ordem da Variável Dependente Com 1 Ponto a Jusante

Da Eq. (7.19), sabe-se que o erro de discretização da derivada de primeira ordem da variável dependente, com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i , no contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, é dado por

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = e(\lambda_{DDS}^i)_0 + \varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_0 \quad (8.66)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de poluição com o seu erro de truncamento. Para o caso específico do erro de discretização nodal, E_j , dado pela Eq. (8.57), para $j = 0$, o erro de poluição, Eq. (7.18), resulta em

$$e(\lambda_{DDS}^i)_0 = \frac{(E_1 - E_0)}{h} = \frac{(-h^2 - 0)}{Vh} = -\frac{1}{V}h \quad (8.67)$$

Para o caso específico de Λ dado pela Eq. (8.3), e suas derivadas dadas pelas Eqs. (8.5), (8.53) e (8.54), o erro de truncamento, Eq. (7.17), para $j = 0$, resulta em

$$\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_0 = -\frac{1}{V}h \quad (8.68)$$

Finalmente, com as Eqs. (8.67) e (8.68) em (8.66), obtém-se

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = -\frac{2}{V}h \quad (8.69)$$

8.6.4 Derivada de Primeira Ordem da Variável Dependente Com 2 Pontos a Jusante

Da Eq. (7.25), sabe-se que o erro de discretização da derivada de primeira ordem da variável dependente, com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i , no contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, é dado por

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = e(\lambda_{DDS-2}^i)_0 + \varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_0 \quad (8.70)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de poluição com o seu erro de truncamento. Para o caso específico do erro de discretização nodal, E_j , dado pela Eq. (8.57), para $j = 0$, o erro de poluição, Eq. (7.24), resulta em

$$e(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = \frac{(4E_1 - 3E_0 - E_2)}{2h} = \frac{(-4h^2 - 0 - 2h^2)}{2Vh} = -\frac{1}{V}h \quad (8.71)$$

Para o caso específico de Λ dado pela Eq. (8.3), e suas derivadas dadas pelas Eqs. (8.5), (8.53) e (8.54), o erro de truncamento, Eq. (7.23), para $j = 0$, resulta em

$$\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = 0 \quad (8.72)$$

Finalmente, com as Eqs. (8.71) e (8.72) em (8.70), obtém-se

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = -\frac{1}{V}h \quad (8.73)$$

A ordem assintótica ($p_L = 1$) de λ_{DDS-2}^i , Eq. (8.73), é uma unidade menor do que a ordem esperada devido apenas ao erro de truncamento, Tab. 2.8. Isto ocorre devido ao erro de poluição de λ_{DDS-2}^i . Da forma em que se trabalhou na Parte I, o seu erro seria dado pela Eq. (8.72), isto é, seria nulo. Portanto, o erro de poluição de λ_{DDS-2}^i degenerou em uma unidade a sua ordem assintótica em relação ao caso em que existissem apenas os erros de truncamento, que foi o caso do exemplo mostrado na subseção 2.9.1.

Comparando-se as Eqs. (8.41) e (8.59), verifica-se que elas são iguais, isto é, o cálculo do erro de discretização da variável dependente, com base na série de Taylor, isto é, *a priori* de soluções numéricas, Eq. (8.59), coincide com o erro de discretização *a posteriori* de soluções numéricas, Eq. (8.41), conforme esperado. O mesmo se verifica entre as Eqs. (8.42) e (8.65) no cálculo do erro de discretização da média da variável dependente, entre as Eqs. (8.44) e (8.69) no cálculo do erro de discretização da derivada de primeira ordem da variável dependente com um

ponto a jusante, e entre as Eqs. (8.45) e (8.73) no cálculo do erro de discretização da derivada de primeira ordem da variável dependente com dois pontos a jusante.

8.7 ERRO DE TRUNCAMENTO DA EQUAÇÃO DISCRETIZADA DO CASO 1

Nesta seção são obtidos o erro de truncamento e as suas ordens verdadeiras e assintótica da equação discretizada, Eq. (8.7), com base na série de Taylor, e considerando-se ou não a solução analítica conhecida. Isto se constitui nas análises dos tipos 1 e 2 mencionadas na Tab. I.1.

8.7.1 Sem Solução Analítica

Conforme visto na subseção 1.6.1, o erro de truncamento de uma equação discretizada é definido pela Eq. (1.16). Aplicando-se o operador numérico da Eq. (8.7) a Λ , para um nó (j) específico, obtém-se

$$d(\Lambda_j) = V \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h} - 2x_j \quad (8.74)$$

Com a substituição da Eq. (7.2) na Eq. (8.74), chega-se a

$$d(\Lambda_j) = V[\Lambda_j^i - \varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j] - 2x_j \quad (8.75)$$

Aplicando-se a definição do operador diferencial (D), também definido na subseção 1.6.1, à solução analítica exata (Λ) na Eq. (8.1), obtém-se

$$D(\Lambda_j) = V\Lambda_j^i - 2x_j = 0 \quad (8.76)$$

que substituída na Eq. (8.75) resulta em

$$d(\Lambda_j) = -V\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j \quad (8.77)$$

Assim, com a Eq. (8.77) em (1.16), chega-se a

$$\varepsilon(ED)_j = V\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j \quad (8.78)$$

onde ED simboliza a equação diferencial na forma discretizada. Finalmente, com a Eq. (7.5) em (8.78), obtém-se o erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (8.7), no nó j , $\varepsilon(ED)_j$,

$$\varepsilon(ED)_j = V \left(\Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \right) \quad (8.79)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2, 3$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

8.7.2 Com Solução Analítica

Conhecendo-se a solução analítica da Eq. (8.1) e suas derivadas, e considerando-se os resultados das Eqs. (8.56) e (8.78), obtém-se

$$\varepsilon(ED)_j = h \quad (8.80)$$

onde h é o tamanho dos elementos da malha. Comparando-se os resultados das Eqs. (8.56) e (8.80), ou diretamente através da Eq. (8.78), verifica-se que o valor do erro de truncamento da aproximação numérica (λ_{UDS}^i) usada na Eq. (8.7), para obter a solução numérica da variável dependente (λ), e dado na Eq. (8.56), é diferente do valor do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (8.80), exceto para $V = 1$. Porém, suas ordens assintóticas são idênticas e valem $p_L = 1$.

8.8 CASO 2

O caso 2 envolve um modelo matemático mais simples que o do Caso 1, Eq. (8.1). Ele é definido por

$$V \frac{d\Lambda}{dx} = S \quad (8.81)$$

onde V é a velocidade do escoamento, que é admitida ser constante, Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar transportado por advecção, x é a variável independente, a direção coordenada, e S é um termo fonte constante. A condição de contorno de Dirichlet é dada pela Eq. (8.2).

A solução analítica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.81) e (8.2), para a variável dependente (Λ), é

$$\Lambda = \frac{S}{V}x \quad (8.82)$$

Com a Eq. (8.82) em (2.28), a solução analítica exata da média da variável dependente resulta em

$$\Lambda_m = \frac{SL}{2V} \quad (8.83)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo. A partir da Eq. (8.82), obtém-se que a derivada primeira da variável dependente é

$$\Lambda^i = \frac{S}{V} \quad (8.84)$$

e, portanto, no contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, seu valor também é dado pela Eq. (8.6).

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.81) e (8.2) é obtida considerando-se o mesmo modelo numérico da seção 8.3. Verifica-se que as soluções numéricas da variável dependente, de sua média, e de sua derivada primeira, com um ou dois pontos a jusante, resultam nos mesmos valores das soluções analíticas dadas acima nesta seção. Portanto, os erros de discretização destas quatro variáveis são todos nulos, bem como seus erros de poluição e de truncamento. O erro de truncamento da equação diferencial, Eq. (8.81), na forma discretizada, também é nulo. Portanto, de acordo com suas definições, não existem as ordens verdadeiras, assintótica, efetiva e aparente dos erros e incertezas. Para qualquer um dos estimadores de erro vistos nos Caps. 3 e 5, a incerteza é igual ao erro, que é nulo.

8.9 RESUMO DO CAPÍTULO 8

Foram apresentadas as soluções analítica e numérica de duas equações diferenciais, Eqs. (8.1) e (8.81), para a variável dependente (λ) nestas equações, sua derivada primeira, obtida de duas formas (λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i), e sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m). As soluções numéricas foram obtidas em forma fechada, o que possibilitou a realização de vários tipos de análise de erros e de suas ordens verdadeiras, assintótica e efetiva: cálculo do erro de discretização *a posteriori* das soluções numéricas, seção 8.4; estimativa do erro de discretização, *a priori*, sem solução analítica, seção 8.5; cálculo do erro de discretização, *a priori*, com solução analítica, seção 8.6; e erro de truncamento da equação discretizada, seção 8.7.

Mostrou-se que o uso da série de Taylor permite calcular corretamente os erros de discretização das soluções numéricas da variável dependente, de sua média, e de sua derivada primeira num dos contornos do domínio de cálculo, mesmo quando existem erros nodais, mas desde que se conheça a solução analítica exata (Λ) para a obtenção dos erros de truncamento (ε) envolvidos.

O erro de discretização local é o erro de discretização de um nó (j) específico, E_j , que resulta do erro de truncamento gerado no mesmo nó. Seu valor e suas ordens verdadeiras e assintótica podem ser extraídos da equação nodal do erro de discretização. O erro de discretização global é o erro de discretização de um nó (j) específico, E_j , produzido pelos erros de truncamento e de poluição no mesmo nó. O valor do erro de discretização global é obtido genericamente para qualquer variável de interesse através da Eq. (3.1). Para as quatro variáveis numéricas de interesse da Tab. 1.2, seus valores são obtidos com as Eqs. (8.37) a (8.40). Para o Caso 1, analisado neste capítulo, que possui soluções numéricas em forma fechada, foi possível obter analiticamente as ordens verdadeiras e assintótica dos erros de discretização globais. O erro de poluição é causado pelo erro de discretização da variável dependente ou primária (λ), e resulta da interação do erro de discretização de nós vizinhos que estão envolvidos na equação nodal do erro de discretização.

Devido à existência do erro de poluição, a ordem assintótica do erro de discretização global de variáveis secundárias (λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_m), isto é, aquelas obtidas a partir da variável primária ou dependente, pode ser diferente da ordem assintótica de seus erros de truncamento. Para as quatro variáveis numéricas de interesse (λ , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_m) do Caso 1: é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), e a equação geral do erro de

discretização, Eq. (3.2); a ordem assintótica do erro de discretização global é igual à ordem do erro de truncamento da equação discretizada, sejam variáveis primária (λ) ou secundárias (λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_m); e a ordem aparente é convergente em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha.

Capítulo 9.

CASO 3: ADVECÇÃO COM UDS EM MALHA UNIFORME

Neste capítulo, o mesmo problema do capítulo anterior é abordado, isto é, a advecção de um escalar. Também emprega-se o mesmo modelo numérico, que é constituído pelo método de diferenças finitas, com aproximação numérica de 1ª ordem a montante e malhas uniformes. A diferença entre a equação diferencial do Caso 1, Eq. (8.1), e a do Caso 3, Eq. (9.1), é o termo fonte desta, que é uma função quadrática em vez da linear usada no Caso 1. Isso resulta que a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), será composta por dois termos para a variável dependente da equação diferencial. Portanto, o objetivo principal deste capítulo é mostrar que o aumento do número de termos na equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), para qualquer variável, não altera em termos qualitativos as conclusões da seção 8.9. Além disso, é analisada a analogia entre as equações gerais dos erros de truncamento e de discretização.

O modelo matemático do Caso 3 é definido por

$$V \frac{d\Lambda}{dx} = 3x^2 \tag{9.1}$$

onde V é a velocidade do escoamento, que é admitida ser constante, Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar transportado por advecção, e x é a variável independente, a direção coordenada. A condição de contorno de Dirichlet é dada pela Eq. (8.2).

Seguindo-se o procedimento apresentado na subseção 8.7.1, verifica-se que o erro de truncamento da equação diferencial, Eq. (9.1), na sua forma discretizada, é dado pela Eq. (8.79). Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2, 3, \text{ etc.}$, e sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

9.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA

A **solução analítica** exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (9.1) e (8.2), **para a variável dependente** (Λ), é

$$\Lambda = \frac{x^3}{V} \quad (9.2)$$

Com a Eq. (9.2) em (2.28), a **solução analítica** exata **da média da variável dependente** resulta em

$$\Lambda_m = \frac{L^3}{4V} \quad (9.3)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo. A partir da Eq. (9.2), obtém-se que a **derivada de primeira ordem da variável dependente** é

$$\Lambda^i = \frac{3x^2}{V} \quad (9.4)$$

e, portanto, no contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, seu valor resulta em

$$\Lambda^i(0) = 0 \quad (9.5)$$

9.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (9.1) e (8.2) é obtida considerando-se o mesmo modelo numérico empregado na seção 8.3. Desta forma, com a Eq. (7.4) em (9.1), tem-se

$$V \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} = 3x_j^2 \quad (9.6)$$

ou

$$\lambda_j = \lambda_{j-1} + \frac{3}{V} x_j^2 h \quad (9.7)$$

onde x_j é a coordenada do nó j , Fig. 2.1, h é a distância entre os nós j e ' $j-1$ ', também denominado de tamanho dos elementos da malha, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (9.7), λ_j depende de λ_{j-1} , além de x , V e h . Resolvendo-a através do mesmo procedimento descrito na seção 8.3, obtém-se que a **solução numérica da variável dependente (λ)** é dada por

$$\lambda_j = \frac{x_j^3}{V} + \frac{3x_j^2}{2V} h + \frac{x_j}{2V} h^2 \quad (9.8)$$

A Eq. (9.8) é a solução numérica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (9.1) e (8.2), bem como do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (9.7). A **solução numérica da média da variável dependente (λ_m)** é

$$\lambda_m = \frac{L^3}{4V} + \frac{L^2}{2V} h + \frac{L}{2V} h^2 + \frac{1}{4V} h^3 \quad (9.9)$$

As **soluções numéricas da derivada de primeira ordem da variável dependente, com um e dois pontos a jusante**, λ_{DDS}^i , são dadas por

$$(\lambda_{DDS}^i)_0 = \frac{3}{V} h^2 \quad (9.10)$$

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = -\frac{3}{2V} h^2 \quad (9.11)$$

Observa-se diretamente na Eq. (9.8) que no limite quando $h \rightarrow 0$, a solução numérica se iguala à solução analítica, Eq. (9.2). O mesmo se observa entre as Eqs. (9.9) e (9.3), entre as Eqs. (9.10) e (9.5), e entre as Eqs. (9.11) e (9.5).

9.3 CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO, *A POSTERIORI*

A Fig. 9.1 apresenta o módulo do erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtido aplicando-se as Eqs. (8.37) a (8.40). As soluções analíticas de $\Lambda^{(1/2)}$, Λ_m e Λ^i , para $L = V = 1$, são, respectivamente, $1/8$, $1/4$ e zero. As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 2, 4, 8, \dots, 65536$ elementos, o que equivale, de acordo com a Eq. (8.11), a $h = 1/2, 1/4, 1/8, \dots, 1/65536 = 0,5; 0,25; 0,125; \dots; (\approx 1,53 \times 10^{-5})$. Observa-se na Fig. 9.1 que as inclinações das curvas do erro em relação ao eixo das abscissas, ou as ordens assintóticas (p_L), de $\lambda^{(1/2)}$ e λ_m tendem ao mesmo valor, e os p_L dos erros de λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , a outro valor, maior.

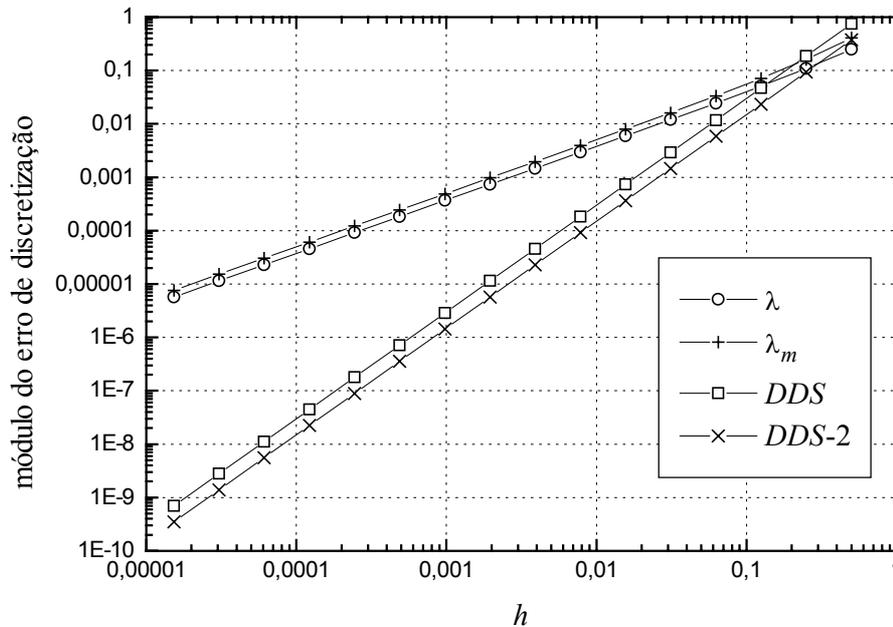


Figura 9.1 Erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

A Tab. 9.1 apresenta a ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtida com as Eqs. (4.25) e (4.26) e considerando-se a razão de refino (q) igual a dois. Estes resultados também são mostrados na Fig. 9.2. As ordens aparente de λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i são convergidas (seção 5.1) em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha; portanto suas ordens assintóticas do erro de discretização valem $p_L = 2$, cujo resultado difere da ordem assintótica do

erro de truncamento da equação discretizada, que vale $p_L = 1$. Já a ordem aparente de $\lambda^{(1/2)}$ e λ_m é do tipo superconvergente (subseção 5.1.2) em qualquer h ; com base em seus valores, para $h \rightarrow 0$, conclui-se que $p_L = 1$; este resultado é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada. Todos esses resultados da ordem assintótica dos erros de discretização são corroborados pelas expressões apresentadas abaixo.

Tabela 9.1 Ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

h	$\lambda^{(1/2)}$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
1,25000000E-01	1,26303440E+00	1,46158008E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
6,25000000E-02	1,15200309E+00	1,25125723E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
3,12500000E-02	1,08246216E+00	1,13065819E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
1,56250000E-02	1,04306872E+00	1,06651812E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
7,81250000E-03	1,02202630E+00	1,03354217E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
3,90625000E-03	1,01114055E+00	1,01683966E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
1,95312500E-03	1,00560270E+00	1,00843667E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
9,76562500E-04	1,00280953E+00	1,00422250E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
4,88281250E-04	1,00140682E+00	1,00211228E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
2,44140625E-04	1,00070392E+00	1,00105640E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
1,22070312E-04	1,00035209E+00	1,00052826E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
6,10351562E-05	1,00017607E+00	1,00026414E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
3,05175781E-05	1,00008804E+00	1,00013207E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00
1,52587890E-05	1,00004402E+00	1,00006604E+00	2,00000000E+00	2,00000000E+00

O erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente no modelo matemático (λ) é obtido com a substituição das Eqs. (9.2) e (9.8) na Eq. (8.37), o que resulta em

$$E(\lambda_j) = -\frac{3x_j^2}{2V}h - \frac{x_j}{2V}h^2 \quad (9.12)$$

Usando-se o procedimento descrito na subseção 4.1.2, isto é, com as Eqs. (4.15), (4.17) e (9.12), deduz-se que a ordem efetiva de λ depende de h e x , e é dada por

$$p_E(\lambda) = 1 + \frac{h}{(3x_j + h)} \quad (9.13)$$

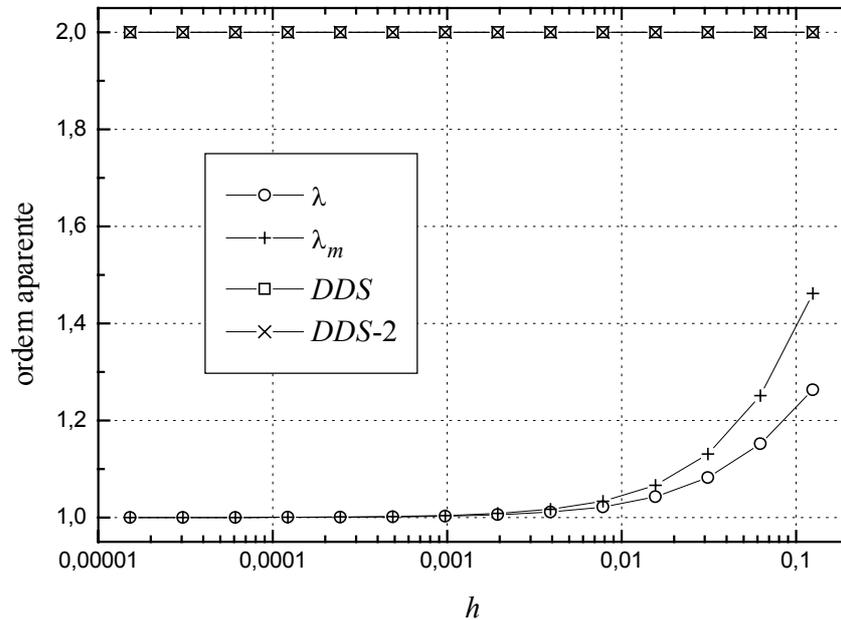


Figura 9.2 Ordem aparente das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

O erro de discretização (E) da média da variável dependente (λ_m) é obtido com a substituição das Eqs. (9.3) e (9.9) na Eq. (8.38), fornecendo

$$E(\lambda_m) = -\frac{L^2}{2V}h - \frac{L}{2V}h^2 - \frac{1}{4V}h^3 \quad (9.14)$$

De forma semelhante ao procedimento usado na obtenção da Eq. (9.13), deduz-se que a ordem efetiva de λ_m depende de h e L , e é dada por

$$p_E(\lambda_m) = 1 + \frac{h(L+h)}{\left[L(L+h) + \frac{h^2}{2} \right]} \quad (9.15)$$

O erro de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente, com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i , é obtido com a substituição das Eqs. (9.5) e (9.10) na Eq. (8.39), o que resulta em

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = -\frac{3}{V}h^2 \quad (9.16)$$

A ordem assintótica ($p_L = 2$) do erro de discretização de λ_{DDS}^i é diferente da ordem assintótica ($p_L = 1$) do erro de truncamento da equação discretizada. Mas isso só ocorre no caso particular de λ_{DDS}^i ser calculado em $x = 0$. Em qualquer outro x , a sua ordem é igual à ordem do erro de truncamento da equação discretizada.

O erro de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente, com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i , é obtido com a substituição das Eqs. (9.5) e (9.11) na Eq. (8.40), fornecendo

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = \frac{3}{2V}h^2 \quad (9.17)$$

A ordem assintótica ($p_L = 2$) do erro de discretização de λ_{DDS-2}^i também é diferente da ordem assintótica ($p_L = 1$) do erro de truncamento da equação discretizada. Isso ocorre porque a ordem do erro de poluição de λ_{DDS-2}^i é igual à sua ordem do erro de truncamento, $p_L = 2$.

Nos dois maiores valores de h plotados na Fig. 9.1, verifica-se que a magnitude do erro de λ_{DDS}^i , cujo $p_L = 2$, é maior do que a magnitude do erro de $\lambda^{(1/2)}$, cujo $p_L = 1$; e, nos demais valores de h , a magnitude do erro de λ_{DDS}^i é menor ou igual à magnitude do erro de $\lambda^{(1/2)}$. Isso significa que, para valores grandes de h , ordem assintótica maior não equivale a erro menor; mas, para valores de $h \rightarrow 0$, ordem assintótica maior equivale a erro menor.

Usando-se o mesmo procedimento apresentado na seção 8.6, verificou-se que o uso da série de Taylor permite calcular corretamente os erros de discretização das soluções numéricas da variável dependente, Eq. (9.12), de sua média, Eq. (9.14), e de sua derivada primeira num dos contornos do domínio de cálculo, Eqs. (9.16) e (9.17), mesmo quando existem erros nodais, mas desde que se conheça a solução analítica exata (Λ) para a obtenção dos erros de truncamento (ε) envolvidos.

Devido ao fato da ordem aparente ser convergente em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha, conforme pode-se observar na Tab. 9.1, o desempenho qualitativo dos

estimadores de erro, delta, de Richardson, *GCI*, bicoeficiente, tricoeficiente e convergente, é idêntico ao observado nos exemplos apresentados nos Caps. 3 e 5 da Parte I deste trabalho.

9.4 RESUMO DO CAPÍTULO 9

Foram apresentadas as soluções analítica e numérica da equação diferencial do Caso 3, Eq. (9.1), para a variável dependente (λ) nestas equações, sua derivada primeira, obtida de duas formas (λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i), e sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m). As soluções numéricas foram obtidas em forma fechada, o que possibilitou a realização de vários tipos de análise de erros e de suas ordens verdadeiras, assintótica e efetiva.

Para a variável dependente (λ) e sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m), a ordem assintótica do erro de discretização global é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada. Porém, isso não ocorre para duas das variáveis secundárias (λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i): a ordem assintótica do erro de discretização global resultou em valor superior à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada. A ordem aparente das quatro variáveis numéricas de interesse (λ , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_m) do Caso 3 é convergente em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha.

Com relação às ordens assintóticas, verificou-se que para λ e λ_m é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2). Para λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , esta analogia não é válida. Mas com relação à independência de h dos coeficientes c_i da equação geral do erro de truncamento, verificou-se que para todas as variáveis de interesse (λ , λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i) a analogia é válida, isto é, os coeficientes C_i da equação geral do erro de discretização também independem de h .

Capítulo 10.

CASOS 4 E 5: ADVECÇÃO COM UDS EM MALHA UNIFORME

São abordados dois casos neste capítulo: no primeiro, Caso 4, a equação diferencial é linear; e, no segundo, Caso 5, é não-linear. A diferença entre estas equações e aquelas dos Caps. 8 e 9 é muito pequena. O modelo numérico é o mesmo empregado nos Caps. 8 e 9, sendo constituído pelo método de diferenças finitas, com aproximação numérica de 1ª ordem a montante e malhas uniformes. Os objetivos desse capítulo são mostrar que: a analogia entre as equações gerais dos erros de truncamento e de discretização não é válida nem mesmo para um modelo matemático muito simples e a forma funcional do erro de discretização pode depender da própria solução numérica.

10.1 MODELO MATEMÁTICO DO CASO 4

O modelo matemático do Caso 4 é definido por

$$\frac{d\Lambda}{dx} = \Lambda + 2x - x^2 \quad (10.1)$$

onde Λ é a variável dependente do problema e x é a variável independente, a direção coordenada. A condição de contorno de Dirichlet é dada pela Eq. (8.2).

Com o mesmo procedimento apresentado na subsecção 8.7.1, obtém-se

$$\varepsilon(ED)_j = \varepsilon(\mathcal{L}_{UDS}^i)_j \quad (10.2)$$

isto é, o erro de truncamento da Eq. (10.1) em sua forma discretizada é igual ao erro de truncamento da aproximação numérica da derivada de primeira ordem usada na Eq. (10.1). Com

a Eq. (7.5) em (10.2), chega-se ao erro de truncamento da equação diferencial, Eq. (10.1), na sua forma discretizada, no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = \Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \quad (10.3)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2, 3$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

10.2 SOLUÇÃO ANALÍTICA DO CASO 4

A **solução analítica** exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (10.1) e (8.2), **para a variável dependente** (Λ), é

$$\Lambda = x^2 \quad (10.4)$$

Com a Eq. (10.4) em (2.28), a **solução analítica exata da média da variável dependente** resulta em

$$\Lambda_m = \frac{L^2}{3} \quad (10.5)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo. A partir da Eq. (10.4), obtém-se que a **derivada de primeira ordem da variável dependente** é

$$\Lambda^i = 2x \quad (10.6)$$

e, portanto, no contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, seu valor resulta em

$$\Lambda^i(0) = 0 \quad (10.7)$$

10.3 SOLUÇÃO NUMÉRICA DO CASO 4

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (10.1) e (8.2) é obtida considerando-se o mesmo modelo numérico empregado na seção 8.3. Desta forma, com a Eq. (7.4) em (10.1), tem-se

$$\frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} = \lambda_j + 2x_j - x_j^2 \quad (10.8)$$

ou

$$\lambda_j = \frac{\lambda_{j-1} + (2x_j - x_j^2)h}{(1-h)} \quad (10.9)$$

onde x_j é a coordenada do nó j , Fig. 2.1, h é a distância entre os nós j e ' $j-1$ ', também denominado de tamanho dos elementos da malha, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (10.9), λ_j depende de λ_{j-1} , além de x e h . Para se obter uma solução numérica em forma fechada, adotou-se o seguinte procedimento: primeiro, determinou-se o erro de discretização global, em forma fechada, através do procedimento explicado na seção 8.6; e, então, com a Eq. (8.37) e a solução analítica, obteve-se a **solução numérica da variável dependente (λ)**, que é dada por

$$\lambda_j = x_j^2 + \left[\frac{1}{(1-h)^j} - 1 \right] h \quad (10.10)$$

A Eq. (10.10) é a solução numérica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (10.1) e (8.2), bem como do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (10.9).

Não se conseguiu obter uma expressão em forma fechada para a **solução numérica da média da variável dependente (λ_m)**. Portanto, seu valor foi computado através da Eq. (7.33). As **soluções numéricas da derivada de primeira ordem da variável dependente com um e dois pontos a jusante** são dadas por

$$(\lambda_{DDS}^i)_0 = \frac{(2-h)}{(1-h)} h \quad (10.11)$$

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = \frac{1(2-3h)}{2(1-h)^2} h \quad (10.12)$$

Observa-se diretamente na Eq. (10.10) que no limite quando $h \rightarrow 0$, a solução numérica se iguala à solução analítica, Eq. (10.4). O mesmo é observado entre as Eqs. (10.11) e (10.7), e entre as Eqs. (10.12) e (10.7).

10.4 CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO, *A POSTERIORI*, DO CASO 4

A Fig. 10.1 apresenta o módulo do erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda(1/2)$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtido aplicando-se as Eqs. (8.37) a (8.40). As soluções analíticas de $\Lambda(1/2)$, Λ_m e Λ^i , para $L = 1$, são, respectivamente, $1/4$, $1/3$ e zero. As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 2, 4, 8, \dots, 65536$ elementos, o que equivale, de acordo com a Eq. (8.11), a $h = 1/2, 1/4, 1/8, \dots, 1/65536 = 0,5; 0,25; 0,125; \dots; (\approx 1,53 \times 10^{-5})$. Observa-se na Fig. 10.1 que as inclinações das curvas dos erros com o eixo das abscissas, ou as ordens assintóticas (p_L), de $\lambda(1/2)$ e λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i tendem ao mesmo valor.

A Tab. 10.1 apresenta a ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda(1/2)$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtida com as Eqs. (4.25) e (4.26) para razão de refino (q) igual a dois. Esses resultados também são mostrados na Fig. 10.2. Com base em seus valores, para $h \rightarrow 0$, conclui-se que $p_L = 1$ para as quatro variáveis de interesse. Este resultado é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, conforme a Eq. (10.3). A ordem aparente de $\lambda(1/2)$, λ_m e λ_{DDS}^i é do tipo superconvergente (subseção 5.1.2) em qualquer h , conforme se pode ver na Tab. 10.1 e Fig. 10.2. A ordem aparente de λ_{DDS-2}^i é superconvergente apenas para valores iguais ou menores que $h = 0,0625$, conforme a Tab. 10.1 e Fig. 10.2; de $h = 0,125$ para $h = 0,0625$, a ordem aparente oscila de um valor menor para um valor maior do que p_L ; as implicações desta oscilação serão apresentadas mais a frente, ainda nesta seção.

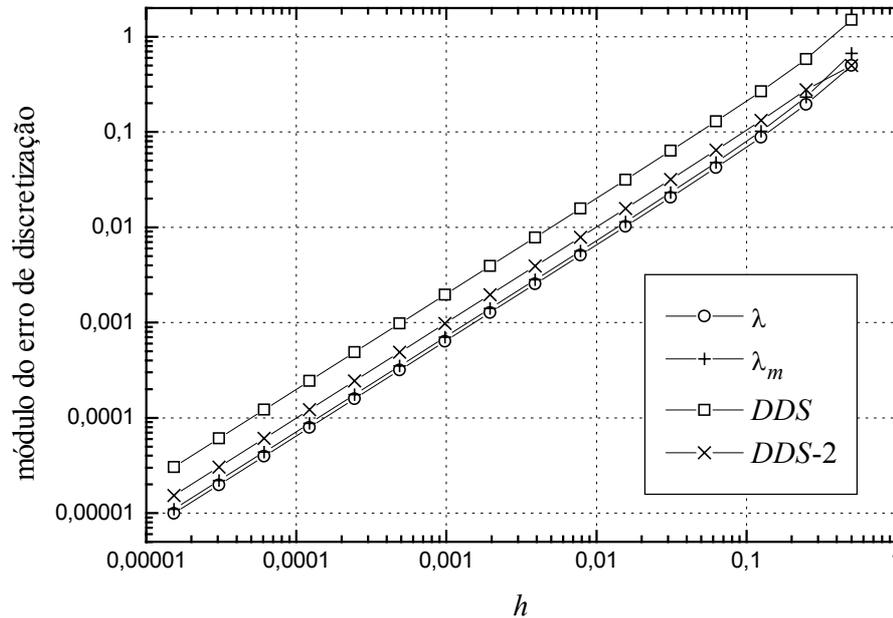


Figura 10.1 Erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

Tabela 10.1 Ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

h	$\lambda^{(1/2)}$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
1,25000000E-01	1,524651449E+00	1,720794924E+00	1,538866086E+00	6,147098441E-01
6,25000000E-02	1,206916052E+00	1,289455447E+00	1,185662405E+00	1,089267338E+00
3,12500000E-02	1,093836861E+00	1,133690068E+00	1,078812781E+00	1,060369069E+00
1,56250000E-02	1,044851776E+00	1,064648247E+00	1,036459167E+00	1,032348811E+00
7,81250000E-03	1,021944336E+00	1,031835170E+00	1,017550619E+00	1,016576917E+00
3,90625000E-03	1,010855803E+00	1,015802378E+00	1,008612195E+00	1,008375049E+00
1,95312500E-03	1,005399292E+00	1,007873238E+00	1,004266113E+00	1,004207585E+00
9,76562500E-04	1,002692553E+00	1,003929736E+00	1,002123158E+00	1,002108619E+00
4,88281250E-04	1,001344511E+00	1,001963160E+00	1,001059116E+00	1,001055493E+00
2,44140625E-04	1,000671815E+00	1,000981155E+00	1,000528944E+00	1,000528040E+00
1,220703125E-04	1,000335797E+00	1,000490471E+00	1,000264319E+00	1,000264093E+00
6,103515625E-05	1,000167871E+00	1,000245209E+00	1,000132121E+00	1,000132065E+00
3,051757813E-05	1,000083929E+00	1,000122598E+00	1,000066051E+00	1,000066037E+00
1,525878906E-05	1,000041963E+00	1,000061297E+00	1,000033023E+00	1,000033020E+00

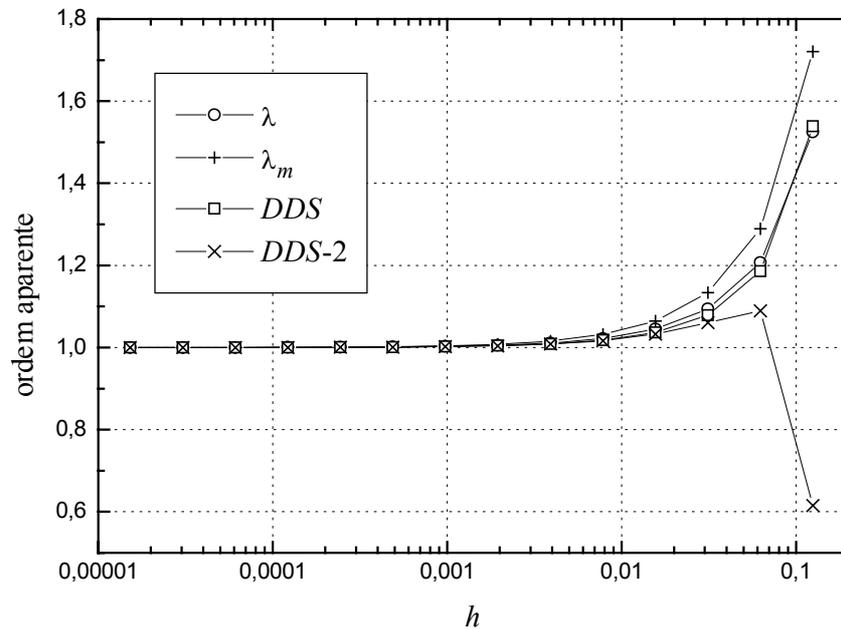


Figura 10.2 Ordem aparente das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

O erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente no modelo matemático (λ) é obtido com a substituição das Eqs. (10.4) e (10.10) na Eq. (8.37), o que resulta em

$$E(\lambda_j) = \left[1 - \frac{1}{(1-h)^j} \right] h = h - \frac{h}{(1-h)^j} \quad (10.13)$$

A Eq. (10.13) colocada na forma da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), fornece

$$(C_1)_j = 1 - \frac{1}{(1-h)^j} \quad (10.14)$$

e $C_2 = C_3 = \dots = 0$, ou seja, o erro é constituído por apenas um termo que depende de h . Para $h \rightarrow 0$, pode ser demonstrado que o erro de discretização tende a

$$E(\lambda_j) = -x_j h \quad (10.15)$$

Portanto, sua ordem assintótica é de 1ª ordem, isto é, $p_L = 1$. O **erro de discretização (E) da média da variável dependente (λ_m)** é obtido com o seu cálculo através da Eq. (7.33) e a substituição deste resultado e o da Eq. (10.5) na Eq. (8.38).

O **erro de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente, com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i** , é obtido com a substituição das Eqs. (10.7) e (10.11) na Eq. (8.39), o que resulta em

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = -\frac{(2-h)}{(1-h)} h \quad (10.16)$$

A Eq. (10.16), colocada na forma da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), fornece

$$C_1 = -\frac{(2-h)}{(1-h)} \quad (10.17)$$

e $C_2 = C_3 = \dots = 0$, ou seja, o erro é constituído por apenas um termo que depende de h . Para $h \rightarrow 0$, pode ser demonstrado que o erro de discretização tende a

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = -2h \quad (10.18)$$

Portanto, sua ordem assintótica é de 1ª ordem, isto é, $p_L = 1$.

O **erro de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente, com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i** , é obtido com a substituição das Eqs. (10.7) e (10.12) na Eq. (8.40), o que resulta em

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = -\frac{1}{2} \frac{(2-3h)}{(1-h)^2} h \quad (10.19)$$

A Eq. (10.19), colocada na forma da equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2), resulta em

$$C_1 = -\frac{1(2-3h)}{2(1-h)^2} \quad (10.20)$$

e $C_2 = C_3 = \dots = 0$, ou seja, o erro é constituído por apenas um termo que depende de h . Para $h \rightarrow 0$, pode ser demonstrado que o erro de discretização tende a

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = -h \quad (10.21)$$

Portanto, sua ordem assintótica é de 1ª ordem, isto é, $p_L = 1$.

A ordem assintótica ($p_L = 1$) do erro de discretização de λ , Eq. (10.15), de λ_{DDS}^i , Eq. (10.18), e de λ_{DDS-2}^i , Eq. (10.21), é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (10.3), conforme se pode observar através da Tab. 10.1 e Fig. 10.2. Comparando-se a Eq. (10.3) com as Eqs. (10.13), (10.16) e (10.19), conclui-se que **não é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2)** para as variáveis λ , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

Um exemplo de uma situação em que o estimador convergente, abordado na seção 5.3, não funciona é dado a seguir. Conforme já visto, de $h = 0,125$ para $h = 0,0625$, a ordem aparente de λ_{DDS-2}^i oscila de um valor menor para um valor maior do que p_L . Na Fig. 10.3 é apresentado um esboço das soluções analítica e numéricas, dos erros e das incertezas de λ_{DDS-2}^i para $h = 0,125$. Neste h , os valores das extrapolações de Richardson (ϕ_∞) baseadas nas ordens assintótica, Eq. (5.15), e aparente, Eq. (5.16), e representadas por $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$, estão além da solução analítica exata (Φ); conseqüentemente, a incerteza convergente (U_C), Eq. (5.20), subestima o valor do erro (E_C) da solução numérica convergente (ϕ_C), Eq. (5.19). Além disso, as incertezas de Richardson (U_{Ri}) baseadas nas ordens assintótica, Eq. (5.6), e aparente, Eq. (5.7), e representadas por $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$, superestimam o valor do erro ($E(\phi_1)$) da solução numérica na malha fina (ϕ_1), o que também pode ser visto na Tab. 10.2. Mas, a partir de $h = 0,0625$, tudo passa a valer conforme a teoria vista na Parte I deste trabalho porque a ordem aparente é superconvergente, exceto por um aspecto: conforme já mencionado, comparando-se as Eqs. (10.3) e (10.13), verificou-se que não é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento (ε), Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2). Na Tab. 10.2 pode-se ver o efeito disso: a incerteza dada pelo estimador bicoeficiente (U_{bi}) está mais próxima do erro de

discretização (E) do que as outras incertezas, especialmente a do estimador tricoeficiente (U_{tri}). Conforme visto no Cap. 5, quando a analogia entre as equações gerais de ε e E é válida, as incertezas calculadas com os estimadores de Richardson, bicoeficiente e tricoeficiente são progressivamente mais próximas de E , e isso não ocorre aqui.

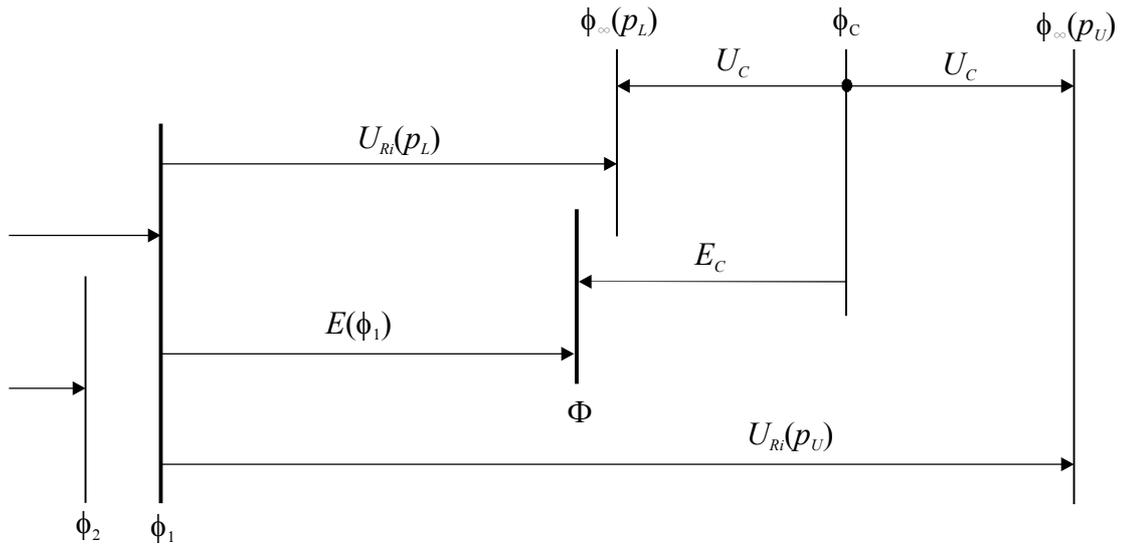


Figura 10.3 Esboço das soluções, dos erros e das incertezas de λ_{DDS-2}^i para $h = 1/8$.

Outro ponto a se destacar é que as incertezas calculadas com os estimadores de Richardson, bicoeficiente e tricoeficiente não são iguais ao erro em nenhum valor de h ; os valores iguais à unidade na Tab. 10.2 decorrem do efeito de arredondamento dos valores mostrados. Em princípio, deveria-se esperar que até mesmo o estimador de Richardson fornecesse o valor correto do erro uma vez que

$$\varepsilon(ED)_j = h \quad (10.22)$$

isto é, o erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (10.8), tem apenas um termo, e de valor constante igual a h ; o resultado mostrado na Eq. (10.22) foi obtido pela substituição das derivadas da solução analítica, Eq. (10.4), na Eq. (10.3).

Tabela 10.2 Razão entre incerteza (U) e erro de discretização (E) de λ_{DDS-2}^i .

h	$U_{Ri}(p_L) / E$	$U_{Ri}(p_U) / E$	U_{bi} / E	U_{tri} / E
2,5000000E-01	8,0000000E-01	não se aplica	não se aplica	não se aplica
1,2500000E-01	1,09401709E+00	2,05932630E+00	1,26495727E+00	não se aplica
6,2500000E-02	1,05840957E+00	9,38589619E-01	1,01337087E+00	9,37368051E-01
3,1250000E-02	1,03052823E+00	9,49388765E-01	1,00117022E+00	9,97458831E-01
1,5625000E-02	1,01547555E+00	9,71420164E-01	1,00012443E+00	9,99805266E-01
7,8125000E-03	1,00777866E+00	9,85012061E-01	1,00001440E+00	9,99980763E-01
3,9062500E-03	1,00389821E+00	9,92343319E-01	1,00000173E+00	9,99997859E-01
1,9531250E-03	1,00195117E+00	9,96132294E-01	1,00000021E+00	9,99999747E-01
9,7656250E-04	1,00097608E+00	9,98056461E-01	1,00000003E+00	9,9999969E-01
4,88281250E-04	1,00048816E+00	9,99025828E-01	1,00000000E+00	9,9999996E-01
2,44140625E-04	1,00024411E+00	9,99512316E-01	1,00000000E+00	1,00000000E+00
1,22070313E-04	1,00012206E+00	9,99756009E-01	1,00000000E+00	1,00000000E+00
6,10351563E-05	1,00006103E+00	9,99877967E-01	1,00000000E+00	1,00000000E+00
3,05175781E-05	1,00003052E+00	9,99938974E-01	1,00000000E+00	1,00000000E+00
1,52587891E-05	1,00001526E+00	9,99969485E-01	1,00000000E+00	1,00000000E+00

10.5 CASO 5

O Caso 5 envolve um modelo matemático não-linear, definido por

$$\Lambda \frac{d\Lambda}{dx} = 2x^3 \quad (10.23)$$

onde Λ é a variável dependente do problema e x é a variável independente, a direção coordenada.

A condição de contorno de Dirichlet é dada pela Eq. (8.2).

Seguindo-se o procedimento apresentado na subseção 8.7.1, obtém-se que o erro de truncamento da equação diferencial, Eq. (10.23), na sua forma discretizada, no nó j , é dado por

$$\varepsilon(ED)_j = \Lambda_j \left(\Lambda_j^{ii} \frac{h}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h^3}{24} - \dots \right) \quad (10.24)$$

ou seja, o erro de truncamento depende, além de derivadas, da própria solução nodal (Λ_j). A partir da Eq. (10.24), conclui-se que as ordens verdadeiras do erro de truncamento são $p_V = 1, 2, 3$, etc., e a ordem assintótica é $p_L = 1$.

A solução analítica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (10.23) e (8.2), para a variável dependente (Λ), é dado pela Eq. (10.4). A solução analítica exata da média da variável dependente (Λ_m) resulta na Eq. (10.5), e a solução da derivada de primeira ordem da variável dependente (Λ^i) é a mesma da Eq. (10.7).

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (10.23) e (8.2) é obtida considerando-se o mesmo modelo numérico empregado na seção 8.3. Desta forma, com a Eq. (7.4) em (10.23), tem-se

$$\lambda_j \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} = 2x_j^3 \quad (10.25)$$

ou

$$\lambda_j = \frac{\lambda_{j-1} + \sqrt{\lambda_{j-1}^2 + 8x_j^3 h}}{2} \quad (10.26)$$

onde x_j é a coordenada do nó j , Fig. 2.1, h é a distância entre os nós j e ' $j-1$ ', também denominado de tamanho dos elementos da malha, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (10.26), λ_j depende de λ_{j-1} , além de x e h . Não se conseguiu obter expressões em forma fechada para a solução numérica da variável dependente (λ) e de sua média (λ_m). Portanto, seus valores foram computados através das Eqs. (10.26) e (7.33). Obtido λ , a solução numérica da derivada de primeira ordem da variável dependente, com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i , foi calculada com a Eq. (8.25) e a solução numérica da derivada de primeira ordem da variável dependente, com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i , com a Eq. (8.32).

Seguindo-se o procedimento descrito na seção 8.5, pode-se deduzir que a equação do erro de discretização local, do Caso 5, é dada por

$$E_j = \frac{\lambda_{j-1} - 2\lambda_j + E_{j-1} - h^2 + \sqrt{(2\lambda_j - \lambda_{j-1} - E_{j-1} + h^2)^2 + 4\lambda_j(E_{j-1} - h^2)}}{2} \quad (10.27)$$

onde o erro de truncamento da aproximação numérica empregada na discretização da Eq. (10.23) já foi substituído, sendo seu valor igual ao dado na Eq. (10.22), isto é, $\varepsilon_j = h$. A novidade da Eq.

(10.27), em relação à Eq. (8.50), é que o erro de discretização nodal (E_j) depende da própria solução numérica nodal (λ), além de h e dos erros de nós vizinhos, representados por E_{j-1} .

Com base nas soluções numéricas obtidas, para a variável dependente (λ) e sua média (λ_m), a ordem aparente é superconvergente em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha. Já para a derivada de primeira ordem da variável dependente, com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i , e com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i , a ordem aparente é convergida em qualquer h . Para as quatro variáveis numéricas de interesse (λ , λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i), a ordem assintótica do erro de discretização global resultou em $p_L = 1$, que é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (10.24).

10.6 RESUMO DO CAPÍTULO 10

Foram apresentadas soluções analítica e numérica das equações diferenciais dos Casos 4 e 5, Eqs. (10.1) e (10.23), para λ , λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i . Para estas quatro variáveis de interesse, a ordem assintótica do erro de discretização global é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada. A ordem aparente de três variáveis numéricas de interesse (λ , λ_m e λ_{DDS}^i) do Caso 4 é superconvergente em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha. Para λ_{DDS-2}^i sua ordem aparente também é superconvergente mas não em todos os valores de h ; entre os dois maiores, a ordem aparente oscila de um valor menor para um valor maior do que p_L .

Para λ , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , verificou-se analiticamente através das Eqs. (10.13), (10.16) e (10.19) que não é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2), uma vez que os coeficientes C_i da equação de E dependem de h . No Caso 5, cuja equação diferencial é não-linear, Eq. (10.23), verificou-se que o erro de discretização nodal (E_j) dado na Eq. (10.27) depende, além de h e dos erros de nós vizinhos, da própria solução numérica nodal (λ).

Capítulo 11.

CASO 6: ADVECÇÃO COM CDS EM MALHA UNIFORME

11.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA E SOLUÇÃO ANALÍTICA

Nos Caps. 8 a 10 foram usadas apenas aproximações numéricas de primeira ordem. No presente capítulo aborda-se o mesmo modelo matemático do Cap. 9, isto é, a advecção de um escalar, mas empregando-se uma aproximação numérica de segunda ordem. Portanto, o modelo matemático do Caso 6 é definido pelas Eqs. (9.1) e (8.2).

Seguindo-se o procedimento apresentado na subseção 8.7.1 e com a Eq. (7.11), chega-se ao erro de truncamento da equação diferencial, Eq. (9.1), na sua forma discretizada, no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = -V \left(\Lambda_j^{iii} \frac{h^2}{6} + \Lambda_j^v \frac{h^4}{120} + \Lambda_j^{vi} \frac{h^6}{5040} + \dots \right) \quad (11.1)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 2, 4, 6$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 2$. As soluções analíticas exatas da variável dependente (Λ), de sua média (Λ_m) e de sua derivada de primeira ordem (Λ') são dadas pelas Eqs. (9.2) a (9.5).

11.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (9.1) e (8.2) é obtida considerando-se (Ferziger e Peric, 1999): método de diferenças finitas, aproximação numérica da derivada de 1ª ordem da equação diferencial com diferença central e malha uniforme. Desta forma, com a Eq. (7.10) em (9.1), tem-se

$$V \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1})}{2h} = 3x_j^2 \quad (11.2)$$

ou

$$\lambda_j = \lambda_{j-2} + \frac{6}{V} x_{j-1}^2 h \quad (11.3)$$

onde x_{j-1} é a coordenada do nó 'j-1', Fig. 2.1, h é a distância entre os nós j e 'j-1', também denominado de tamanho dos elementos da malha, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (11.3), λ_j depende de λ_{j-2} , além de x , V e h . Resolvendo-a através do mesmo procedimento descrito na seção 8.3, obtém-se que a **solução numérica da variável dependente** (λ) é dada por

$$\lambda_j = \frac{x_j^3}{V} - \frac{x_j}{V} h^2 \quad (\text{para } j = 0, 2, 4, \dots, N) \quad (11.4)$$

válida para os nós pares, isto é, para $j = 0, 2, 4, \dots, N$, sendo N um número par que representa o número total de elementos da malha. A Eq. (11.4) é a solução numérica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (9.1) e (8.2), bem como do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (11.3), e independe da solução dos nós ímpares. A solução numérica da variável dependente nos nós ímpares é obtida a partir dos nós pares, através de

$$\lambda_j = \frac{(\lambda_{j-1} + \lambda_{j+1})}{2} \quad (\text{para } j = 1, 3, 5, \dots, N-1) \quad (11.5)$$

Com a Eq. (11.4) substituída na Eq. (11.5), obtém-se

$$\lambda_j = \frac{x_j^3}{V} + \frac{2x_j}{V} h^2 \quad (\text{para } j = 1, 3, 5, \dots, N-1) \quad (11.6)$$

A solução numérica da média da variável dependente (λ_m) é

$$\lambda_m = \frac{L^3}{4V} + \frac{L}{2V}h^2 \quad (11.7)$$

As soluções numéricas da derivada de primeira ordem da variável dependente com um e dois pontos a jusante são dadas por

$$(\lambda_{DDS}^i)_0 = \frac{3}{V}h^2 \quad (11.8)$$

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = \frac{3}{V}h^2 \quad (11.9)$$

Observa-se diretamente nas Eqs. (11.4) e (11.6) que no limite quando $h \rightarrow 0$, a solução numérica se iguala à solução analítica, Eq. (9.2). O mesmo se observa entre as Eqs. (11.7) e (9.3), entre as Eqs. (11.8) e (9.5), e entre as Eqs. (11.9) e (9.5).

11.3 CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO, *A POSTERIORI*

As soluções analíticas de $\Lambda^{(1/2)}$, Λ_m e Λ^i , para $L = V = 1$, são, respectivamente, $1/8$, $1/4$ e zero. As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 4, 8, \dots, 65536$ elementos, o que equivale, de acordo com a Eq. (8.11), a $h = 1/4, 1/8, \dots, 1/65536 = 0,25; 0,125; \dots; (\approx 1,53 \times 10^{-5})$. O erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente no modelo matemático (λ) é obtido com a substituição das Eqs. (9.2) e (11.4) na Eq. (8.37), o que resulta em

$$E(\lambda_j) = \frac{x_j}{V}h^2 \quad (\text{para } j = 0, 2, 4, \dots, N) \quad (11.10)$$

e, com a substituição das Eqs. (9.2) e (11.6) na Eq. (8.37), tem-se

$$E(\lambda_j) = -\frac{2x_j}{V}h^2 \quad (\text{para } j = 1, 3, 5, \dots, N-1) \quad (11.11)$$

O erro de discretização (E) da média da variável dependente (λ_m) é obtido com a substituição das Eqs. (9.3) e (11.7) na Eq. (8.38), chegando-se a

$$E(\lambda_m) = -\frac{L}{2V}h^2 \quad (11.12)$$

Os erros de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente com um e dois pontos a jusante, λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , são obtidos com a substituição das Eqs. (9.5) e (11.8) na Eq. (8.39), o que resulta em

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = -\frac{3}{V}h^2 \quad (11.13)$$

Sobre o erro de discretização (E) de λ , Eqs. (11.10) e (11.11), de λ_m , Eq. (11.12), de λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , Eq. (11.13), observa-se que:

- 1) Os erros são constituídos por apenas um termo. Portanto, as ordens verdadeiras (p_V) se reduzem à ordem assintótica (p_L), que é de 2ª ordem, isto é, $p_V = p_L = 2$. Para os coeficientes C_i , de acordo com a subseção 4.1.3, as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) são do tipo convergida (seção 5.1) em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha ou, em outras palavras, são iguais à ordem assintótica, ou seja, $p_E = p_U = p_L = 2$.
- 2) As ordens assintóticas ($p_L = 2$) dos erros de discretização são iguais à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (11.1).

11.4 DEGENERAÇÃO DA ORDEM DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Seguindo-se o mesmo procedimento descrito na seção 8.5, pode-se deduzir que a equação nodal do erro de discretização, do Caso 6, é dada por

$$E_j = E_{j-2} + \frac{2}{V}h^3 \quad (\text{para } j = 0, 2, 4, \dots, N) \quad (11.14)$$

ou seja, a ordem do erro de discretização local é igual a três. Portanto, a passagem da Eq. (11.14) para a Eq. (11.10), que é o erro de discretização global, resulta na **degeneração de sua ordem em uma unidade**, provocada pelo somatório que está implícito na Eq. (11.14).

11.5 RESUMO DO CAPÍTULO 11

Foram apresentadas as soluções numéricas da equação diferencial do Caso 6, Eq. (9.1), para λ , λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i . Verificou-se que a ordem do erro de discretização local ($p_L = 3$) degenera em uma unidade para a ordem do erro de discretização global ($p_L = 2$) da variável dependente. Para todas as variáveis de interesse (λ , λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i), a ordem assintótica do erro de discretização global é igual à ordem do erro de truncamento da equação discretizada, e é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2). A ordem aparente das quatro variáveis numéricas de interesse (λ , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_m) é convergida em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha.

CASOS 7 E 8: DIFUSÃO COM CDS EM MALHA UNIFORME

Nos Caps. 8 a 11 foram abordados problemas advectivos, que envolvem apenas aproximações numéricas de derivadas de primeira ordem. No presente capítulo, são abordados dois casos de problemas difusivos que envolvem aproximações numéricas de derivadas de segunda ordem: no primeiro problema, Caso 7, a equação diferencial é linear; e, no segundo, Caso 8, é não-linear. O modelo numérico é constituído pelo método de diferenças finitas, com aproximações numéricas de 2^a ordem através de diferença central e malhas uniformes.

12.1 MODELO MATEMÁTICO DO CASO 7

O modelo matemático do Caso 7 é definido por

$$\frac{d^2\Lambda}{dx^2} = 12x^2 \quad (12.1)$$

com as seguintes condições de contorno de Dirichlet (Tannehill *et al.*, 1997):

$$\Lambda(0) = 0 \quad (12.2)$$

$$\Lambda(L) = 1 \quad (12.3)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo, Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar difundido, e x é a variável independente, a direção coordenada.

Seguindo-se o procedimento apresentado na subsecção 8.7.1 e com a Eq. (7.29), chega-se ao erro de truncamento da equação diferencial, Eq. (12.1), na sua forma discretizada, no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = -\Lambda_j^{iv} \frac{h^2}{12} - \Lambda_j^{vi} \frac{h^4}{360} - \Lambda_j^{viii} \frac{h^6}{20160} - \dots \quad (12.4)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 2, 4, 6$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 2$.

12.2 SOLUÇÃO ANALÍTICA DO CASO 7

A **solução analítica** exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (12.1) a (12.3), para a variável dependente (Λ), é

$$\Lambda = x^4 \quad (12.5)$$

Com a Eq. (12.5) em (2.28), a **solução analítica** exata da média da variável dependente resulta em

$$\Lambda_m = \frac{L^4}{5} \quad (12.6)$$

A partir da Eq. (12.5), obtém-se que a **derivada de primeira ordem da variável dependente** é

$$\Lambda^i = 4x^3 \quad (12.7)$$

e, portanto, no contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, seu valor resulta em

$$\Lambda^i(0) = 0 \quad (12.8)$$

12.3 SOLUÇÃO NUMÉRICA DO CASO 7

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (12.1) a (12.3) é obtida considerando-se (Ferziger e Peric, 1999): método de diferenças finitas, aproximação numérica da derivada de 2ª ordem da equação diferencial com diferença central e malha uniforme. Desta forma, com a Eq. (7.28) em (12.1), tem-se

$$\frac{(\lambda_{j+1} + \lambda_{j-1} - 2\lambda_j)}{h^2} = 12x_j^2 \quad (12.9)$$

ou

$$\lambda_j = \frac{\lambda_{j-1}}{2} + \frac{\lambda_{j+1}}{2} - 6x_j^2 h^2 \quad (12.10)$$

onde x_j é a coordenada do nó j , Fig. 2.1, h é a distância entre os nós j e ' $j-1$ ', ou entre os nós j e ' $j+1$ ', também denominado de tamanho dos elementos da malha, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (12.10), λ_j depende de λ_{j-1} e λ_{j+1} , além de x e h . A solução da Eq. (12.10), em forma fechada, foi obtida da seguinte forma: primeiro, resolveu-se a equação nodal do erro de discretização, com base na série de Taylor e na solução analítica; e, então, através da Eq. (8.37) obteve-se a **solução numérica da variável dependente (λ)**, que é dada por

$$\lambda_j = x_j^4 + x_j(L - x_j)h^2 \quad (12.11)$$

A Eq. (12.11) é a solução numérica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (12.1) a (12.3), bem como do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (12.10). A **solução numérica da média da variável dependente (λ_m)** é

$$\lambda_m = \frac{L^4}{5} + \frac{L^2}{2}h^2 - \frac{1}{5}h^4 \quad (12.12)$$

As **soluções numéricas da derivada de primeira ordem da variável dependente com um e dois pontos a jusante** são dadas por

$$(\lambda_{DDS}^i)_0 = Lh^2 \quad (12.13)$$

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = Lh^2 - 6h^3 \quad (12.14)$$

12.4 CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO, *A POSTERIORI*, DO CASO 7

A Fig. 12.1 apresenta o módulo do erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda(1/2)$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtido aplicando-se as Eqs. (8.37) a (8.40). As soluções analíticas de $\Lambda(1/2)$, Λ_m e Λ^i , para $L = 1$, são, respectivamente, $5/8$, $1/5$ e zero. As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 2, 4, 8, \dots, 32768$ elementos, o que equivale, de acordo com a Eq. (8.11), a $h = 1/2, 1/4, 1/8, \dots, 1/32768 = 0,5; 0,25; 0,125; \dots; (\approx 3,05 \times 10^{-5})$. Observa-se na Fig. 12.1 que as inclinações das curvas de erro em relação ao eixo das abscissas, ou as ordens assintóticas (p_L), de $\lambda(1/2)$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i tendem ao mesmo valor. A Tab. 12.1 apresenta a ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda(1/2)$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtida com as Eqs. (4.25) e (4.26) para razão de refino (q) igual a dois. Esses resultados também são mostrados na Fig. 12.2.

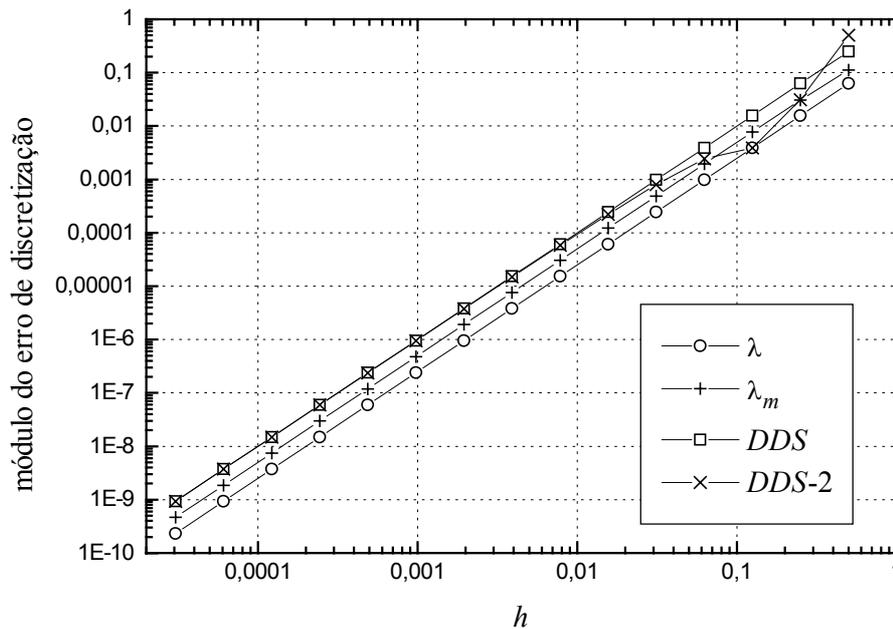


Figura 12.1 Erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda(1/2)$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

A ordem aparente (p_U) de λ_{DDS-2}^i apresenta um comportamento muito diferente daqueles apresentados até aqui, conforme se pode observar na Tab. 12.1 e na Fig. 12.2: em $h = 0,125$, p_U é maior do que a sua ordem assintótica ($p_L = 2$); em $h = 0,0625$, p_U é indefinido devido ao

argumento negativo do logaritmo, no seu cálculo com a Eq. (4.26); em $h = 0,03125$, p_U é negativo; e, a partir de $h = 0,015625$, p_U é subconvergente (subseção 5.1.1). Esses valores de p_U , que correspondem aos quatro valores maiores de h , exemplificam os quatro tipos de valores das ordens efetiva e aparente previstos na subseção 4.1.3. Com base nos valores de p_U , para $h \rightarrow 0$, conclui-se que $p_L = 2$; esse resultado é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (12.4). Na Fig. 12.2, o valor de p_U , que não existe, foi representado pelo valor zero.

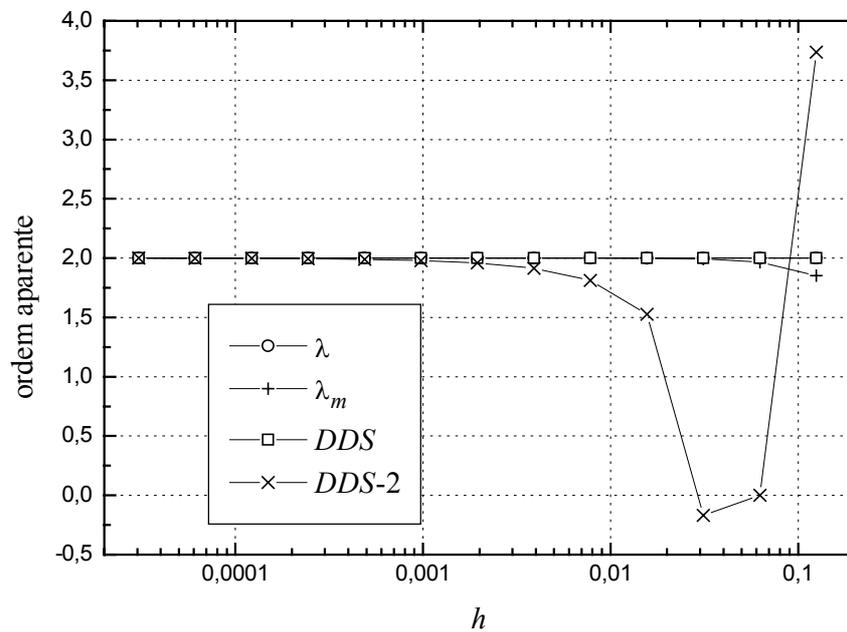


Figura 12.2 Ordem aparente das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

O erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente no modelo matemático (λ) é obtido com a substituição das Eqs. (12.5) e (12.11) na Eq. (8.37), o que resulta em

$$E(\lambda_j) = x_j(x_j - L)h^2 \quad (12.15)$$

A respeito dele, observa-se que seu máximo ocorre em $L = \frac{1}{2}$. O **erro de discretização (E) da média da variável dependente (λ_m)** é obtido com a substituição das Eqs. (12.6) e (12.12) na Eq. (8.38), o que resulta em

$$E(\lambda_m) = -\frac{L^2}{2}h^2 + \frac{1}{5}h^4 \quad (12.16)$$

Usando-se o procedimento descrito na subseção 4.1.2, isto é, com as Eqs. (4.15), (4.17) e (12.16), deduz-se que a ordem efetiva de λ_m depende de h e L , e é dada por

$$p_E(\lambda_m) = 2 + \frac{4h^2}{(2h^2 - 5L^2)} \quad (12.17)$$

Tabela 12.1 Ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

h	$\lambda(\frac{1}{2})$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
1,25000000E-01	2,00000000E+00	1,853158612E+00	2,00000000E+00	3,736965594E+00
6,25000000E-02	2,00000000E+00	1,965511624E+00	2,00000000E+00	não existe
3,12500000E-02	2,00000000E+00	1,991505206E+00	2,00000000E+00	-1,699250000E-01
1,56250000E-02	2,00000000E+00	1,997884094E+00	2,00000000E+00	1,526068812E+00
7,81250000E-03	2,00000000E+00	1,999471508E+00	2,00000000E+00	1,810966176E+00
3,90625000E-03	2,00000000E+00	1,999867907E+00	2,00000000E+00	1,914026777E+00
1,95312500E-03	2,00000000E+00	1,999966979E+00	2,00000000E+00	1,958861305E+00
9,76562500E-04	2,00000000E+00	1,999991745E+00	2,00000000E+00	1,979862354E+00
4,88281250E-04	2,00000000E+00	1,999997936E+00	2,00000000E+00	1,990035614E+00
2,44140625E-04	2,00000000E+00	1,999999484E+00	2,00000000E+00	1,995043497E+00
1,22070312E-04	2,00000000E+00	1,999999878E+00	2,00000000E+00	1,997528120E+00
6,10351562E-05	2,00000000E+00	1,999999979E+00	2,00000000E+00	1,998765646E+00
3,05175781E-05	2,00000000E+00	1,999999627E+00	2,00000000E+00	1,999383219E+00

O **erro de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente, com um ponto a jusante, λ_{DDS}^i** , é obtido com a substituição das Eqs. (12.8) e (12.13) na Eq. (8.39), o que resulta em

$$E(\lambda_{DDS}^i)_0 = -Lh^2 \quad (12.18)$$

O erro de discretização (E) da derivada de primeira ordem da variável dependente, com dois pontos a jusante, λ_{DDS-2}^i , é obtido com a substituição das Eqs. (12.8) e (12.14) na Eq. (8.40), fornecendo

$$E(\lambda_{DDS-2}^i)_0 = -Lh^2 + 6h^3 \quad (12.19)$$

A respeito dele, observa-se que:

- 1) O primeiro termo de E na Eq. (12.19) é proveniente do erro de poluição de λ_{DDS-2}^i , isto é, da Eq. (7.24), e o segundo, do erro de truncamento calculado através da Eq. (7.23). Esses dois termos se anulam em $h = L/6$, ou seja, o erro de discretização de λ_{DDS-2}^i pode ser nulo em $h \neq$ zero mesmo quando não existem erros de iteração, de arredondamento e de programação.
- 2) Usando-se o procedimento descrito na subseção 4.1.2, isto é, com as Eqs. (4.15), (4.17) e (12.19), deduz-se que a ordem efetiva de λ_{DDS-2}^i , para $h < L/9$, depende de h e L , e é dada por

$$p_E(\lambda_{DDS-2}^i) = 2 + \frac{6h}{(6h - L)} \quad (12.20)$$

Sobre o erro de discretização (E) de λ , Eq. (12.15), de λ_m , Eq. (12.16), de λ_{DDS}^i , Eq. (12.18), e de λ_{DDS-2}^i , Eq. (12.19), observa-se que:

- 3) para o limite de $h \rightarrow 0$, $E \rightarrow 0$ e, portanto, a solução numérica é consistente (Ferziger e Peric, 1999);
- 4) é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2); e
- 5) a ordem assintótica ($p_L = 2$) do erro de discretização é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (12.4).

Na Tab. 12.2 são apresentados o erro de discretização (E) e a ordem efetiva (p_E) de λ_{DDS-2}^i , calculados com as Eqs. (12.19) e (12.20), respectivamente, em função do tamanho (h) dos elementos da malha, bem como os dois termos de E mostrados na Eq. (12.19). O comportamento de p_E é semelhante ao da ordem aparente, já comentado. Ressalta-se que para h

→ $L/6$ pela direita, $p_E \rightarrow +\infty$, e para $h \rightarrow L/6$ pela esquerda, $p_E \rightarrow -\infty$. O erro de discretização (E) mostrado na Tab. 12.2 começa com valores positivos e passa para valores negativos à medida que $h \rightarrow 0$, apresentando uma oscilação em torno de $h \approx 0,111$.

Tabela 12.2 Erro de discretização (E) e ordem efetiva (p_E) de λ_{DDS-2}^i .

h	$-Lh^2$	$6h^3$	E	p_E
5,00000000E-01	-2,50000000E-01	7,50000000E-01	5,00000000E-01	3,50000000E+00
2,50000000E-01	-6,25000000E-02	9,37500000E-02	3,12500000E-02	5,00000000E+00
2,00000000E-01	-4,00000000E-02	4,80000000E-02	8,00000000E-03	8,00000000E+00
1,66666667E-01	-2,77777778E-02	2,77777778E-02	0,00000000E+00	indefinido
1,428571429E-01	-2,040816327E-02	1,749271137E-02	-2,915451895E-03	-4,00000000E+00
1,25000000E-01	-1,56250000E-02	1,171875000E-02	-3,90625000E-03	-1,00000000E+00
1,11111111E-01	-1,234567901E-02	8,230452675E-03	-4,115226337E-03	0,00000000E+00
6,25000000E-02	-3,90625000E-03	1,464843750E-03	-2,441406250E-03	1,40000000E+00
3,12500000E-02	-9,76562500E-04	1,831054688E-04	-7,934570313E-04	1,769230769E+00
1,56250000E-02	-2,441406250E-04	2,288818359E-05	-2,212524414E-04	1,896551724E+00
7,81250000E-03	-6,103515625E-05	2,861022949E-06	-5,817413330E-05	1,950819672E+00
3,90625000E-03	-1,525878906E-05	3,576278687E-07	-1,490116119E-05	1,97600000E+00
1,95312500E-03	-3,814697266E-06	4,470348358E-08	-3,769993782E-06	1,988142292E+00
9,76562500E-04	-9,536743164E-07	5,587935448E-09	-9,480863810E-07	1,994106090E+00
4,882812500E-04	-2,384185791E-07	6,984919310E-10	-2,377200872E-07	1,997061704E+00
2,441406250E-04	-5,960464478E-08	8,731149137E-11	-5,951733328E-08	1,998533007E+00
1,220703125E-04	-1,490116119E-08	1,091393642E-11	-1,489024726E-08	1,999267041E+00
6,103515625E-05	-3,725290298E-09	1,364242053E-12	-3,723926056E-09	1,999633655E+00
3,051757813E-05	-9,313225746E-10	1,705302566E-13	-9,311520444E-10	1,999816861E+00
1,525878906E-05	-2,328306437E-10	2,131628207E-14	-2,328093274E-10	1,999908439E+00

Na Tab. 12.3 são apresentadas as razões entre incerteza (U) e erro (E) para a solução numérica de λ_{DDS-2}^i calculadas com os estimadores de Richardson (U_{Ri}), Eq. (3.10), estimador GCI (U_{GCI}), Eq. (3.31), e o estimador bicoeficiente (U_{bi}), Eqs. (3.39) e (3.47). Para o cálculo de U_{GCI} usou-se $F_S = 3$, e para U_{bi} , $p_V = 2$ e 3 . O estimador de Richardson superestima o erro de discretização (E) na malha mais grossa ($h = 0,25$), depois estima incorretamente o sinal do erro em $h = 0,125$, e finalmente exibe comportamento monotônico para $h \leq 0,0625$, mas subestimando o valor do erro. Devido ao fator de segurança (F_S) que o estimador GCI impõe sobre o estimador de Richardson, o comportamento daquele é semelhante a este, mas não subestima o erro para $h \leq 0,0325$, já que $U_{GCI}/E \rightarrow 3$ para $h \rightarrow 0$; entretanto, em $h = 0,0625$, U_{GCI}

subestima o erro (E). Devido ao fato do erro de discretização de λ_{DDS-2}^i ser composto por apenas dois termos, Eq. (12.19), o estimador bicoeficiente o avalia corretamente em qualquer h , mesmo sendo oscilante o seu comportamento.

Tabela 12.3 Razão entre incerteza (U) e erro (E) para λ_{DDS-2}^i .

h	$U_{Ri}(p_L) / E$	$U_{GCI}(p_L) / E$	U_{bi} / E
2,500000000E-01	5,000000000E+00	1,500000000E+01	não se aplica
1,250000000E-01	-3,000000000E+00	9,000000000E+00	1,000000000E+00
6,250000000E-02	2,000000000E-01	6,000000000E-01	1,000000000E+00
3,125000000E-02	6,923076923E-01	2,076923077E+00	1,000000000E+00
1,562500000E-02	8,620689655E-01	2,586206897E+00	1,000000000E+00
7,812500000E-03	9,344262295E-01	2,803278689E+00	1,000000000E+00
3,906250000E-03	9,680000000E-01	2,904000000E+00	1,000000000E+00
1,953125000E-03	9,841897233E-01	2,952569170E+00	1,000000000E+00
9,765625000E-04	9,921414538E-01	2,976424361E+00	1,000000000E+00
4,882812500E-04	9,960822723E-01	2,988246817E+00	1,000000000E+00
2,441406250E-04	9,980440098E-01	2,994132029E+00	1,000000000E+00
1,220703125E-04	9,990227217E-01	2,997068165E+00	1,000000000E+00
6,103515625E-05	9,995115399E-01	2,998534620E+00	1,000000000E+00
3,051757813E-05	9,997558147E-01	2,999267444E+00	1,000000000E+00
1,525878906E-05	9,998779185E-01	2,999633756E+00	1,000000000E+00

12.5 DEGENERAÇÃO DA ORDEM DO ERRO DO CASO 7

Seguindo-se o mesmo procedimento descrito na seção 8.5, pode-se deduzir que a equação nodal do erro de discretização, do Caso 7, é dada por

$$E_j = \frac{E_{j-1}}{2} + \frac{E_{j+1}}{2} - h^4 \quad (12.21)$$

ou seja, a ordem do erro de discretização local é igual a quatro. Portanto, a passagem da Eq. (12.21) para a Eq. (12.15), que é o erro de discretização global, resulta na **degeneração de sua ordem em duas unidades**, provocada pelo duplo somatório que está implícito na Eq. (12.21).

12.6 CASO 8

O modelo matemático do Caso 8 é definido por

$$\frac{d}{dx} \left(e^{\Lambda} \frac{d\Lambda}{dx} \right) = 0 \quad (12.22)$$

onde Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar difundido, e^{Λ} representa uma condutividade térmica não-linear, e x é a variável independente, a direção coordenada. As condições de contorno de Dirichlet são dadas pelas Eqs. (12.2) e (12.3).

A **solução analítica** exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (12.22), (12.2) e (12.3), **para a variável dependente (Λ)**, é

$$\Lambda = \ln[1 + (e-1)x] \quad (12.23)$$

Com a Eq. (12.23) em (2.28), a **solução analítica exata da média da variável dependente** resulta em

$$\Lambda_m = \frac{1}{(e-1)} \quad (12.24)$$

para $L = 1$. A partir da Eq. (12.23), obtém-se que a **solução analítica exata da derivada de primeira ordem da variável dependente**, no contorno esquerdo do domínio de cálculo, isto é, em $x = 0$, resulta em

$$\Lambda^i(0) = e - 1 \quad (12.25)$$

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (12.22), (12.2) e (12.3) foi obtida considerando-se o mesmo modelo numérico usado na seção 11.2. Desta forma, com uma aproximação numérica similar à Eq. (7.10), substituída na Eq. (12.22), tem-se

$$\frac{e^{\Lambda_{j+1/2}} \left(\frac{d\Lambda}{dx} \right)_{j+1/2} - e^{\Lambda_{j-1/2}} \left(\frac{d\Lambda}{dx} \right)_{j-1/2}}{h} = 0 \quad (12.26)$$

Os termos de condutividade térmica da Eq. (12.26) são aproximados através da média harmônica (Patankar, 1980), isto é,

$$e^{\Lambda_{j+1/2}} = \frac{2e^{\lambda_j} e^{\lambda_{j+1}}}{(e^{\lambda_j} + e^{\lambda_{j+1}})} \quad (12.27)$$

$$e^{\Lambda_{j-1/2}} = \frac{2e^{\lambda_j} e^{\lambda_{j-1}}}{(e^{\lambda_j} + e^{\lambda_{j-1}})} \quad (12.28)$$

As duas derivadas da Eq. (12.26) são aproximadas de forma semelhante à Eq. (7.10), ou seja,

$$\left(\frac{d\Lambda}{dx} \right)_{j+1/2} = \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_j)}{h} \quad (12.29)$$

$$\left(\frac{d\Lambda}{dx} \right)_{j-1/2} = \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} \quad (12.30)$$

Finalmente, substituindo as Eqs. (12.29) e (12.30) em (12.26), chega-se a

$$A_{j-1} \lambda_{j-1} + A_j \lambda_j + A_{j+1} \lambda_{j+1} = 0 \quad (12.31)$$

onde os coeficientes A são dados por

$$A_{j-1} = -\frac{e^{\Lambda_{j-1/2}}}{h} \quad (12.32)$$

$$A_{j+1} = -\frac{e^{\Lambda_{j+1/2}}}{h} \quad (12.33)$$

$$A_j = -(A_{j-1} + A_{j+1}) \quad (12.34)$$

sendo as condutividades térmicas dos coeficientes das Eqs. (12.32) e (12.33) dadas pelas Eqs. (12.28) e (12.27), respectivamente; h é a distância entre os nós j e ' $j-1$ ', ou entre os nós j e ' $j+1$ ', Fig. 2.1, também denominado de tamanho dos elementos da malha; e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (12.31), λ_j depende de λ_{j-1} e λ_{j+1} , além de h e dele próprio através das Eqs. (12.27) e (12.28), o que constitui uma não-linearidade.

A Fig. 12.3 apresenta o módulo do erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtido aplicando-se as Eqs. (8.37) a (8.40). As soluções analíticas de $\Lambda(\frac{1}{2})$, Λ_m e Λ^i , para $L = 1$, são, respectivamente, $6,201145070 \times 10^{-1}$, $5,819767069 \times 10^{-1}$ e $1,718281828$. As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 2, 4, 8, \dots, 1024$ elementos, o que equivale, de acordo com a Eq. (8.11), a $h = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \dots, \frac{1}{1024} = 0,5; 0,25; 0,125; \dots$; e ($\approx 9,76 \times 10^{-4}$). Para resolver a dependência dos coeficientes A com a variável dependente (λ) foi necessário usar um processo iterativo. Esse processo foi considerado convergido quando a variação de $\lambda(\frac{1}{2})$ entre iterações sucessivas era menor do que 10^{-14} . Para atingir este nível de convergência foram necessárias de 13 a 29 iterações.

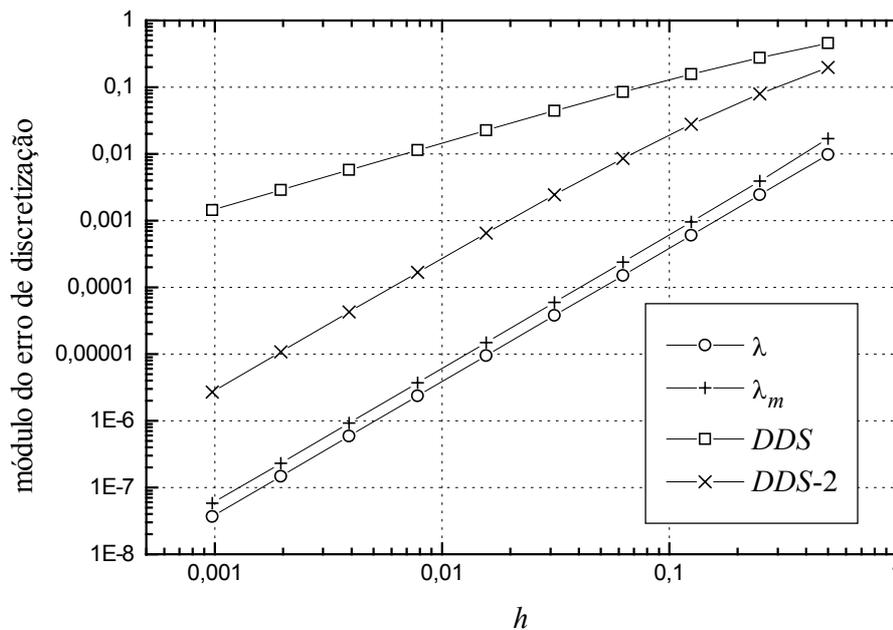


Figura 12.3 Erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

A Tab. 12.4 apresenta a ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtida com as Eqs. (4.25) e (4.26) para razão de refino (q) igual a dois. Esses resultados também são mostrados na Fig. 12.4. As ordens aparente de $\lambda^{(1/2)}$ e λ_m são do tipo superconvergente (subseção 5.1.2) em qualquer h ; com base em seus valores, para $h \rightarrow 0$, conclui-se que suas ordens assintóticas valem $p_L = 2$. O valor de p_U , relativo à variável $\lambda^{(1/2)}$, que é menor do que dois, na Tab. 12.4, deve-se provavelmente ao efeito do erro de arredondamento. As ordens aparente de λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i são do tipo subconvergente (subseção 5.1.1) em qualquer h ; com base em seus valores, para $h \rightarrow 0$, conclui-se que a ordem assintótica de λ_{DDS}^i vale $p_L = 1$ e de λ_{DDS-2}^i , $p_L = 2$.

Tabela 12.4 Ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

h	$\lambda^{(1/2)}$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
1,250000000E-01	2,011840888E+00	2,143570834E+00	6,069174347E-01	1,205156815E+00
6,250000000E-02	2,006405495E+00	2,042072810E+00	7,278014625E-01	1,427607304E+00
3,125000000E-02	2,001866101E+00	2,010916919E+00	8,356903972E-01	1,639229154E+00
1,562500000E-02	2,000484086E+00	2,002753731E+00	9,088800726E-01	1,793392797E+00
7,812500000E-03	2,000122137E+00	2,000689952E+00	9,518687585E-01	1,888652026E+00
3,906250000E-03	2,000030564E+00	2,000172595E+00	9,752418441E-01	1,942070397E+00
1,953125000E-03	2,000007998E+00	2,000043038E+00	9,874409116E-01	1,970435685E+00
9,765625000E-04	1,999998958E+00	2,000012077E+00	9,936745481E-01	1,985063351E+00

Na Tab. 12.5 são apresentadas as razões entre incerteza (U) e erro (E), para a solução numérica de λ_{DDS-2}^i , calculadas com os estimadores de Richardson (U_{Ri}), Eq. (3.10), estimador GCI (U_{GCI}), Eq. (3.31), o estimador bicoeficiente (U_{bi}), Eqs. (3.39) e (3.47), e o estimador tricoeficiente (U_{tri}), Eqs. (3.54) e (3.59). Para o cálculo de U_{GCI} usou-se $F_S = 3$, para U_{bi} , $p_V = 2$ e 3 , e para U_{tri} , $p_V = 2, 3$ e 4 . Os estimadores de Richardson, bicoeficiente e tricoeficiente subestimam o erro de discretização (E) em qualquer h , mas são progressivamente mais acurados, enquanto que o estimador GCI , superestima o erro.

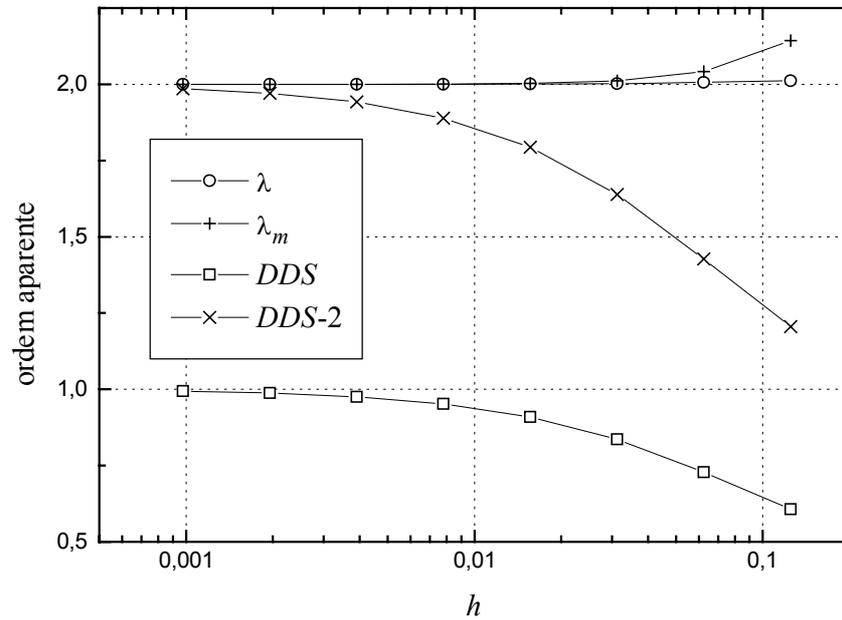


Figura 12.4 Ordem aparente das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i .

Tabela 12.5 Razão entre incerteza (U) e erro (E) para λ_{DDS-2}^i .

h	$U_{Ri}(p_L) / E$	$U_{GCI}(p_L) / E$	U_{bi} / E	U_{Iri} / E
2,50000000E-01	4,996819828E-01	1,499045949E+00	não se aplica	não se aplica
1,25000000E-01	6,195090735E-01	1,858527221E+00	7,694636085E-01	não se aplica
6,25000000E-02	7,450725002E-01	2,235217501E+00	8,845072723E-01	9,265301150E-01
3,12500000E-02	8,468888658E-01	2,540666597E+00	9,539606014E-01	9,781527244E-01
1,56250000E-02	9,149378704E-01	2,744813611E+00	9,846965175E-01	9,951702165E-01
7,81250000E-03	9,549729701E-01	2,864918910E+00	9,955059991E-01	9,991495136E-01
3,90625000E-03	9,768065083E-01	2,930419525E+00	9,987753121E-01	9,998712201E-01
1,95312500E-03	9,882254927E-01	2,964676478E+00	9,996798046E-01	9,999821577E-01
9,76562500E-04	9,940666469E-01	2,982199941E+00	9,999173739E-01	9,999968711E-01

12.7 RESUMO DO CAPÍTULO 12

No Caso 7, para as quatro variáveis numéricas de interesse (λ , λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i), a ordem assintótica ($p_L = 2$) do erro de discretização global é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, e é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização, Eq. (3.2). A ordem do erro de discretização local ($p_L = 4$) da variável dependente degenera em duas unidades para a ordem do erro de discretização global ($p_L = 2$). A ordem aparente (p_U) de λ , λ_m e λ_{DDS}^i é convergente em qualquer tamanho (h) dos elementos da malha. A ordem aparente de λ_{DDS-2}^i assume valores acima ou abaixo da ordem assintótica, valores negativos e é indefinida num determinado h , ou seja, estes quatro tipos de valores que a p_U assume representam todos os casos deduzidos na subseção 4.1.3.

Capítulo 13.

CASOS 9 E 10: ADVECÇÃO-DIFUSÃO EM MALHA UNIFORME

Em todos os casos anteriores, Caps. 8 a 12, os problemas eram apenas do tipo advectivo ou difusivo puro. Neste capítulo são abordados dois problemas do tipo advectivo-difusivo que se distinguem pelo emprego de dois modelos numéricos diferentes, constituídos pelo método de diferenças finitas, com aproximações numéricas de 1^a e 2^a ordens e malhas uniformes.

O modelo matemático dos Casos 9 e 10 é definido por

$$Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2} \quad (13.1)$$

onde Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar difundido e transportado por advecção, Pe é o número de Peclet (Incropera e DeWitt, 1996), e x é a variável independente, a direção coordenada. As condições de contorno de Dirichlet são dadas pelas Eqs. (12.2) e (12.3).

13.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA

A **solução analítica** exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (13.1), (12.2) e (12.3), **para a variável dependente (Λ)**, é (Ferziger e Peric, 1999)

$$\Lambda = \frac{(e^{xPe} - 1)}{(e^{Pe} - 1)} \quad (\text{para } L = 1) \quad (13.2)$$

Com a Eq. (13.2) em (2.28), a **solução analítica exata da média da variável dependente** resulta em

$$\Lambda_m = \frac{(e^{Pe} - Pe - 1)}{Pe(e^{Pe} - 1)} \quad (\text{para } L = 1) \quad (13.3)$$

A partir da Eq. (13.2), obtém-se que a **solução analítica exata da derivada de primeira ordem da variável dependente** é

$$\Lambda^i = \frac{e^{xPe} Pe}{(e^{Pe} - 1)} \quad (\text{para } L = 1) \quad (13.4)$$

Considerando-se $Pe = 10$ e $x = 1/2$, as soluções analíticas resultam em $\Lambda(1/2) \approx 6,692850924 \times 10^{-3}$, $\Lambda_m \approx 9,995459801 \times 10^{-2}$ e $\Lambda^i(0) \approx 4,540199101 \times 10^{-4}$.

13.2 CASO 9

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (13.1), (12.2) e (12.3) é obtida considerando-se (Ferziger e Peric, 1999): método de diferenças finitas; aproximação numérica das derivadas de 1ª e 2ª ordens da equação diferencial com um ponto a montante e diferença central, respectivamente; e malha uniforme. Desta forma, substituindo-se as Eqs. (7.4) e (7.28), respectivamente, nas derivadas de primeira e segunda ordens da Eq. (13.1), obtém-se

$$Pe \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h} = \frac{(\lambda_{j+1} + \lambda_{j-1} - 2\lambda_j)}{h^2} \quad (13.5)$$

Para esta equação, colocada na forma da Eq. (12.31), chega-se a

$$A_{j-1} = -\left(\frac{Pe}{h} + \frac{1}{h^2}\right) \quad (13.6)$$

$$A_{j+1} = -\frac{1}{h^2} \quad (13.7)$$

$$A_j = -(A_{j-1} + A_{j+1}) \quad (13.8)$$

onde h é a distância entre os nós j e ' $j-1$ ', ou entre os nós j e ' $j+1$ ', Fig. 2.1, também denominado de tamanho dos elementos da malha, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente.

Seguindo-se o procedimento apresentado na subseção 8.7.1 e com as Eqs. (7.5) e (7.29), obtém-se o erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (13.5), no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = \left(Pe \frac{\Lambda_j^{ii}}{2} \right) h + \left(\frac{\Lambda_j^{iv}}{12} - Pe \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} \right) h^2 + \left(Pe \frac{\Lambda_j^{iv}}{24} \right) h^3 + \dots \quad (13.9)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2, 3$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

A Fig. 13.1 apresenta o módulo do erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtido aplicando-se as Eqs. (8.37) a (8.40). As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 2, 4, 8, \dots, 65536$ elementos, o que equivale, de acordo com a Eq. (8.11), a $h = 1/2, 1/4, 1/8, \dots, 1/65536 = 0,5; 0,25; 0,125; \dots; (\approx 1,53 \times 10^{-5})$. Observa-se na Fig. 13.1 que as inclinações das curvas de erro em relação ao eixo das abscissas, ou suas ordens assintóticas (p_L), de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i tendem ao mesmo valor.

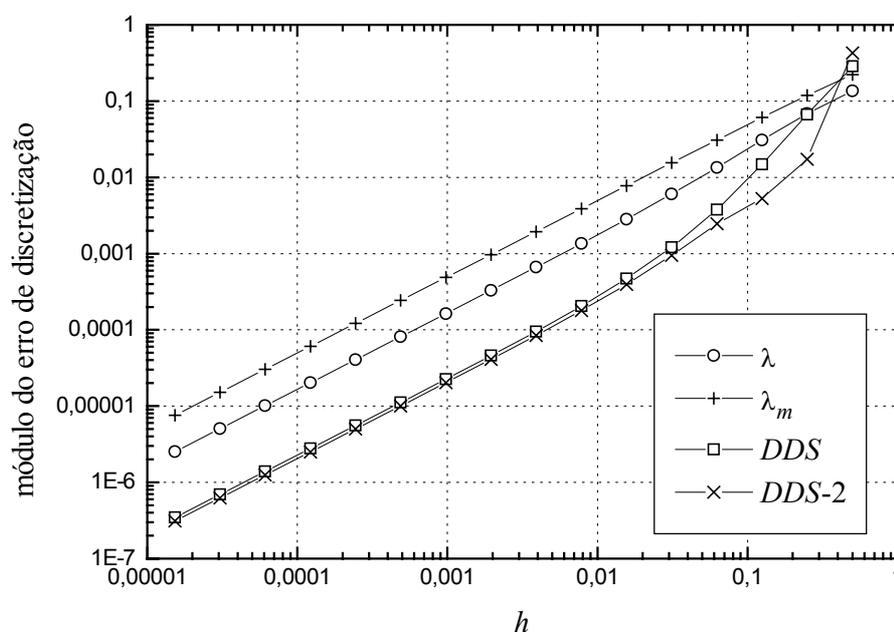


Figura 13.1 Erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i do Caso 9.

A Tab. 13.1 apresenta a ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtida com as Eqs. (4.25) e (4.26) para razão de refino (q) igual a dois. Esses resultados também são mostrados na Fig. 13.2. Com base neles, conclui-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i vale $p_L = 1$. Esse resultado é idêntico à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, conforme a Eq. (13.9).

Tabela 13.1 Ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i do Caso 9.

h	$\lambda(\frac{1}{2})$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
1,25000000E-01	8,295342627E-01	8,475503373E-01	2,076388613E+00	4,194630444E+00
6,25000000E-02	1,123769335E+00	9,268594686E-01	2,234451411E+00	não existe
3,12500000E-02	1,229237319E+00	9,721422850E-01	2,100380131E+00	8,988335444E-01
1,56250000E-02	1,204656336E+00	9,898333599E-01	1,793545398E+00	1,445073325E+00
7,81250000E-03	1,138554184E+00	9,960252002E-01	1,490281814E+00	1,347181395E+00
3,90625000E-03	1,081193343E+00	9,982998005E-01	1,274838706E+00	1,209598176E+00
1,95312500E-03	1,044054873E+00	9,992217516E-01	1,145833893E+00	1,114678804E+00
9,76562500E-04	1,022962133E+00	9,996287492E-01	1,075158667E+00	1,059937205E+00
4,88281250E-04	1,011724260E+00	9,998188252E-01	1,038157952E+00	1,030635196E+00
2,44140625E-04	1,005924170E+00	9,999105231E-01	1,019225962E+00	1,015486462E+00
1,220703125E-04	1,002977752E+00	9,999555352E-01	1,009650022E+00	1,007785727E+00
6,103515625E-05	1,001492815E+00	9,999778185E-01	1,004834319E+00	1,003903535E+00
3,051757813E-05	1,000747148E+00	9,999887700E-01	1,002419364E+00	1,001954298E+00
1,525878906E-05	1,000373797E+00	9,999934220E-01	1,001209977E+00	1,000977497E+00

Conforme a Tab. 13.1, à medida que se reduz o tamanho (h) dos elementos da malha, a ordem aparente (p_U) de $\lambda(\frac{1}{2})$ assume valores menor e maiores do que a ordem assintótica (p_L) do erro, atingindo um valor máximo em $h = 0,03125$, a partir do qual passa a ser superconvergente (subseção 5.1.2). A ordem aparente de λ_m é do tipo subconvergente (subseção 5.1.1) em qualquer h . À medida que se reduz h , a ordem aparente de λ_{DDS}^i assume valores maiores do que a ordem assintótica do erro, atingindo um valor máximo em $h = 0,0625$, a partir do qual passa a ser superconvergente (subseção 5.1.2). À medida que se reduz h , a ordem aparente de λ_{DDS-2}^i assume valores maior, indefinido, menor e maiores do que a ordem assintótica do erro; a partir de $h = 0,015625$, passa a ser superconvergente (subseção 5.1.2); na Fig. 13.2, o valor indefinido de p_U foi representado pelo valor zero.

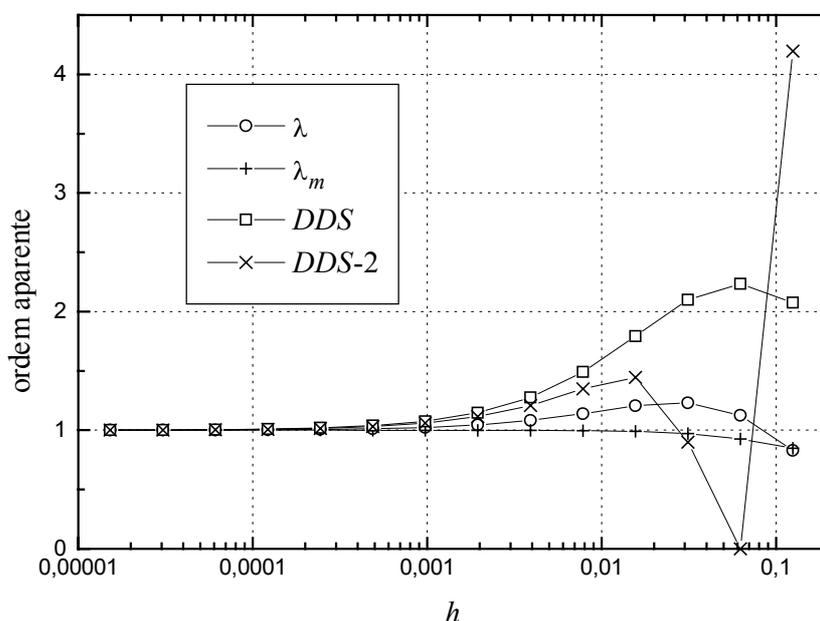


Figura 13.2 Ordem aparente das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i do Caso 9.

Na Tab. 13.2 são apresentadas as razões entre incerteza (U) e erro (E) para a solução numérica de λ_{DDS-2}^i calculadas com os estimadores de Richardson (U_{Ri}), Eq. (3.10), o estimador GCI (U_{GCI}), Eq. (3.31), o estimador bicoeficiente (U_{bi}), Eqs. (3.39) e (3.47), e o estimador tricoeficiente (U_{tri}), Eqs. (3.54) e (3.59). Para o cálculo de U_{GCI} usou-se $F_S = 3$, para U_{bi} , $p_V = 2$ e 3 , e para U_{tri} , $p_V = 2, 3$ e 4 . Para malhas grossas, todos os estimadores de erro subestimam ou superestimam muito o erro. Mas, conforme deduzido no Cap. 3, para $h \rightarrow 0$, a efetividade de todos os estimadores de erro tende aos valores esperados, isto é, à unidade para os estimadores de Richardson, bicoeficiente e tricoeficiente, e ao F_S para o estimador GCI .

13.3 CASO 10

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (13.1), (12.2) e (12.3) é obtida considerando-se (Ferziger e Peric, 1999): método de diferenças finitas; aproximação numérica das derivadas de 1ª e 2ª ordens da equação diferencial com diferença central; e malha

uniforme. Desta forma, substituindo-se as Eqs. (7.10) e (7.28), respectivamente, nas derivadas de primeira e segunda ordens da Eq. (13.1), obtém-se

$$Pe \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1})}{2h} = \frac{(\lambda_{j+1} + \lambda_{j-1} - 2\lambda_j)}{h^2} \quad (13.10)$$

Para esta equação, colocada na forma da Eq. (12.31), chega-se a

$$A_{j-1} = -\left(\frac{Pe}{2h} + \frac{1}{h^2}\right) \quad (13.11)$$

$$A_{j+1} = \frac{Pe}{2h} - \frac{1}{h^2} \quad (13.12)$$

com A_j dado pela Eq. (13.8).

Tabela 13.2 Razão entre incerteza (U) e erro (E) para λ_{DDS-2}^i do Caso 9.

h	$U_{Ri}(p_L) / E$	$U_{GCI}(p_L) / E$	U_{bi} / E	U_{Iri} / E
2,500000000E-01	2,390640270E+01	7,171920811E+01	não se aplica	não se aplica
1,250000000E-01	-4,272428194E+00	1,281728458E+01	1,895661508E+01	não se aplica
6,250000000E-02	1,143799548E+00	3,431398644E+00	4,959409124E+00	2,569852719E-02
3,125000000E-02	1,586939166E+00	4,760817497E+00	1,658585327E+00	2,894188681E-01
1,562500000E-02	1,397165713E+00	4,191497139E+00	1,060557469E+00	8,436745129E-01
7,812500000E-03	1,218125435E+00	3,654376305E+00	9,971794570E-01	9,775873704E-01
3,906250000E-03	1,112843036E+00	3,338529107E+00	9,968357788E-01	9,972350850E-01
1,953125000E-03	1,057207602E+00	3,171622806E+00	9,988962858E-01	9,996685352E-01
9,765625000E-04	1,028779169E+00	3,086337508E+00	9,996850287E-01	9,999599175E-01
4,882812500E-04	1,014430705E+00	3,043292116E+00	9,999163929E-01	9,999950901E-01
2,441406250E-04	1,007225288E+00	3,021675863E+00	9,999784912E-01	9,999993926E-01
1,220703125E-04	1,003615085E+00	3,010845256E+00	9,999945487E-01	9,99999264E-01
6,103515625E-05	1,001808133E+00	3,005424400E+00	9,999986087E-01	9,99999689E-01

Seguindo-se o procedimento apresentado na subseção 8.7.1 e com as Eqs. (7.11) e (7.29), obtém-se o erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (13.10), no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = \left(\frac{\Lambda_j^{iv}}{12} - Pe \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} \right) h^2 + \left(\frac{\Lambda_j^{vi}}{360} - Pe \frac{\Lambda_j^v}{120} \right) h^4 + \left(\frac{\Lambda_j^{viii}}{20160} - Pe \frac{\Lambda_j^{vii}}{5040} \right) h^6 + \dots \quad (13.13)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 2, 4, 6$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 2$.

A Fig. 13.3 apresenta o módulo do erro de discretização das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtido aplicando-se as Eqs. (8.37) a (8.40). As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 2, 4, 8, \dots, 8192$ elementos, o que equivale, de acordo com a Eq. (8.11), a $h = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \dots, \frac{1}{8192} = 0,5; 0,25; 0,125; \dots; (\approx 1,22 \times 10^{-4})$. Observa-se na Fig. 13.3 que as inclinações das curvas de erro em relação ao eixo das abscissas, ou suas ordens assintóticas (p_L), de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m e λ_{DDS-2}^i tendem ao mesmo valor, que é maior do que a inclinação de λ_{DDS}^i . Esta variável apresenta um mínimo local do erro em $h = 0,0625$.

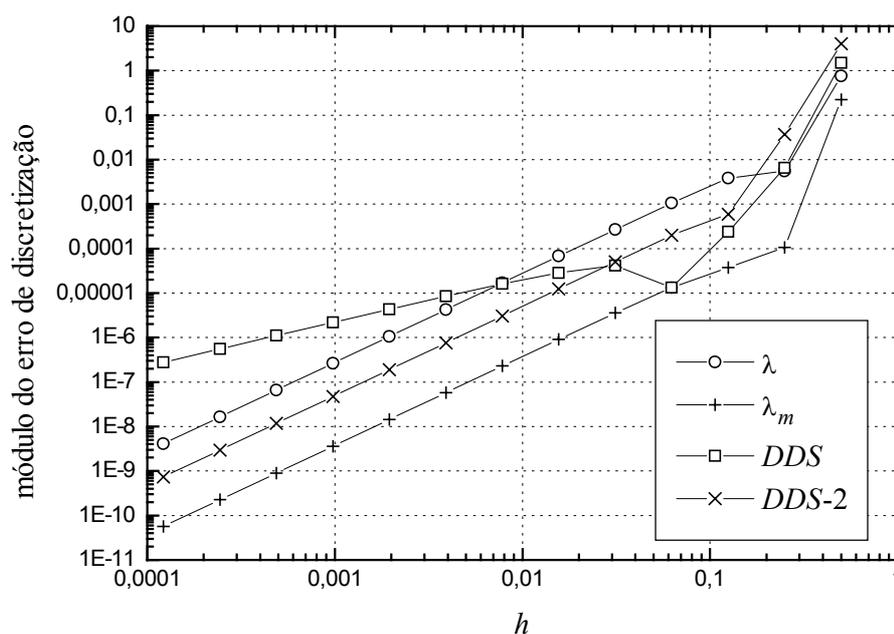


Figura 13.3 Erro de discretização das soluções numéricas de

$\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i do Caso 10.

A Tab. 13.3 apresenta a ordem aparente (p_U) das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtida com as Eqs. (4.25) e (4.26) para razão de refino (q) igual a dois. Esses resultados

também são mostrados na Fig. 13.4. Com base neles, conclui-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m e λ_{DDS-2}^i vale $p_L = 2$; esse resultado é idêntico à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, conforme a Eq. (13.13). A ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de λ_{DDS}^i vale $p_L = 1$; esse resultado é idêntico à ordem assintótica do erro de truncamento da aproximação numérica usada no cálculo de λ_{DDS}^i , conforme a Eq. (7.17), ou seja, esta ordem menor predomina sobre a ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada. Os valores indefinidos de p_U , na Tab. 13.3, foram representados pelo valor zero na Fig. 13.4.

Tabela 13.3 Ordem aparente das soluções numéricas de $\lambda(\frac{1}{2})$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i do Caso 10.

h	$\lambda(\frac{1}{2})$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
1,250000000E-01	não existe	1,060470210E+01	7,886762672E+00	6,764983055E+00
6,250000000E-02	não existe	não existe	4,642442421E+00	6,517309170E+00
3,125000000E-02	1,832421525E+00	1,314373225E+00	3,162559708E+00	1,418336398E+00
1,562500000E-02	1,968087314E+00	1,852144348E+00	não existe	1,971383773E+00
7,812500000E-03	1,992510083E+00	1,964349620E+00	4,927324739E-02	2,025944357E+00
3,906250000E-03	1,998156393E+00	1,991166945E+00	7,135176568E-01	2,021856946E+00
1,953125000E-03	1,999540878E+00	1,997796679E+00	8,822247258E-01	2,013067580E+00
9,765625000E-04	1,999885331E+00	1,999449899E+00	9,462065304E-01	2,007061634E+00
4,882812500E-04	1,999971374E+00	1,999860746E+00	9,742574607E-01	2,003662118E+00
2,441406250E-04	1,999993080E+00	1,999868049E+00	9,874041769E-01	2,001863826E+00
1,220703125E-04	1,999999120E+00	2,000444756E+00	9,937693970E-01	2,000941861E+00

Conforme a Tab. 13.3, a ordem aparente (p_U) de $\lambda(\frac{1}{2})$ é indefinida nos dois valores maiores de h , a partir dos quais passa a ser subconvergente (subseção 5.1.1). À medida que se reduz o tamanho (h) dos elementos da malha, a ordem aparente de λ_m assume valores maior, indefinido e menores do que a ordem assintótica (p_L) do erro, atingindo um valor mínimo em $h = 0,03125$, a partir do qual passa a ser subconvergente (subseção 5.1.1); o valor de p_U que é maior do que dois, na Tab. 13.3 em $h \approx 1,22 \times 10^{-4}$, deve-se provavelmente ao efeito do erro de arredondamento. À medida que se reduz h , a ordem aparente de λ_{DDS}^i assume valores maiores, indefinido e menores do que a ordem assintótica do erro, atingindo um valor mínimo em $h = 0,0078125$, a partir do qual passa a ser subconvergente (subseção 5.1.1). À medida que se reduz

h , a ordem aparente de λ_{DDS-2}^i assume valores maiores, menores e maiores do que a ordem assintótica (p_L) do erro; e para $h \leq 0,0078125$ passa a ser superconvergente (subseção 5.1.2).

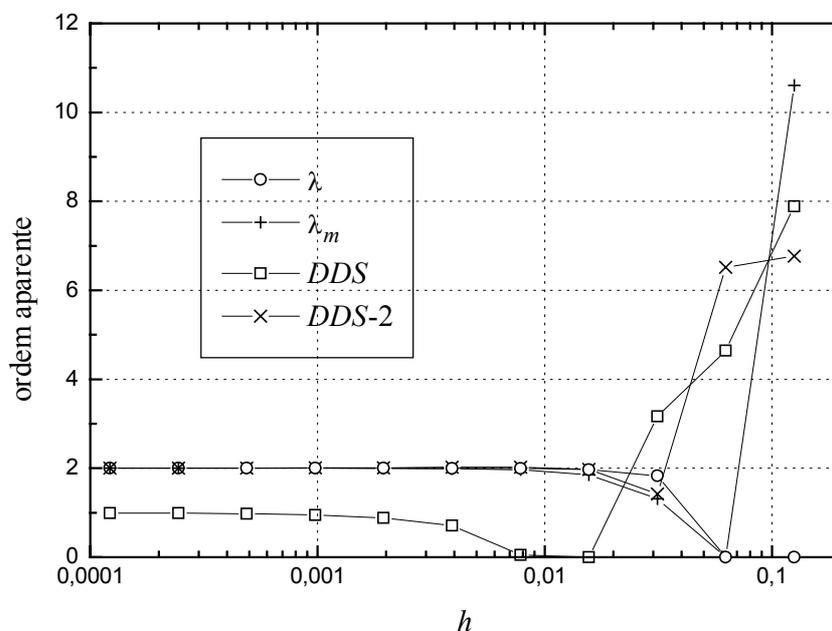


Figura 13.4 Ordem aparente das soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i do Caso 10.

Na Tab. 13.4 são apresentadas as razões entre incerteza (U) e erro (E) para a solução numérica de λ_{DDS-2}^i calculadas com os estimadores de Richardson (U_{Ri}), Eq. (3.10), o estimador GCI (U_{GCI}), Eq. (3.31), o estimador bicoeficiente (U_{bi}), Eqs. (3.39) e (3.47), e o estimador tricoeficiente (U_{tri}), Eqs. (3.54) e (3.59). Para o cálculo de U_{GCI} usou-se $F_S = 3$, para U_{bi} , $p_V = 2$ e 3, e para U_{tri} , $p_V = 2, 3$ e 4. Para malhas grossas, todos os estimadores de erro subestimam ou superestimam muito o erro. Mas, conforme deduzido no Cap. 3, para $h \rightarrow 0$, a efetividade de todos os estimadores de erro tende aos valores esperados, isto é, à unidade para os estimadores de Richardson, bicoeficiente e tricoeficiente, e ao F_S para o estimador GCI .

Tabela 13.4 Razão entre incerteza (U) e erro (E) para λ_{DDS-2}^i do Caso 10.

h	$U_{Ri}(p_L) / E$	$U_{GCI}(p_L) / E$	U_{bi} / E	U_{tri} / E
2,50000000E-01	3,566846977E+01	1,070054093E+02	não se aplica	não se aplica
1,25000000E-01	2,034718100E+01	6,104154300E+01	-2,841582728E+02	não se aplica
6,25000000E-02	6,657982048E-01	1,997394614E+00	-7,666392927E+00	4,873797229E+01
3,12500000E-02	9,858175682E-01	2,957452705E+00	1,172732621E+00	3,470704137E+00
1,56250000E-02	1,022645098E+00	3,067935294E+00	1,034122000E+00	9,895524581E-01
7,81250000E-03	1,017913400E+00	3,053740200E+00	1,007358551E+00	9,986276729E-01
3,90625000E-03	1,010514915E+00	3,031544746E+00	1,001700093E+00	9,998356770E-01
1,95312500E-03	1,005636711E+00	3,016910132E+00	1,000408031E+00	9,999799581E-01
9,76562500E-04	1,002911929E+00	3,008735788E+00	1,000099907E+00	9,999975220E-01
4,88281250E-04	1,001479157E+00	3,004437470E+00	1,000024659E+00	9,999996316E-01

13.4 RESUMO DO CAPÍTULO 13

No Caso 9, para as quatro variáveis numéricas de interesse (λ , λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i), a ordem assintótica ($p_L = 1$) do erro de discretização global é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação diferencial na forma discretizada. No Caso 10, para três das variáveis numéricas de interesse (λ , λ_m e λ_{DDS-2}^i), a ordem assintótica ($p_L = 2$) do erro de discretização global é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação diferencial na forma discretizada. Mas isso não se verificou na ordem assintótica do erro de discretização de λ_{DDS}^i , que vale $p_L = 1$ e cujo resultado é idêntico à ordem assintótica do erro de truncamento da aproximação numérica usada no cálculo de λ_{DDS}^i , ou seja, esta ordem menor predomina sobre a ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada.

Nos Casos 9 e 10, para as quatro variáveis numéricas de interesse (λ , λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i), observou-se a existência de um intervalo de tamanho (h) dos elementos da malha em que a ordem aparente é convergente quando $h \rightarrow 0$. Para malhas grossas, todos os estimadores de erro subestimam ou superestimam muito o erro. Mas, conforme deduzido no Cap. 3, para $h \rightarrow 0$, a efetividade de todos os estimadores de erro tende aos valores esperados, isto é, à unidade para os estimadores de Richardson, bicoeficiente e tricoeficiente, e ao F_S para o estimador GCI .

Parte II.

FECHAMENTO DA PARTE II

O fechamento da Parte II deste trabalho está dividido em três seções: escopo, conclusão e contribuições; descritas a seguir.

II.1 ESCOPO DA PARTE II

Conforme a Tab. II.1, foram apresentadas soluções analíticas e numéricas de oito equações diferenciais para as quais a variável independente é a coordenada x . Soluções analíticas exatas foram obtidas para a variável dependente (Λ) nas equações diferenciais, sua derivada primeira (Λ^i) e sua média ao longo do domínio de cálculo (Λ_m). Soluções numéricas foram obtidas para a variável dependente em $x = 1/2$, $\lambda(1/2)$, sua derivada primeira em $x = 0$, $(\lambda_{DDS}^i)_0$ e $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$, e sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m). Empregou-se o método de diferenças finitas com malhas unidimensionais e tamanho (h) dos seus elementos constante, ou seja, malhas uniformes, e seis tipos de aproximações numéricas definidas e deduzidas no Cap. 7.

As soluções numéricas foram obtidas considerando-se a existência de erros de discretização nos nós das malhas, além dos erros de truncamento produzidos pelos seis tipos de aproximações numéricas empregados. O erro de discretização é igual à soma do erro de truncamento com o erro de poluição. Portanto, não foram considerados os efeitos dos erros de iteração, de arredondamento e de programação que porventura possam existir.

II.2 CONCLUSÃO DA PARTE II

Em termos gerais, com base nos dez casos analisados, a conclusão da Parte II deste trabalho é a que se segue.

Tabela II.1 Casos abordados na Parte II.

caso	capítulo	equação diferencial	aproximações numéricas usadas na equação diferencial
1	8	$V \frac{d\Lambda}{dx} = 2x$	λ_{UDS}^i
2	8	$V \frac{d\Lambda}{dx} = S$	λ_{UDS}^i
3	9	$V \frac{d\Lambda}{dx} = 3x^2$	λ_{UDS}^i
4	10	$\frac{d\Lambda}{dx} = \Lambda + 2x - x^2$	λ_{UDS}^i
5	10	$\Lambda \frac{d\Lambda}{dx} = 2x^3$	λ_{UDS}^i
6	11	$V \frac{d\Lambda}{dx} = 3x^2$	λ_{CDS}^i
7	12	$\frac{d^2\Lambda}{dx^2} = 12x^2$	λ_{CDS}^{ii}
8	12	$\frac{d}{dx} \left(e^\Lambda \frac{d\Lambda}{dx} \right) = 0$	λ_{CDS}^i
9	13	$Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2}$	λ_{UDS}^i e λ_{CDS}^{ii}
10	13	$Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2}$	λ_{CDS}^i e λ_{CDS}^{ii}

Erro de Discretização (E):

- 1) As expressões para o erro de discretização (E) de λ , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_m , obtidas através da série de Taylor, avaliam corretamente o valor de E , na magnitude e no sinal, qualquer que seja o tamanho (h) dos elementos da malha, desde que se tenha a solução analítica para calculá-lo.
- 2) O valor do erro de discretização (E) tende a zero quando $h \rightarrow 0$. Portanto, todas as soluções numéricas são consistentes.

- 3) O erro de discretização (E) pode ser nulo em $h \neq 0$, mesmo que ele tenha sido produzido apenas por erros de truncamento, isto é, sem erros de iteração, de arredondamento e de programação.

Ordem Assintótica (p_L) do Erro de Discretização (E):

- 1) Genericamente, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) global, de qualquer variável numérica (ϕ), é igual a menor ordem assintótica entre aquelas dos erros de truncamento da equação diferencial na forma discretizada e da aproximação numérica usada no cálculo de ϕ . Em alguns casos particulares, isso não se verificou.
- 2) Para uma mesma equação diferencial, as ordens assintóticas (p_L) dos erros de discretização (E) das variáveis numéricas (λ , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_m) podem ser todas iguais ou diferentes entre si.

Degeneração da Ordem Assintótica (p_L):

- 1) A Tab. II.2 resume a degeneração da ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) local verificada nos casos analisados na Parte II deste trabalho.
- 2) Um modelo que se propõe para prever a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) local, de equações diferenciais que tenham apenas um termo advectivo ou um termo difusivo, é: adicionar a ordem assintótica do erro de truncamento da equação diferencial na forma discretizada à ordem da derivada do termo que é aproximado numericamente. A degeneração ou a redução da ordem do erro de discretização local é igual à ordem da derivada do termo que é aproximado numericamente.

Tabela II.2 Degeneração da ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) local.

termo	aproximação numérica	p_L de E local	p_L de E global
advecção	λ_{UDS}^i	2	1
advecção	λ_{CDS}^i	3	2
difusão	λ_{CDS}^{ii}	4	2

Analogia entre Erro de Truncamento (ε_τ) e Erro de Discretização (E):

- 1) Em termos gerais, para qualquer equação diferencial e tamanho (h) dos elementos da malha, não é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento (ε_τ), Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2). Isso ocorre porque os coeficientes de E podem ser função de h , enquanto que os coeficientes de ε_τ não dependem de h .
- 2) A implicação disso é que estimadores de erro com maior número de coeficientes, como os estimadores bicoeficiente e tricoeficiente, não garantem incertezas mais acuradas ou confiáveis.
- 3) Essa analogia é válida apenas para equações diferenciais muito simples ou no limite quando $h \rightarrow 0$.

Intervalo Convergente da Ordem Aparente (p_U):

- 1) Para todos os casos e variáveis numéricas, verificou-se a existência de um intervalo convergente da ordem aparente (p_U) quando $h \rightarrow 0$, situação em que p_U tende monotonicamente à ordem assintótica (p_L).
- 2) Porém, em malhas grossas, isto é, fora do intervalo convergente, p_U pode assumir valores muito maiores ou menores do que a ordem assintótica (p_L), valores negativos ou até ser indefinido. Nesta situação, todos os estimadores de erro vistos (delta, de Richardson, GCI , bicoeficiente, tricoeficiente e convergente) podem subestimar ou superestimar em muito o erro de discretização, isto é, podem ser inacurados e sem confiabilidade.
- 3) Dentro do intervalo convergente de p_U , estimadores de erro com maior número de coeficientes, como os estimadores bicoeficiente e tricoeficiente, resultam em incertezas mais acuradas do que o estimador de Richardson.

II.3 CONTRIBUIÇÕES NA PARTE II

As contribuições realizadas ao longo da Parte II deste trabalho podem ser resumidas nos seguintes pontos:

- 1) Exemplificou-se que o erro de discretização (E) pode ser nulo em $h \neq 0$, mesmo ele sendo produzido apenas por erros de truncamento, isto é, sem erros de iteração, de arredondamento e de programação.
- 2) Genericamente, verificou-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E), de qualquer variável numérica (ϕ), é igual a menor ordem assintótica entre aquelas dos erros de

truncamento da equação diferencial na forma discretizada e da aproximação numérica usada no cálculo de ϕ .

- 3) Mostrou-se que, em termos gerais, para qualquer equação diferencial e tamanho (h) dos elementos da malha, não é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento (ε_T), Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2).
- 4) Verificou-se que em malhas grossas, isto é, fora do intervalo convergente de p_U , todos os estimadores de erro vistos (delta, de Richardson, GCI , bicoeficiente, tricoeficiente e convergente) podem subestimar ou superestimar em muito o erro de discretização, ou seja, podem ser inaccurados e sem confiabilidade.
- 5) Introduziu-se o conceito de erro de poluição (e) e analisou-se o seu efeito sobre o erro de discretização (E) e sua ordem assintótica (p_L).
- 6) Foram introduzidos os conceitos de erro de discretização (E) local e global.
- 7) Mostrou-se que existe degeneração da ordem assintótica (p_L) do erro de discretização local, conforme a Tab. II.2.

Parte III.

ERRO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS OBTIDAS EM MALHAS NÃO-UNIFORMES

Na Parte II deste trabalho, as aproximações numéricas descritas no Cap. 7 foram feitas utilizando-se valores nodais obtidos das próprias soluções numéricas e, portanto, com erros, mas sobre malhas uniformes. Para problemas unidimensionais, a situação mais prática, que emprega malhas não-uniformes, é examinada nesta Parte III, que envolve os Caps. 14 a 20. No Cap. 14 são reescritas as seis aproximações numéricas apresentadas no Cap. 7. No Cap. 15 são definidas quatro formas de se refinar uma malha unidimensional não-uniforme. Nos Caps. 16 a 19 são apresentados os resultados da solução numérica de três equações diferenciais que envolvem advecção e difusão de um escalar, bem como de advecção-difusão sobre malhas não-uniformes. No Cap. 20 é definido o conceito de soluções numéricas coerentes, são apresentados o procedimento para verificar quando duas soluções numéricas atendem a este conceito e exemplos de aplicação deste procedimento. O objetivo é aumentar a confiabilidade das estimativas de erro, principalmente em malhas muito grossas.

Capítulo 14.

**APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS E SEUS ERROS DE
TRUNCAMENTO E DE POLUIÇÃO EM MALHAS NÃO-UNIFORMES**

O objetivo deste capítulo é reescrever, para malhas não-uniformes exemplificadas na Fig. 14.1, as seis aproximações numéricas da Tab. 2.1 apresentadas no Cap. 7. Com este fim, expandindo-se a série de Taylor, Eq. (2.3), para os nós ' $j-1$ ', ' $j+1$ ' e ' $j+2$ ' da malha não-uniforme mostrada na Fig. 14.1, chega-se a

$$\Lambda_{j-1} = \Lambda_j - \Lambda_j^i h_j + \Lambda_j^{ii} \frac{h_j^2}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h_j^3}{6} + \dots \quad (14.1)$$

$$\Lambda_{j+1} = \Lambda_j + \Lambda_j^i h_{j+1} + \Lambda_j^{ii} \frac{h_{j+1}^2}{2} + \Lambda_j^{iii} \frac{h_{j+1}^3}{6} + \dots \quad (14.2)$$

$$\Lambda_{j+2} = \Lambda_j + \Lambda_j^i (h_{j+1} + h_{j+2}) + \Lambda_j^{ii} \frac{(h_{j+1} + h_{j+2})^2}{2} + \Lambda_j^{iii} \frac{(h_{j+1} + h_{j+2})^3}{6} + \dots \quad (14.3)$$

onde j é o nó genérico sobre o qual se realizam as aproximações numéricas; os três pontos indicam uma série infinita; e os tamanhos (h) dos elementos da malha são dados por

$$h_j = x_j - x_{j-1} \quad (14.4)$$

$$h_{j+1} = x_{j+1} - x_j \quad (14.5)$$

$$h_{j+2} = x_{j+2} - x_{j+1} \quad (14.6)$$

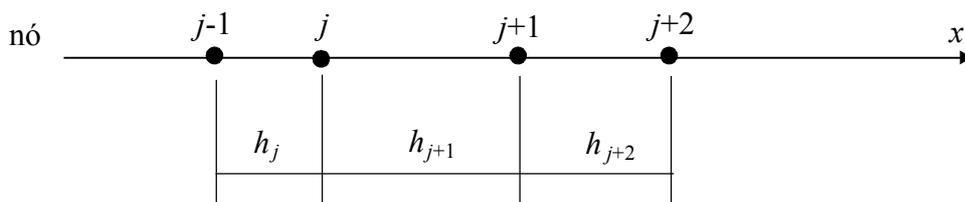


Figura 14.1 Malha unidimensional não-uniforme.

As expressões para as aproximações numéricas da Tab. 2.1, e para seus erros de truncamento (ε) e de poluição (e) são deduzidas nas seções 14.1 a 14.6, a seguir, e aplicadas ao longo dos capítulos que compõem a Parte III deste trabalho.

14.1 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 1 PONTO A MONTANTE: λ_{UDS}^i

Isolando-se Λ_j^i da Eq. (14.1), obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h_j} + \Lambda_j^{ii} \frac{h_j}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h_j^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h_j^3}{24} - \dots \quad (14.7)$$

onde Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª, 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j , e h_j é definido na Eq. (14.4). Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.7), obtém-se a Eq. (7.3). A aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a montante resulta em

$$(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h_j} \quad (14.8)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{UDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{UDS})_j = \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}h_j - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6}h_j^2 + \frac{\Lambda_j^{iv}}{24}h_j^3 - \dots \quad (14.9)$$

$$e(\lambda_{UDS})_j = \frac{(E_j - E_{j-1})}{h_j} \quad (14.10)$$

onde E_j e E_{j-1} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_j e λ_{j-1} , respectivamente, e o erro de discretização de λ_{UDS}^i é dado pela Eq. (7.7).

14.2 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM DIFERENÇA CENTRAL: λ_{CDS}^i

Embora possa não ser estritamente correto, o termo “diferença central” é empregado aqui e na seção 14.5, mesmo em malhas não-uniformes, porque se usa um nó a montante e outro a jusante na obtenção da aproximação numérica do nó de interesse. Assim, subtraindo-se a Eq. (14.1) de (14.2) e isolando-se Λ_j^i do resultado, obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} + \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (14.11)$$

onde Λ_j^{ii} e Λ_j^{iii} são, respectivamente, as derivadas de 2ª e 3ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j , e h_j e h_{j+1} são definidos nas Eqs. (14.4) e (14.5). Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.11), obtém-se a Eq. (7.9). A aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com diferença central resulta em

$$(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} \quad (14.12)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{CDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (14.13)$$

$$e(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{(E_{j+1} - E_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} \quad (14.14)$$

onde E_{j+1} e E_{j-1} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_{j+1} e λ_{j-1} , respectivamente,

Não existe um único parâmetro de h para reduzir a Eq. (14.13) à Eq. (2.2). Mas mesmo assim, observa-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)$ são $p_V = 1, 2, \text{ etc, e}$, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 1$. Desta forma, **o erro de truncamento da aproximação numérica λ_{CDS}^i é de 1ª ordem**. Esse resultado difere daquele obtido com malhas uniformes, Eq. (7.11), cujo $p_L = 2$. A partir das Eqs. (14.1) e (14.2), mesmo para malhas não-uniformes, é possível obter uma aproximação numérica cujo $p_L = 2$. Mas, neste caso, além de λ_{j+1} e λ_{j-1} , o valor de λ_j também é envolvido na aproximação numérica. Em outras palavras, passa-se a ter uma aproximação numérica de três pontos (Hirsch, 1988) e não de dois, Eq. (14.12), que é o interesse aqui, por ser uma aproximação semelhante àquela usada em malhas uniformes.

14.3 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 1 PONTO A JUSANTE: λ_{DDS}^i

Isolando-se Λ_j^i da Eq. (14.2), obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_j)}{h_{j+1}} - \Lambda_j^{ii} \frac{h_{j+1}}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h_{j+1}^2}{6} - \Lambda_j^{iv} \frac{h_{j+1}^3}{24} - \dots \quad (14.15)$$

onde Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª, 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.15), obtém-se a Eq. (7.15). A aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a jusante resulta em

$$(\lambda_{DDS}^i)_j = \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_j)}{h_{j+1}} \quad (14.16)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{DDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_j = -\frac{\Lambda_j^{ii}}{2}h_{j+1} - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6}h_{j+1}^2 - \frac{\Lambda_j^{iv}}{24}h_{j+1}^3 - \dots \quad (14.17)$$

$$e(\lambda_{DDS}^i)_j = \frac{(E_{j+1} - E_j)}{h_{j+1}} \quad (14.18)$$

onde o erro de discretização de λ_{DDS}^i é dado pela Eq. (7.19).

14.4 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 2 PONTOS A JUSANTE: λ_{DDS-2}^i

A partir das Eqs. (14.2) e (14.3), pode-se deduzir uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\begin{aligned} \Lambda_j^i &= \frac{[(1+r_j)^2\Lambda_{j+1} - (2+r_j)r_j\Lambda_j - \Lambda_{j+2}]}{r_j(1+r_j)h_{j+1}} + \Lambda_j^{iii}\frac{(1+r_j)}{6}h_{j+1}^2 \\ &+ \Lambda_j^{iv}\frac{(1+r_j)(2+r_j)}{24}h_{j+1}^3 + \dots \end{aligned} \quad (14.19)$$

onde

$$r_j = \frac{h_{j+2}}{h_{j+1}} \quad (14.20)$$

e Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j , e h_{j+1} e h_{j+2} são definidos nas Eqs. (14.5) e (14.6). Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.19), obtém-se a Eq. (7.21). A aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com dois pontos a jusante resulta em

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \frac{[(1+r_j)^2\lambda_{j+1} - (2+r_j)r_j\lambda_j - \lambda_{j+2}]}{r_j(1+r_j)h_{j+1}} \quad (14.21)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{DDS-2}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \Lambda_j^{iii} \frac{(1+r_j)}{6} h_{j+1}^2 + \Lambda_j^{iv} \frac{(1+r_j)(2+r_j)}{24} h_{j+1}^3 + \dots \quad (14.22)$$

$$e(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \frac{[(1+r_j)^2 E_{j+1} - (2+r_j)r_j E_j - E_{j+2}]}{r_j(1+r_j)h_{j+1}} \quad (14.23)$$

onde E_{j+1} , E_j e E_{j+2} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_{j+1} , λ_j e λ_{j+2} , respectivamente, e o erro de discretização de λ_{DDS-2}^i é dado pela Eq. (7.25).

Não existe um único parâmetro de h para reduzir a Eq. (14.22) à Eq. (2.2). Mas, mesmo assim, observa-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$ são $p_V = 2, 3$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 2$.

14.5 DERIVADA DE 2ª ORDEM COM DIFERENÇA CENTRAL: λ_{CDS}^{ii}

Com a multiplicação da Eq. (14.1) por h_{j+1} e da Eq. (14.2) por h_j , com a adição dos resultados e o isolamento de Λ_j^{ii} , obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 2ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^{ii} = 2 \frac{[h_{j+1}\Lambda_{j-1} + h_j\Lambda_{j+1} - (h_j + h_{j+1})\Lambda_j]}{(h_j + h_{j+1})h_j h_{j+1}} + \frac{\Lambda_j^{iii}}{3}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (14.24)$$

onde Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.24), obtém-se a Eq. (7.27). A aproximação numérica da derivada de 2ª ordem com diferença central resulta em

$$(\lambda_{CDS}^{ii})_j = 2 \frac{[h_{j+1}\lambda_{j-1} + h_j\lambda_{j+1} - (h_j + h_{j+1})\lambda_j]}{(h_j + h_{j+1})h_j h_{j+1}} \quad (14.25)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})$, e de poluição, $e(\lambda_{CDS}^{ii})$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{\Lambda_j^{iii}}{3}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (14.26)$$

$$e(\lambda_{CDS}^i)_j = 2 \frac{[h_{j+1}E_{j-1} + h_jE_{j+1} - (h_j + h_{j+1})E_j]}{(h_j + h_{j+1})h_jh_{j+1}} \quad (14.27)$$

onde o erro de discretização de λ_{CDS}^i é dado pela Eq. (7.31).

Não existe um único parâmetro de h para reduzir a Eq. (14.26) à Eq. (2.2). Mas mesmo assim, observa-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)$ são $p_V = 1, 2$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

14.6 MÉDIA DA VARIÁVEL DEPENDENTE: λ_m

Define-se a solução analítica exata da média da variável dependente (Λ_m) ao longo do domínio de cálculo através da Eq. (2.28). A solução analítica exata da integração numérica da variável dependente (Λ), obtida pela regra do trapézio (Pletcher *et al.*, 1988) ao longo do domínio de cálculo, é dada por

$$\Lambda_m = \frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N h_j (\Lambda_{j-1} + \Lambda_j) - \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \left(\Lambda_{j-1/2}^{ii} \frac{h_j^3}{12} + \Lambda_{j-1/2}^{iv} \frac{h_j^5}{480} + \dots \right) \quad (14.28)$$

onde $\Lambda_{j-1/2}^{ii}$ e $\Lambda_{j-1/2}^{iv}$ são, respectivamente, as derivadas de 2ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) em ' $j-1/2$ ', isto é, na coordenada média entre os nós ' $j-1$ ' e j ; h_j é definido pela Eq. (14.4); N é o número total de elementos da malha; sendo que o primeiro ($j = 0$) e o último nós ($j = N$) da malha estão sobre os contornos do domínio. Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.28), obtém-se a Eq. (7.32). A aproximação numérica da média da variável dependente resulta em

$$\lambda_m = \frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N h_j (\lambda_{j-1} + \lambda_j) \quad (14.29)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_m)$, e de poluição, $e(\lambda_m)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_m) = -\frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \left(\Lambda_{j-1/2}^{ii} \frac{h_j^3}{12} + \Lambda_{j-1/2}^{iv} \frac{h_j^5}{480} + \dots \right) \quad (14.30)$$

$$e(\lambda_m) = \frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N h_j (E_{j-1} + E_j) \quad (14.31)$$

onde o erro de discretização da aproximação numérica da média da variável dependente é dado pela Eq. (7.36).

14.7 RESUMO DO CAPÍTULO 14

O caso prático das simulações numéricas, isto é, quando a própria variável dependente armazenada nos nós da malha contém erro de discretização, foi abordado genericamente neste capítulo para malhas não-uniformes. Nesse caso, o erro de discretização de cada aproximação numérica é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição. As expressões das aproximações numéricas (λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m) e de seus erros de truncamento (ε) se reduzem àquelas do Cap. 7 se os tamanhos (h) dos elementos da malha forem constantes, como na Fig. 2.1.

Foram apresentados seis tipos de aproximações numéricas (λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m) para três variáveis diferentes: as derivadas de primeira e segunda ordem da variável dependente (Λ) nos modelos matemáticos, Λ^i e Λ^{ii} ; e a média da variável dependente ao longo do domínio de cálculo, Λ_m . Também foram apresentadas as expressões genéricas para o erro de truncamento (ε) e o erro de poluição (e) destas seis aproximações numéricas, ou seja, as estimativas de erro *a priori*. Foram definidas e obtidas as ordens assintótica (p_L) e verdadeiras (p_V) dos erros de truncamento, resumidas na Tab. 14.1. As expressões dos erros de truncamento das aproximações numéricas de λ_{CDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_{CDS}^{ii} não são reduzíveis à equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2).

Tabela 14.1 Valores previstos para as ordens verdadeiras (p_V) e assintótica (p_L) dos erros de truncamento para malhas não-uniformes.

tipo de variável	solução numérica (ϕ)	tipo de aproximação numérica	ordens verdadeiras (p_V)	ordem assintótica (p_L)
derivada de 1ª ordem da variável dependente	λ_{UDS}^i	um ponto a montante	1, 2, 3, ...	1
	λ_{CDS}^i	diferença central	1, 2, 3, ...	1
	λ_{DDS}^i	um ponto a jusante	1, 2, 3, ...	1
	λ_{DDS-2}^i	dois pontos a jusante	2, 3, 4, ...	2
derivada de 2ª ordem da variável dependente	λ_{CDS}^{ii}	diferença central	1, 2, 3, ...	1
média da variável dependente	λ_m	regra do trapézio	2, 4, 6, ...	2

Capítulo 15.

TIPOS DE REFINO DE MALHAS NÃO-UNIFORMES

São definidas, a seguir, quatro formas diferentes de se refinar uma malha unidimensional não-uniforme de diferenças finitas, exemplificada na Fig. 14.1. Estes quatro tipos de refino são usados na Parte III deste trabalho para demonstrar os seus efeitos sobre os erros de truncamento e de discretização, bem como sobre as ordens desses erros.

15.1 REFINO POR SUBDIVISÃO UNIFORME

O refino por subdivisão uniforme é definido pela subdivisão de cada elemento da malha grossa (g) em q elementos iguais na malha fina (f). Ele é exemplificado na Fig. 15.1, onde h é a distância entre dois nós consecutivos ou o tamanho de cada elemento da malha; os subíndices numéricos indicam o número do nó; os subíndices g e f referem-se respectivamente às malhas grossa (g) e fina (f); e q é a razão de refino da malha grossa, que deve valer $q = 2, 3, \dots$, isto é, números inteiros positivos maiores ou iguais a dois. O tamanho de cada elemento da malha fina (h_f), dentro de cada elemento da malha grossa (h_g), é calculado por

$$(h_f)_{j,g} = \frac{h_{j,g}}{q} \quad (15.1)$$

onde ' j,g ' é o número do elemento da malha grossa.

O refino por subdivisão uniforme é sugerido por Roache (1994) para estimar erros de discretização em malhas multidimensionais não-uniformes. Neste tipo de refino, os nós da malha fina coincidem com todos os nós da malha grossa com uma frequência igual à razão de refino de malha (q). Para o primeiro elemento da malha grossa na Fig. 15.1, por exemplo: $h_{1,f} + h_{2,f} = h_{1,g}$, para $q = 2$.

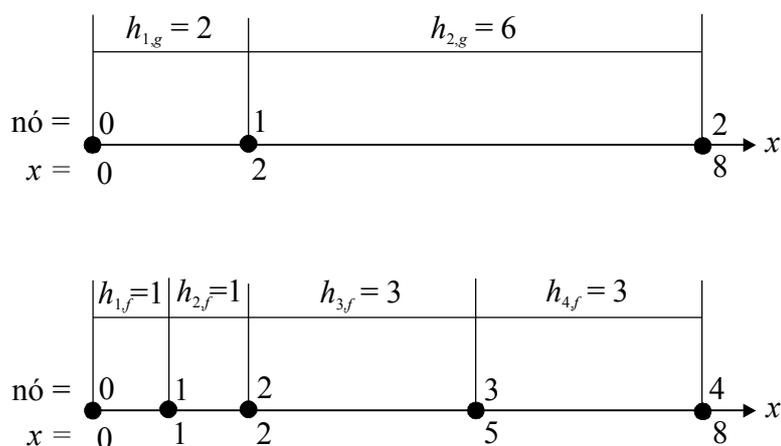


Figura 15.1 Refino de malha não-uniforme por subdivisão uniforme com $q = 2$.

15.2 REFINO IRREGULAR

O refino irregular é caracterizado quando não existe qualquer parâmetro com valor constante que relacione as malhas grossa e fina. Pode haver coincidência entre coordenadas de nós da malha grossa e nós da malha fina, como no exemplo da Fig. 15.2. Também pode não haver coincidência alguma, exceto entre nós dos contornos, conforme o exemplo da Fig. 15.3.

A razão de refino (q) para malhas unidimensionais com refino irregular é calculada através de (Roache, 1994)

$$q = \frac{N_f}{N_g} \quad (15.2)$$

onde N_f e N_g são, respectivamente, o número de elementos das malhas fina e grossa. Portanto, neste tipo de refino, a razão de refino também pode assumir valores reais, ou seja, $q > 1$. O refino irregular é muito empregado com malhas não-estruturadas (Ferziger e Peric, 1999; Maliska, 1995). Um exemplo pode ser visto no trabalho de Santos *et al.* (1996).

Em vez de se refinar a malha grossa de forma irregular, também se pode realizar a operação inversa, ou seja, partir da malha fina e engrossá-la. Isso é feito através da eliminação de nós alternados da malha fina, no caso de $q = 2$. Um exemplo dessa estratégia é o trabalho de Jameson e Martinelli (1998).

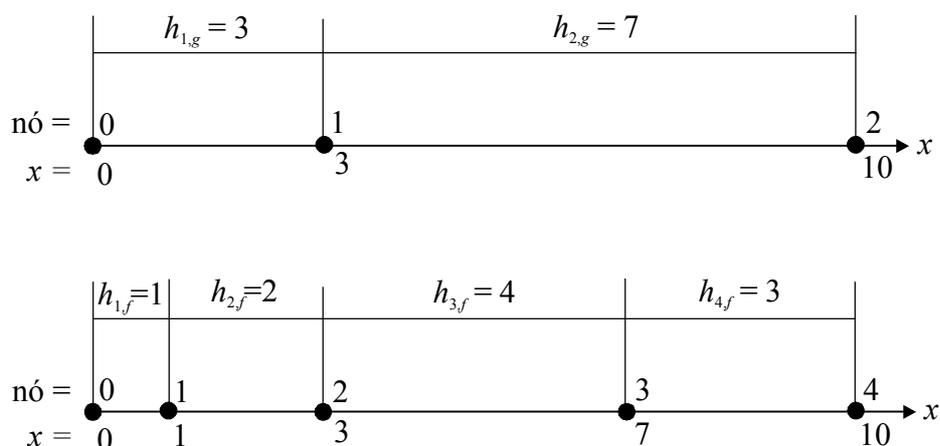


Figura 15.2 Refino irregular de malha não-uniforme, com coincidência entre nós das malhas grossa e fina: $x_{2,f} = x_{1,g}$.

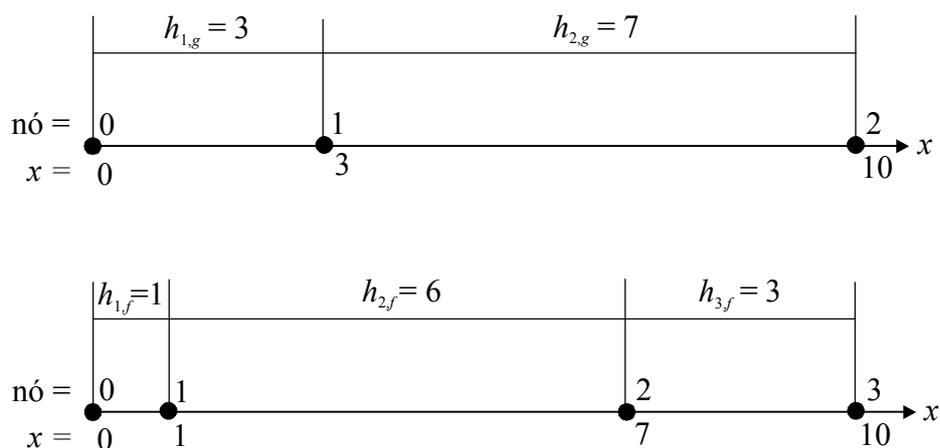


Figura 15.3 Refino irregular de malha não-uniforme, sem coincidência entre nós das malhas grossa e fina: $x_{1,f} \neq x_{1,g}$ e $x_{2,f} \neq x_{1,g}$.

15.3 REFINO COM PROGRESSÃO GEOMÉTRICA

No refinamento com progressão geométrica (*PG*), os nós da malha estão distribuídos no domínio de cálculo conforme uma *PG*. Além disso, os nós da malha fina coincidem com todos os nós da malha grossa com uma frequência igual à razão de refinamento de malha (q). O caso de $q = 2$

(Ferziger e Peric, 1999) é exemplificado na Fig. 15.4, onde os nós da malha fina coincidem com todos os nós da grossa, de dois em dois. Neste tipo de refino, as razões das duas progressões geométricas devem estar relacionadas por

$$r_f = (r_g)^{1/q} \quad (15.3)$$

onde r_f e r_g são, respectivamente, as razões da progressão geométrica das malhas fina e grossa. Os elementos de cada malha (h_j) são obtidos de

$$h_j = h_{j-1}r \quad (15.4)$$

ou

$$h_j = h_1 r^{j-1} \quad (15.5)$$

onde h_1 é o tamanho do primeiro elemento da malha. A relação entre o tamanho do domínio de cálculo (L) e seus elementos é obtida da soma dos termos de uma progressão geométrica (Bronstein e Semendiaev, 1979), isto é,

$$L = h_1 \frac{(r^N - 1)}{(r - 1)} \quad (15.6)$$

onde N é o número total de elementos da malha. A partir da Eq. (15.4) ou (15.5), percebe-se que, para a razão da progressão geométrica igual à unidade, obtém-se uma malha uniforme.

Para a equação de advecção-difusão, Eq. (13.1), Ferziger e Peric (1999) verificaram que a ordem do erro de discretização da variável dependente, segundo a média da norma l_1 (Kreyszig, 1999) tende a dois para malhas não-uniformes refinadas de acordo com a Eq. (15.3) e $q = 2$. Eles empregaram o método de diferenças finitas com diferença central. A malha mais grossa, com 10 elementos e $r = 0,7$, foi refinada até 320 elementos, que resulta em $r = 0,989$.

Usando-se o método de volumes finitos com diferença central, Hortmann *et al.* (1990) resolveram problemas bidimensionais de convecção natural, numa cavidade quadrada, com malhas não-uniformes de 10x10 a 640x640 volumes. As malhas foram geradas segundo

progressões geométricas variando de $r = 1,3524$, na malha 10×10 , a $r = 1,0047$, na malha 640×640 . Neste trabalho de Hortmann *et al.* (1990) são apresentadas tabelas com resultados de variáveis locais e globais para as diversas malhas empregadas. Esses resultados permitem calcular a ordem aparente. Para a malha mais fina, são obtidos $p_U = 2,003$ e $2,000$ para uma variável global e local, respectivamente.

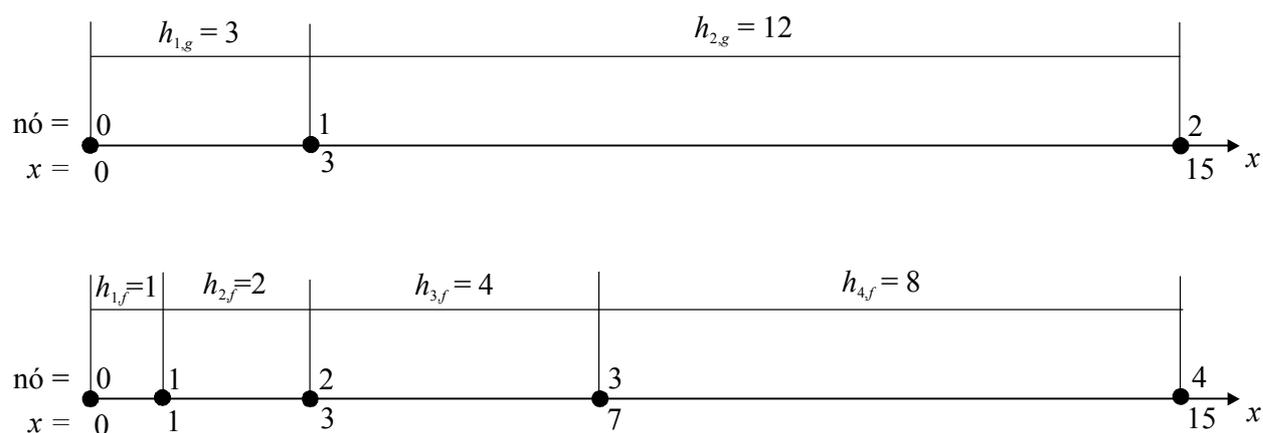


Figura 15.4 Refino de malha não-uniforme com progressão geométrica para $q = 2$.

15.4 REFINO COM Δh CONSTANTE

Considere-se uma malha na qual a variação do tamanho dos elementos subsequentes é constante, ou seja,

$$\Delta h_j = h_j - h_{j+1} = \text{constante} \quad (15.7)$$

O refinamento de malhas com Δh constante é caracterizado quando a razão de refinamento (q) entre as malhas grossa (g) e fina (f) é

$$q = \frac{\Delta h_g}{\Delta h_f} \quad (15.8)$$

onde um exemplo é mostrado na Fig. 15.5.

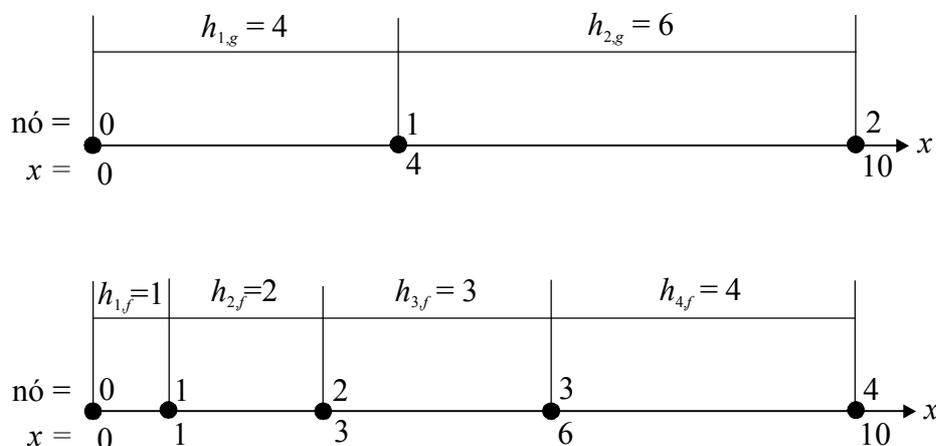


Figura 15.5 Refino com Δh constante na malha inteira; $\Delta h_g = -2$ e $\Delta h_f = -1 \rightarrow q = 2$.

15.5 PREVISÕES DA LITERATURA

Conforme se relatou na seção 15.3 e se relata nos capítulos seguintes, para diferença central, a ordem do erro de discretização tende a dois. Este resultado é obtido através de experimentos numéricos com malhas uniformes e não-uniformes, e vale para as aproximações numéricas das derivadas de 1^a e 2^a ordens (λ_{CDS}^i e λ_{CDS}^{ii}) com diferença central, mostradas nas seções 14.2 e 14.5. Entretanto, segundo as previsões teóricas de diversos autores (Pepper e Baker, 1988; Ferziger e Peric, 1999; Hoffman, 1982; Fletcher, 1997), a ordem do erro de truncamento de λ_{CDS}^i é igual à unidade para malhas não-uniformes. Isso parece evidente da Eq. (14.13). Também segundo as previsões teóricas de diversos autores (Pepper e Baker, 1988; Ferziger e Peric, 1999; Hirsch, 1988; Fletcher, 1997; Tannehill *et al.*, 1997), a ordem do erro de truncamento de λ_{CDS}^{ii} é igual à unidade para malhas não-uniformes. Isso também parece evidente da Eq. (14.26).

Aparentemente, existe discordância entre as previsões teóricas e os resultados experimentais para a ordem do erro de aproximações numéricas por diferença central em malhas não-uniformes. Ao longo dos próximos capítulos da Parte III deste trabalho será explicado e demonstrado que para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem do erro de

discretização da variável dependente da equação diferencial seja igual à ordem do erro de truncamento da equação discretizada. Sendo assim, também é mostrado que as previsões baseadas na série de Taylor coincidem com os resultados de experimentos numéricos em todos os casos abordados e que não existe discordância alguma entre previsões teóricas e resultados experimentais.

CASO 11: ADVECÇÃO COM UDS EM MALHA NÃO-UNIFORME

Ao longo dos próximos capítulos, Caps. 16 a 19, são considerados três equações diferenciais. Além dos itens 1, 2 e 6 do início do Cap. 8, são feitos e apresentados os seguintes tipos de análises e resultados:

- 10) apresentação de tabelas do erro de discretização, em função dos tamanhos (h) dos elementos da malha para a variável dependente em $x = 1/2$, $\lambda(1/2)$, sua derivada primeira, obtida de duas formas em $x = 0$, $(\lambda_{DDS}^i)_0$ e $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$, e sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m) ;
- 11) apresentação da ordem efetiva (p_E), em função de h , e do erro de discretização de $\lambda(1/2)$, $(\lambda_{DDS}^i)_0$, $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$ e (λ_m) ;
- 12) obtenção da ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de $\lambda(1/2)$, $(\lambda_{DDS}^i)_0$, $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$ e (λ_m) com base na tendência da ordem efetiva (p_E) para $h \rightarrow 0$; e
- 13) dedução da ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente, de termos advectivos e difusivos aproximados com diferença central em malhas não-uniformes.

O problema da advecção de um escalar é abordado neste capítulo. O modelo matemático é o mesmo do Cap. 8. Portanto, ele é definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2) e sua solução analítica exata da variável dependente (Λ) é dada na Eq. (8.3). É analisado o erro da solução numérica da variável dependente. O modelo numérico é constituído pelo método de diferenças finitas, com aproximação numérica de 1^a ordem a montante e malhas não-uniformes. Mostra-se que o uso da série de Taylor permite calcular corretamente os erros de discretização da solução numérica da variável dependente, mesmo para malhas não-uniformes e quando existem erros nodais, mas desde que se conheça a solução analítica exata (Λ) para a obtenção dos erros de truncamento (ε) envolvidos. Também se mostra que o tipo de refino de malha afeta a magnitude do erro de discretização e a sua ordem efetiva. Finalmente, mostra-se que para refino de malha não-uniforme por subdivisão uniforme, a ordem efetiva do erro de discretização é igual à unidade.

Este é o mesmo resultado obtido com malhas uniformes e também é igual à ordem do erro de truncamento da equação discretizada.

16.1 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2) é obtida considerando-se o mesmo modelo numérico empregado na seção 8.3 mas para malhas não-uniformes. Desta forma, com a Eq. (14.8) em (8.1), tem-se

$$V \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h_j} = 2x_j \quad (16.1)$$

ou

$$\lambda_j = \lambda_{j-1} + \frac{2}{V} x_j h_j \quad (16.2)$$

onde x_j é a coordenada do nó j , Fig. 14.1, h_j é a distância entre os nós j e ' $j-1$ ', também denominado de tamanho do elemento da malha, definido pela Eq. (14.4), e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. Conforme a Eq. (16.2), λ_j depende de λ_{j-1} , além de x_j , V e h_j . De acordo com a condição de contorno dada pela Eq. (8.2), a Eq. (16.2) resulta em

$$\lambda_j = \sum_{k=1}^j \left(\frac{2}{V} x_k h_k \right) \quad (16.3)$$

Para uma malha não-uniforme, sabe-se que

$$x_j = \sum_{k=1}^j (h_k) \quad (16.4)$$

onde, por definição, o comprimento total do domínio de cálculo (L) é dado por

$$L = \sum_{j=1}^N (h_j) \quad (16.5)$$

com N sendo o número total de elementos da malha, que é igual ao número total de nós da malha menos a unidade. A partir das Eqs. (16.4) e (16.5), chega-se às Eqs. (8.13) e (8.14) que definem os contornos do domínio de cálculo.

Com o erro de discretização (E) da variável dependente (λ), que é obtido na próxima seção, e com as Eqs. (8.37) e (8.3), é possível demonstrar que

$$\lambda_j = \frac{x_j^2}{V} + \frac{1}{V} \sum_{k=1}^j (h_k^2) \quad (16.6)$$

A Eq. (16.6) é a solução numérica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2), bem como do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (16.2). A solução de λ dada na Eq. (16.6) é chamada de solução numérica exata porque a sua única fonte de erro, dentre as quatro abordadas na seção 1.6, é devido aos erros de truncamento, isto é, não contém erros de iteração, de arredondamento e de programação. Observa-se diretamente na Eq. (16.6) que no limite quando os tamanhos (h) dos elementos da malha tendem a zero, ou seja, $h_j \rightarrow 0$, a solução numérica se iguala à solução analítica, Eq. (8.3).

16.2 CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO, *A PRIORI*

Seguindo-se o mesmo procedimento apresentado na seção 8.5, com as Eqs. (14.9) e (14.10), obtém-se

$$\frac{(E_j - E_{j-1})}{h_j} + \frac{\Lambda_j^{ii}}{2} h_j - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} h_j^2 + \frac{\Lambda_j^{iv}}{24} h_j^3 - \dots = 0 \quad (16.7)$$

Esta equação pode ser reescrita da seguinte forma

$$E_j = E_{j-1} - \frac{\Lambda_j^{ii}}{2} h_j^2 + \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} h_j^3 - \frac{\Lambda_j^{iv}}{24} h_j^4 + \dots \quad (16.8)$$

Com a substituição das Eqs. (8.53) e (8.54) em (16.8), chega-se a

$$E_j = E_{j-1} - \frac{1}{V} h_j^2 \quad (16.9)$$

A condição de contorno dada pela Eq. (8.2) implica que o erro no contorno é nulo já que a solução neste nó ($j = 0$) é conhecida, ou seja, $E_0 = 0$. Sendo assim, a Eq. (16.9) resulta no erro da variável dependente (λ) em cada nó (j), que é dado por

$$E(\lambda_j) = -\frac{1}{V} \sum_{k=1}^j (h_k^2) \quad (16.10)$$

Este resultado também pode ser obtido com a substituição das Eqs. (8.3) e (16.6) na Eq. (8.37). Isto é, o cálculo do erro de discretização da variável dependente, com base na série de Taylor, ou seja, *a priori* de soluções numéricas, Eq. (16.10), coincide com o erro de discretização *a posteriori* de soluções numéricas.

Seguindo-se o mesmo procedimento apresentado na subseção 8.7.1, com a Eq. (14.9), obtém-se o erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (16.1), no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = V \left(\frac{\Lambda_j^{ii}}{2} h_j - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} h_j^2 + \frac{\Lambda_j^{iv}}{24} h_j^3 - \dots \right) \quad (16.11)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2, 3$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

16.3 ANÁLISE DE SUBCASOS

Apresenta-se a seguir a análise de quatro subcasos que envolvem a solução numérica da Eq. (8.1). Eles diferem apenas no número e nos tamanhos dos elementos usados para discretizar um domínio de cálculo único com $L = V = 1$. A solução analítica (Λ) é obtida da Eq. (8.3), a numérica (λ), da Eq. (16.6), e o erro de discretização (E), da Eq. (16.10).

A malha do Subcaso 11-A, constituída por um único elemento, é mostrada na Fig. 16.1, e os seus resultados na Tab. 16.1. A malha e os resultados do Subcaso 11-B são apresentados na Fig. 16.2 e Tab. 16.2. Este subcaso serve de referência para os demais já que se constitui numa

malha uniforme com dois elementos. Os Subcasos 11-A e 11-B possuem o nó $x = 1$ em comum. Desta forma, pode-se verificar a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização (E) nesta coordenada. Da Eq. (4.5), a razão de refino de malha (q) vale dois. Assim, da Eq. (4.4), chega-se a $p_E(x=1) = 1$. Este resultado é apenas um exemplo numérico daquilo que foi apresentado no Cap. 8, mostrando que a Eq. (16.10) também é válida para malhas uniformes, como era de se esperar. Ele também mostra, pelo menos para malhas uniformes, que a ordem do erro de discretização da Eq. (16.10) é na verdade igual à unidade, e não dois como aparenta; conforme já abordado na Parte II deste trabalho, somatórios como o da Eq. (16.10) degeneram a ordem do erro.

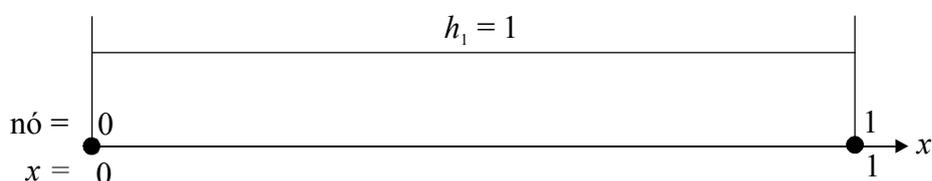


Figura 16.1 Malha do Subcaso 11-A: $N = 1$ elemento.

Tabela 16.1 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 11-A e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	1	1	2	-1

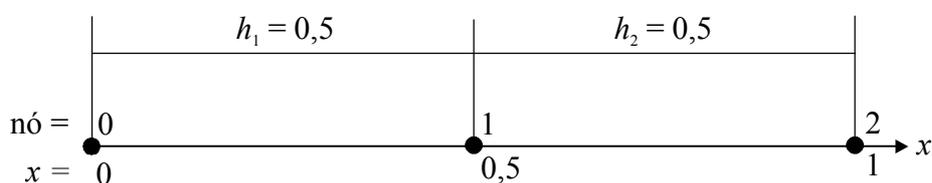


Figura 16.2 Malha do Subcaso 11-B: $N = 2$ elementos.

Na Fig. 16.3 é apresentada a malha do Subcaso 11-C cujos resultados estão na Tab. 16.3. Esta malha, em relação à malha do Subcaso 11-A, é um exemplo de refino irregular, conforme

definido na seção 15.2. De acordo com a Eq. (15.2), $q = 2$. Para $x = 1$, a ordem efetiva do erro do Subcaso 11-C em relação ao Subcaso 11-A resulta em $p_E(x=1) = 0,68$, que é diferente do p_E de uma malha uniforme (1). Este é um exemplo simples mas que mostra o efeito do tipo de refino de malha sobre a ordem do erro, além do valor do próprio erro. Para qualquer outra relação entre h_2 e h_1 na malha do Subcaso 11-C, Fig. 16.3, encontra-se um valor diferente de $p_E(x=1)$.

Tabela 16.2 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 11-B e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	0,5	0,25	0,5	-0,25
2	1	1	1,5	-0,5

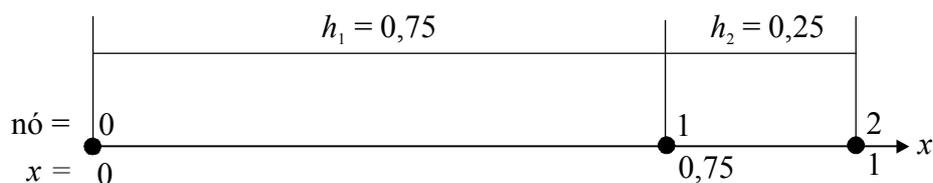


Figura 16.3 Malha do Subcaso 11-C: $N = 2$ elementos.

Tabela 16.3 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 11-C e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	0,75	0,5625	1,125	-0,5625
2	1	1	1,625	-0,625

A malha do Subcaso 11-D é mostrada na Fig. 16.4 e os seus resultados na Tab. 16.4. Esta malha foi obtida dividindo-se ao meio cada elemento da malha do Subcaso 11-C, ou seja, efetuando-se o refino por subdivisão uniforme, processo descrito na seção 15.1. Para este refino, conforme a Eq. (15.1), $q = 2$. Entre as malhas dos Subcasos 11-C e 11-D, além do contorno

esquerdo, existem dois nós com a mesma coordenada: $x = 0,75$ e 1 . Calculando-se a ordem efetiva do erro de discretização, para estas duas coordenadas, obtém-se $p_E = 1$. Este valor é o mesmo que se obtém com malhas uniformes, conforme visto no Cap. 8, e entre os Subcasos 11-A e 11-B, acima.

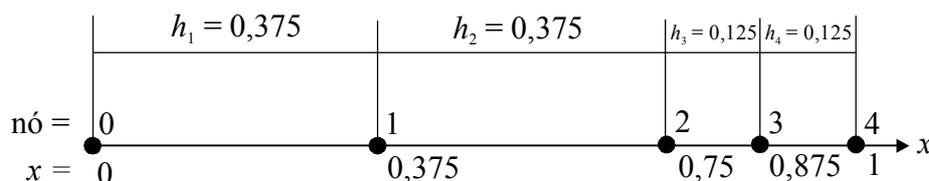


Figura 16.4 Malha do Subcaso 11-D: $N = 4$ elementos.

Tabela 16.4 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 11-D e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	0,375	0,140625	0,28125	-0,140625
2	0,75	0,5625	0,84375	-0,28125
3	0,875	0,765625	1,0625	-0,296875
4	1	1	1,3125	-0,3125

A partir da Eq. (16.10), pode-se demonstrar que $p_E = 1$ em todos os nós da malha grossa, para qualquer par de malhas não-uniformes, desde que uma seja obtida da outra através de refino por subdivisão uniforme, conforme segue. Para uma malha grossa (g), da Eq. (16.10), o erro de discretização num nó j , ou seja, numa coordenada x específica, é dado por

$$E(\lambda_j)_g = -\frac{1}{V} \sum_{k=1}^{j,g} (h_g^2)_k \quad (16.12)$$

Também com a Eq. (16.12), para uma malha fina (f) obtida a partir da malha grossa através de refino por subdivisão uniforme, o erro de discretização na mesma coordenada x , é dado por

$$E(\lambda_j)_f = -\frac{1}{V} \sum_{k=1}^{j,g} \left[\sum_{m=1}^q (h_f^2)_k \right] \quad (16.13)$$

onde q é a razão de refino de malha. Substituindo-se a Eq. (15.1), que relaciona os elementos das malhas fina e grossa, na Eq. (16.13), obtém-se

$$E(\lambda_j)_f = -\frac{1}{V} \sum_{k=1}^{j,g} \left[\sum_{m=1}^q \left(\frac{h_g}{q} \right)_k^2 \right] = -\frac{1}{V} \sum_{k=1}^{j,g} \left[q \frac{h_g^2}{q^2} \right] = -\frac{1}{qV} \sum_{k=1}^{j,g} (h_g^2)_k \quad (16.14)$$

A razão entre as Eqs. (16.12) e (16.14) resulta na razão de refino q , que substituída na Eq. (4.4), fornece a ordem efetiva $p_E = 1$, concluindo a demonstração.

16.4 RESUMO DO CAPÍTULO 16

Foi apresentada a solução numérica da equação diferencial do Caso 11, Eq. (8.1), para a variável dependente (λ) nesta equação. Foram realizadas várias análises do erro de discretização e de sua ordem efetiva e deduzidas as ordens verdadeiras e assintótica da equação diferencial em sua forma discretizada. O uso da série de Taylor permite calcular corretamente os erros de discretização da solução numérica da variável dependente, mesmo para malhas não-uniformes e quando existem erros nodais, mas desde que se conheça a solução analítica exata (Λ) para a obtenção dos erros de truncamento (ε) envolvidos.

O tipo de refino de malha afeta a magnitude do erro de discretização e a sua ordem efetiva. Para refino de malha do tipo irregular, a ordem efetiva obtida é diferente da ordem do erro de truncamento da equação discretizada. Para refino de malha não-uniforme por subdivisão uniforme, a ordem efetiva do erro de discretização é igual à unidade; este é o mesmo resultado obtido com malhas uniformes, e também é igual à ordem do erro de truncamento da equação discretizada.

Capítulo 17.

CASO 12: ADVECÇÃO COM CDS EM MALHA NÃO-UNIFORME

Os objetivos deste capítulo são: investigar o uso de uma aproximação numérica por diferença central (λ_{CDS}^i) em malha não-uniforme para derivadas de primeira ordem; demonstrar que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente é igual ao caso de malhas uniformes, quando se emprega λ_{CDS}^i na discretização de equações diferenciais sobre malhas não-uniformes refinadas com subdivisão uniforme; e mostrar que para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada.

O mesmo problema do capítulo anterior é abordado neste, ou seja, a advecção de um escalar; a diferença é que no presente capítulo utiliza-se uma aproximação numérica através de diferença central no modelo numérico. Portanto, o modelo matemático do Caso 12 também é definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2) e sua solução analítica exata da variável dependente (Λ) é dada na Eq. (8.3).

17.1 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2) é obtida considerando-se o mesmo modelo numérico empregado na seção 11.2 mas para malhas não-uniformes. Desta forma, com a Eq. (14.12) em (8.1), tem-se

$$V \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} = 2x_j \quad (17.1)$$

ou

$$\lambda_j = \lambda_{j-2} + \frac{2}{V} x_{j-1} (h_{j-1} + h_j) \quad (17.2)$$

onde x_{j-1} é a coordenada do nó 'j-1', Fig. 14.1, h_j é definido pela Eq. (14.4), e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (17.2), λ_j depende de λ_{j-2} , x_{j-1} , V , h_{j-1} e h_j . A partir do seu erro de discretização (E) e da sua solução analítica, é possível demonstrar que a **solução numérica da variável dependente (λ)** é dada por

$$\lambda_j = \frac{x_j^2}{V} + \frac{1}{V} \sum_{k=2,4,\dots}^j (h_{k-1}^2 - h_k^2) \quad (\text{para } j = 2, 4, \dots, N) \quad (17.3)$$

válida para os nós pares, isto é, para $j = 2, 4, \dots, N$, sendo N um número par e que representa o número total de elementos da malha. A solução dada na Eq. (17.3) independe da solução dos nós ímpares, que não é obtida aqui. Pode-se verificar que a **solução numérica da variável dependente (λ)** é dada por

$$\lambda_j = \frac{x_j^2}{V} + \frac{x_j}{V} \Delta h \quad (\text{para } j = 2, 4, \dots, N) \quad (17.4)$$

se Δh é constante na malha inteira e definido por

$$\Delta h = h_1 - h_2 \quad (17.5)$$

A Eq. (17.3) é a solução numérica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (8.1) e (8.2), bem como do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (17.2). Observa-se diretamente nas Eqs. (17.3) e (17.4) que no limite quando os tamanhos (h) dos elementos da malha tendem a zero, ou seja, $h \rightarrow 0$, a solução numérica se iguala à solução analítica, Eq. (8.3). No caso de malhas uniformes, a solução numérica é idêntica à solução analítica.

O **erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente no modelo matemático (λ)** é obtido com a substituição das Eqs. (8.3) e (17.3) na Eq. (8.37), o que resulta em

$$E(\lambda_j) = \frac{1}{V} \sum_{k=2,4,\dots}^j (h_k^2 - h_{k-1}^2) \quad (\text{para } j = 2, 4, \dots, N) \quad (17.6)$$

ou

$$E(\lambda_j) = -\frac{x_j}{V} \Delta h \quad (\text{se } \Delta h \text{ constante e para } j = 2, 4, \dots, N) \quad (17.7)$$

Para a Eq. (17.7) e Δh sendo constante na malha inteira, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) é de primeira ordem, isto é, $p_L = 1$.

Seguindo-se o mesmo procedimento apresentado na subsecção 8.7.1, com a Eq. (14.13), chega-se ao erro de truncamento da equação diferencial, Eq. (8.1), na sua forma discretizada, no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = V \left[\frac{\Lambda_j^{ii}}{2} (h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \right] \quad (17.8)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

17.2 DEGENERAÇÃO DA ORDEM DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Seguindo-se o mesmo procedimento descrito na seção 8.5, pode-se deduzir que a equação nodal do erro de discretização, do Caso 12, é dada por

$$E_j = E_{j-2} + (h_j^2 - h_{j-1}^2) \quad (\text{para } j = 2, 4, \dots, N) \quad (17.9)$$

ou seja, a ordem do erro de discretização local é igual a dois. Portanto, a passagem da Eq. (17.9) para a Eq. (17.7), que é o erro de discretização global no caso de Δh ser constante na malha inteira, resulta na **degeneração de ordem em uma unidade**, provocada pelo somatório que está implícito na Eq. (17.9). Esta degeneração de uma unidade é idêntica ao caso de malhas uniformes, conforme visto no Cap. 11, na passagem da Eq. (11.14) para a Eq. (11.10).

17.3 ANÁLISE DE SUBCASOS

Apresenta-se a seguir a análise de cinco subcasos que envolvem a solução numérica da Eq. (8.1). As soluções analíticas (Λ) e numéricas são obtidas através das Eqs. (8.3) e (17.3), respectivamente, e o erro de discretização (E) com a Eq. (17.6).

Para os Subcasos 12-A e 12-B foram considerados $L = 10$ e $V = 1$. A malha do Subcaso 12-A, constituída por dois elementos, é mostrada na Fig. 17.1, e os seus resultados na Tab. 17.1; para esta malha, $\Delta h = -2$, conforme definição da Eq. (17.5). A malha do Subcaso 12-B, constituída por quatro elementos, é mostrada na Fig. 17.2, e os seus resultados na Tab. 17.2; para esta malha, $\Delta h = -1$. Os Subcasos 12-A e 12-B possuem o nó $x = 10$ em comum. Desta forma, pode-se verificar a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização nesta coordenada. A passagem da malha do Subcaso 12-A para o 12-B foi feita utilizando-se um refino de malha com Δh constante, explicado na seção 15.4. Assim, com base na Eq. (15.8), a razão de refino de malha (q) vale dois, e com a Eq. (4.4), chega-se a $p_E(x=10) = 1$. Este valor da ordem efetiva (p_E) está de acordo com a previsão da ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (17.8), e difere dos resultados relatados na literatura, conforme mencionado na seção 15.5. O mesmo resultado é obtido quando se usa Δh variável em uma malha mas todos sendo reduzidos à mesma proporção para a malha fina, conforme exemplificado nos dois subcasos a seguir.

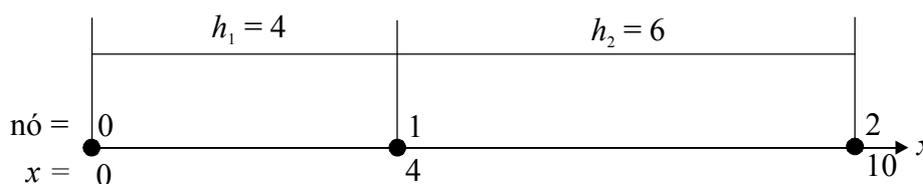


Figura 17.1 Malha do Subcaso 12-A: $N = 2$ elementos e $\Delta h = -2$.

Nos Subcasos 12-C e 12-D, o tamanho do domínio de cálculo é $L = 11$ e $V = 1$. Suas malhas são mostradas nas Figs. 17.3 e 17.4, e os resultados nas Tabs. 17.3 e 17.4. O Δh varia em cada malha mas ele é reduzido na mesma proporção para a malha fina, com $q = 2$, segundo a Eq. (15.8). Os Subcasos 12-C e 12-D possuem dois nós em comum: $x = 6$ e 11 . Desta forma, pode-se verificar a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização nestas duas coordenadas. Com base na Eq.

(4.4) e nos resultados das Tabs. 17.3 e 17.4, verifica-se que $p_E(x = 6 \text{ e } 11) = 1$. Novamente, este valor da ordem efetiva (p_E) está de acordo com a previsão da ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (17.8), e está em desacordo com resultados relatados na literatura, conforme mencionado na seção 15.5.

Tabela 17.1 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 12-A e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	4	não obtido	não obtido	não obtido
2	10	100	80	20

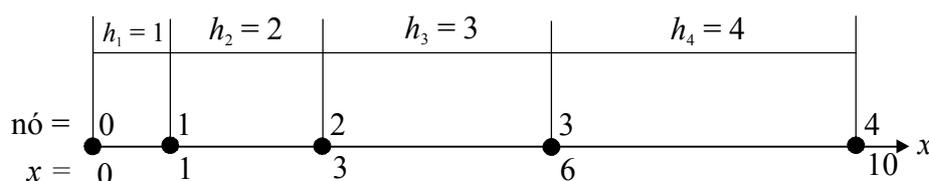


Figura 17.2 Malha do Subcaso 12-B: $N = 4$ elementos e $\Delta h = -1$.

Tabela 17.2 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 12-B e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	1	não obtido	não obtido	não obtido
2	3	9	6	3
3	6	não obtido	não obtido	não obtido
4	10	100	90	10

Os quatro subcasos abordados acima exemplificam as duas únicas possibilidades de refino de malha em que se pode obter ordem do erro de discretização igual à unidade num problema advectivo cujo modelo matemático é discretizado com diferenças finitas, através de

diferença central, em malhas não-uniformes. Refinos de malhas em que o Δh da malha grossa não é reduzido na mesma proporção para a malha fina resultam em ordem do erro de discretização diferente da unidade, conforme o subcaso que se exemplifica a seguir.

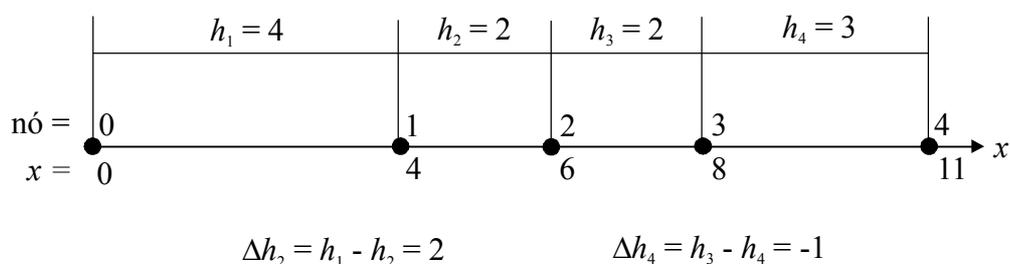


Figura 17.3 Malha do Subcaso 12-C: $N = 4$ elementos.

Tabela 17.3 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 12-C e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	4	não obtido	não obtido	não obtido
2	6	36	48	-12
3	8	não obtido	não obtido	não obtido
4	11	121	128	-7

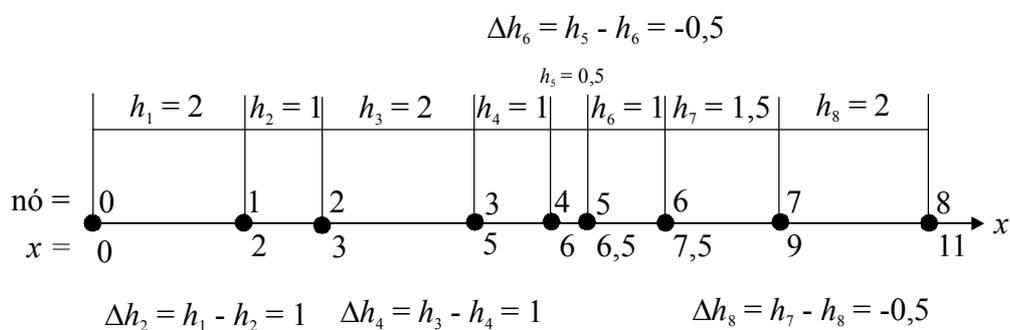


Figura 17.4 Malha do Subcaso 12-D: $N = 8$ elementos.

Tabela 17.4 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 12-D e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	2	não obtido	não obtido	não obtido
2	3	9	12	-3
3	5	não obtido	não obtido	não obtido
4	6	36	42	-6
5	6,5	não obtido	não obtido	não obtido
6	7,5	56,25	61,5	-5,25
7	9	não obtido	não obtido	não obtido
8	11	121	124,5	-3,5

No Subcaso 12-E, o tamanho do domínio de cálculo é $L = 10$ e $V = 1$. Sua malha é mostrada na Fig. 17.5, e os resultados na Tab. 17.5. Os Subcasos 12-A e 12-E possuem o nó $x = 10$ em comum. Desta forma, pode-se verificar a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização nesta coordenada. A passagem da malha do Subcaso 12-A para o 12-E foi feita utilizando-se o refino de malha do tipo irregular, seção 15.2. Assim, com base na Eq. (15.2), a razão de refino de malha (q) vale dois, já que o Subcaso 12-A apresenta dois elementos e o Subcaso 12-E, quatro. Com a Eq. (4.4), chega-se a $p_E(x=10) = 0,42$. Este valor da ordem efetiva (p_E) é diferente da previsão da ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (17.8). Os refinamentos de malha por subdivisão uniforme, seção 15.1, e com progressão geométrica, seção 15.3, são abordados na seção a seguir.

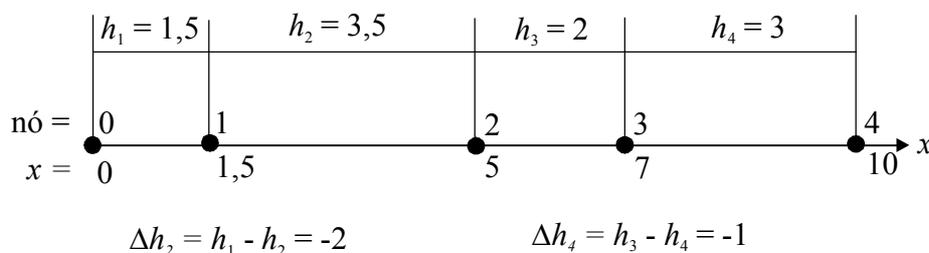


Figura 17.5 Malha do Subcaso 12-E: $N = 4$ elementos.

Tabela 17.5 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 12-E e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	1,5	não obtido	não obtido	não obtido
2	5	25	15	10
3	7	não obtido	não obtido	não obtido
4	10	100	85	15

17.4 ORDEM DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO DE PROBLEMAS ADVECTIVOS COM CDS EM MALHA NÃO-UNIFORME

Para a aproximação numérica da derivada de 1ª ordem obtida com diferença central e dois nós, λ_{CDS}^i , deduzida na seção 14.2 e empregada no presente capítulo, a ordem assintótica (p_L) do seu erro de truncamento, Eq. (14.13), vale $p_L = 1$. Porém, conforme relatado nas seções 15.3 e 15.5, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) vale dois quando se emprega λ_{CDS}^i . Este resultado é obtido através de experimentos numéricos com malhas uniformes e não-uniformes. Entretanto, segundo as previsões teóricas de diversos autores (Pepper e Baker, 1988; Ferziger e Peric, 1999; Hoffman, 1982; Fletcher, 1997), a ordem assintótica do erro de truncamento de λ_{CDS}^i , é igual à unidade para malhas não-uniformes. Isto parece evidente da Eq. (14.13).

Portanto, aparentemente existe discordância entre as previsões teóricas e os resultados experimentais. A demonstração a seguir elucidada a questão mostrando que não existe discordância alguma, o que existe é equívoco na interpretação das previsões teóricas, e isso ocorre porque se supõe que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) seja igual à ordem assintótica do erro de truncamento da aproximação numérica (λ_{CDS}^i) empregada na discretização da equação diferencial.

Sem se dispor de uma solução numérica em forma fechada, isenta de somatórios, não é possível determinar qual é a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) com uma única malha. Nesse caso há duas alternativas. Na primeira, conhecendo-se a solução analítica, pode-se calcular a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização

(E) da variável dependente (λ) através de duas soluções de λ , obtidas em duas malhas diferentes. Na segunda, desconhecendo-se a solução analítica, pode-se calcular a ordem aparente (p_U) da incerteza (U) da variável dependente (λ) através de três soluções de λ , obtidas em três malhas diferentes. Portanto, necessariamente estarão envolvidas duas ou três malhas e, assim, conforme já mostrado na seção 17.3, a forma de se refinar a malha influencia o resultado da ordem do erro. A dedução apresentada a seguir é para malhas não-uniformes com refino por subdivisão uniforme, seção 15.1.

Considere-se um problema advectivo, Eq. (8.1), discretizado com diferença central, Eq. (17.1), numa malha grossa (g) não-uniforme composta de N_g elementos. O interesse é analisar apenas a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ). Desta forma, a partir da Eq. (17.9), tem-se

$$E(\lambda_j)_g \propto E(\lambda_{j-1})_g + (h_j^2)_g \quad (\text{para } j = 1, 2, 3, \dots, N_g) \quad (17.10)$$

Considerando-se que todos os elementos da malha grossa tenham o tamanho h_g , a partir da Eq. (17.10), chega-se à conclusão que o erro do último nó da malha grossa (N_g) é da ordem de

$$E(\lambda_{N_g}) \propto N_g h_g^2 \quad (17.11)$$

Obtendo-se a malha fina (f) a partir da malha grossa através do refino por subdivisão uniforme, seção 15.1, cada elemento da malha grossa origina q elementos uniformes na malha fina, onde q é a razão de refino, Eq. (15.1), e é um número inteiro positivo com $q \geq 2$. Em cada conjunto de q elementos da malha fina, existirá um elemento com o erro sendo regido por uma equação semelhante à Eq. (17.10), mas escrita para a malha fina, isto é,

$$E(\lambda_j)_f \propto E(\lambda_{j-1})_f + (h_j^2)_f \quad (17.12)$$

e $(q-1)$ elementos regidos por uma equação semelhante à Eq. (11.14), para malhas uniformes, ou seja,

$$E(\lambda_j)_f \propto E(\lambda_{j-1})_f + (h_j^3)_f \quad (17.13)$$

Portanto, com as Eqs. (17.12) e (17.13), considerando-se que todos os elementos da malha fina tenham o tamanho h_f , chega-se à conclusão que o erro do último nó da malha fina (N_f) é da ordem de

$$E(\lambda_{N_f}) \propto N_g h_f^2 + (q-1)N_g h_f^3 \quad (17.14)$$

Como o interesse é apenas a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ), o termo de terceira ordem da Eq. (17.14) pode ser eliminado, restando apenas

$$E(\lambda_{N_f}) \propto N_g h_f^2 \quad (17.15)$$

Como λ_{N_g} e λ_{N_f} estão na mesma coordenada, e considerando-se a relação entre os tamanhos dos elementos da malha grossa (h_g) e fina (h_f), dada pela Eq. (15.1), pode-se obter a razão entre seus erros, isto é, a razão entre a Eq. (17.11) e a Eq. (17.15), o que resulta em

$$\frac{E(\lambda_{N_g})}{E(\lambda_{N_f})} \rightarrow \frac{N_g h_g^2}{N_g h_f^2} = \frac{(qh_f)^2}{h_f^2} = q^2 \quad (17.16)$$

Finalmente, com o resultado da Eq. (17.16) na Eq. (4.4), chega-se à conclusão que a ordem efetiva tende a dois. Portanto, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) é dois quando se emprega λ_{CDS}^i , Eq. (14.12), na discretização de equações diferenciais sobre malhas não-uniformes com refino por subdivisão uniforme, o que conclui a demonstração. Pode-se também demonstrar que este resultado é válido para qualquer nó da malha grossa. Assim, também se conclui que para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente da equação diferencial é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada.

A explicação de que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) é dois quando se emprega λ_{CDS}^i , Eq. (14.12), na discretização de equações diferenciais para malhas não-uniformes refinadas com progressão geométrica, seção 15.3, é simples. Para tanto, basta verificar os exemplos da Tab. 17.6 que foram obtidos considerando a razão de refino (q) de malha igual a $q = 2$ na Eq. (15.3); o número de refino igual a zero

corresponde à malha mais grossa, isto é, àquela que é refinada sucessivamente. Tanto para malhas com razão (r) da progressão geométrica (PG) começando com valores superiores à unidade, quanto com valores inferiores, com pequeno número de refinamentos, ambos tendem à razão unitária, que equivale a uma malha uniforme. Com isso, passam a prevalecer os resultados já vistos na Parte II deste trabalho.

Tabela 17.6 Razão (r) das progressões geométricas (PG) em função do número de refinamentos de malha para razão de refinamento $q = 2$.

número do refino	r para h aumentando de $x = 0$ a L .	r para h diminuindo de $x = 0$ a L .
0	4,0000	0,2000
1	2,0000	0,4472
2	1,4142	0,6687
3	1,1892	0,8178
4	1,0905	0,9043
5	1,0443	0,9509
6	1,0219	0,9752
7	1,0109	0,9875
8	1,0054	0,9937
9	1,0027	0,9969
10	1,0014	0,9984
11	1,0007	0,9992

17.5 RESUMO DO CAPÍTULO 17

Foi apresentada a solução numérica da equação diferencial do Caso 12, Eq. (8.1), para a variável dependente (λ) nesta equação. Demonstrou-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) é dois quando se emprega λ_{CDS}^i , Eq. (14.12), na discretização de equações diferenciais sobre malhas não-uniformes com refinamento por subdivisão uniforme. Este é o mesmo resultado obtido com malhas uniformes. Chegou-se à mesma constatação para malhas não-uniformes refinadas com progressão geométrica. Para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente seja igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada.

Capítulo 18.

CASO 13: DIFUSÃO COM CDS EM MALHA NÃO-UNIFORME

Os objetivos deste capítulo são: investigar o uso de uma aproximação numérica por diferença central (λ_{CDS}^i) em malha não-uniforme para derivadas de segunda ordem; e demonstrar que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente é igual ao caso de malhas uniformes, quando se emprega λ_{CDS}^i na discretização de equações diferenciais sobre malhas não-uniformes refinadas com subdivisão uniforme.

O problema da difusão de um escalar é abordado neste capítulo, onde se analisa o erro da solução numérica da variável dependente. O modelo matemático do Caso 13 é definido por

$$\frac{d^2\Lambda}{dx^2} = 6x \quad (18.1)$$

onde Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar difundido, e x é a variável independente, a direção coordenada. As condições de contorno de Dirichlet são dadas nas Eqs. (12.2) e (12.3). A **solução analítica exata para a variável dependente (Λ)** é

$$\Lambda = x^3 \quad (18.2)$$

18.1 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (18.1), (12.2) e (12.3) é obtida considerando-se o mesmo modelo numérico empregado na seção 12.3 mas para malhas não-uniformes. Desta forma, com a Eq. (14.25) em (18.1), tem-se

$$2 \frac{[h_{j+1}\lambda_{j-1} + h_j\lambda_{j+1} - (h_j + h_{j+1})\lambda_j]}{(h_j + h_{j+1})h_j h_{j+1}} = 6x_j \quad (18.3)$$

ou

$$\lambda_j = \frac{h_{j+1}}{(h_j + h_{j+1})} \lambda_{j-1} + \frac{h_j}{(h_j + h_{j+1})} \lambda_{j+1} - 3x_j h_j h_{j+1} \quad (18.4)$$

onde x_j é a coordenada do nó j , Fig. 14.1, h_j e h_{j+1} são definidos pelas Eqs. (14.4) e (14.5), e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. De acordo com a Eq. (18.4), λ_j depende de λ_{j-1} e λ_{j+1} , x_j , e h_{j+1} e h_j . Pode-se verificar que a **solução numérica da variável dependente (λ)** é dada por

$$\lambda_j = x_j^3 - x_j(L - x_j)\Delta h \quad (18.5)$$

se Δh é constante na malha inteira e definido conforme a Eq. (17.5).

A Eq. (18.5) é a solução numérica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (18.1), (12.2) e (12.3), bem como do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (18.4). Observa-se diretamente na Eq. (18.5) que no limite quando os tamanhos (h) dos elementos da malha tendem a zero, ou seja, $h \rightarrow 0$, a solução numérica se iguala à solução analítica, Eq. (18.2). No caso de malhas uniformes, a solução numérica é idêntica à solução analítica.

O **erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente no modelo matemático (λ)** é obtido com a substituição das Eqs. (18.2) e (18.5) na Eq. (8.37), o que resulta em

$$E(\lambda_j) = x_j(L - x_j)\Delta h \quad (18.6)$$

se Δh é constante na malha inteira e definido pela Eq. (17.5). Neste caso, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) é de primeira ordem, isto é, $p_L = 1$.

Seguindo-se o mesmo procedimento apresentado na subseção 8.7.1, com a Eq. (14.26), chega-se ao erro de truncamento da equação diferencial, Eq. (18.1), na sua forma discretizada, no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = \frac{\Lambda_j^{iii}}{3}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (18.7)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

18.2 DEGENERAÇÃO DA ORDEM DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Seguindo-se o mesmo procedimento descrito na seção 8.5, pode-se deduzir que a equação nodal do erro de discretização, do Caso 13, é dada por

$$E_j = \frac{h_{j+1}}{(h_j + h_{j+1})} E_{j-1} + \frac{h_j}{(h_j + h_{j+1})} E_{j+1} - (h_j - h_{j+1}) h_j h_{j+1} \quad (18.8)$$

ou seja, a ordem do erro de discretização local é igual a três. Portanto, a passagem da Eq. (18.8) para a Eq. (18.6), que é o erro de discretização global, no caso de Δh constante na malha inteira, resulta na **degeneração de ordem em duas unidades**, provocada pelo duplo somatório que está implícito na Eq. (18.8). Esta degeneração de duas unidades é idêntica ao caso de malhas uniformes, conforme visto no Cap. 12, na passagem da Eq. (12.21) para a Eq. (12.15).

18.3 ANÁLISE DE SUBCASOS

Apresenta-se a seguir a análise de quatro subcasos que envolvem a solução numérica da Eq. (18.1). Para os Subcasos 13-A e 13-B, o tamanho do domínio de cálculo é $L = 10$, conforme as Figs. 18.1 e 18.2. As soluções analíticas (Λ) e numéricas são obtidas através das Eqs. (18.2) e (18.5), respectivamente, e o erro de discretização (E) com a Eq. (18.6). A malha do Subcaso 13-A, constituída por dois elementos, é mostrada na Fig. 18.1, e os seus resultados na Tab. 18.1; para esta malha, $\Delta h = -4$, conforme definido na Eq. (17.5). A malha do Subcaso 13-B, constituída por quatro elementos, é mostrada na Fig. 18.2, e os seus resultados na Tab. 18.2; para esta malha, $\Delta h = -1$. Os Subcasos 13-A e 13-B possuem o nó $x = 3$ em comum. Desta forma, pode-se verificar a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização nesta coordenada. A passagem da malha do Subcaso 13-A para o 13-B foi feita utilizando-se um refino de malha com Δh constante, explicado na seção 15.4. Assim, com base na Eq. (15.8), a razão de refino de malha

(q) vale quatro e com a Eq. (4.4), chega-se a $p_E(x=3) = 1$. Este valor da ordem efetiva (p_E) está de acordo com a previsão da ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (18.7), e difere dos resultados relatados na literatura, conforme mencionado na seção 15.5.

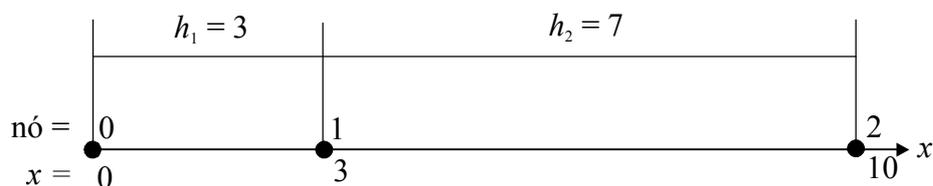


Figura 18.1 Malha do Subcaso 13-A: $N = 2$ elementos e $\Delta h = -4$.

Tabela 18.1 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 13-A e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	3	27	111	-84

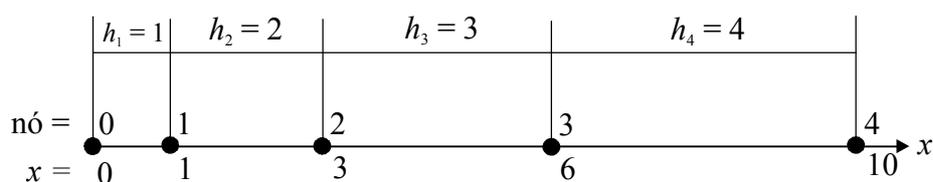


Figura 18.2 Malha do Subcaso 13-B: $N = 4$ elementos e $\Delta h = -1$.

Nos Subcasos 13-C e 13-D, o tamanho do domínio de cálculo é $L = 1$. Suas malhas são mostradas nas Figs. 18.3 e 18.4, e os resultados nas Tabs. 18.3 e 18.4. As soluções numéricas foram obtidas resolvendo-se o sistema representado pela Eq. (18.4). A malha do Subcaso 13-D foi obtida da malha do Subcaso 13-C através de refino por subdivisão uniforme, seção 15.1. Os Subcasos 13-C e 13-D possuem o nó $x = 0,2$ em comum. Desta forma, pode-se verificar a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização nesta coordenada. Com base na Eq. (4.4) e nos resultados

das Tabs. 18.3 e 18.4, verifica-se que $p_E(x=0,2) = 2$. Este valor da ordem efetiva (p_E) é diferente da previsão da ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (18.7), mas está de acordo com resultados experimentais relatados na literatura, conforme mencionado na seção 15.5, e é igual ao caso de malhas uniformes. Este resultado é explicado na seção a seguir.

Tabela 18.2 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 13-B e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	1	1	10	-9
2	3	27	48	-21
3	6	216	240	-24

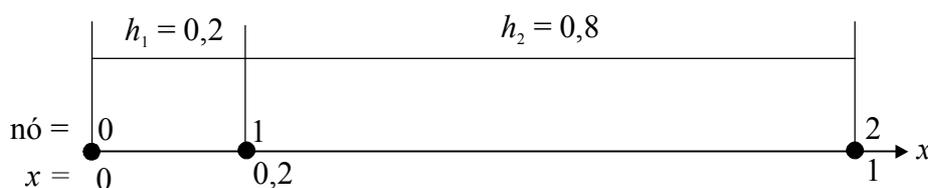


Figura 18.3 Malha do Subcaso 13-C: $N = 2$ elementos.

18.4 ORDEM DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO DE PROBLEMAS DIFUSIVOS COM CDS EM MALHA NÃO-UNIFORME

Para a aproximação numérica da derivada de 2ª ordem obtida com diferença central, λ_{CDS}^i , deduzida na seção 14.5 e empregada no presente capítulo, a ordem assintótica (p_L) do seu erro de truncamento, Eq. (14.26), vale $p_L = 1$. Porém, conforme relatado nas seções 15.3 e 15.5, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) vale dois quando se emprega λ_{CDS}^i . Este resultado é obtido através de experimentos numéricos com malhas uniformes e não-uniformes. Entretanto, segundo as previsões teóricas de diversos autores (Pepper e Baker, 1988; Ferziger e Peric, 1999; Hirsch, 1988; Fletcher, 1997; Tannehill *et al.*,

1997), a ordem assintótica do erro de truncamento de λ_{CDS}^i é igual à unidade para malhas não-uniformes. Isso parece evidente da Eq. (14.26).

Tabela 18.3 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 13-C e respectivo erro de discretização (E).

nó	X	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	0,2	0,008	0,104	-0,096

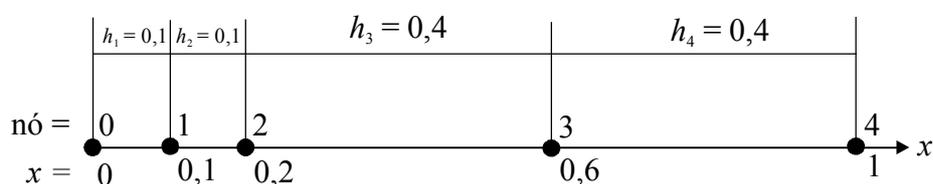


Figura 18.4 Malha do Subcaso 13-D: $N = 4$ elementos.

Tabela 18.4 Soluções analítica (Λ) e numérica (λ) do Subcaso 13-D e respectivo erro de discretização (E).

nó	x	Λ	λ	$E(\lambda)$
1	0,1	0,001	0,013	-0,012
2	0,2	0,008	0,032	-0,024
3	0,6	0,216	0,228	-0,012

Portanto, aparentemente existe discordância entre as previsões teóricas e os resultados experimentais. A demonstração a seguir elucida a questão mostrando que não existe discordância alguma, o que existe é equívoco na interpretação das previsões teóricas, e isso ocorre porque se supõe que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) seja igual à ordem assintótica do erro de truncamento da aproximação numérica (λ_{CDS}^i) empregada na

discretização da equação diferencial. A dedução apresentada a seguir é para malhas não-uniformes com refino por subdivisão uniforme, seção 15.1.

Considere-se um problema difusivo, Eq. (18.1), discretizado com diferença central, Eq. (18.3), numa malha grossa (g) não-uniforme composta de N_g elementos e que todos os elementos da malha grossa tenham o tamanho h_g . O interesse é analisar apenas a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ). Desta forma, a partir da Eq. (18.8), tem-se

$$E(\lambda_j)_g = \frac{E(\lambda_{j-1})_g}{2} + \frac{E(\lambda_{j+1})_g}{2} + h_g^3 \quad (18.9)$$

A solução do sistema de equações representado pela Eq. (18.9) resulta em

$$E(\lambda_j)_g = x_j(L - x_j)h_g \quad (18.10)$$

Obtendo-se a malha fina (f) a partir da malha grossa através do refino por subdivisão uniforme, seção 15.1, cada elemento da malha grossa origina q elementos uniformes na malha fina, onde q é a razão de refino, Eq. (15.1). Em cada conjunto de q elementos da malha fina, existirá um elemento com o erro sendo regido por uma equação semelhante à Eq. (18.9), mas escrita para a malha fina, isto é,

$$E(\lambda_j)_f = \frac{E(\lambda_{j-1})_f}{2} + \frac{E(\lambda_{j+1})_f}{2} + h_f^3 \quad (18.11)$$

e $(q-1)$ elementos regidos por uma equação semelhante à Eq. (12.21), para malhas uniformes, ou seja,

$$E(\lambda_j)_f = \frac{E(\lambda_{j-1})_f}{2} + \frac{E(\lambda_{j+1})_f}{2} + h_f^4 \quad (18.12)$$

Desconsiderando-se os termos de ordem superior, a solução do sistema de equações representado pelas Eqs. (18.11) e (18.12) resulta em

$$E(\lambda_j)_f = \frac{x_j(L - x_j)}{q} h_f \quad (18.13)$$

Para qualquer nó da malha grossa cuja coordenada coincida com algum nó da malha fina, considerando-se a relação entre os tamanhos dos elementos da malha grossa (h_g) e fina (h_f), dada pela Eq. (15.1), pode-se obter a razão entre seus erros, isto é, a razão entre a Eq. (18.10) e a Eq. (18.13), o que resulta em

$$\frac{E(\lambda_j)_g}{E(\lambda_j)_f} = \frac{qh_g}{h_f} = \frac{q(qh_f)}{h_f} = q^2 \quad (18.14)$$

Finalmente, com o resultado da Eq. (18.14) na Eq. (4.4), chega-se à conclusão que a ordem efetiva tende a dois. Portanto, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) é dois quando se emprega λ_{CDS}^i , Eq. (14.25), na discretização de equações diferenciais sobre malhas não-uniformes com refino por subdivisão uniforme, o que conclui a demonstração. Assim, também se conclui que para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente da equação diferencial é igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada. A explicação de que para malhas não-uniformes refinadas com progressão geométrica, seção 15.3, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) é dois quando se emprega λ_{CDS}^i , Eq. (14.25), na discretização de equações diferenciais, é idêntica àquela dada na seção 17.4.

18.5 RESUMO DO CAPÍTULO 18

Foram apresentadas as soluções analítica e numérica da equação diferencial do Caso 13, Eq. (18.1), para a variável dependente nesta equação. Demonstrou-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da variável dependente (λ) é dois quando se emprega λ_{CDS}^i , Eq. (14.25), na discretização de equações diferenciais sobre malhas não-uniformes com refino por subdivisão uniforme. Este é o mesmo resultado obtido com malhas uniformes. A mesma conclusão é válida para malhas não-uniformes refinadas com progressão geométrica. Para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente da equação diferencial seja igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada.

CASO 14: ADVECÇÃO-DIFUSÃO EM MALHA NÃO-UNIFORME

No Caso 14 é abordado o mesmo modelo matemático do Cap. 13, isto é, um problema advectivo-difusivo que é definido pelas Eqs. (13.1), (12.2) e (12.3). Mas neste capítulo as soluções numéricas são obtidas empregando-se malhas não-uniformes. A solução analítica exata do problema é dada na seção 13.1. O objetivo deste capítulo é mostrar que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização da variável dependente é dois num problema advectivo-difusivo, o que está de acordo com as deduções feitas nas seções 17.4 e 18.4. Através destas deduções, previu-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de termos advectivos e difusivos é $p_L = 2$, para a variável dependente (λ), quando se usa diferença central em malhas não-uniformes refinadas através de subdivisão uniforme.

19.1 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (13.1), (12.2) e (12.3) é obtida considerando-se (Ferziger e Peric, 1999): método de diferenças finitas; aproximação numérica das derivadas de 1ª e 2ª ordens da equação diferencial com diferença central; e malha não-uniforme. Desta forma, substituindo-se as Eqs. (14.12) e (14.25), respectivamente, nas derivadas de primeira e segunda ordens da Eq. (13.1), obtém-se

$$Pe \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} = 2 \frac{[h_{j+1}\lambda_{j-1} + h_j\lambda_{j+1} - (h_j + h_{j+1})\lambda_j]}{(h_j + h_{j+1})h_j h_{j+1}} \quad (19.1)$$

Para esta equação, colocada na forma da Eq. (12.31), chega-se a

$$A_{j-1} = -\frac{Pe}{(h_j + h_{j+1})} - \frac{2}{(h_j + h_{j+1})h_j} \quad (19.2)$$

$$A_{j-1} = \frac{Pe}{(h_j + h_{j+1})} - \frac{2}{(h_j + h_{j+1})h_{j+1}} \quad (19.3)$$

com A_j dado pela Eq. (13.8), onde h_j e h_{j+1} são definidos pelas Eqs. (14.4) e (14.5), Fig. 14.1, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente.

Seguindo-se o procedimento apresentado na subseção 8.7.1 e com as Eqs. (14.13) e (14.26), obtém-se o erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (19.1), no nó j , dado por

$$\varepsilon(ED)_j = \left(Pe \frac{\Lambda_j^{ii}}{2} - \frac{\Lambda_j^{iii}}{3} \right) (h_j - h_{j-1}) - \left(Pe \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12} \right) \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (19.4)$$

Portanto, suas ordens verdadeiras são $p_V = 1, 2$, etc., e sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

19.2 VERIFICAÇÃO DA ORDEM EFETIVA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Nesta seção são relatados testes feitos para obter a ordem efetiva do erro de discretização da solução numérica de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i em malhas não-uniformes. Os testes são de dois tipos: refino de malha por subdivisão uniforme, seção 15.1; e refino irregular, seção 15.2.

19.2.1 Refino de Malha Por Subdivisão Uniforme

A Tab. 19.1 apresenta o bloco-base usado para gerar malhas não-uniformes que, então, são refinadas por subdivisão uniforme. O primeiro subcaso analisado nesta subseção é baseado numa malha com 8 elementos gerada a partir do bloco-base da Tab. 19.1, para um domínio de cálculo com tamanho $L = 1$. Esta malha foi refinada quatro vezes, por subdivisão uniforme, com razão de refino $q = 2$. Portanto, as cinco malhas têm $N = 8, 16, 32, 64$ e 128 elementos. Com base nas soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i obtidas sobre estas malhas, e seus erros de discretização, foram calculadas as ordens efetivas das quatro variáveis de interesse cujos resultados são apresentados na Tab. 19.2. Na primeira coluna das Tabs. 19.2, 19.3 e 19.4 são indicados os pares de malhas cujos resultados numéricos foram usados para calcular a ordem efetiva através da Eq. (4.6). Parece claro na Tab. 19.2 que a ordem efetiva (p_E) dos erros de discretização de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m e λ_{DDS-2}^i tende a dois à medida que a malha é refinada. O mesmo não

se pode dizer de λ_{DDS}^i . Mas sua ordem efetiva fica bem caracterizada a partir de uma nova malha-base, mais fina.

Tabela 19.1 Bloco-base.

elemento (j)	h_j (%)	h_j / h_{j-1}	Σh_j (%)
1	20	---	20
2	2	0,1	22
3	8	4	30
4	2	0,25	32
5	18	9	50
6	36	2	86
7	9	0,25	95
8	5	0,555...	100

Tabela 19.2 Ordem efetiva (p_E) dos erros de discretização (E) a partir de um bloco-base.

malhas	$\lambda^{(1/2)}$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
$N = 8$ e 16	3,573	0,105	3,781	não existe
$N = 16$ e 32	1,875	1,622	3,632	1,398
$N = 32$ e 64	1,993	1,929	não existe	1,952
$N = 64$ e 128	1,999	1,983	0,206	2,006

A malha-base do segundo subcaso desta subseção foi gerada a partir do encadeamento de oito blocos-base da Tab. 19.1, resultando numa malha com $N = 64$ elementos. Assim, para um domínio de cálculo com tamanho $L = 1$, cada bloco-base ocupa o comprimento $L/8 = 0,125$. Esta malha-base foi refinada quatro vezes, por subdivisão uniforme, com razão de refino $q = 2$. Portanto, as cinco malhas têm $N = 64, 128, 256, 512$ e 1024 elementos. Com base nas soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtidas sobre estas malhas, e seus erros de discretização, foram calculadas as ordens efetivas das quatro variáveis de interesse cujos resultados são apresentados na Tab. 19.3. Com estes novos resultados, parece bastante claro que a ordem

efetiva (p_E) dos erros de discretização de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m e λ_{DDS-2}^i tende a dois à medida que a malha é refinada, e à unidade para λ_{DDS}^i .

Conforme visto acima, a ordem efetiva do erro de discretização de $\lambda^{(1/2)}$ tende a dois, isto é, $p_E \rightarrow 2$. Este resultado está de acordo com as deduções feitas nas seções 17.4 e 18.4. Através delas, previu-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de termos advectivos e difusivos, discretizados com diferença central em malhas não-uniformes refinadas através de subdivisão uniforme, é $p_L = 2$ para a variável dependente (λ). Este resultado é diferente da previsão da ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (19.4), que é $p_L = 1$. Sendo a ordem assintótica da variável dependente (λ) igual a $p_L = 2$, é de se esperar que as ordens assintóticas dos erros de λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i concordem com as previsões da Tab. 14.1. Isso é exatamente o que ocorre, conforme se pode ver pela comparação desta tabela com a Tab. 19.3.

Tabela 19.3 Ordem efetiva (p_E) dos erros de discretização (E) a partir de oito blocos-base.

malhas	$\lambda^{(1/2)}$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
$N = 64$ e 128	2,00556	1,9831	0,206	1,7296
$N = 128$ e 256	2,00136	1,9958	0,742	2,0092
$N = 256$ e 512	2,00034	1,9990	0,891	2,0060
$N = 512$ e 1024	2,00008	1,9997	0,950	2,0033

19.2.2 Refino Irregular de Malha

A malha-base desta subseção foi gerada a partir do encadeamento de 128 blocos-base da Tab. 19.1, resultando numa malha com $N = 1024$ elementos. Assim, para um domínio de cálculo com tamanho $L = 1$, cada bloco-base ocupa o comprimento $L/128 = 7,8125 \times 10^{-3}$. Esta malha-base foi engrossada três vezes, com razão $q = 2$. O processo de engrossamento de malha consiste em eliminar-se o ponto intermediário de cada três da malha fina que está sendo engrossada; este processo é equivalente a um refino irregular de malha, seção 15.2. Portanto, as quatro malhas têm $N = 128, 256, 512$ e 1024 elementos. Com base nas soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , obtidas sobre estas malhas, e seus erros de discretização, foram calculadas as ordens

efetivas das quatro variáveis de interesse cujos resultados são apresentados na Tab. 19.4. Com estes resultados, como era de se esperar das discussões das seções 15.2, 17.3 e 18.3, nota-se que a ordem efetiva (p_E) dos erros de discretização de $\lambda^{(1/2)}$, λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i não tende a um único valor quando a malha é refinada: o valor da ordem depende das malhas envolvidas e das relações geométricas entre os elementos de ambas as malhas.

Tabela 19.4 Ordem efetiva (p_E) dos erros de discretização (E) a partir de 128 blocos-base.

malhas	$\lambda^{(1/2)}$	λ_m	λ_{DDS}^i	λ_{DDS-2}^i
$N = 128$ e 256	1,526	1,525	1,702	1,672
$N = 256$ e 512	1,014	1,014	0,482	1,217
$N = 512$ e 1024	1,474	1,474	0,043	1,501

19.3 RESUMO DO CAPÍTULO 19

Foram obtidas as soluções analítica e numérica da equação diferencial do Caso 14, Eq. (13.1), para a variável dependente nesta equação, sua derivada primeira e sua média ao longo do domínio de cálculo. A ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de $\lambda^{(1/2)}$ é dois, isto é, $p_L = 2$. Este resultado está de acordo com as deduções feitas nas seções 17.4 e 18.4. Através delas, previu-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização de termos advectivos e difusivos é $p_L = 2$, para a variável dependente (λ), quando se usa diferença central em malhas não-uniformes refinadas através de subdivisão uniforme. Este resultado difere da previsão da ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada, Eq. (19.4), que é $p_L = 1$. Sendo a ordem assintótica da variável dependente (λ) igual a $p_L = 2$, as ordens assintóticas dos erros de λ_m , λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i concordam com as previsões da Tab. 14.1.

SOLUÇÕES NUMÉRICAS COERENTES

Conforme foi visto na Parte II deste trabalho, nenhum estimador de erro (E) daqueles abordados na Parte I garante sempre incertezas (U) que sejam confiáveis, isto é, $U/E \geq 1$, e acuradas, ou seja, $U/E \approx 1$. Isso ocorre principalmente em malhas muito grossas ou, em outras palavras, fora do intervalo convergente da ordem aparente (p_U). Na Parte I, também foi visto que dentro deste intervalo consegue-se limitar o erro de discretização (E). Entretanto, não se vislumbrou um procedimento para saber quando se está ou não dentro do intervalo convergente de p_U . Portanto, neste capítulo, é definido o conceito de soluções numéricas coerentes. Apresenta-se o procedimento para verificar quando duas soluções numéricas atendem a este conceito e exemplos de aplicação. O objetivo é aumentar a confiabilidade das estimativas de erro, principalmente em malhas muito grossas.

20.1 DEFINIÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS COERENTES

Soluções numéricas obtidas com um modelo numérico consistente (Ferziger e Peric, 1999; Maliska, 1995) devem tender à solução analítica exata (Φ) da variável de interesse quando os tamanhos (h) dos elementos da malha tendem a zero, isto é, quando $h \rightarrow 0$. Esta afirmação é válida para qualquer modelo numérico, por exemplo: para um modelo numérico cuja aproximação numérica é de ordem baixa e para outro modelo com aproximação numérica de ordem alta. As variáveis λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i , Cap. 7, são dois exemplos de aproximações numéricas de ordens baixa e alta, respectivamente. As variáveis λ_{UDS}^i e λ_{CDS}^i , também do Cap. 7, representam outro exemplo.

Roache *et al.* (1986) já sugerem o uso de ordens baixa e alta numa mesma malha para avaliar a acurácia de uma solução numérica. Roache (1998) enfatiza que bandas de erros de soluções numéricas diferentes devem se sobrepor. Conforme mostrado na seção 5.2, a solução

analítica exata (Φ) é envolvida ou limitada pelas extrapolações de Richardson calculadas com a ordem assintótica, $\phi_{\infty}(p_L)$, Eq. (5.15), e com a ordem aparente, $\phi_{\infty}(p_U)$, Eq. (5.16), quando a ordem aparente (p_U) é convergente. Isso está ilustrado nas Figs. 5.3 e 5.4.

Por definição, duas **soluções numéricas** são **coerentes** entre si quando a envolvente de ordem baixa (b) contém a envolvente de ordem alta (a), onde a envolvente é definida pelo intervalo compreendido entre $\phi_{\infty}(p_L)$ e $\phi_{\infty}(p_U)$. Para a situação em que as ordens aparentes das soluções numéricas obtidas com modelos numéricos de ordens baixa e alta são convergentes, o caso ideal de soluções numéricas coerentes é mostrado na Fig. 20.1. É dito ideal porque as soluções numéricas de ordens baixa e alta apresentam suas ordens aparentes dentro do intervalo convergente e, assim, tanto a envolvente de ordem baixa, $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ a $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$, quanto a envolvente de ordem alta, $\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$ a $\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$, contém a solução analítica exata (Φ). O problema é que na prática não se sabe se as soluções numéricas de ordem baixa ou alta, ou ambas, resultam em ordens aparentes que estejam dentro do intervalo convergente num dado h . Assim, é necessário assumir um procedimento que maximize as chances da solução analítica exata estar dentro de uma envolvente e, portanto, o erro estimado ser confiável.

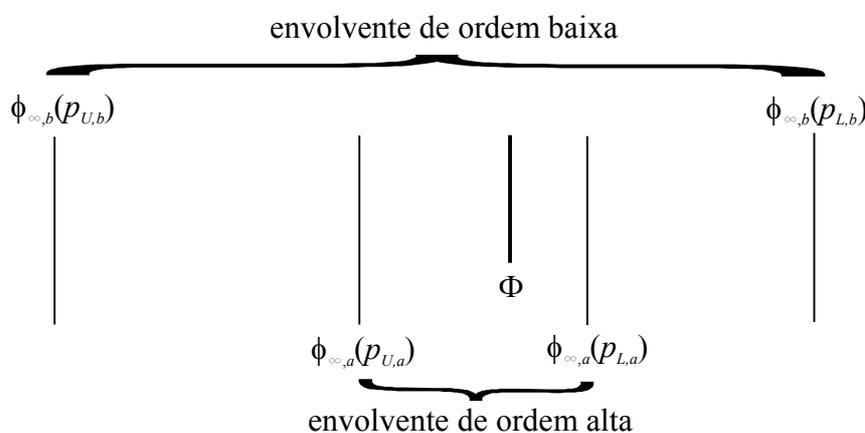


Figura 20.1 Exemplo do caso ideal de soluções numéricas coerentes.

Para cada variável de interesse, cuja solução analítica exata é Φ , o procedimento proposto aqui é baseado na comparação das soluções numéricas obtidas numa mesma malha com os tamanhos de seus elementos representados por h , mas usando-se aproximações numéricas de ordens baixa e alta. Para uma malha h e uma variável de interesse específicas, a solução de

ordem alta é usada para obter o intervalo de $\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$ a $\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$ dentro do qual espera-se que esteja a solução exata se a ordem aparente já for convergente para o h em consideração, Fig. 20.2. Para a mesma malha h e a mesma variável de interesse, usando-se uma aproximação numérica de ordem baixa, obtém-se o intervalo de $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ a $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$ dentro do qual espera-se que esteja a solução exata se a sua ordem aparente também já for convergente. Se o intervalo de solução obtido com a aproximação numérica de ordem alta estiver contido no intervalo de solução da aproximação numérica de ordem baixa, considera-se que as soluções numéricas são coerentes para a variável de interesse e a malha h consideradas.

A solução de ordem alta serve para dar credibilidade à solução de ordem baixa, que é usada tanto para diminuir quanto para estimar o erro de discretização através da solução numérica convergente (ϕ_C) e de sua incerteza (U_C), seção 5.3. A envolvente da aproximação numérica de ordem baixa, $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ a $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$, é escolhida para obter ϕ_C e U_C porque sua envolvente é maior do que a de ordem alta e, portanto, tem mais chance de conter a solução numérica exata (Φ). As posições de $\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$, $\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$, $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$ na Fig. 20.2 são apenas ilustrativas, isto é, suas posições relativas podem ser quaisquer, desde que a envolvente de ordem baixa contenha a de ordem alta.

20.2 VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS COERENTES

Definidas as aproximações numéricas de ordens baixa (índice b) e alta (índice a), conhecidos os seus respectivos valores de ordem assintótica ($p_{L,b}$ e $p_{L,a}$), e definidas as malhas supergrossa (h_3), grossa (h_2) e fina (h_1), e respectiva razão de refino de malhas (q) entre elas, o procedimento recomendado para cada variável de interesse é:

- 1) obter as soluções numéricas ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 com as aproximações numéricas de ordens baixa e alta; isso resulta em seis soluções numéricas sobre três malhas diferentes;
- 2) com as Eqs. (4.25) e (4.26), calcular a ordem aparente das soluções numéricas obtidas com as aproximações numéricas de ordens baixa e alta; só são válidos valores positivos, isto é, $p_U > 0$; se $p_U \leq 0$ ou não existir, sugere-se descartar as soluções da malha h_3 , obter novas soluções numa malha mais fina do que h_1 e refazer este item;
- 3) com as soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 da aproximação numérica de ordem baixa e suas ordens assintótica ($p_{L,b}$) e aparente ($p_{U,b}$), calcular através das Eqs. (5.15) e (5.16), respectivamente, os valores extrapolados $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$;

- 4) com as soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 da aproximação numérica de ordem alta e suas ordens assintótica ($p_{L,a}$) e aparente ($p_{U,a}$), calcular através das Eqs. (5.15) e (5.16), respectivamente, os valores extrapolados $\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$ e $\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$;
- 5) verificar se as soluções numéricas são coerentes, isto é, se $\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$ e $\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$ estão entre $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$; se não estão, recomenda-se a obtenção de soluções numéricas em uma malha mais fina do que h_1 e repetir o procedimento a partir do item 2; se estão, calcular o valor da solução numérica convergente (ϕ_C) e sua incerteza associada (U_C), com as extrapolações de ordem baixa, através das Eqs. (5.19) e (5.20); e
- 6) expressar a solução numérica relacionada à malha fina (h_1) através da Eq. (5.21).

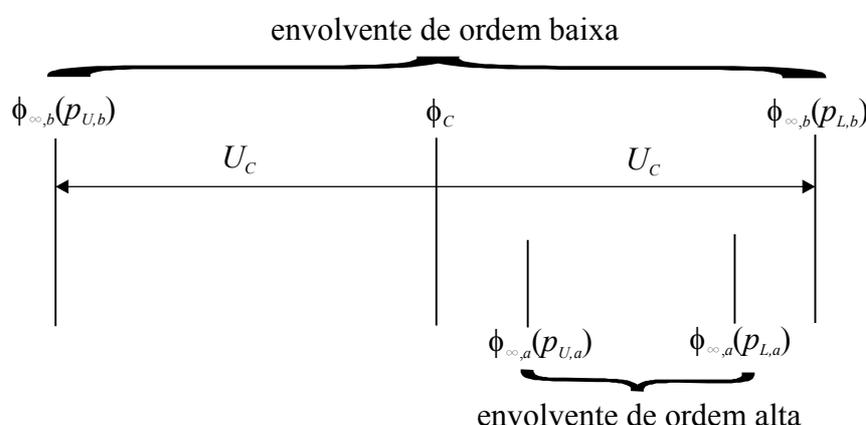


Figura 20.2 Definição prática de soluções numéricas coerentes.

Conforme explicado na seção 5.3, já que a solução analítica exata deve estar entre $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$, aproveita-se para melhorar a solução numérica, de ordem baixa, obtida na malha fina, $\phi_{1,b}$, através da diminuição do seu erro de discretização. Isso é feito usando-se estes dois valores extrapolados para obter ϕ_C através da Eq. (5.19). A incerteza U_C , Eq. (5.20), é calculada para facilitar a sua representação, pois tem a mesma magnitude para mais e para menos de ϕ_C , e é baseada no intervalo total sobre o qual espera-se que a solução exata esteja, isto é, entre $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$. Também de acordo com o que já foi visto na subseção 5.3.2, a ordem assintótica do erro de discretização de ϕ_C é igual à ordem dos erros dos valores extrapolados $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$. Por exemplo: se a aproximação numérica de ordem baixa for de $p_L = 1$, a ordem assintótica do erro de ϕ_C será 2.

O procedimento proposto acima é muito adequado quando são empregados códigos computacionais que usam (1) *multigrid* e (2) aproximações numéricas de ordem alta com correção adiada. A primeira característica resulta automaticamente na obtenção de soluções numéricas em diversas malhas diferentes. A segunda permite obter, por meio de um único parâmetro nos dados para executar o programa, soluções numéricas com aproximações numéricas de ordens baixa e alta. O procedimento descrito nesta seção para verificar se duas soluções numéricas são coerentes é aplicado, a seguir, a aproximações numéricas da Parte I deste trabalho, bem como a alguns casos abordados na Parte II.

20.3 EXEMPLO DA PARTE I

Este exemplo é aplicado ao cálculo da derivada de 1ª ordem da variável dependente, Λ^i , cuja solução analítica exata é $\Lambda^i = 2048$, conforme visto na subseção 2.9.1. A variável λ_{DDS}^i , definida na seção 2.5, é usada na obtenção das soluções numéricas de ordem baixa, cujos erros de discretização (E) e suas extrapolações de Richardson $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$ são mostrados na Tab. 20.1. Para a variável λ_{DDS}^i , o valor do erro é definido pela Eq. (2.42), $p_{L,b} = 1$, e os valores de $p_{U,b}$ podem ser vistos na Tab. 4.3. A variável λ_{DDS-2}^i , definida na seção 2.6, é usada na obtenção das soluções numéricas de ordem alta, cujos erros de discretização (E) e suas extrapolações de Richardson $\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$ e $\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$ são mostrados na Tab. 20.2. Para a variável λ_{DDS-2}^i , o valor do erro é definido pela Eq. (2.43), $p_{L,a} = 2$, e os valores de $p_{U,a}$ podem ser vistos na Tab. 4.4.

Observando-se as Tabs. 20.1 e 20.2, verifica-se que as soluções numéricas λ_{DDS}^i e λ_{DDS-2}^i são coerentes em qualquer h pois o intervalo entre $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$ contém o intervalo entre $\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$ e $\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$, qualquer que seja o valor de h . Na Fig. 5.8 são mostrados $E(\lambda_{DDS}^i)$ e $E_C(\lambda_{DDS}^i)$, representados na legenda por ε_τ e ε_C , respectivamente. $E_C(\lambda_{DDS}^i)$ é o erro de $(\lambda_{DDS}^i)_C$, que foi calculado com a Eq. (5.19). Nesta figura também são mostradas as incertezas de $\lambda_{DDS}^i(h)$ e de $(\lambda_{DDS}^i)_C$, representadas na legenda por $U_{Ri}(p_L)$ e U_C , respectivamente, onde U_C foi calculado com a Eq. (5.20). Nesta figura, a ordem de U_C é maior do que a ordem de U_{Ri} , conforme as inclinações das curvas em relação ao eixo das abscissas e deduzido na subseção 5.3.2.

Tabela 20.1 Aproximação numérica de λ_{DDS}^i , seu erro de discretização (E), e suas extrapolações de Richardson $\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$.

h	λ_{DDS}^i	$E(\lambda_{DDS}^i)$	$\phi_{\infty,b}(p_{L,b})$	$\phi_{\infty,b}(p_{U,b})$
4,00000000E+00	4,16000000E+03	-2,11200000E+03	não se aplica	não se aplica
2,00000000E+00	2,95200000E+03	-9,04000000E+02	1,74400000E+03	não se aplica
1,00000000E+00	2,46500000E+03	-4,17000000E+02	1,97800000E+03	2,136055478E+03
5,00000000E-01	2,24812500E+03	-2,00125000E+02	2,03125000E+03	2,074002776E+03
2,50000000E-01	2,146015625E+03	-9,80156250E+01	2,043906250E+03	2,055166780E+03
1,25000000E-01	2,096501953E+03	-4,850195313E+01	2,046988281E+03	2,049889710E+03
6,25000000E-02	2,072125244E+03	-2,412524414E+01	2,047748535E+03	2,048485795E+03
3,12500000E-02	2,060031281E+03	-1,203128052E+01	2,047937317E+03	2,048123198E+03
1,56250000E-02	2,054007816E+03	-6,007816315E+00	2,047984352E+03	2,048031023E+03
7,81250000E-03	2,051001954E+03	-3,001953602E+00	2,047996091E+03	2,048007784E+03
3,90625000E-03	2,049500488E+03	-1,500488341E+00	2,047999023E+03	2,048001949E+03

Tabela 20.2 Aproximação numérica de λ_{DDS-2}^i , seu erro de discretização (E), e suas extrapolações de Richardson $\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$ e $\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$.

h	λ_{DDS-2}^i	$E(\lambda_{DDS-2}^i)$	$\phi_{\infty,a}(p_{L,a})$	$\phi_{\infty,a}(p_{U,a})$
4,00000000E+00	6,40000000E+02	1,40800000E+03	não se aplica	não se aplica
2,00000000E+00	1,74400000E+03	3,04000000E+02	2,11200000E+03	não se aplica
1,00000000E+00	1,97800000E+03	7,00000000E+01	2,05600000E+03	2,040937931E+03
5,00000000E-01	2,03125000E+03	1,67500000E+01	2,04900000E+03	2,046937759E+03
2,50000000E-01	2,043906250E+03	4,09375000E+00	2,04812500E+03	2,047852194E+03
1,25000000E-01	2,046988281E+03	1,011718750E+00	2,048015625E+03	2,047980416E+03
6,25000000E-02	2,047748535E+03	2,514648438E-01	2,048001953E+03	2,047997476E+03
3,12500000E-02	2,047937317E+03	6,268310547E-02	2,048000244E+03	2,047999680E+03
1,56250000E-02	2,047984352E+03	1,564788818E-02	2,048000030E+03	2,047999960E+03
7,81250000E-03	2,047996091E+03	3,909111023E-03	2,048000004E+03	2,047999995E+03
3,90625000E-03	2,047999023E+03	9,769201279E-04	2,048000000E+03	2,047999999E+03

20.4 EXEMPLOS DA PARTE II

O procedimento descrito na seção 20.2 para verificar se duas soluções numéricas são coerentes é aplicado, a seguir, ao problema abordado no Cap. 13 e que envolve os Casos 9 e 10.

20.4.1 Variável Dependente

Este exemplo é aplicado ao cálculo da variável dependente, cuja solução analítica exata é $\Lambda^{(1/2)} = 0,006692851$, conforme visto na seção 13.1. As soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, do Caso 9, são consideradas as de ordem baixa, já que a ordem assintótica do erro de discretização delas é $p_{L,b} = 1$, conforme a Tab. 13.1. As soluções numéricas de $\lambda^{(1/2)}$, do Caso 10, são consideradas as de ordem alta, pois a ordem assintótica do erro de discretização delas é $p_{L,a} = 2$, conforme a Tab. 13.3.

Para $\lambda^{(1/2)}$, conforme a Tab. 13.3, em $h = 0,125$ e $0,0625$, a ordem aparente (p_U) não existe e, assim, não é possível verificar se as soluções numéricas são coerentes. Para $h = 0,03125$, $p_{U,b} = 1,229$ da Tab. 13.1 e $p_{U,a} = 1,832$ da Tab. 13.3. As extrapolações de Richardson para as soluções numéricas de ordem baixa resultam em $\phi_{\infty,b}(p_{L,b}) = 0,005308452$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b}) = 0,007209920$; estes dois valores envolvem a solução analítica exata mencionada acima. As extrapolações de Richardson para as soluções numéricas de ordem alta resultam em $\phi_{\infty,a}(p_{L,a}) = 0,006686601$ e $\phi_{\infty,a}(p_{U,a}) = 0,006731604$; estes dois valores também envolvem a solução analítica exata. Além disso, a envolvente de ordem baixa contém a envolvente de ordem alta, que por sua vez contém a solução exata; isso é genericamente representado na Fig. 20.1 e corresponde ao caso ideal de soluções numéricas coerentes, que ocorre quando as ordens aparentes (p_U) das soluções numéricas de ordem baixa e alta são ambas convergentes no h considerado, que é o caso em questão. O mesmo se verifica para os demais valores de $h \leq 0,03125$. Conseqüentemente a incerteza convergente (U_C) é confiável, isto é, $U_C/E_C \geq 1$, conforme desejado.

20.4.2 Média da Variável Dependente

Este exemplo é aplicado ao cálculo da média da variável dependente, cuja solução analítica exata é $\Lambda_m = 0,099954598$, conforme visto na seção 13.1. As soluções numéricas de λ_m , do Caso 9, são consideradas as de ordem baixa, já que a ordem assintótica do erro de discretização delas é $p_{L,b} = 1$, conforme a Tab. 13.1. As soluções numéricas de λ_m , do Caso 10, são consideradas as de ordem alta, pois a ordem assintótica do erro de discretização delas é $p_{L,a} = 2$, conforme a Tab. 13.3.

Para $h = 0,125$, $p_{U,b} = 0,848$ da Tab. 13.1 e $p_{U,a} = 10,60$ da Tab. 13.3. As extrapolações de Richardson para as soluções numéricas de ordem baixa resultam em $\phi_{\infty,b}(p_{L,b}) = 0,103659075$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b}) = 0,089280109$; estes dois valores envolvem a solução analítica exata mencionada acima. As extrapolações de Richardson para as soluções numéricas de ordem alta resultam em

$\phi_{\infty,a}(p_{L,a}) = 0,100040089$ e $\phi_{\infty,a}(p_{U,a}) = 0,099992050$; estes dois valores **não envolvem** a solução analítica exata. Entretanto, a envolvente de ordem baixa contém a envolvente de ordem alta; isso é genericamente representado na Fig. 20.2 e, portanto as soluções numéricas são coerentes. A incerteza convergente (U_C) é confiável, isto é, $U_C/E_C \geq 1$, conforme desejado.

20.4.3 Derivada de 1ª Ordem da Variável Dependente

Este exemplo é aplicado ao cálculo da derivada de 1ª ordem da variável dependente, Λ^i , cuja solução analítica exata é $(\Lambda^i)_0 = 0,000454020$, conforme visto na seção 13.1. As soluções numéricas de $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$, do Caso 9, são consideradas as de ordem baixa, já que a ordem assintótica do erro de discretização delas é $p_{L,b} = 1$, conforme a Tab. 13.1. As soluções numéricas de $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$, do Caso 10, são consideradas as de ordem alta, pois a ordem assintótica do erro de discretização delas é $p_{L,a} = 2$, conforme a Tab. 13.3.

Para $h = 0,125$, $p_{U,b} = 4,195$ da Tab. 13.1 e $p_{U,a} = 6,765$ da Tab. 13.3. As extrapolações de Richardson para as soluções numéricas de ordem baixa resultam em $\phi_{\infty,b}(p_{L,b}) = 0,028207191$ e $\phi_{\infty,b}(p_{U,b}) = 0,007016995$; estes dois valores **não envolvem** a solução analítica exata mencionada acima. As extrapolações de Richardson para as soluções numéricas de ordem alta resultam em $\phi_{\infty,a}(p_{L,a}) = 0,012004460$ e $\phi_{\infty,a}(p_{U,a}) = 0,000195196$; estes dois valores envolvem a solução analítica exata. Entretanto, a envolvente de ordem baixa não contém a envolvente de ordem alta e, portanto, as soluções numéricas **não são coerentes**. Neste caso, como é de se esperar para soluções numéricas incoerentes, a incerteza convergente (U_C) não é confiável, isto é, $U_C/E_C < 1$.

20.5 RESUMO DO CAPÍTULO 20

Foi definido o conceito de soluções numéricas coerentes, que envolve soluções numéricas obtidas com aproximações numéricas de ordens baixa e alta. Apresentou-se o procedimento para verificar quando duas soluções numéricas atendem a este conceito e feitos exemplos de aplicação. Em todos os casos analisados, embora não se tenha demonstrado que isso sempre ocorra, verificou-se que quando as soluções numéricas são coerentes, a incerteza convergente (U_C) é confiável, isto é, $U_C/E_C \geq 1$, conforme desejado.

Parte III.

FECHAMENTO DA PARTE III

O fechamento da Parte III deste trabalho está dividido em duas seções: escopo, e conclusão e contribuições; descritas a seguir.

III.1 ESCOPO DA PARTE III

Conforme a Tab. III.1, foram apresentadas soluções analíticas e numéricas de três equações diferenciais para as quais a variável independente é a coordenada x . Soluções analíticas exatas foram obtidas para a variável dependente (Λ) nas equações diferenciais, sua derivada primeira (Λ^i) e sua média ao longo do domínio de cálculo (Λ_m). Soluções numéricas foram obtidas para a variável dependente em $x = \frac{1}{2}$, $\lambda(\frac{1}{2})$, sua derivada primeira, obtida de duas formas em $x = 0$, $(\lambda_{DDS}^i)_0$ e $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$, e sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m). Empregou-se o método de diferenças finitas com malhas unidimensionais e tamanho (h) variável dos seus elementos, ou seja, malhas não-uniformes, e seis tipos de aproximações numéricas definidas e deduzidas no Cap. 14.

As soluções numéricas foram obtidas considerando-se a existência de erros de discretização nos nós das malhas, além dos erros de truncamento produzidos pelos seis tipos de aproximações numéricas empregados. O erro de discretização é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição. Portanto, não foram considerados os efeitos dos erros de iteração, de arredondamento e de programação que porventura possam existir.

III.2 CONCLUSÃO E CONTRIBUIÇÕES DA PARTE III

A conclusão e contribuições da Parte III deste trabalho podem ser resumidas nos seguintes pontos:

- 1) Mostrou-se que o tipo de refino de malhas não-uniformes que se usa afeta a magnitude do erro de discretização e a sua ordem assintótica.
- 2) Para equações diferenciais discretizadas com diferença central sobre malhas não-uniformes com refino por subdivisão uniforme, demonstrou-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente (λ) é igual à ordem assintótica obtida com malhas uniformes. Chegou-se à mesma conclusão para malhas não-uniformes refinadas com progressão geométrica.
- 3) Mostrou-se que não se deve usar o refino irregular de malhas não-uniformes com o intuito de se estimar erros de soluções numéricas.
- 4) Mostrou-se que para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente seja igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada.
- 5) Introduziu-se um procedimento, que funcionou em todos os testes efetuados, para verificar se duas soluções numéricas são coerentes e, em caso positivo, empregar o estimador convergente. Este procedimento pode ser empregado em malhas com quaisquer tamanhos (h) de elementos, isto é, finas ou grossas.

Tabela III.1 Casos abordados na Parte III.

Caso	Capítulo	equação diferencial	aproximações numéricas usadas na equação diferencial
11	16	$V \frac{d\Lambda}{dx} = 2x$	λ_{UDS}^i
12	17	$V \frac{d\Lambda}{dx} = 2x$	λ_{CDS}^i
13	18	$\frac{d^2\Lambda}{dx^2} = 6x$	λ_{CDS}^{ii}
14	19	$Pe \frac{d\Lambda}{dx} = \frac{d^2\Lambda}{dx^2}$	λ_{CDS}^i e λ_{CDS}^{ii}

Capítulo 21.

CONCLUSÃO

A conclusão deste trabalho está dividida em cinco seções: escopo do trabalho, conclusão geral, contribuições, trabalhos futuros e comentários finais; descritos a seguir.

21.1 ESCOPO DO TRABALHO

Foram apresentadas soluções analíticas e numéricas de nove equações diferenciais para as quais a variável independente é a coordenada x . Soluções analíticas exatas foram obtidas para a variável dependente (Λ) nas equações diferenciais, sua derivada primeira (Λ^i) e sua média ao longo do domínio de cálculo (Λ_m). Soluções numéricas foram obtidas para a variável dependente em $x = \frac{1}{2}$, $\lambda(\frac{1}{2})$, sua derivada primeira, obtida de duas formas em $x = 0$, $(\lambda_{DDS}^i)_0$ e $(\lambda_{DDS-2}^i)_0$, e sua média ao longo do domínio de cálculo (λ_m). Empregou-se o método de diferenças finitas sobre malhas unidimensionais com tamanhos (h) constantes e variáveis dos seus elementos, ou seja, malhas uniformes e não-uniformes, e seis tipos de aproximações numéricas definidas e deduzidas nos Caps. 2, 7 e 14.

As soluções numéricas foram obtidas considerando-se a existência de erros de discretização nos nós das malhas, além dos erros de truncamento produzidos pelos seis tipos de aproximações numéricas empregados. O erro de discretização é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição. Portanto, não foram considerados os efeitos dos erros de iteração, de arredondamento e de programação que porventura possam existir. Os estimadores de erro empregados no cálculo da incerteza das soluções numéricas são os estimadores delta, de Richardson e *GCI*, existentes na literatura, e bicoeficiente, tricoeficiente, multicoeficiente e convergente, introduzidos neste trabalho. Todos estes estimadores se baseiam em duas ou mais soluções numéricas obtidas em malhas diferentes, isto é, são estimadores *a posteriori*.

21.2 CONCLUSÃO GERAL

A conclusão geral do presente trabalho pode ser resumida nos pontos a seguir.

Analogia Entre as Equações dos Erros de Truncamento e de Discretização:

- 1) Em termos gerais, para qualquer equação diferencial e tamanhos (h) dos elementos da malha, não é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento (ε_τ), Eq. (2.2), e a equação geral do erro de discretização (E), Eq. (3.2). Isso ocorre porque os coeficientes de E podem ser função de h , enquanto que os coeficientes de ε_τ independem de h .
- 2) A implicação disso é que estimadores de erro com maior número de coeficientes, como os estimadores bicoeficiente e tricoeficiente, não garantem incertezas mais acuradas ou confiáveis do que o estimador de Richardson.
- 3) Esta analogia é válida apenas para o limite de $h \rightarrow 0$ ou para equações diferenciais muito simples.

Ordem Aparente (p_U) da Incerteza (U):

- 1) Além dos tamanhos (h) dos elementos da malha, o valor de p_U depende da razão de refino de malha (q).
- 2) Para todos os casos e variáveis numéricas, verificou-se a existência de um intervalo convergente da ordem aparente (p_U) quando $h \rightarrow 0$. Neste intervalo, p_U tende monotonicamente à ordem assintótica (p_L).
- 3) Porém, em malhas grossas, isto é, fora do intervalo convergente, p_U pode assumir valores muito maiores ou menores do que a ordem assintótica (p_L), valores negativos ou até ser indefinido.

Ordem Assintótica (p_L) do Erro de Discretização (E):

- 1) Para uma mesma equação diferencial, as ordens assintóticas (p_L) dos erros de discretização (E) das variáveis numéricas (λ , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_m) podem ser todas iguais ou diferentes entre si.
- 2) O tipo de refino de malhas não-uniformes que se usa afeta a magnitude da ordem assintótica do erro de discretização.

- 3) Para equações diferenciais discretizadas com diferença central sobre malhas não-uniformes e com refino por subdivisão uniforme, a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente (λ) é igual à ordem assintótica obtida com malhas uniformes. A mesma conclusão é válida para malhas não-uniformes refinadas com progressão geométrica.
- 4) Para refino irregular de malhas não-uniformes, não se consegue obter a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da solução numérica porque a ordem sempre varia e não tende a um valor constante à medida que a malha é refinada, isto é, quando $h \rightarrow 0$. Portanto, não se recomenda o uso deste tipo de refino de malha com o intuito de se estimar erros de soluções numéricas.
- 5) Para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente seja igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada.

Erro de Discretização (E):

- 1) As expressões para o erro de discretização (E) de λ , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_m , obtidas através da série de Taylor, avaliam corretamente o valor de E , na magnitude e no sinal, quaisquer que sejam os tamanhos (h) dos elementos da malha, tanto para malhas uniformes quanto não-uniformes, para equações lineares ou não-lineares.
- 2) O valor do erro de discretização (E) tende a zero quando $h \rightarrow 0$. Portanto, todas as soluções numéricas obtidas neste trabalho são consistentes.
- 3) O erro de discretização (E) pode ser nulo em $h \neq 0$, mesmo que ele tenha sido produzido apenas por erros de truncamento, isto é, sem erros de iteração, de arredondamento e de programação.
- 4) O tipo de refino de malhas não-uniformes que se usa afeta a magnitude do erro de discretização.
- 5) Com as Eqs. (5.13) e (5.14), concluiu-se que o erro de discretização (E) é envolvido pelas incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ quando p_U é convergente, onde $U_{Ri}(p_L)$ é a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.6) com a ordem assintótica (p_L), e $U_{Ri}(p_U)$ é a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida através da Eq. (5.7) com a ordem aparente (p_U). Em outras palavras, $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$ constituem limites inferior e superior do erro. Portanto, estas duas incertezas são confiáveis, isto é, $U/E \geq 1$. Assim, se p_U é subconvergente, $U_{Ri}(p_U)$

é confiável, conforme a Eq. (5.13), e se p_U é superconvergente, $U_{Ri}(p_L)$ é confiável, conforme a Eq. (5.14). Com a Eq. (5.12) e sua análoga para p_U superconvergente, verificou-se que, quanto mais próximo p_U estiver de p_L , mais próximas da unidade estarão as efetividades das incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$. Conseqüentemente, mais acuradas serão estas estimativas de erro.

- 6) Com as Eqs. (5.17) e (5.18), concluiu-se que a solução analítica exata (Φ) é envolvida pelas extrapolações de Richardson calculadas com a ordem assintótica, $\phi_\infty(p_L)$, Eq. (5.15), e com a ordem aparente, $\phi_\infty(p_U)$, Eq. (5.16), quando p_U é convergente. Em outras palavras, $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$ constituem limites inferior e superior da solução analítica exata (Φ). Aqui também, da mesma forma que ocorre entre $U_{Ri}(p_L)$ e E , quanto mais próximo p_U estiver de p_L , mais próximo da unidade estarão as razões de $\phi_\infty(p_L)$ e $\phi_\infty(p_U)$ em relação a Φ .

Estimadores de Erro:

- 1) Dentro do intervalo convergente de p_U , estimadores de erro com maior número de coeficientes, como os estimadores bicoeficiente e tricoeficiente resultam em incertezas mais acuradas do que o estimador de Richardson.
- 2) No caso do estimador de Richardson, para se fazer uma estimativa de erro confiável, deve-se usá-lo com base na ordem aparente (p_U), Eq. (6.1), ou na ordem assintótica (p_L), Eq. (6.2), dependendo do comportamento de p_U ser subconvergente ou superconvergente, respectivamente.
- 3) No caso do estimador delta, para se fazer uma estimativa de erro confiável, deve-se atender à condição dada na Eq. (6.7) se a ordem aparente (p_U) é subconvergente, ou à condição dada na Eq. (6.5) se a ordem aparente (p_U) é superconvergente.
- 4) Pelo menos quando a ordem aparente é convergente, o estimador GCI é desnecessário. Isso ocorre porque se aplicado adequadamente, isto é, usando-se p_L ou p_U no seu cálculo para os casos superconvergente ou subconvergente, respectivamente, basta empregar $F_S = 1$, o que resulta em reduzi-lo ao estimador de Richardson, de acordo com a Eq. (3.38).
- 5) Devido à sua concepção, a incerteza calculada com o estimador convergente, Eq. (5.20), é automaticamente confiável quando a ordem aparente (p_U) é convergente.
- 6) Para um determinado problema cuja malha tem elementos de tamanho h_j e cuja ordem aparente não está no intervalo convergente, não existe qualquer garantia para realizar estimativas de erro confiáveis. Nesta situação, todos os estimadores de erro vistos (delta, de Richardson, GCI , bicoeficiente, tricoeficiente e convergente) podem subestimar ou

superestimar em muito o erro de discretização, isto é, podem ser inacurados e sem confiabilidade. Um procedimento alternativo, que funcionou em todos os testes efetuados, é verificar se as soluções numéricas são coerentes e, em caso positivo, empregar o estimador convergente.

21.3 CONTRIBUIÇÕES

As contribuições do presente trabalho podem ser resumidas nos seguintes pontos:

- 1) Foram introduzidos quatro novos estimadores de erro, *a posteriori*, denominados bicoeficiente, tricoeficiente, multicoeficiente e convergente.
- 2) Foram definidos dois tipos de curva esperados para a ordem aparente (p_U) quando os tamanhos (h) dos elementos da malha tendem a zero: intervalos subconvergente e superconvergente; sendo ambos referenciados genericamente por ordem aparente convergente.
- 3) Para os casos em que a ordem aparente é convergente, foi demonstrado que: o erro de discretização (E) é envolvido pelas incertezas $U_{Ri}(p_L)$ e $U_{Ri}(p_U)$, onde $U_{Ri}(p_L)$ é a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida com a ordem assintótica (p_L), e $U_{Ri}(p_U)$ é a incerteza de Richardson (U_{Ri}) obtida com a ordem aparente (p_U); e a solução analítica exata (Φ) é envolvida pelas extrapolações de Richardson calculadas com a ordem assintótica, $\phi_\infty(p_L)$, e com a ordem aparente, $\phi_\infty(p_U)$.
- 4) Para os estimadores de erro delta, de Richardson e GCI , foram demonstradas as condições que são suficientes para se realizar estimativas de erro confiáveis quando a ordem aparente é convergente.
- 5) Mostrou-se que, em termos gerais, para quaisquer equações diferenciais e tamanhos (h) dos elementos da malha, não é válida a analogia entre a equação geral do erro de truncamento (ε_t) e a equação geral do erro de discretização (E). Esta analogia é assumida como base nos estimadores de erro do tipo de Richardson.
- 6) Verificou-se que em malhas grossas, isto é, fora do intervalo convergente de p_U , todos os estimadores de erro vistos (delta, de Richardson, GCI , bicoeficiente, tricoeficiente e convergente) podem subestimar ou superestimar em muito o erro de discretização, ou seja, podem ser inacurados e sem confiabilidade.
- 7) Mostrou-se que o tipo de refino de malhas não-uniformes que se usa afeta a magnitude do erro de discretização e a sua ordem assintótica.

- 8) Para equações diferenciais discretizadas com diferença central sobre malhas não-uniformes com refino por subdivisão uniforme, demonstrou-se e verificou-se que a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização (E) da solução numérica da variável dependente (λ) é igual à ordem assintótica obtida com malhas uniformes. Chegou-se à mesma conclusão para malhas não-uniformes refinadas com progressão geométrica.
- 9) Mostrou-se que para malhas não-uniformes é incorreto admitir que a ordem assintótica do erro de discretização da variável dependente seja igual à ordem assintótica do erro de truncamento da equação discretizada.
- 10) Introduziu-se um procedimento, que funcionou em todos os testes efetuados, para verificar se duas soluções numéricas são coerentes e, em caso positivo, empregar o estimador convergente. Este procedimento pode ser usado em malhas com quaisquer tamanhos (h) de elementos, isto é, finas ou grossas.

21.4 TRABALHOS FUTUROS

São sugeridos três temas para a continuação do presente trabalho, denominados de volumes finitos, multidimensão e erros iterativos. Para o primeiro tema, volumes finitos, sugere-se estender a este método as análises feitas no presente trabalho com o método de diferenças finitas. Neste tema, além de malhas uniformes, deveriam ser considerados os casos de malhas não-uniformes de faces centradas entre nós e de nós centrados entre faces da malha.

Para o segundo tema, multidimensão, a sugestão é verificar se conceitos como ordem aparente convergente, estimador convergente, soluções coerentes, entre outros, empregados neste trabalho, podem ser aplicados em casos multidimensionais. Isto é, casos em que existem duas ou três dimensões espaciais e eventualmente a dimensão temporal. Nestes casos multidimensionais, pode-se fazer refinamentos de malhas em cada dimensão separadamente ou em todas simultaneamente. O efeito destes dois tipos de refino precisa ser investigado. Além disso, o efeito de se usar malhas cartesianas, não-ortogonais ou não-estruturadas precisaria ser analisado.

Finalmente, para o terceiro tema, erros iterativos, sugere-se estudar suas interações com erros de truncamento e formas de estimá-los e reduzi-los. Os poucos trabalhos que tratam de erros iterativos geralmente avaliam o resíduo das equações de conservação ou a simples diferença da variável de interesse entre iterações sucessivas. As duas formas não estimam o valor absoluto do erro iterativo, o que deveria ser feito para compô-lo com o erro de truncamento e,

então, poder estimar o erro numérico, isto é, a composição dos erros de truncamento com os erros iterativos de qualquer variável de interesse.

21.5 COMENTÁRIOS FINAIS

Dentro do escopo deste trabalho, verificou-se que os estimadores do erro de discretização de soluções numéricas que são empregados atualmente não são confiáveis, nem acurados, para os casos em geral. Para problemas unidimensionais, este trabalho melhorou a confiabilidade das estimativas de erro ao introduzir o conceito de soluções numéricas coerentes. Foram propostos trabalhos para estender este conceito a problemas multidimensionais e ao método dos volumes finitos. Ainda é necessário muito avanço para afirmar, com algum grau aceitável de confiabilidade, qual é o valor da estimativa do erro da solução numérica de um problema de interesse prático, por exemplo, para um escoamento tridimensional turbulento.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

AESCHLIMAN, D. P.; OBERKAMPF, W. L. Experimental methodology for computational fluid dynamics code validation. *AIAA Journal*, v. 36, n. 5, p. 733-741, 1998.

AIAA. Editorial policy statement on numerical accuracy and experimental uncertainty. *AIAA Journal*, v. 32, n. 1, p. 3, 1994.

AIAA. *Assessment of Wind Tunnel Data Uncertainty, Standard*, AIAA S-071-1995. Washington, USA, 1995.

AIAA. *Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations*, AIAA G-077-1998. Reston, USA, 1998.

AINSWORTH, M.; ODEN, J. T. A posteriori error estimation in finite element analysis. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v. 142, p. 1-88, 1997.

AMALADAS, J. R.; KAMATH, H. Accuracy assessment of upwind algorithms for steady-state computations. *Computers and Fluids*, v. 27, n. 8, p. 941-962, 1998.

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

BABUSKA, L.; IHLENBURG, F.; STROUBOULIS, T.; GANGARAJ, S. K. A posteriori error estimation for finite element solutions of Helmholtz' equation. Part I: the quality of

- local indicators and estimators. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 40, p. 3443-3462, 1997.
- BALDWIN, B. S.; LOMAX, H. Thin layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows. In: *AIAA 16th Aerospace Sciences Meeting*. Huntsville, AL, USA. AIAA paper 78-257, 1978.
- BARBER, T. J. Role of code validation and certification in the design environment. *AIAA Journal*, v. 36, n. 5, p. 752-758, 1998.
- BLOTTNER, F. G. Accurate Navier-Stokes results for the hypersonic flow over a spherical nosetip. *Journal of Spacecraft and Rockets*, v. 27, n. 2, p. 113-122, 1990.
- BRONSTEIN, I.; SEMENDIAEV, K. *Manual de Matemática para Engenheiros e Estudantes*, MIR, Moscou, 1979.
- BUI, T. T. Some practical turbulence modeling options for Reynolds-averaged full Navier-Stokes calculations of three-dimensional flows. In: *AIAA 24th Fluid Dynamics Conference*, Orlando, FL, USA. AIAA paper 93-2964, 1993.
- CELIK, I. Numerical uncertainty in fluid flow calculations: needs for future research. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 115, p. 194-195, 1993.
- CELIK, I.; CHEN, C. J.; ROACHE, P. J.; SCHEUERER, G. *Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics*. ASME, FED-Vol. 158, 1993.
- CELIK, I.; KARATEKIN, O. Numerical experiments on application of Richardson extrapolation with nonuniform grids. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 119, p. 584-590, 1997.
- CELIK, I.; ZHANG, W. M. Calculation of numerical uncertainty using Richardson extrapolation: application to some simple turbulent flow calculations. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 117, p. 439-445, 1995.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. *Introduction to Computing for Engineers*. 2nd ed. New York : McGraw-Hill, 1994.

COLEMAN, H. W.; STEELE, W. G. *Experimentation and Uncertainty Analysis for Engineers*. 2nd ed. New York : Wiley, 1999.

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

De VAHL DAVIS, G. Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 3, p. 249-264, 1983.

DEMIRDZIC, I.; LILEK, Z.; PERIC, M. Fluid flow and heat transfer test problems for non-orthogonal grids: bench-mark solutions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 15, p. 329-354, 1992.

DEMUREN, A. O.; WILSON, R. V. Estimating uncertainty in computations of two-dimensional separated flows. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 116, p. 216-220, 1994.

DORN, W. S.; MCCRACKEN, D. D. *Cálculo Numérico com Estudos de Casos em Fortran IV*. Rio de Janeiro : Campus, 1981.

DOUGLASS, R. W.; RAMSHAW, J. D. Perspective: future research direction in computational fluid dynamics. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 116, p. 212-215, 1994.

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

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 2nd ed. Berlin : Springer, 1999.

FLETCHER, C. A. J. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*. 2nd ed. Berlin :

Springer, 1997.

FORTUNA, A. O. *Técnicas Computacionais Para Dinâmica dos Fluidos*. São Paulo : Edusp, 2000.

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

FREITAS, C. J. Perspective: selected benchmarks from commercial CFD codes. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 117, p. 208-218, 1995.

GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. T. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, v. 48, p. 387-411, 1982.

GRESHO, P. M.; GARTLING, D. K.; TORCZYNSKI, J. R.; KLIFFE, K. A.; WINTERS, K. H.; GARRATT, T. J.; SPENCE, A.; GOODRICH, J. H. Is the steady viscous incompressible two-dimensional flow over a backward-facing step at $Re=800$ stable?. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 17, p. 501-541, 1993.

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

HABASHI, W. G.; DOMPIERRE, J.; BOURGAULT, Y.; FORTIN, M.; VALLET, M. G. Certifiable computational fluid dynamics through mesh optimization. *AIAA Journal*, v. 36, n. 5, p. 703-711, 1998.

HAMMING, R. W. *Numerical Methods for Scientists and Engineers*. 2nd ed. New York : Dover, 1973.

HAYASE, T.; HUMPHREY, J. A. C.; GREIF, R. A consistently formulated QUICK scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures. *Journal of Computational Physics*, v. 98, p. 108-118, 1992.

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

HOFFMAN, J. D. Relationship between the truncation errors of centered finite-difference approximations on uniform and nonuniform meshes. *Journal of Computational Physics*, v. 46, p. 469-474, 1982.

HOLMAN, J. P. *Experimental Methods for Engineers*. New York : McGraw-Hill, 1994.

HORTMANN, M.; PERIC, M.; SCHEUERER, G. Finite volume multigrid prediction of laminar natural convection: bench-mark solutions. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 11, p. 189-207, 1990.

ILINCA, A.; CAMARERO, R.; TRÉPANIÉ, J. Y.; REGGIO, M. Error estimator and adaptive moving grids for finite volume schemes. *AIAA Journal*, v. 33, n. 11, p. 2058-2065, 1995.

INCROPERA, F. P.; DeWITT, D. P. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 4th ed. New York : Wiley, 1996.

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

JAMESON, A.; MARTINELLI, L. Mesh refinement and modeling errors in flow simulation. *AIAA Journal*, v. 36, n. 5, p. 676-686, 1998.

KIM, N.; ANAND, N. K.; RHODE, D. L. A study on convergence criteria for a simple-based finite-volume algorithm. *Numerical Heat Transfer, Part B*, v. 34, p. 401-417, 1998.

KLINE, S. J.; CANTWELL, B. J.; LILLEY, G. M. *1980-81 AFOSR-HTTM-Stanford Conference on Complex Turbulent Flows*. Mechanical Engineering Dept., Stanford University. Stanford, CA, USA, 1981.

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

LeVEQUE, R. J. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Berlin : Birkhäuser, 1992.

MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Rio de Janeiro : LTC, 1995.

MARVIN, J. G. Perspective on computational fluid dynamics validation. *AIAA Journal*, v. 33, n. 10, p. 1778-1787, 1995.

MEHTA, U. B. Guide to credible computer simulations of fluid flows. *Journal of Propulsion and Power*, v. 12, n. 5, 940-948, 1996.

MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.; PLETCHER, R.H. *Handbook of Numerical Heat Transfer*. New York : Wiley, 1988.

OBERKAMPF, W. L.; AESCHLIMAN, D. P. Joint computational/experimental aerodynamics research on a hypersonic vehicle, part 1: experimental results. *AIAA Journal*, v. 30, n. 8, p. 2000-2009, 1992.

OBERKAMPF, W. L.; BLOTTNER, F. G. Issues in computational fluid dynamics code verification and validation. *AIAA Journal*, v. 36, n. 5, p. 687-695, 1998.

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

PEPPER, D. W.; BAKER, A. J. Finite differences versus finite elements.

In: *Handbook of Numerical Heat Transfer*. Eds. MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.; PLETCHER, R.H. New York : Wiley, 1988.

PLETCHER, R. H.; MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.

Overview of basic numerical methods. In: MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.; PLETCHER, R.H. *Handbook of Numerical Heat Transfer*. New York : Wiley, 1988.

- RICHARDSON, L. F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A*, v. 210, 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*, v. 226, p. 299-361, 1927.
- RIZZI, A.; VOS, J. Toward establishing credibility in computational fluid dynamics simulations. *AIAA Journal*, v. 36, n. 5, p. 668-675, 1998.
- ROACHE, P. J. *Computational Fluid Dynamics*, Albuquerque, USA : Hermosa, 1972.
- ROACHE, P. J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 116, p. 405-413, 1994.
- ROACHE, P. J. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*, Albuquerque, USA : Hermosa, 1998.
- ROACHE, P. J.; GHIA, K. N.; WHITE, F. M. Editorial policy statement on the control of numerical accuracy. *ASME Journal of Fluids Engineering*, v. 108, p. 2, 1986.
- ROY, C. J.; EDWARDS, J. R. Numerical simulation of a three-dimensional flame/shock wave interaction. *AIAA Journal*, v. 38, n. 5, p. 745-754, 2000.
- RUDY, D. H.; THOMAS, J. L.; KUMAR, A.; GNOFFO, P. A.; CHAKRAVARTHY, S. R. Computation of laminar hypersonic compression-corner flows. *AIAA Journal*, v. 29, n. 7, p. 1108-1113, 1991.
- SANTOS, L. A.; VASCONCELLOS, J. F. V.; MALISKA, C. R. Análise da acurácia de aproximações do laplaciano em volumes finites usando diagramas de Voronoi. In: *Anais do VI Encontro Nacional de Ciências Térmicas*. Rio de Janeiro : ABCM, p. 565-570, 1996.

- SETTLES, G. S.; DODSON, L. J. Supersonic and hypersonic shock/boundary-layer interaction database. *AIAA Journal*, v. 32, p. 1377-1383, 1994.
- SETTLES, G. S.; VAS, I. E.; BOGDONOFF, S. M. Details of a shock-separated turbulent boundary layer at a compression corner. *AIAA Journal*, v. 14, p.1709-1715, 1976.
- SHIH, T. M. A procedure to debug computer programs. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, v. 21, p. 1027-1037, 1985.
- STEPHENS, M. A.; SHIH, T. I. P. Flow and heat transfer in a smooth U-duct with and without rotation. *Journal of Propulsion and Power*, v. 15, n. 2, p. 272-279, 1999.
- STRAUSS, D.; AZEVEDO, J. L. F.; SILVA, L. F. F. On the application of higher order schemes for compressible flows. In: *Proceedings of 20th Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*. São Paulo, 1999. CD-ROM, paper 49.
- SZABÓ, B.; BABUSKA, I. *Finite Element Analysis*. New York : Wiley, 1991.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 2nd ed. Washington : Taylor & Francis, 1997.
- VISBAL, M.; KNIGHT, D. The Baldwin-Lomax turbulence model for two-dimensional shock-wave/boundary-layer interaction. *AIAA Journal*, v. 22, p. 921-928, 1984.
- WALKER, M. M.; OBERKAMPF, W. L. Joint computational/experimental aerodynamics research on a hypersonic vehicle, part 2: computational results. *AIAA Journal*, v. 30, n. 8, p. 2010-2016, 1992.
- ZHU, J. Z.; ZIENKIEWICZ, O. C. Superconvergence recovery technique and *a posteriori* error estimates. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 30, p. 1321-1339, 1990.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method*. 4th ed. New York : McGraw-Hill, v. 1, 1989.