



UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE LONDRINA

GABRIEL HENRIQUE SILVEIRA PARIZOTO

**RESOLUÇÃO DE EDPS ELÍPTICAS POR MEIO DO
MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS EM MALHAS NÃO
ESTRUTURADAS TRIANGULARES**

Londrina

2023

GABRIEL HENRIQUE SILVEIRA PARIZOTO

**RESOLUÇÃO DE EDPS ELÍPTICAS POR MEIO DO
MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS EM MALHAS NÃO
ESTRUTURADAS TRIANGULARES**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial para a obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada e Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Gylles Ricardo Ströher

Londrina

2023

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UEL

Dados Internacionais de Catalogação (CIP)

P234r	<p>Silveira, Gabriel Henrique Silveira. Resolução de EDPs elípticas por meio do método dos volumes finitos em malhas não estruturadas triangulares / Gabriel Henrique Silveira Parizoto. – Londrina, 2023. 162 f. : il.</p> <p>Orientador: Gylles Ricardo Ströher. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) Universidade Estadual de Londrina, Centro de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional, 2023.</p> <p>Inclui Bibliografia.</p> <p>1. Métodos numéricos - Tese. 2. Equações Diferenciais Parciais - Tese. 3. Ordem de convergência - Tese. 4. Malhas não estruturadas - Tese. I. Ströher, Gylles Ricardo. II. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional. III. Título.</p> <p style="text-align: right;">CDU 51</p>
-------	--

GABRIEL HENRIQUE SILVEIRA PARIZOTO

**RESOLUÇÃO DE EDPS ELÍPTICAS POR MEIO DO
MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS EM MALHAS NÃO
ESTRUTURADAS TRIANGULARES**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial para a obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada e Computacional.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Gylles Ricardo Ströher
(Orientador)
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Profa. Dra. Neyva Maria Lopes Romeiro
Universidade Estadual de Londrina

Profa. Dra. Claudia Regina de Andrade
Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Londrina, 31 de Julho de 2023.

Young man, in mathematics you don't understand things. You just get used to them.
John von Neumann

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família por toda ajuda e suporte que me forneceram, desde os primeiros dias de vida até a conclusão desta etapa. Não teria conseguido sem vocês.

Agradeço à minha namorada, Thais, pela companhia, paciência, amor e carinho. Não teria conseguido sem você.

Agradeço aos meus amigos por me proporcionarem bons momentos, em especial neste período.

Agraço aos meus professores, desde os que tive durante a escola até os do mestrado, em especial ao Professor Gylles pela ótima orientação. Todo meu crescimento acadêmico só foi possível graças à dedicação de vocês.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

PARIZOTO, Gabriel Henrique Silveira. **Resolução de EDPs Elípticas por meio do Método dos Volumes Finitos em malhas não estruturadas triangulares**. 2023. 162. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2023.

RESUMO

O presente trabalho apresenta o desenvolvimento de um código computacional capaz de resolver, numericamente, Equações Diferenciais Parciais Elípticas (EDPEs) por meio do Método dos Volumes Finitos (MVF), formulado em domínios discretizados por malhas não estruturadas triangulares e com coeficientes de difusão dependentes da posição, cuja ordem de convergência teórica é $O(h^2)$. Também expõe um estudo computacional da sensibilidade da ordem de convergência deste esquema em relação à qualidade dos elementos utilizados na tecelagem da malha, uma análise de custo computacional envolvido na solução destes problemas, uma investigação a respeito da influência do coeficiente de difusão na ordem de convergência e aplicações práticas desta metodologia na resolução de problemas modelos. De modo a atestar a qualidade da metodologia numérica apresentada, um processo de verificação do código é realizado resolvendo-se várias EDPEs, construídas por meio do Método das Soluções Fabricadas (MSF), e comparando os resultados obtidos com suas respectivas soluções exatas. Tais problemas são discretizados por malhas de diferentes níveis de qualidade e refinamento, geradas de dois modos distintos: metodologia própria e uso de um gerador de código-fonte aberto, sendo então solucionados pelo código desenvolvido. Os resultados das simulações são avaliados e os erros entre as diversas soluções numéricas e suas respectivas soluções analíticas são comparados, de forma a se obter a ordem de convergência de cada uma das simulações. Os cálculos evidenciam uma forte correlação entre a ordem de convergência do esquema proposto e os formatos dos volumes que compõem as malhas utilizadas, de modo que triângulos mais afastados do formato equilátero culminam por introduzir maiores erros nas soluções. Ainda, o aparecimento de volumes distorcidos nas malhas resulta numa maior exigência de recurso computacional para a execução do algoritmo. Apesar deste inconveniente, as soluções numéricas obtidas não destoam consideravelmente de suas respectivas soluções analíticas, mesmo nos casos em que malhas mais distorcidas são utilizadas, reforçando a hipótese de que o método proposto e o código fornece bons resultados. O custo computacional das soluções se mostrou inversamente proporcional à quantidade de iterações máximas permitidas para a execução do método de Gauss-Seidel, sendo este ganho de desempenho limitado, mas significativo. Finalmente, as aplicações práticas apresentadas demonstram o potencial do código desenvolvido de resolver problemas reais, que pode ser útil a diversas áreas do conhecimento.

Palavras-chave: Métodos Numéricos, Malhas Bidimensionais Distorcidas, Ordem de Convergência, Reconstrução Diamante por Green-Gauss.

PARIZOTO, Gabriel Henrique Silveira. **Solution of elliptic PDEs by means of the Finite Volume Method on unstructured triangular meshes.** 2023. 162. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2023.

ABSTRACT

This work presents the development of a computational code capable to solve, numerically, Elliptic Differential Partial Equations (EPDEs) by means of the Finite Volume Method (FVM), formulated on domains discretized by triangular unstructured meshes and presenting position dependent diffusion coefficient, which the theoretical order of accuracy is $O(h^2)$. The present work also exposes a computational study of the sensibility showed by the order of accuracy due to the quality of the elements utilized on the grid fabrication, an analysis of the computational cost required by the solution of these problems, a investigation in respect of the influence of the diffusion coefficient over the order of accuracy and, by the last, practical applications of this methodology on the solution of model problems. In order to atest the quality of the presented numerical methodology, we perform a process to verify the code by solving several EPDEs, made by means of the Method of Manufactured Solutions (MMS), and comparing the obtained results with those obtained analitically. Those problems are discretized using meshes of several quality levels and refinement, generated by two different process: the first is a own methodology, the second is using an open-source code, and then solved by the developed code. The results are evaluated and the errors between the numerical solutions and its respectivities analytical solutions are compared, in a way to obtain the order of accuracy of each simulation. The calculations showed a strong evidence that exists a correlation between the order of accuracy of the proposed scheme and the format of the control volumes that compose the meshes that were utilized, in a sense that triangles with the format away from its equilateral form tends to introduce bigger erros on the solutions. Moreover, those distorted volumes implies in a adittion of the computational cost required by the algorithm. Despite this inconvenient, the numerical solutions that were obtained did not deviate considerably from its analytical benchmarks, even in cases were highly distorted meshes were used, reinforcing the hyphotesis that the proposed method is pretty capable to output goods results. The computational cost of the solutions showed to be inversely proportional to the maximum number of itetations allowed to the Gauss-Seidel algorithm, with this gain being limited, but significant. Finally, the practical scenarios presented demonstrate the potential of the code to solve real problems, that could be useful to many areas of science and technology.

Keywords: Numerical Methods, Bidimensional Distorted Meshes, Order of Accuracy, Green-Gauss Diamond Reconstruction.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	23
1.1	OBJETIVOS	25
1.1.1	Objetivo geral	25
1.1.2	Objetivos específicos	25
1.2	ESTRUTURA DO TRABALHO	26
2	REFERENCIAL TEÓRICO	27
2.1	EQUAÇÕES DIFERENCIAIS E MODELAGEM MATEMÁTICA	27
2.1.1	Equações diferenciais	27
2.1.2	Classificação de equações diferenciais parciais	29
2.1.3	Equações diferenciais parciais parabólicas e hiperbólicas	31
2.1.4	Equações diferenciais parciais elípticas	32
2.1.5	Condições auxiliares iniciais e de contorno	34
2.1.6	Condição de contorno do tipo Dirichlet	35
2.1.7	Condição de contorno do tipo Neumann	36
2.1.8	Condição de contorno do tipo Robin	37
2.2	MÉTODOS NUMÉRICOS PARA EQUAÇÕES DIFERENCIAIS	38
2.2.1	O processo de discretização	38
2.2.2	Malhas computacionais	40
2.2.3	Método dos volumes finitos	47
2.2.4	Método dos volumes finitos em malhas não estruturadas	53
3	FORMULAÇÃO DO MVF EM MALHAS NÃO ESTRUTURADAS PARA EDPS ELÍPTICAS	77
3.1	LINEARIZAÇÃO DO TERMO FONTE \bar{S}_{ϕ_i}	77
3.2	OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO (EQUAÇÃO CANÔNICA)	79
3.3	VOLUMES DE FRONTEIRA E CONDIÇÕES DE CONTORNO	83
4	DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL PARA PROBLEMAS ELÍPTICOS	87
4.1	CÓDIGO PRINCIPAL PARA UMA EDPE	87
4.2	SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE DUAS EDPEs ACOPLADAS	90
5	VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO, ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA E ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	93
5.1	CONCEITOS BÁSICOS: VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO	93

	10
5.2	MÉTODO DAS SOLUÇÕES FABRICADAS 93
5.3	VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO POR MEIO DA ANÁLISE DE ORDEM DE CONVERGÊNCIA 95
5.4	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE À DISTORÇÃO DA MALHA 96
6	PROBLEMAS INVESTIGADOS E RESULTADOS OBTIDOS 100
6.1	PROBLEMA 1: AVALIAÇÃO DA ORDEM DE CONVERGÊNCIA E DE SENSIBILIDADE À DISTORÇÃO DA MALHA PARA A METODOLOGIA DE DISCRETIZAÇÃO APRESENTADA 100
6.1.1	Apresentação 100
6.1.2	Resultados 100
6.1.3	Discussões 104
6.2	PROBLEMA 2: AVALIAÇÃO DOS EFEITOS DA VARIAÇÃO DO LIMITE MÁXIMO DE ITERAÇÕES PARA O MÉTODO DE GAUSS-SEIDEL NO TEMPO COMPUTACIONAL E ERRO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA 104
6.2.1	Apresentação 104
6.2.2	Resultados 105
6.2.3	Discussões 107
6.3	PROBLEMA 3: ESTUDO DA ORDEM DE CONVERGÊNCIA PARA UMA EDPE NÃO HOMOGENEA E COM TERMO FONTE NÃO LINEAR 107
6.3.1	Apresentação 107
6.3.2	Resultados 108
6.3.3	Discussões 115
6.4	PROBLEMA 4: ORDEM DE CONVERGÊNCIA DE UMA EDP ELÍPTICA NÃO HOMOGENEA COM TERMO FONTE CONSTANTE E CONDIÇÕES DE CONTORNO MISTAS 116
6.4.1	Apresentação 116
6.4.2	Resultados 118
6.4.3	Discussões 121
6.5	PROBLEMA 5 - ORDEM DE CONVERGÊNCIA DE UM PROBLEMA DE DIFUSÃO EM UM DOMÍNIO COM INTERFACE ENTRE MEIOS DISTINTOS 122
6.5.1	Apresentação 122
6.5.2	Resultados 124
6.5.3	Discussões 131
6.6	PROBLEMA 6: ORDEM DE CONVERGÊNCIA DE UMA EDP ELÍPTICA NÃO HOMOGENEA COM COEFICIENTE DE DIFUSÃO VARIÁVEL LINEAR 131
6.6.1	Apresentação 131
6.6.2	Resultados 132
6.6.3	Discussão 135

6.7	PROBLEMA 7: ORDEM DE CONVERGÊNCIA DE UMA EDP ELÍPTICA NÃO HOMOGÊNEA COM COEFICIENTE DE DIFUSÃO VARIÁVEL NÃO LINEAR	135
6.7.1	Apresentação	135
6.7.2	Resultados	135
6.7.3	Discussões	139
6.8	PROBLEMA 8 - SOLUÇÃO DE UMA EDPE DEFINIDA EM UM DOMÍNIO COM DESCONTINUIDADES E GEOMETRIA ARBITRÁRIA	139
6.8.1	Apresentação	139
6.8.2	Resultados	139
6.8.3	Discussões	140
6.9	PROBLEMA 9 - SIMULAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA EM UM SEIO HUMANO COM ACOMETIDO POR TUMORES	141
6.9.1	Apresentação	141
6.9.2	Resultados	143
6.9.3	Discussões	146
6.10	PROBLEMA 10 - ORDEM DE CONVERGÊNCIA DA METODOLOGIA EXPOSTA PARA UM SISTEMA DE DUAS EDPEs ACOPLADAS	147
6.10.1	Apresentação	147
6.10.2	Resultados	148
6.10.3	Discussões	153
7	CONCLUSÃO	154
8	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	155
	REFERÊNCIAS	156

LISTA DE FIGURAS

2.1	Ilustração do princípio de uma direção e múltiplas direções de propagação dos fenômenos elípticos, parabólicos e hiperbólicos. Fonte: [58].	31
2.2	Exemplos de problemas físicos modelados por EDPs elípticas: a) uma placa quadrada aquecida em algumas de suas fronteiras; b) isolinhas de pressão e fluxo de água sob uma barragem; c) o campo elétrico que circunda um corpo condutor. Fonte: [18].	32
2.3	Representação geométrica da definição do operador de derivada normal. Fonte: autoria própria.	36
2.4	Ilustração do processo de discretização de um caso bidimensional. Fonte: autoria própria, adaptado de [58, 34]	39
2.5	Exemplos de discretização de domínios computacionais com geometrias ortogonais e não ortogonais. Fonte: adaptado de [60].	41
2.6	Discretização de um domínio misto entre curvas ortogonais e circulares por malhas ortogonais e <i>body-fitted</i> . Fonte: adaptado de [87].	42
2.7	Malha cartesiana estruturada em blocos. Cada bloco possui seu respectivo volume de controle, mantendo, dentro deste bloco, o aspecto estruturado de uma malha cartesiana. O detalhe exposto no canto superior direito enfatiza a região de adesão da malha à fronteira do domínio [87]. Fonte: [87].	43
2.8	Exemplos de matrizes de coeficientes produzidas por discretizações: (a) estruturadas, com a presença de bandas bem definidas; (b) não-estruturadas, com distribuição aleatória dos coeficientes. Os símbolos \times indicam uma entrada não nula, os espaços vazios, por sua vez, indicam entradas nulas. Fonte: autoria própria.	44
2.9	Malha não estruturada triangular com refinamento local não uniforme gerada por meio do <i>software Distmesh</i> . Fonte: autoria própria.	45
2.10	Exemplo do volume de controle utilizado nas formulações <i>cell-centered</i> , mostrada por (a), e <i>nodal point</i> , dada em (b). A formulação <i>cell-centered</i> é mais evidente e computacionalmente mais simples, facilitando sua implementação em malhas não estruturadas. Fonte: [87].	48

2.11	Estencil para uma formulação do FVM em malha cartesiana ortogonal. Os centróides dos volumes retangulares de tamanho Δx por Δy são denotados por um retângulo vazado e letras maiúsculas, sendo P o volume principal, aquele para o qual a equação está sendo construída. Os pontos médios de cada face (arestas para o caso $2D$) são dados por círculos vazados e letras minúsculas, em malhas estruturadas cartesianas estes pontos coincidem com o ponto médio de cada aresta e o ponto médio da distância entre os CGs. Fonte: autoria própria.	52
2.12	Exemplos das possibilidades de distorções em volumes triangulares. P denota o centróide do volume principal, N denota o centróide de seu vizinho, f denota o ponto médio da face compartilhada entre eles e \hat{n} denota o vetor normal à f . Volumes distorcidos são definidos como aqueles onde o ponto médio do segmento \overline{PN} não intercepta o ponto f . Fonte: autoria própria.	54
2.13	Esquema de volume de controle utilizado para a discretização do termo difusivo apresentado por Demirdžić e Perić (1990). Fonte: [28].	56
2.14	Esquema de volume de controle utilizado para a discretização do termo difusivo apresentado por Demirdžić, Lilek e Perić (1993). Fonte: [26].	56
2.15	Esquema utilizado por Muzaferija e Gosman [63] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: [25].	57
2.16	Dois volumes de controle que compartilham uma face. O fluxo difusivo por esta face é avaliado no ponto médio desta, f , indicado por um círculo aberto. Os círculos preenchidos indicam os nós da malha e os pontos denotados por quadrados vazados indicam os centróides dos dois volumes em questão. O quadrilátero formado pelos pontos a, b, c e d é utilizado para o cálculo de $(\nabla\phi)_f \cdot \hat{n}$. Fonte: adaptado de [23].	58
2.17	Esquema de construção do vetor fluxo normal entre dois volumes em uma malha não ortogonal. Fonte: adaptado de [61].	60
2.18	Interpretação geométrica dos três modos de avaliação do termo de difusão cruzada. Em (a) tem-se a correção mínima, em (b) tem-se a correção ortogonal e em (c) tem-se a correção sobrerrelaxada. Fonte: adaptado de [61].	61
2.19	Esquema proposto por Mathur e Murthy [59] para a discretização do fluxo difusivo entre dois volumes em malhas curvilíneas. Fonte: adaptado de [59].	63
2.20	Ilustração do diagrama utilizado por Coudière, Vila e Villedieu (1999) [20] para a construção do fluxo difusivo entre dois triângulos vizinhos. Fonte: adaptado de [20].	64
2.21	Esquema utilizado por Kim e Choi para o cálculo de $\nabla\phi$ na face compartilhada pelos dois volumes, P e N . Fonte: adaptado de [47].	66

2.22	Esquemas para a discretização do fluxo normal à face compartilhada por dois volumes triangulares utilizado por Versteeg e Malalasekera [87]. Em (a) mostra-se os volumes vizinhos e os vetores unitários nas direções de interesse. Em (b) ilustra-se as componentes do vetor $\nabla\phi$ decompostas nas direções dos vetores unitários mostrados em (a). Fonte: adaptado de [87].	67
2.23	Diagrama utilizado por Jayantha e Turner [46] para a discretização do fluxo difusivo. Fonte: autoria própria.	68
2.24	Detalhe dos parâmetros utilizados por Perez-Segarra <i>et al.</i> [74] para construir uma equação para o fluxo difusivo. Fonte: adaptado de [74].	69
2.25	Esquema utilizado por Xue e Barton [88] para a reconstrução do fluxo difusivo. Fonte: Xue e Barton [88].	70
2.26	Esquema de discretização do fluxo entre dois volumes triangulares. Fonte: adaptado de Mazumder [60].	72
2.27	Esquema utilizado em Nishikawa [64]. Fonte: autoria própria.	74
3.1	Ilustração do esquema utilizado para calcular o fluxo difusivo entre um volume e seu vizinho.	80
3.2	Esquema de tratamento dos triângulos de fronteira. Em (a) apresenta-se o exemplo de um triângulo que possui apenas uma face sobre a fronteira $\partial\Omega$ (preenchido). Em (b) apresenta-se o exemplo de um triângulo que possui duas faces sobre $\partial\Omega$, com a simbologia análoga ao caso (a). Fonte: autoria própria.	84
5.1	Problema proposto para o estudo da ordem de convergência do esquema de discretização apresentado. A solução analítica para uma variante deste problema, apresentada por Maliska [58], é exatamente a equação descrita para as condições de contorno das arestas diagonais. Fonte: autoria própria.	98
5.2	Estratégia utilizada para o refinamento da malha ortogonal. A partir do triângulo inicial denotado pelos seus respectivos vértices, cada ciclo de refinamento transforma cada triângulo da malha de entrada, denominado triângulo pai, em 4 triângulos filhos na malha de saída ao dividir ao meio cada aresta do triângulo pai	99
5.3	Ilustração do processo de distorção utilizado no presente trabalho. O grau de distorção obtido é proporcional ao deslocamento do vértice mais ao sul do domínio, este procedimento garante que todos os volumes possuam os mesmos índices D e Q . Esta imagem é apenas ilustrativa e não representa totalmente o procedimento realizado.	99
6.1	Gráficos da distribuição de ϕ e do ERP para o Problema 1, plotados com os resultados obtidos pela malha de 1024 volumes de controle e com distorção $D = 0$. Fonte: autoria própria.	101

6.2	Gráficos da distribuição de ϕ e do ERP para o Problema 1, plotados com os resultados obtidos pela malha de 1024 volumes de controle e com distorção $D = 0.50$. Fonte: autoria própria.	102
6.3	Distribuição de ϕ para o Problema 3(a) em malhas ortogonais com números variados de volumes nT . Fonte: autoria própria.	110
6.4	Distribuição do ERP para o Problema 3(a) em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	111
6.5	Distribuição de ϕ para o Problema 3(b) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	113
6.6	Distribuição de ERP para o Problema 3(b) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	114
6.7	Malhas utilizadas para as simulações do Problema 3(b). Fonte: autoria própria.	115
6.8	Ilustração do Problema 4. Ao centro apresenta-se a EDP Elíptica a ser resolvida, enquanto que as condições de contorno são definidas para cada fronteira do domínio. Fonte: autoria própria.	117
6.9	Gráficos da distribuição de ϕ para o Problema 4 em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	119
6.10	Gráficos da distribuição de ERP para o Problema 4 em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	120
6.11	Malhas utilizadas para as simulações do Problema 4. Fonte: autoria própria.	121
6.12	Ilustração do domínio que define o Problema 5. Note que em $x = \frac{1}{2}$ a linha está da cor verde, evidenciando que estes pontos pertencem à região de coeficiente de difusão Γ_1 . Fonte: autoria própria.	123
6.13	Gráficos da distribuição de ϕ para o Problema 5(a) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	125
6.14	Gráficos da distribuição de ERP para o Problema 5(a) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	126
6.15	Malhas utilizadas para as simulações do Problema 5(a). Fonte: autoria própria.	127
6.16	Gráficos da distribuição de ϕ para o Problema 5(b) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	128
6.17	Gráficos da distribuição de ERP para o Problema 5(b) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	129
6.18	Malhas utilizadas para as simulações do Problema 5(b). Fonte: autoria própria.	130
6.19	Distribuição de ϕ para o Problema 6 em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	133
6.20	Distribuição de ERP para o Problema 6 em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	134
6.21	Distribuição de ϕ para o Problema 7 em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	137

6.22	Distribuição de ERP para o Problema 7 em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.	138
6.23	Gráficos da distribuição de ϕ e do ERP para o Problema 8, plotados com os resultados obtidos por meio de uma malha composta por 7376 volumes de controle. Fonte: autoria própria.	140
6.24	Esquema utilizado para modelagem das condições de contorno para a simulação da distribuição de temperatura em um seio acometido por tumores. Fonte: autoria própria.	143
6.25	Gráficos da distribuição de T e da malha utilizada para a simulação da distribuição de temperatura de um seio saudável. Fonte: autoria própria.	144
6.26	Gráficos da distribuição de T e da malha utilizada para a simulação da distribuição de temperatura de um seio com um tumor. O círculo no item (b) representa o tumor em tamanho real. Fonte: autoria própria.	145
6.27	Gráficos da distribuição de T e da malha utilizada para a simulação da distribuição de temperatura de um seio com dois tumores. Os círculos no item (b) representam os tumores em tamanho real. Fonte: autoria própria.	146
6.28	Gráficos da distribuição de ϕ , ERP ϕ , ψ , ERP ψ para o Problema 10, plotados com os resultados obtidos pela malha de 1024 volumes de controle e com distorção $D = 0$. Fonte: autoria própria.	151
6.29	Gráficos da distribuição de ϕ , ERP ϕ , ψ , ERP ψ para o Problema 10, plotados com os resultados obtidos pela malha de 1024 volumes de controle e com distorção $D = 0.5$. Fonte: autoria própria.	152

LISTA DE TABELAS

6.1	Dados obtidos pelas simulações do problema apresentado pela Figura 5.1 para malhas com diferentes índices de refinamento h e fatores de distorção D . Fonte: autoria própria.	103
6.2	Resultados do experimento realizado para avaliação do efeito da variação do limite de iterações para o método de Gauss-Seidel no problema definido pela Figura 5.1. Fonte: autoria própria.	106
6.3	Dados obtidos pelo procedimento de análise de convergência para a EDPE dada pela Equação (6.3) definida em um domínio triangular $\Omega = \{(0, 1); (0.5, (1 - \sqrt{0.75})); (1, 1)\} \in \mathbb{R}^2$ discretizado por uma malha não estruturada triangular ortogonal, isto é, $D = 0$ e $Q = 1$. Fonte: autoria própria.	109
6.4	Dados da análise de convergência do Problema 3b, onde as malhas utilizadas foram geradas pelo <i>Distmesh</i> e possuem distorções e qualidades médias ($D_{\text{méd.}}$ e $Q_{\text{méd.}}$) variáveis. Fonte: autoria própria.	112
6.5	<i>Inputs</i> para as condições de contorno de acordo com os parâmetros apresentados pelo problema. Fonte: autoria própria.	118
6.6	Dados obtidos a partir das simulações do problema definido na Seção 6.4. Fonte: autoria própria.	118
6.7	Resultados obtidos para as simulações de ordem de convergência do Problema 5(a). Fonte: autoria própria.	124
6.8	Resultados obtidos para as simulações de ordem de convergência do Problema 5(b). Fonte: autoria própria.	124
6.9	Dados obtidos pelo procedimento de análise de convergência para a EDPE dada pela Equação (6.14) definida em um domínio triangular $\Omega = \{(0, 1); (0.5, (1 - \sqrt{0.75})); (1, 1)\} \in \mathbb{R}^2$ discretizado por uma malha não estruturada triangular ortogonal. Fonte: autoria própria.	132
6.10	Dados obtidos pelo procedimento de análise de convergência para a EDPE dada pela Equação (6.15). Fonte: autoria própria.	136
6.11	Parâmetros termofísicos utilizados na simulação térmica de tumores por meio do modelo de Pennes. Fonte: Centigul e Herman [92].	142
6.12	Dados obtidos para a variável ϕ a partir das simulações do problema Brusselator, apresentado por Ang [4] e modelado pela Equação (6.17) para malhas com diferentes índices de refinamento h e fatores de distorção D . Fonte: autoria própria.	149

6.13 Dados obtidos para a variável ψ a partir das simulações do problema Brusselator, apresentado por Ang [4] e modelado pela Equação (6.17) para malhas com diferentes índices de refinamento h e fatores de distorção D . Fonte: autoria própria.	150
--	-----

LISTA DE SIGLAS

CG	Centro Geométrico
DFC	Dinâmica dos Fluidos Computacional
EDP	Equação Diferencial Parcial
EDPE	Equação Diferencial Parcial Elíptica
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MIPS	Milhões de Instruções Por Segundo
MMQ	Método dos Mínimos Quadrados
MRP	Método dos Resíduos Ponderados
MVF	Método dos Volumes Finitos
PVC	Problema de Valor de Contorno
PVI	Problema de Valor Inicial
VTK	Visualization Toolkit

LISTA DE SÍMBOLOS

f	Centróide da face f (representa a face)
f'	Ponto de intersecção entre o segmento \overrightarrow{PN} e a face f
f_{ij}	Centróide da face f_{ij} (representa a face)
$(\nabla\phi)_f$	Gradiente de ϕ avaliado no centróide da face f
\bar{S}_ϕ	Termo fonte médio em um volume de controle relativo à variável dependente ϕ
Δt	Intervalo de tempo
$\Delta x, \Delta y$	Diferença entre as coordenadas x e y de dois pontos (determinados no subscrito das variáveis)
$\Delta x, \Delta y$	Intervalos espaciais nas direções x e y
Γ	Coefficiente de difusão do meio
κ	Escalar da combinação convexa entre dois pontos
Λ_{ij}	Superfície gaussiana que envolve a face f_{ij}
\hat{e}	Vetor unitário em uma direção arbitrária (denotada pelo subscrito da variável)
\hat{i}, \hat{j}	Vetores unitários nas direções cartesianas
\hat{n}	Vetor unitário normal
\hat{t}	Vetor unitário tangencial
$\mathbf{A}_f, \mathbf{S}_f$	Vetores área da face f
\mathbf{q}	Vetor fluxo de calor
\mathbf{x}	Vetor posição
\mathcal{M}	Malha utilizada
∇	Operador Gradiente
∇^2	Operador Laplaciano

Ω	Domínio da EDP
ω_b	Taxa de perfusão do sangue
$\partial\Lambda_{ij}$	Fronteira da superfície gaussiana que envolve a face f_{ij}
$\partial\Omega$	Fronteira de Ω
ϕ, ψ	Variáveis dependentes
b	Densidade do sangue
θ	Ângulo interno de um triângulo
ε_{ijk}	k -ésimo trecho da região $\partial\Lambda_{ij}$
a_i, a_n	Escalares
C_b	Calor específico do sangue
D	Índice de distorção de uma malha
d	Distância entre dois pontos (definidos no subscrito da variável)
E_2^h	Norma 2 do erro calculado por meio de uma malha com índice de refinamento h
E_{RMS}^h	Norma <i>RMS</i> do erro calculado por meio de uma malha com índice de refinamento h
h	Índice de refinamento da malha
h_{ic}	Coefficiente de convecção na interface ou coeficiente de película
i, j, k, m	Indexadores
L_2	Norma 2 (euclidiana)
L_{RMS}	Norma <i>RMS</i>
N	Quantidade total de elementos de uma malha \mathcal{M}
N_B	Quantidade de elementos de fronteira de uma malha \mathcal{M}
N_j	j -ésimo vizinho de um volume de controle
N_P	Quantidade de elementos internos de uma malha \mathcal{M}
Nb	Número de vizinhos de um determinado volume de controle
$O(h)$	Ordem de convergência de magnitude um

$O(h^2)$	Ordem de convergência de magnitude dois
P_i	i -ésimo volume de controle avaliado
Q	Índice de qualidade de uma malha
Q_T	Calor metabólico de um tumor
q_2	Ordem de convergência calculada por meio da norma E_2
q_{RMS}	Ordem de convergência calculada por meio da norma E_{RMS}
R	Raio do menor círculo que circunscreve um triângulo
r	Raio do maior círculo que inscrito em um triângulo
R_∞	Resíduo máximo
S_C, S_P	Constantes do termo fonte linearizado
S_ϕ	Termo fonte relativo à variável dependente ϕ
S_ψ	Termo fonte relativo à variável dependente ψ
t	Tempo
T_b	Temperatura do sangue arterial
V	Volume de um volume de controle
v_i	i -ésimo vértice
v_{ijk}	k -ésimo vértice da face f_{ij}
x, y	Variáveis independentes

1 INTRODUÇÃO

Equações diferenciais nasceram com o Cálculo de Isaac Newton (1642 – 1727) e Gottfried W. Leibniz (1646 – 1716). São objetos matemáticos que estabelecem uma identidade entre variáveis independentes, uma variável dependente e suas derivadas parciais em relação às variáveis independentes. Tais objetos são uma das mais poderosas ferramentas matemáticas para a modelagem de fenômenos complexos [10, 14, 18].

O conjunto das equações diferenciais é muito amplo. Há um subconjunto especial destes objetos que é formado pelas Equações Diferenciais Parciais Elípticas (EDPEs), que aparecem com frequência na modelagem de fenômenos independentes do tempo, ou estacionários. Estes fenômenos indicam que alguma condição de equilíbrio dentro do sistema físico em questão fora atingida, não implicando na ausência de algum fenômeno de transporte, bastando apenas que o fluxo, se existir, seja invariante no tempo. Na Física, tais eventos ocorrem, usualmente, como resultado final de fenômenos dependentes do tempo. São exemplos de problemas elípticos: a distribuição de calor em uma superfície em regime permanente, a distribuição do potencial eletrostático criada por um objeto carregado eletricamente e a distribuição de tensões em uma placa submetida a um carregamento estático [34, 58, 87].

Um revés intrínseco ao estudo das equações diferenciais parciais reside no fato de que é extremamente difícil obter soluções exatas para tais equações. Apenas equações mais simplificadas, com condições de contorno e geometrias triviais, são possíveis de ser solucionadas analiticamente. Contudo, equações simples são de pouco proveito prático, uma vez que não incorporam diversas propriedades relevantes à modelagem de problemas reais da Física, Química e Engenharia. O ônus de se adicionar detalhes na modelagem de um fenômeno é uma Equação Diferencial Parcial (EDP) mais complexa, cuja solução analítica, se existir, pode ser difícil ou até mesmo impossível de ser obtida por técnicas conhecidas na literatura. Neste contexto, as técnicas de solução numérica de EDPs são de grande valia, pois proporcionam resultados precisos e confiáveis para problemas complexos da fronteira da ciência. Paralelamente, a ascensão exponencial do poder de processamento dos circuitos digitais, reconhecida na lei de Moore¹, proporcionou o avanço do uso do computador como um laboratório digital, onde problemas físicos puderam ser simulados de forma rápida e prática, com custos dezenas de vezes menor que o de modelos em escala, ou até mesmo sendo a única forma de se obter informações sobre um fenômeno, como por exemplo no caso da reentrada de um foguete na atmosfera terrestre [16, 31, 51, 58, 60, 71].

O processo de solução numérica de uma EDP é denominado discretização, e é estabelecido ao substituir o problema original, definido sobre um domínio contínuo e governado pela EDP em questão com suas condições iniciais e de contorno, por um sistema de

¹Em homenagem ao engenheiro Gordon Moore, que em 1965 conjecturou que o número de transistores em um processador dobraria anualmente [60].

equações algébricas, definidas apenas em uma quantidade finita de pontos no domínio discretizado, denominado malha. Dentre as técnicas numéricas utilizadas para esta tarefa, o Método dos Volumes Finitos (MVF) se destaca por sua natureza conservativa, fácil implementação computacional, adaptatividade à geometrias complexas e capacidade de resolver problemas multifísicos, tornando-o a técnica mais popular nos estudos em Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC), mas abrangendo também outras áreas. A facilidade do MVF em lidar com geometrias irregulares é oriunda da possibilidade de ser formulado em domínios discretizado por malhas não estruturadas, que são malhas onde o número de vizinhos que cada elemento possui não é necessariamente constante, e não há a possibilidade de mapear, com correspondência biunívoca, as células desta malha com as entradas de uma matriz [16, 58, 61, 71, 87].

A adoção das malhas não estruturadas às formulações do MVF datam do início dos anos 1990, com o aproveitamento de técnicas derivadas da análise de elementos finitos. Possuem como principal vantagem em relação às malhas estruturadas a capacidade de representar, de forma acurada, domínios definidos por geometrias arbitrárias sem recorrer a refinamentos excessivos, resultando em um bom custo benefício entre precisão e esforço computacional. Contudo, o uso deste tipo de malha requer um tratamento matemático mais complexo que o das malhas estruturadas usuais, especialmente na modelagem dos fluxos entre os elementos destas malhas, uma vez que a variabilidade das formas destes elementos originam um efeito conhecido por difusão cruzada [26, 61, 60, 87].

Especificamente no caso dos problemas elípticos, há uma grande atenção no tratamento da difusão cruzada, uma vez que esta classe de fenômenos de transporte é caracterizada por experimentar somente fluxos difusivos. Desta maneira, a busca por compreender e formular novas abordagens para a discretização destes fluxos entre elementos não ortogonais é objeto de estudo de diversos pesquisadores, sendo um tópico ativo de investigação. Cardiff e Demirdžić [16] apontam que o tratamento dos fluxos difusivos é uma das principais fontes de diferenciação entre as variantes do MVF. Dentre as principais metodologias citadas na bibliografia estão: as baseadas na reconstrução do fluxo mediante ponderações de fluxos conhecidos ([46] e [64]), as constituídas por meio de decomposição do vetor superfície ([28],[45] e [47]) e as concebidas utilizando uma superfície gaussiana ao redor da face ([19], [23], [30] e [7]).

O presente trabalho apresenta o desenvolvimento de um código computacional capaz de solucionar numericamente problemas elípticos definidos em domínios bidimensionais com coeficiente de difusão isotrópicos uniformes e não uniformes, por meio de uma formulação do MVF em malhas não estruturadas triangulares do tipo *cell-centered*, que assume que a informação é avaliada no centróide dos elementos. A discretização dos termos difusivos utilizada é baseada no teorema da divergência de Gauss, tal como as encontradas nos trabalhos de Coudière, Vila e Villedieu [20], Elmahi *et al.* [30], Benkhaldoun *et al.* [11] e Asmouh *et al.* [7]. Este tratamento é descrito por Benkhaldoun *et al.* [11] como sendo uma abordagem de segunda ordem se a malha utilizada possuir volumes de controle com formato triangular equilátero. Em busca de quantificar os efeitos da difusão cruzada nos resultados fornecidos pelo

código, este trabalho também expõe uma análise empírica da ordem de convergência da metodologia de discretização utilizada e um estudo da robustez desta metodologia ante ao grau de distorção das células utilizadas na tecelagem da malha.

Dentre os principais motivos que endossam a elaboração deste trabalho, pode-se destacar a importância de um pesquisador ser capaz de construir um código próprio, que atenda às suas necessidades de maneira específica e que permita desenvolver e implementar novas funcionalidades conforme lhe aprouver. Ainda, esta é uma ótima oportunidade de conhecer profundamente as etapas executadas para a obtenção dos resultados e poder propor aprimoramentos às técnicas disponíveis na literatura, bem como acumular conhecimento para operar com maior expertise os produtos ofertados no mercado de *softwares*. Por outro lado, apesar da reconhecida importância dos *softwares* tradicionais, por serem produtos de propósito geral, nem sempre contemplam tópicos específicos e não permitem aprimoramentos desenvolvidos fora da equipe de desenvolvimento oficial, além de que os custos envolvidos são, frequentemente, proibitivos dentro da realidade brasileira. Ademais, o fato de serem excessivamente fechados por questões de propriedade intelectual demonstra a real estatura do poder que o domínio destas técnicas possui, envolvendo conflitos de interesses materiais, intelectuais, financeiros e militares. Por isso, há também uma questão estratégica de nacionalização da detenção desta tecnologia.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo geral

Desenvolvimento de um código computacional capaz de resolver, numericamente, EDPEs definidas em domínios bidimensionais de geometrias arbitrárias e com coeficiente de difusão variável, por meio do Método dos Volumes Finitos formulado em domínios discretizados por malhas não estruturadas triangulares, bem como estender esta metodologia para a resolução de sistemas de EDPEs acopladas.

1.1.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos executados para alcançar o objetivo geral foram:

- Empreender uma revisão bibliográfica acerca das Equações Diferenciais, da matemática computacional aplicada à solução numérica destes objetos e áreas afins;
- Desenvolvimento de uma discretização das EDPEs com coeficientes uniformes e não uniformes, baseada no Método dos Volumes finitos para malhas não estruturadas e com ordem de convergência teórica $O(h^2)$;
- Implementação numérica de condições de contorno dos tipos: Dirichlet, Neumann e Robin;

- Construção do código computacional para a solução numérica de problemas modelados por EDPEs;
- Verificação dos resultados obtidos pelo *software* com relação à ordem de convergência da metodologia utilizada e à sensibilidade desta ante a diferentes qualidades de malhas utilizadas na discretização;
- Extensão do código computacional desenvolvido para o caso de uma EDPE para ser capaz de resolver sistemas de EDPEs acopladas;
- Verificação dos resultados obtidos e análise de ordem de convergência e sensibilidade para o caso de EDPEs acopladas.

1.2 ESTRUTURA DO TRABALHO

O presente trabalho está dividido da seguinte forma:

- O Capítulo 2 apresenta o referencial teórico, com seções designadas para a apresentação do conceito de EDPs, modelagem matemática, e formulações do MVF para malhas estruturadas e não estruturadas. Nesta parte do trabalho também são apresentadas as abordagens mais consolidadas encontradas na literatura para o tratamento do termo difusivo.
- O Capítulo 3 trata da formulação do MVF utilizada para a implementação do código proposto pelo presente trabalho, sendo o desenvolvimento deste código abordado durante o Capítulo 4.
- No Capítulo 5 expõe-se os procedimentos pertinentes à verificação do código e às análises feitas. Ressalta-se a utilização do Método das Soluções Fabricadas para a obtenção de soluções analíticas para este propósito.
- Os problemas resolvidos com o auxílio do código desenvolvido e seus respectivos resultados são apresentados no Capítulo 6.
- Os Capítulos 7 e 8 finalizam o trabalho exibindo, respectivamente, a conclusão e as sugestões para futuros trabalhos.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 EQUAÇÕES DIFERENCIAIS E MODELAGEM MATEMÁTICA

2.1.1 Equações diferenciais

Ao observar-se um fenômeno da natureza, é instintivo desejar compreendê-lo em linguagem matemática, isto é, descrever as relações envolvidas em tal fenômeno por meio do emprego de ferramentas matemáticas. Frequentemente estes fenômenos envolvem taxas de variações de grandezas físicas, ou seja, quão rápido ou devagar uma grandeza muda em relação à outra. Na Matemática, as derivadas são os objetos que naturalmente expressam taxas de variações, sendo razoável então supor que estejam envolvidas nesta tarefa, e que o nome Equação Diferencial remete de maneira inequívoca a este envolvimento.

O processo de descrição de fenômenos naturais utilizando linguagem matemática é denominado por modelagem. Em outras palavras, utiliza-se os objetos e técnicas matemáticas para criar um modelo¹ que, em maior ou menor grau, consegue captar os aspectos mais fundamentais do fenômeno estudado. John von Neumann dizia que a matemática é uma aproximação relativamente boa da verdade, pois esta é demasiadamente complexa para permitir qualquer coisa melhor do que uma aproximação. Em sua interpretação, a própria matemática é um modelo humano dos fenômenos do Universo. De fato, este é o significado real de qualquer modelo matemático: uma aproximação. Qualquer teoria, por mais requintada que seja, não passa de uma "simples" aproximação da realidade, e nunca conseguirá captá-la em toda sua essência. Estas discussões são inevitáveis ao tema discorrido no presente trabalho, pois demonstram explicitamente o processo de modelagem e suas limitações [10, 14, 18, 42].

As equações diferenciais surgiram com o Cálculo de Newton e Leibniz, dado os avanços nos estudos da Mecânica Clássica. A Segunda Lei de Newton, que rege o movimento dos corpos, foi enunciada com respeito à taxa de variação da velocidade de um corpo em relação ao tempo, fazendo com que o problema de encontrar a trajetória que este corpo desenvolveria, se resumisse a um problema de encontrar uma função cuja derivada em relação ao tempo satisfizesse a equação $\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt}$. Ou seja, a modelagem que Newton propôs para os fenômenos celestes originou uma equação diferencial. Contudo, ainda que as deduções de alguns modelos conhecidos, tal como a própria Segunda Lei de Newton sejam, de certa forma, evidentes, a palavra final para a validação das hipóteses é sempre dada pela natureza [10, 14].

Matematicamente, uma equação diferencial em sua forma mais geral é uma identidade que relaciona variáveis independentes, uma variável dependente e suas derivadas parciais em relação às variáveis independentes. No caso em que há apenas uma variável inde-

¹Um modelo é um conjunto de relações matemáticas que recebem argumentos como entrada e tentam simular as relações reais do fenômeno *in natura*, fornecendo como saída, resultados aproximados dos obtidos via mensuração experimental [14, 18].

pendente, a equação diferencial é dita ordinária, enquanto que se existem duas ou mais variáveis independentes, a equação diferencial é dita parcial. Denomina-se como ordem da equação diferencial o grau da derivada de maior grau. Se todos os termos da equação diferencial forem lineares em relação à variável dependente, ela é dita equação diferencial linear; caso contrário, é dita não linear [80].

A metodologia da modelagem de um problema físico é descrita pelo seguinte ciclo: modelagem do fenômeno, solução do modelo, experimentação e análise dos dados experimentais. Ao fim da última etapa, a experimentação fornecerá indícios da qualidade do modelo proposto e do procedimento utilizado para a obtenção da solução, bem como sugestões de aprimoramento para uma nova volta do ciclo. Este sistema pode ser interrompido por alguns fatores, dentre os principais: a dificuldade de resolver as novas equações ou a satisfação com os resultados obtidos. O primeiro fator remete a um problema fundamental do estudo das equações diferenciais: nem toda equação diferencial possui solução. Inclusive, é de primordial importância saber se soluções para uma determinada equação diferencial existem, para que não se despenda esforço desnecessário na busca do que não há. O segundo, por sua vez, mostra que um modelo pode ser considerado adequado quando responde bem às perguntas formuladas com certa acurácia². Aqui leva-se em conta questões filosóficas a respeito da análise de erros inerente ao processo de medir e também da limitação natural do processo de modelagem [10, 14].

Fenômenos da mecânica dos fluidos e de transferência de calor são modelados à partir da formulação das leis de conservação básicas, são elas: lei de conservação da massa, segunda lei de Newton para a conservação do *momentum*, a primeira lei da termodinâmica e a lei de Fick para difusão. Tais leis podem ser expressas em formas diferenciais ou integrais. Na primeira forma, as formulações são construídas a partir da noção de pequenos volumes de controle, enquanto que as formulações integrais são baseadas em informações sobre o comportamento global do sistema. O resultado de uma formulação pode ser utilizado para a checagem do resultado obtido pela outra [57].

Mazumder [61] apresenta a equação geral do transporte, dada pela Equação (2.1), disposta a seguir:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_1 + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u})}_2 = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi)}_3 + \underbrace{S_\phi}_4 \quad (2.1)$$

com ρ sendo a densidade do fluido transportado pelo campo de velocidades \mathbf{u} , Γ o coeficiente de difusão da propriedade ϕ no meio e os termos indicados por 1 a 4 significando, respectivamente:

²Aproveitando o exemplo de Newton, após alguns séculos fornecendo boas previsões, eventualmente alguns fenômenos gravitacionais não foram bem respondidos pelos cálculos newtonianos. Soube-se então que, naquelas circunstâncias, a Lei da Gravitação Universal não apresentava bons resultados, e por esta razão Albert Einstein trabalhou nas suas equações de campo para a Teoria da Relatividade Geral, uma teoria da gravidade e do movimento muito mais refinada que sua antecessora [65].

1. Taxa de incremento de ϕ durante um instante de tempo t , por unidade de volume (ou termo transitório);
2. Fluxo resultante de ϕ devido à advecção, por unidade de volume (ou termo advectivo);
3. Taxa de incremento de ϕ dentro do volume de controle devido ao movimento molecular aleatório, denominado como difusão, por unidade de volume (ou termo difusivo);
4. Quantidade criada ou destruída de ϕ devido a fontes ou sorvedouros, por unidade de volume (ou termo fonte).

A Equação (2.1) na forma apresentada acima é obtida realizando o balanço do fluxo das leis de conservação sobre um volume de controle infinitesimal. Diversos fenômenos relacionados com o transporte de grandezas físicas, seja por processos difusivos ou convectivos, são derivados a partir desta formulação geral. As equações de Navier-Stokes, a equação da energia, e outros fenômenos de transporte podem ser obtidas por meio de manipulações algébricas da Equação (2.1), empregando-se as constantes físicas apropriadas. Finalmente, a depender de quais termos eventualmente tornam-se nulos, a equação apresenta características distintas, e a classificação destas é crucial para a escolha do método de solução mais eficiente [58].

2.1.2 Classificação de equações diferenciais parciais

Equações diferenciais parciais possuem infinitas formas, porém, há uma classe particular e interessante de EDPs que ocorrem com grande frequência na Física, que são as EDPs de segunda ordem. Tais equações permitem ser classificadas a partir de manipulações algébricas de seus coeficientes e se dividem em três tipos canônicos: hiperbólicas, parabólicas e elípticas. Observe a forma geral de uma equação diferencial de segunda ordem em duas variáveis, x_1 e x_2 , dada por:

$$A \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + D \frac{\partial \phi}{\partial x} + E \frac{\partial \phi}{\partial y} + F \phi = G . \quad (2.2)$$

Fortuna [34] destaca o caso particular em que, se A, B, C, D, E, F e G forem constantes ou funções de x, y , a Equação (2.2) é dita linear. Caso contrário, é dita não linear. A classificação entre os três tipos canônicos é obtida realizando a seguinte análise com os termos que multiplicam os operadores de derivação:

- Elíptica se $B^2 - 4AC < 0$.
- Parabólica se $B^2 - 4AC = 0$.
- Hiperbólica se $B^2 - 4AC > 0$.

Em situações em que os coeficientes A , B e C não forem constantes, o comportamento da EDP pode ser distinto em diferentes regiões do domínio em que foi definida. Estas equações podem passar a apresentar comportamento misto entre os três tipos. Para tais casos e outros mais complexos, como no caso da equação possuir mais de duas variáveis independentes, outros métodos matemáticos de classificação são recomendados, como a classificação baseada nas curvas características e a classificação baseada nos autovalores³ de uma matriz associada à EDP [34, 87].

O sistema de classificação baseado nos coeficientes dos operadores diferenciais é matematicamente rigoroso e útil para a escolha de métodos analíticos de soluções, porém, é pouco eficiente para direcionar a escolha de um método numérico. Como os problemas práticos são, frequentemente, mais complexos que os problemas que possuem soluções analíticas, torna-se mais adequado observar quais das três características (elíptica, parabólica ou hiperbólica) se manifestam nos termos das equações governantes, sendo comum que problemas complexos sejam descritos por sistemas de equações diferenciais, e apresentem as três características simultaneamente, alterando em relação à cada variável. Esta observação contribui para a escolha do método numérico, e uma vez que tais características requerem estratégias computacionais diferenciadas, cada qual com uma demanda específica de *hardware*⁴, um olhar amplo sobre o problema proporciona uma melhor estratégia de solução [58, 60, 80].

Nesta perspectiva mais aplicada, direcionada pela física do fenômeno, pode-se adotar dois tipos de classificação para os problemas modelados por EDPs de segunda ordem: problemas "de marcha"⁵, também chamados de problemas transitórios ou problemas em regime não permanente, que contempla as EDPs parabólicas e hiperbólicas, e problemas estacionários, modelados por EDPs elípticas. Este tipo de classificação permite uma visualização mais propícia de como o método numérico escolhido deve trabalhar, uma vez que os termos diferenciais da EDP expõem a forma com que a informação será transmitida e, portanto, como tratar as incógnitas numericamente [87].

Patankar [71] aponta implicações computacionais proporcionadas por este modo de classificar os problemas. Algoritmos para problemas de marcha podem economizar esforço computacional ao guardarem na memória apenas os resultados do instante imediatamente anterior à iteração atual, sem tornar necessário que os dados utilizados para a computação da

³Esta metodologia é abordada em detalhes por Strauss [80] e também por Versteeg e Malalasekera [87]. Consiste em uma generalização do método citado por Fortuna [34], permitindo uma análise mais refinada sobre os múltiplos comportamentos que uma EDP pode apresentar e abrangendo casos de EDPs definidas em domínios com mais dimensões. Contudo, o método apresentado por Fortuna é suficiente para o escopo deste trabalho.

⁴Por exemplo, o programador pode escolher construir códigos que necessitem de maior quantidade de memória, ou maior quantidade de processamento a depender do contexto.

⁵Problemas "de marcha" ou "de ordem de marcha", são aqueles cujos efeitos em um instante de tempo t dependem das informações do fenômeno nos instantes de tempo anteriores $t - \Delta t$. Isto é, tais fenômenos exigem que se conheça informações sobre o sistema físico no momento inicial da análise, t_0 . Estas informações são designadas como condições iniciais, e a partir deste estado originário, a própria física do fenômeno dita sua evolução. Em outras palavras, o domínio da equação diferencial pode ser aberto, não havendo a necessidade de se conhecer o estado do sistema quando $t \rightarrow \infty$ [58, 60].

solução anterior sejam todos salvos. Assim, controla-se a quantidade de memória utilizada e permite-se considerar um número maior de incógnitas.

A Figura 2.1, disposta a seguir, ilustra as direções e formas de propagação das informações transportadas quando modeladas por diferentes tipos de EDPs, influenciadas pela física dos problemas que modelam.

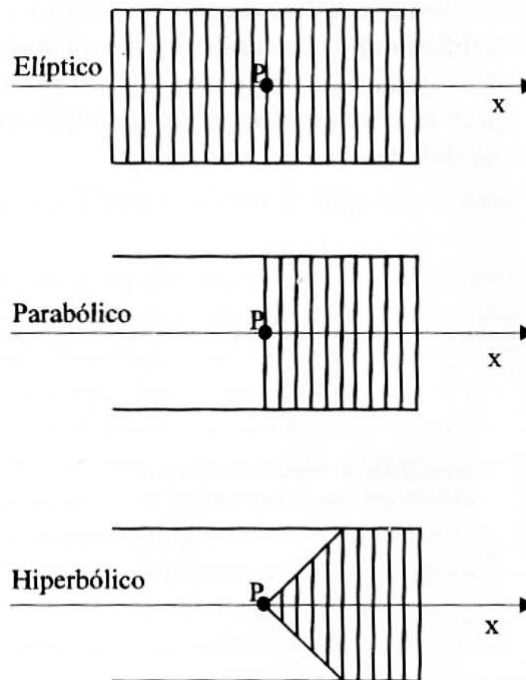


Figura 2.1: Ilustração do princípio de uma direção e múltiplas direções de propagação dos fenômenos elípticos, parabólicos e hiperbólicos. Fonte: [58].

2.1.3 Equações diferenciais parciais parabólicas e hiperbólicas

Problemas descritos por EDPs parabólicas ou hiperbólicas são ditos problemas transitórios, "de marcha" ou de propagação. Recebem tais nomes por apresentarem variação temporal das grandezas físicas de interesse. O termo "problemas de marcha" é melhor compreendido tomando-se a noção do esquema numérico de solução destas EDPs. Dada uma distribuição inicial de uma grandeza ϕ em um domínio Ω , também conhecida como condição inicial do sistema (em um instante t_0), novos valores de ϕ são calculados para os futuros instantes de tempo em múltiplos de intervalos discretos e regulares Δt , até atingir um instante final t_f de interesse do problema. Este procedimento de subdividir um intervalo com infinitos pontos, contínuo, em uma quantidade finita de subintervalos, é chamado de discretização. Deste modo, o processo de solução numérica⁶ simula, de forma discreta, a evolução temporal contínua do fenômeno na natureza [34].

⁶Patankar [71] define como solução numérica um conjunto de números os quais permitem que a distribuição da variável dependente ϕ seja reconstruída.

2.1.4 Equações diferenciais parciais elípticas

Problemas que não dependem do tempo, isto é, aqueles em que as grandezas físicas envolvidas permanecem em estado de equilíbrio, são denominados estacionários. Como exemplo de fenômenos de equilíbrio tem-se a distribuição de tensões em uma placa submetida a um carregamento estático, a distribuição de temperatura em uma barra isolada com temperaturas fixas nas extremidades, dentre outros. Matematicamente, as equações diferenciais que modelam problemas estacionários são as equações elípticas [34, 58, 87].

Na Física, fenômenos estacionários ocorrem, com frequência, como resultado final de fenômenos transientes. Ressalta-se que fenômenos estacionários não se resumem a situações onde não há fluxo de energia, bastando apenas que tal fluxo, se existir, seja invariante no tempo [34]. A Figura 2.2 apresenta fenômenos físicos cujos estados estacionários são modelados por EDPs elípticas.

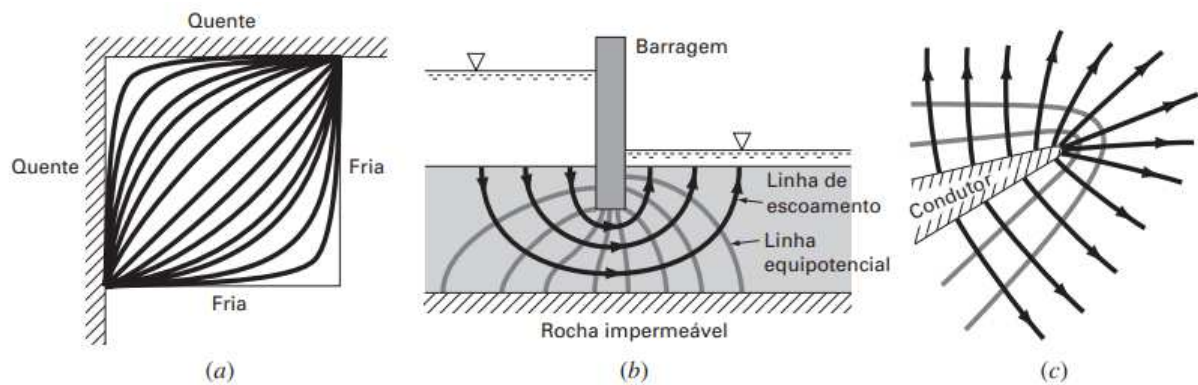


Figura 2.2: Exemplos de problemas físicos modelados por EDPs elípticas: a) uma placa quadrada aquecida em algumas de suas fronteiras; b) isolinhas de pressão e fluxo de água sob uma barragem; c) o campo elétrico que circunda um corpo condutor. Fonte: [18].

A solução de um problema elíptico pode ser obtida especificando-se as condições de contorno em todas as fronteiras do domínio. Tal fato faz com que os problemas elípticos também sejam chamados de Problemas de Valores de Contorno (PVC). Versteeg e Malalaskera [87] frisam também que uma característica de suma importância nos problemas elípticos é a de que qualquer perturbação no interior da solução, pela ação de um termo fonte, por exemplo, altera a solução em todo o domínio, não se restringindo a uma direção preferencial, tal como ilustrado pela Figura 2.1. Em consequência deste fato, as soluções para os problemas elípticos são sempre suaves, mesmo que hajam discontinuidades nas condições de contorno, e a natureza deste efeito se reflete na escolha dos métodos numéricos utilizados para a solução destes problemas, uma vez que a solução do problema para um ponto influencia e é influenciada por todos os seus vizinhos.

Equações elípticas também apresentam outra propriedade interessante: a validade de um teorema conhecido como "princípio do máximo"⁷. Este teorema enuncia que os

⁷Uma demonstração para o princípio do máximo (e por consequência também para o princípio do mínimo)

valores máximos que a solução $\phi(x, y)$ do problema pode assumir estarão localizados nas fronteiras do domínio da solução. O princípio do máximo definido para uma solução $\phi(x, y)$ pode ser reformulado para uma função $-\phi(x, y)$, implicando no então "princípio do mínimo", que afirma que os valores mínimos que $\phi(x, y)$ pode assumir também estão nas fronteiras $\partial\Omega$ do domínio Ω [80].

Considere a equação genérica da difusão para um regime não permanente em duas dimensões, dada por:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + S_\phi \quad (2.3)$$

onde $\Gamma(x, y) > 0$ é o coeficiente de difusão da grandeza ϕ no meio de suporte, que pode variar de acordo com a posição (x, y) e $S_\phi(x, y, t)$ é o termo fonte.

Este problema necessita de condições iniciais e de contorno para tornar-se um problema bem posto⁸, de modo que torna-se necessário lhe atribuir informações adicionais, sendo elas uma condição inicial $\phi(x, y, t = 0) \in \Omega$ e condições de fronteira para todo t na fronteira do domínio $\partial\Omega$. LeVeque [51] afirma que se as condições de fronteira e o termo fonte independem de t , espera-se que um estado de equilíbrio ocorra, e que é possível determiná-lo resolvendo a seguinte equação (agora elíptica):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) = f(x, y) \quad (2.4)$$

onde $f(x, y) = -S_\phi(x, y)$. O autor ainda enfatiza a necessidade de se especificar condições de fronteira para toda fronteira $\partial\Omega$ do domínio Ω , pois trata-se de um PVC.

Considerando o caso em que o meio é fisicamente isotrópico para a difusão de ϕ , tem-se que Γ é constante em todos os pontos $(x, y) \in \Omega$. Fazendo $\Gamma \equiv 1$, a Equação (2.4) torna-se a conhecida equação de Poisson:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = f(x, y) . \quad (2.5)$$

No caso particular em que $f(x, y) = 0$, a Equação (2.5) torna-se a equação de Laplace:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = 0 . \quad (2.6)$$

A solução para a equação de Laplace no caso de uma dimensão espacial, $u''(x) = 0$, é trivial, sendo qualquer função linear que contenha os dois pontos das condições de contorno. Contudo, no caso bidimensional mostrado pela Equação (2.6), a aparente simplicidade da equação não se confirma ao tentar solucioná-la. Mesmo o caso mais trivial das EDPs

pode ser encontrada em Strauss [80].

⁸Um problema bem posto é aquele dado por uma EDP adicionada de um conjunto de condições iniciais e/ou de contorno, que goza das seguintes propriedades: existência, unicidade e estabilidade [80]. Esta definição será detalhada posteriormente.

elípticas pode tornar-se extremamente complexo a depender das condições de contorno exigidas pelo problema [51].

As equações elípticas podem ser reescritas utilizando o operador Laplaciano ∇^2 , definido por:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} . \quad (2.7)$$

Esta maneira torna a notação mais compacta, como pode-se notar ao utilizá-la para reescrever a Equação (2.6):

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \nabla^2 \phi = 0 . \quad (2.8)$$

LeVeque [51] define o princípio de problema bem posto como um problema que fornece todas as informações necessárias para que a solução encontrada seja, de fato, verossímil com a realidade. O autor mostra que um problema elíptico só torna-se bem posto quando possui condições de contorno associadas à toda fronteira $\partial\Omega$ do domínio Ω para o qual é definido, e o termo Problema de Valor de Contorno (PVC) evidencia esta particularidade. Mazumder [60] afirma que nos problemas elípticos, a informação se propaga das fronteiras para dentro do domínio Ω , justificando também a nomenclatura adotada. Um estudo mais detalhado sobre condições de contorno será apresentado na seção seguinte.

Com intuito de evitar tais discrepâncias é que se

2.1.5 Condições auxiliares iniciais e de contorno

Conforme brevemente mostrado na seção anterior, as condições de contorno são elementos fundamentais para a solução das EDPs. Sem elas é impossível determinar uma única solução para o problema modelado, tornando inócua o processo de solução, uma vez que a solução encontrada pode discrepar completamente da experimentação. Assim, Strauss [80], Fortuna [34] e outros autores mostram que um problema bem-posto consiste em uma EDP definida em um domínio Ω , acompanhada de um conjunto de condições iniciais e/ou de fronteira (de modo geral, tais condições podem também ser chamadas de condições auxiliares) constituídas das seguintes propriedades fundamentais:

- Existência: Existe pelo menos uma solução $\phi(\mathbf{x}, t)$ que satisfaz todas as condições impostas, sendo \mathbf{x} o vetor posição.
- Unicidade: Há, no máximo, uma solução $\phi(\mathbf{x}, t)$.
- Estabilidade: A única solução $\phi(\mathbf{x}, t)$ depende de maneira estável dos dados do problema, isto é, se as entradas são ligeiramente modificadas, a solução não sofre grandes alterações.

9

⁹A rigor, deve-se definir matematicamente o conceito de "grandes alterações". Apesar desta necessidade, tal

A modelagem de um problema por EDPs deve prescrever condições auxiliares realistas. A máxima aristotélica de não pecar por falta ou por excesso se faz presente neste aspecto, pois negligenciar informações ao problema pode lhe privar da unicidade, enquanto que o excesso de informação restringe demasiadamente, e é capaz de afastar a existência de soluções. Outrossim, a propriedade de estabilidade é necessária pois qualquer medida experimental possui um erro associado à precisão do instrumento. A condição inerente da existência de erros de medida nos experimentos exige que as soluções admitam pequenas perturbações, tais como estes erros, sem modificar por completo o resultado [80, 34].

Condições auxiliares iniciais são relevantes para problemas dependentes do tempo devido à necessidade de se estabelecer uma relação cronológica de causa e efeito a partir da evolução temporal de uma configuração inicial conhecida. Já as condições de contorno, apesar de também aparecerem nos problemas transientes, são as grandes protagonistas dos problemas estacionários, pois qualquer alteração nelas modifica o valor da variável dependente $\phi(\mathbf{x})$ em todo o domínio Ω de forma instantânea [57].

Diante da importância das condições de contorno para os problemas elípticos, serão esmiuçadas, a seguir, os tipos canônicos de condições de contorno: condições de Dirichlet (ou de primeiro tipo), condições de Neumann (ou de segundo tipo) e condições de Robin (também conhecidas como condições mistas ou de terceiro tipo)¹⁰. Salienta-se que tais condições não se limitam aos problemas elípticos, estando presente também em problemas modelados por outros tipos de EDPs [50].

2.1.6 Condição de contorno do tipo Dirichlet

As condições de contorno de Dirichlet, nome dado em homenagem ao matemático Peter Dirichlet (1805 – 1859), ou de primeiro tipo, são aquelas onde o valor da variável dependente ϕ é diretamente especificado para um intervalo da fronteira $\partial\Omega$ do domínio. A variável ϕ pode ser uma constante ou uma função das variáveis espaciais [57].

De modo geral, condições de Dirichlet têm a forma:

$$\phi|_{\partial\Omega} = \psi(\mathbf{x}) , \quad (2.9)$$

discussão se afasta do escopo deste trabalho e não receberá devida atenção. O texto referenciado aborda, em detalhes, esta questão.

¹⁰Apesar deste trabalho se limitar às três condições supracitadas, existem diversos outros tipos de condições de contorno, dentre as quais pode-se destacar: a condição de Stefan, a condição de Higdon e a condição de Olanski, uma modificação da condição de Sommerfeld. Caldwell e Kwan [15] destacam que a condição de Stefan é utilizada na modelagem de problemas de transição de fase, especialmente nos que apresentam derretimento ou solidificação de um material, onde a forma do contorno $\partial\Omega$ é dependente do tempo. Higdon [40], por sua vez, apresenta uma modelagem que atribui condições de contorno específicas para problemas de dispersão de ondas. Por fim, Olanski [67] desenvolve condições de contorno para problemas hiperbólicos que necessitam de prescrição de informações em fronteiras computacionais (cujo domínio físico não é limitado), como no caso de mudanças de refinamento de malhas. Olanski se utilizou dos estudos do físico alemão Arnold Sommerfeld (1868 – 1951), que forneceu uma condição de contorno para fenômenos radioativos, um exemplo de problemas onde há a necessidade da prescrição de condições de fronteiras abertas.

onde $\phi|_{\partial\Omega}$ representa a variável dependente ϕ na fronteira $\partial\Omega$ e $\psi(\mathbf{x})$ a função que descreve o valor de ϕ em $\partial\Omega$, podendo ser nula, constante ou variável.

2.1.7 Condição de contorno do tipo Neumann

Ozisik *et al.* [69] apresentam que as condições de contorno de Neumann, nomeadas em homenagem ao matemático Carl Neumann (1832–1925), ou também de segundo tipo, especificam o fluxo da grandeza em questão em relação à um segmento da fronteira $\partial\Omega$ com direção perpendicular à $\partial\Omega$, isto é, a variação instantânea da grandeza ϕ que cruza este segmento¹¹. Matematicamente estas condições possuem a forma:

$$-\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial\hat{\mathbf{n}}}\Big|_{\partial\Omega} = \psi(\mathbf{x}) , \quad (2.10)$$

com Γ representando o coeficiente de difusão do material (em referência ao caso padrão adotado neste trabalho que é o problema da condução do calor) na região da condição de contorno, $\psi(\mathbf{x})$ sendo a função que determina o valor do fluxo e o termo $\frac{\partial\phi}{\partial\hat{\mathbf{n}}}$ indicando a derivada da grandeza ϕ em relação ao vetor normal $\hat{\mathbf{n}}$ da superfície $\partial\Omega$, sendo que $\hat{\mathbf{n}}$ possui sentido para fora de $\partial\Omega$. Este operador é definido como:

$$\frac{\partial\phi}{\partial\hat{\mathbf{n}}} = \nabla\phi \cdot \hat{\mathbf{n}} , \quad (2.11)$$

e sua interpretação geométrica é ilustrada pela Figura 2.3.

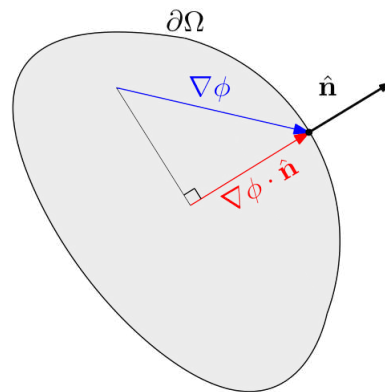


Figura 2.3: Representação geométrica da definição do operador de derivada normal. Fonte: autoria própria.

Em um sistema de coordenadas cartesiano de duas dimensões, escopo principal deste trabalho, considere que o vetor $\hat{\mathbf{n}}$ seja dado por:

$$\hat{\mathbf{n}} = \alpha\hat{\mathbf{i}} + \beta\hat{\mathbf{j}} \quad (2.12)$$

onde α e β são os cossenos diretores do vetor $\hat{\mathbf{n}}$, e $\hat{\mathbf{i}}$ e $\hat{\mathbf{j}}$ são os vetores unitários que formam a

¹¹Compreende-se por fluxo a quantidade transferida ou transportada por unidade de área e por unidade de tempo

base do espaço \mathbf{R}^2 . Assim, substituindo a Equação (2.12) na Equação (2.11), o vetor $\frac{\partial\phi}{\partial\hat{\mathbf{n}}}$ fica dado por:

$$\frac{\partial\phi}{\partial\hat{\mathbf{n}}} = \alpha \frac{\partial\phi}{\partial x} + \beta \frac{\partial\phi}{\partial y} . \quad (2.13)$$

Em um problema estacionário de condução de calor, a Equação representa a Lei de Fourier, que estipula que o vetor fluxo de calor normal à uma secção transversal é dado pelo produto interno entre o gradiente da temperatura e o vetor normal da secção. A direção positiva é dada na direção do vetor normal $\hat{\mathbf{n}}$ [57].

2.1.8 Condição de contorno do tipo Robin

Majumdar [57] expõe o terceiro e último tipo canônico de condição de contorno, também conhecido como condição de contorno de Robin, em referência a Victor Robin (1855 – 1897). Esta condição é uma combinação linear entre as duas condições de contorno anteriores, e matematicamente é expressa por:

$$-\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial\hat{\mathbf{n}}}\Big|_{\partial\Omega} = h_{ic}(\phi|_{\partial\Omega} - \phi_{\infty}) , \quad (2.14)$$

onde Γ é o coeficiente de difusão do meio, h_{ic} é uma constante de proporcionalidade conhecida, ϕ_{∞} é o valor de equilíbrio da grandeza ϕ , e $\phi|_{\partial\Omega}$ é o valor de ϕ avaliado na interface. Em problemas de condução de calor, a condição de Robin é também conhecida como condição de convecção na interface, modelada pela lei do resfriamento de Newton. De modo geral, a condição de contorno de Robin modela fenômenos onde o fluxo que cruza a fronteira do domínio é alterado pela interação entre o meio exterior e a fronteira.

Manipulando a Equação (2.14), é possível apresentá-la na forma :

$$\Gamma(\nabla\phi|_{\partial\Omega}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega} + h_{ic}\phi|_{\partial\Omega} = h_{ic}\phi_{\infty} . \quad (2.15)$$

Esta forma de escrever a condição de fronteira de Robin é interessante por apresentar as seguintes propriedades:

- Se $h_{ic} \rightarrow \infty$, tem-se $\phi|_{\partial\Omega} = \phi_{\infty}$, que é a condição de Dirichlet.
- Se $h_{ic} = 0$, tem-se que $\Gamma(\nabla\phi|_{\partial\Omega}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega} = 0$, sendo a condição de Neumann homogênea.

As propriedades apresentadas pela Equação (2.15) são tais que nos permitem escrever qualquer tipo de combinação linear entre as condições de contorno canônicas, bastando atribuir valores adequados para $\phi|_{\partial\Omega}$, ϕ_{∞} e h_{ic} .

Quando o lado direito das Equações (2.9), (2.1.7) e (2.15) são iguais a zero, tais condições são ditas homogêneas. Um problema real pode apresentar todos os casos de condições de fronteira de uma única vez, exigindo apenas que duas condições para a mesma variável não se sobreponham em uma mesma região $\partial\Omega$, respeitando o princípio de boa-posição.

2.2 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Métodos numéricos são técnicas que permitem que problemas matemáticos complexos, ou que não possuam soluções analíticas, sejam formulados de uma maneira em que possam ser resolvidos por recurso de uma sequência de operações aritméticas. Os métodos numéricos fornecem soluções numéricas para um dado problema, tais soluções são aproximações, geralmente discretas, da solução analítica ou dos valores experimentais medidos e permitem que o comportamento da grandeza discretizada possa ser reconstruído a partir destes valores [18, 36, 71].

2.2.1 O processo de discretização

Quando uma equação diferencial bem posta é resolvida de forma analítica, a solução encontrada satisfaz a equação perfeitamente em todos os pontos do domínio. As soluções numéricas, por outro lado, satisfazem a equação apenas em alguns pontos de interesse: os nós. Tais pontos usualmente representam o centróide de objetos chamados células ou volumes, mas podem também representar seus vértices (chamados de nós no contexto da análise numérica). Estes objetos são originados no processo de discretização do problema, onde o domínio é subdividido em um conjunto finito de regiões menores e não sobrepostas, formando um conjunto nomeado malha. A EDP é substituída por uma equação algébrica que relaciona os valores da grandeza dependente entre um nó e seus vizinhos, exprimindo o mesmo significado físico da EDP. Esta equação é a equivalente discreta da equação diferencial e é formulada para cada um dos nós internos do domínio, relacionando o valor que a grandeza assume em um ponto com suas adjacências [61, 58, 34, 71].

A Figura 2.4 exemplifica a passagem do problema original, contínuo, para sua forma discretizada. Do lado esquerdo tem-se o domínio original Ω e sua fronteira $\partial\Omega$, ambos contínuos, formando uma região onde a equação $L(\phi) = 0$ fornece o valor de ϕ para qualquer ponto com precisão exata. Do lado direito tem-se a versão discretizada em M e N subintervalos de tamanhos Δx e Δy na direção x e y , respectivamente, pela ação de algum método numérico. O problema então passa a ser governado por um conjunto de equações algébricas que fornecem valores aproximados para ϕ em pontos discretos, calculados à partir de um sistema. Os coeficientes da matriz A podem representar, por exemplo, a relação entre a grandeza ϕ em um ponto (i, j) (em azul) e seus vizinhos $(i+1, j)$, $(i-1, j)$, $(i, j+1)$ e $(i, j-1)$ (em vermelho).

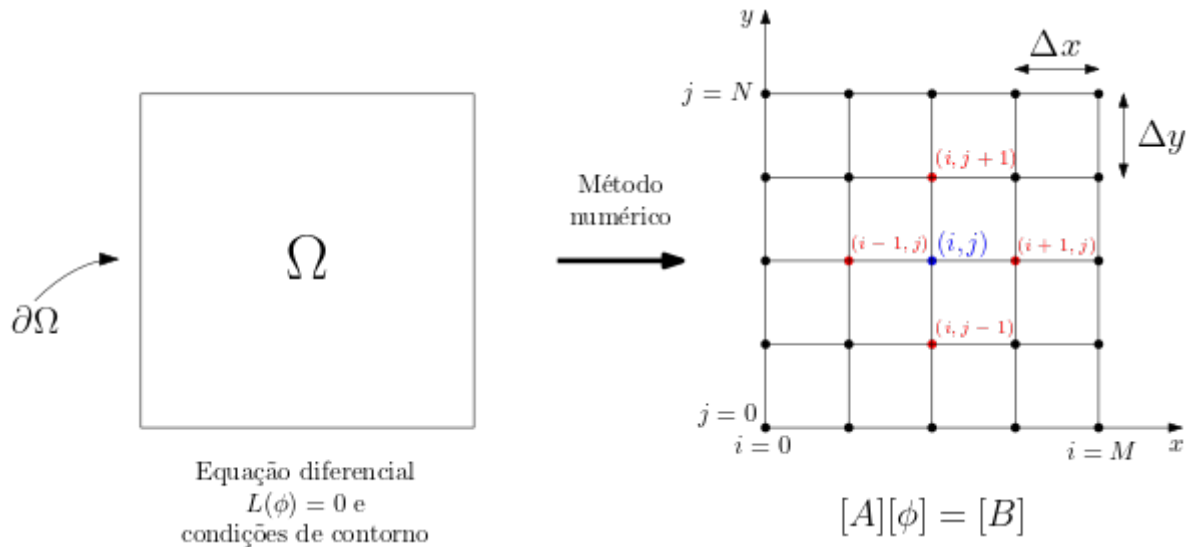


Figura 2.4: Ilustração do processo de discretização de um caso bidimensional. Fonte: autoria própria, adaptado de [58, 34]

Como cada nó interno possui sua equação, tem-se n equações para uma malha com n nós internos, e por que todas as equações devem ser satisfeitas simultaneamente, forma-se um sistema de equações algébricas. Este sistema pode ser resolvido por algum método, direto ou iterativo, sendo o último preferível para implementação computacional ao se lidar com sistemas esparsos e de grande porte. Os nós localizados nas regiões de fronteira em geral não fazem parte do vetor de incógnitas do sistema, uma vez que são tratados especificamente a depender do tipo de condição de contorno envolvida. Todas estas etapas descritas definem o processo de discretização, e os diferentes métodos utilizados para executá-lo são denominados métodos de discretização ou métodos numéricos, classificados pelo modo com que discretizam a EDP [61, 58, 34].

O desejo primário da análise numérica é que a solução numérica nos pontos discretizados represente, de maneira fidedigna, a solução analítica¹². Em suma, isto é forçar que a discretização possua algumas características, que são: consistência, convergência e estabilidade. De maneira breve, um esquema consistente é aquele onde os erros de discretização tendem a zero ao melhorar o refinamento da malha, fazendo com que a solução numérica eventualmente convirja para a solução analítica; convergência é uma propriedade que designa que, durante o processo iterativo de solução de um sistema linear (por exemplo), duas soluções consecutivas não variam mais do que uma quantidade limite pré-fixada, chamada frequentemente de tolerância; estabilidade se refere ao comportamento das equações discretizadas quando resolvidas por um processo iterativo, é uma propriedade que remete ao sistema de equações montado

¹²Este desejo se relaciona com a propriedade de acurácia da solução numérica. Basicamente, esta propriedade é definida como quão próxima a solução numérica está da solução analítica, isto é, uma solução numérica acurada é aquela que está bem próxima da solução analítica (a depender de um parâmetro de tolerância aceitável). Contudo, a maioria dos problemas reais não possuem, por não existência ou por proibições práticas, soluções analíticas. Nestes casos, uma alternativa para medir a acurácia de um esquema de discretização, é considerar o erro de truncamento como métrica de acurácia [61].

pelo processo de discretização, ela indica que o sistema terá solução única sob diversas situações, estando diretamente ligada à convergência desta solução. A estabilidade de um sistema linear é garantida se o sistema satisfizer o critério de Scarborough¹³, que indica que a matriz de coeficientes é diagonalmente dominante¹⁴ [69, 61, 58].

2.2.2 Malhas computacionais

Conforme exposto nas seções anteriores, a solução de uma EDP por meio de um método numérico requer que o domínio computacional seja discretizado em sub-domínios não sobrepostos chamados células, volumes de controle ou elementos, formando um conjunto de objetos denominado malha [52].

As primeiras soluções numéricas de EDPs foram de problemas definidos em domínios bidimensionais retangulares discretizados por malhas ortogonais cartesianas, onde os elementos são produzidos por sucessivas intersecções de retas paralelas aos eixos cartesianos x e y , separadas por distâncias, não necessariamente fixas, Δx e Δy , respectivamente [60]. Os padrões geométricos formados por estas malhas podem ser exemplificados pela Figura 2.5 item (a).

As experiências primordiais com geometrias irregulares foram feitas criando-se degraus nas malhas cartesianas ortogonais. Posteriormente, na busca por uma melhor representação da geometria de domínios não retangulares, os pesquisadores optaram por cortar as áreas das células que ultrapassassem as fronteiras, formando polígonos de formatos variados. Esta abordagem era mais conveniente, pois se utilizava de procedimentos matemáticos já estabelecidos, tais como tentar aproximar uma circunferência por segmentos de retas. Em contrapartida, como os polígonos criados não poderiam ter seu formato previsto, era difícil adequar a discretização da EDP a tais incertezas e a comunidade científica compreendeu que haveria de despende esforços para formular teorias mais sólidas para a geração de malhas [60, 87]. A Figura 2.5, itens (b) e (c), reproduz as dificuldades aqui relatadas, sendo que em (b) o domínio possui uma fronteira com formato de arco, discretizada por meio da técnica de formação de degraus; enquanto que em (c) tem-se as células da parte circular do domínio cortadas por segmentos de retas para melhor se adequarem à irregularidade da fronteira, e este corte produziu elementos de três tipos: triangulares, quadrilaterais e pentagonais.

¹³Mais detalhes sobre o critério de Scarborough podem ser vistos em [71], [58], [87] e outros.

¹⁴Existem outros critérios para a análise de estabilidade de um sistema linear, tal como o número de condicionamento. O leitor pode encontrar maiores detalhes em [60].

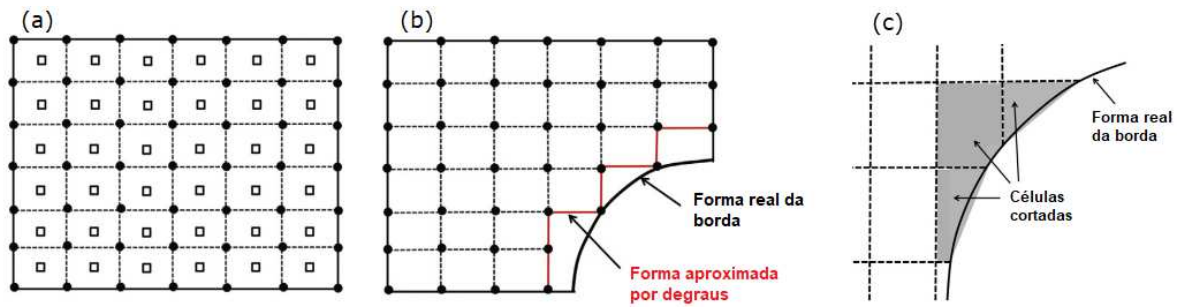


Figura 2.5: Exemplos de discretização de domínios computacionais com geometrias ortogonais e não ortogonais. Fonte: adaptado de [60].

Desde então o tema "geração de malhas" tornou-se tão vasto quanto o tema "métodos numéricos", e ambos passaram a se desenvolver separadamente, ainda que com comportamento simbiótico. As primeiras pesquisas dedicadas diretamente às malhas iniciaram com o Projeto Nacional de Malhas, liderados por J.F. Thompson [82], em meados de 1980. Durante os anos seguintes surgiram as malhas *body-fitted*¹⁵, que representavam um avanço considerável em relação às malhas estruturadas ortogonais, tal como pode ser percebido ao observar-se a Figura 2.6, que mostra no item (a) uma tentativa de discretização utilizando uma malha estruturada ortogonal, incapaz de se ajustar à região circular, resultando em soluções com baixa resolução, que não captam a real distribuição do campo de velocidades, conforme mostrado em (b). Em (c) o mesmo domínio é discretizado por malhas estruturadas não ortogonais do tipo *body-fitted*, que produzem resultados mais aprimorados, mostrados em (d), mas cuja formulação é consideravelmente mais complexa que para estruturadas ortogonais.

¹⁵Em tradução livre: ajustadas ao corpo. São malhas que tentam se ajustar ao domínio por meio de transformações de coordenadas cartesianas para sistemas de coordenadas generalizadas. É eficaz quando o domínio possui formas de funções matemáticas simples, como circunferências ou parábolas [60, 87].

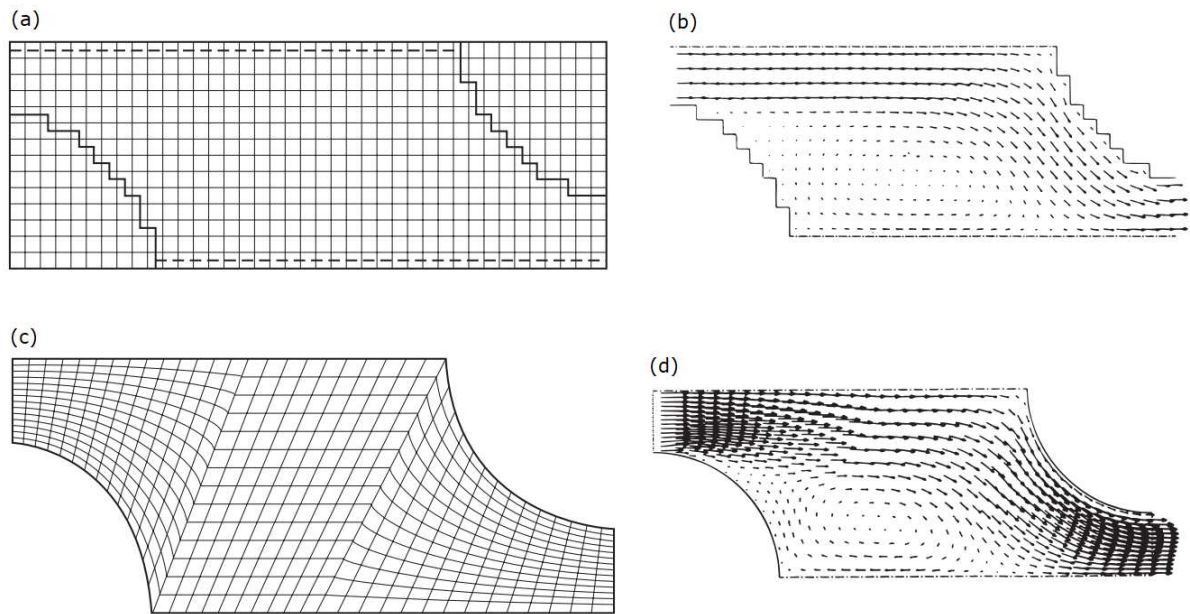


Figura 2.6: Discretização de um domínio misto entre curvas ortogonais e circulares por malhas ortogonais e *body-fitted*. Fonte: adaptado de [87].

Contudo, a popularização do Método dos Elementos Finitos na Mecânica dos Sólidos forçou a investigação por tipos de malhas que pudessem aproximar, com fidelidade, irregularidades comuns em geometrias de peças mecânicas, o que era extremamente difícil de ser feito por meio de malhas estruturadas. Posteriormente, malhas não estruturadas mostraram-se capazes de sanar tal deficiência, incentivando a construção de geradores de malhas deste tipo durante os anos 1990 e 2000 e tornando-as favoritas para o desenvolvimento de novos métodos numéricos [60].

Os problemas associados ao uso de malhas estruturadas aparecem quando há a necessidade de se representar um domínio com geometria complexa ou pela demanda de refinamentos locais para que as características do fenômeno sejam captadas satisfatoriamente. O obstáculo reside no fato de que o refinamento se propaga para o domínio como um todo, criando células excessivas em locais desnecessários, implicando em um acréscimo de custo computacional sem fundamento. A saída encontrada para estes transtornos é construir malhas estruturadas separadas por blocos, como o exemplo ilustrado pela Figura 2.7, onde o domínio é dividido em partes separadas, cada um com um nível de refinamento, havendo a necessidade de se especificar as conectividades nas interfaces entre dois blocos distintos tal como na abordagem não estruturada [60, 87].

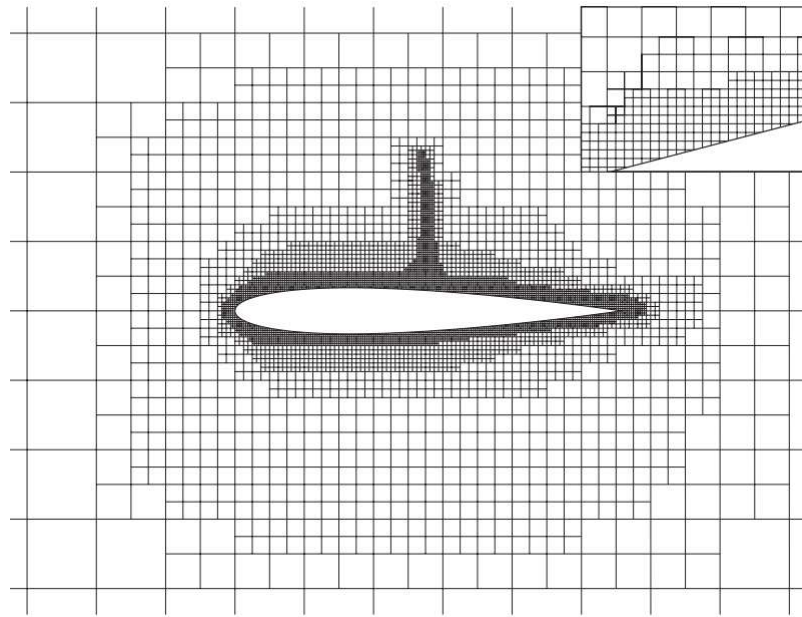


Figura 2.7: Malha cartesiana estruturada em blocos. Cada bloco possui seu respectivo volume de controle, mantendo, dentro deste bloco, o aspecto estruturado de uma malha cartesiana. O detalhe exposto no canto superior direito enfatiza a região de adesão da malha à fronteira do domínio [87]. Fonte: [87].

Uma comparação importante entre discretizações obtidas por meio de malhas estruturadas ou não estruturadas é feita ao se observar a estrutura da matriz de coeficientes resultante de cada uma das formulações, tal como ilustrado pela Figura 2.8. Dado que a conectividade entre os elementos nas discretizações que utilizam malhas estruturadas (Figura 2.8 item (a)) possui um padrão fixo, tal padrão se apresenta na matriz de coeficientes formando bandas. Matrizes que representam discretizações usando malhas não estruturadas (Figura 2.8 item (b)) não apresentam esta regularidade, resultando em coeficientes espalhados aleatoriamente pelas entradas da matriz [58, 60].

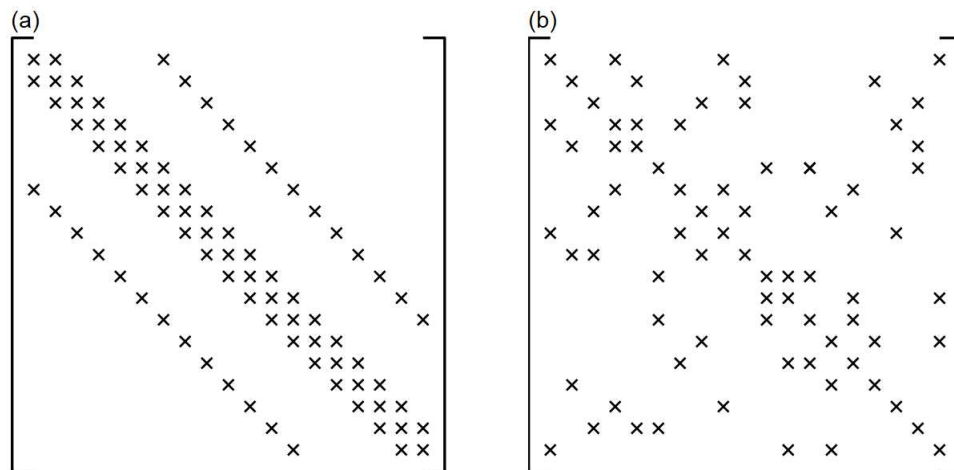


Figura 2.8: Exemplos de matrizes de coeficientes produzidas por discretizações: (a) estruturadas, com a presença de bandas bem definidas; (b) não-estruturadas, com distribuição aleatória dos coeficientes. Os símbolos \times indicam uma entrada não nula, os espaços vazios, por sua vez, indicam entradas nulas. Fonte: autoria própria.

Malhas não estruturadas formam um conjunto que contém o conjunto das malhas estruturadas, mas é maior que este. São o limite do conceito de malhas em blocos, de modo que, neste caso, cada elemento é em si mesmo um bloco. Malhas não estruturadas podem ser compostas de diversos polígonos (para o caso $2D$) ou poliedros (para o caso $3D$), de tamanhos e formatos arbitrários, fazendo com que as informações de conectividade entre os elementos não seja óbvia, conforme observado no item (b) da Figura 2.8 item (b). Esta particularidade obriga que um gerador deste tipo de malhas forneça uma lista de conectividade para cada elemento, isto é, informações sobre quais elementos compartilham a mesma aresta ou o mesmo nó, de forma que o código consiga identificar os elementos que se relacionam entre si para o cálculo das equações algébricas [60, 87, 21].

O presente trabalho utiliza o *software Distmesh*, produto da tese de doutorado de Persson [75], como gerador de malhas. É um gerador de código aberto, construído em linguagem *MATLAB*® e capaz de gerar malhas não estruturadas para domínios $2D$ e $3D$ utilizando elementos triangulares para o caso bidimensional e tetraedrais para o caso tridimensional. De acordo com Persson [75], o funcionamento do código, grosso modo, baseia-se nas seguintes etapas: *input* dos nós que definem a fronteira do domínio, criação dos nós internos, tecelagem da malha de triângulos, readequação e melhoramento.

A Figura 2.9 mostra uma malha $2D$ gerada com o auxílio do *Distmesh*. O domínio possui um obstáculo com formato de um aerofólio NACA0012 (semelhante ao ilustrado na Figura 2.7) que exige que os elementos próximos sejam mais refinados nas partes dianteira e traseira, melhorando a precisão da solução nesta região, e pode-se notar a quantidade muito menor de elementos necessários para uma boa representação em comparação à abordagem estruturada por blocos.

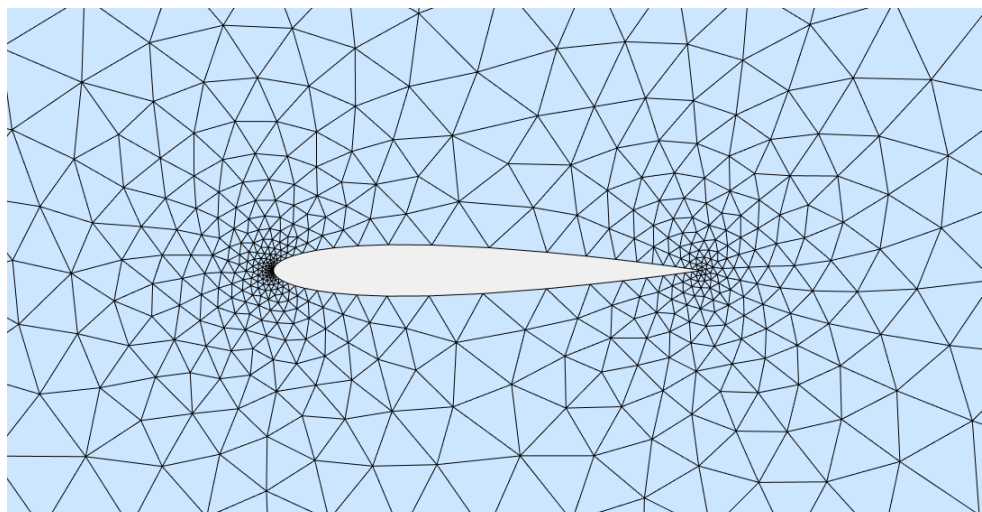


Figura 2.9: Malha não estruturada triangular com refinamento local não uniforme gerada por meio do *software Distmesh*. Fonte: autoria própria.

Apesar da excelente qualidade¹⁶ média dos elementos das malhas geradas pelo *Distmesh*, o programa carece de opções que proporcionem um controle refinado dos atributos dos elementos, dificultando ou até impossibilitando algumas análises. Devido a este fato, o presente trabalho necessitará adotar também outros meios de geração de malhas, conforme será apresentado nas seções posteriores.

Mazumder [60] menciona que o MVF foi adaptado para trabalhar com malhas não estruturadas durante a década de 1990. A flexibilidade oferecida por tais malhas fez com que tornassem-se as preferidas pelos fabricantes de *softwares* comerciais de DFC, porque são capazes de produzir elementos de boa qualidade, mesmo para domínios acentuadamente irregulares. Malhas não estruturadas permitem refinamentos locais e discretizações de problemas multiescala, tal como mostrado na Figura ???. A popularidade das malhas não estruturadas decorre do fato de não serem restritas, algorítmicamente, a uma geometria específica de célula, possibilitando que sejam aplicadas a células com um número arbitrário de faces. Esta propriedade é importante, dado que nos últimos anos, o uso de malhas não estruturadas está tornando-se uma prática padrão em simulações de processos desafiadores na Engenharia. A discretização de geometrias complexas, tipicamente associadas a tais processos, por meio de malhas estruturadas pode tornar-se uma tarefa árdua conforme já comentado, enquanto que com malhas não estruturadas é consideravelmente mais simples e automatizável [12].

A qualidade de um elemento está relacionada ao seu formato, sendo preferível que os elementos de uma malha sejam todos equiláteros. Quanto mais distorcidos¹⁷ em

¹⁶A qualidade de um elemento da malha relaciona-se com o formato deste, sendo preferível que seja um polígono regular.

¹⁷Neste momento vale salientar que, para malhas estruturadas, o grau de distorção médio diminui com o refinamento da malha, enquanto que para malhas não estruturadas, o processo de geração de malha normalmente se faz usando algoritmos baseados em princípios geométricos, que não dependem diretamente do refinamento da malha, de modo que há certa autossimilaridade entre malhas grosseiras e finas, fazendo com que o refinamento não reduza a distorção dos elementos.

relação à sua forma regular, pior a taxa de convergência¹⁸ do método numérico. Malhas de boa qualidade permitem que os vetores normais das faces de um elemento estejam alinhados aos seus respectivos vetores que ligam o centróide deste elemento aos de seus vizinhos, nesta ordem. O desalinhamento entre estes ângulos produz um vetor de fluxo tangencial à face, que distorce o gradiente (idealizado como sendo na direção do vetor que liga os Centros Geométricos (CGs)) nas faces das células, afetando a precisão da discretização. O tratamento adequado deste gradiente é um dos pontos mais sensíveis para a convergência do MVF [60, 61, 88].

Como o escopo do presente trabalho contempla apenas malhas não estruturadas triangulares, é desejável possuir meios para avaliar a qualidade dos elementos utilizados nas discretizações. Sob esta perspectiva, diversas métricas para a qualidade dos elementos de uma malha não estruturada triangular são encontradas na literatura, tais como as propostas em ANSYS [1], mostradas pelas Equações (2.16), (2.17) e (2.18):

$$D = \max \left[\frac{\theta_{\max} - 60}{180 - 60}, \frac{60 - \theta_{\min}}{60} \right], \quad (2.16)$$

onde D é o grau de distorção da célula e θ_{\max} e θ_{\min} são, respectivamente, o maior e o menor ângulo interno do elemento (em graus). O conjunto imagem desta equação é o intervalo $[0, 1]$, onde 0 representa um elemento equilátero (perfeito) e 1 um elemento totalmente distorcido¹⁹ (degenerado);

$$Q_{AR} = \frac{R}{2r}, \quad (2.17)$$

sendo R o raio do menor círculo que circunscreve o elemento e r o raio do maior círculo inscrito no elemento, sendo desejado que Q_{AR} seja próximo de 1 para elementos próximos do ótimo, evitando elementos com Q_{AR} próximos de 0;

$$Q = \left[\frac{4\sqrt{3} * \text{Área}}{\Sigma(\text{Tamanho da aresta})^2} \right], \quad (2.18)$$

desejando que Q esteja próximo de 1, indicando um elemento perfeito. No geral, espera-se um valor mínimo de qualidade $Q = 0,6$. Se um valor for próximo de 0, a métrica diz que tal elemento é extremamente distorcido (degenerado).

O cuidado com a qualidade da malha utilizada para discretizar o domínio de um problema é fundamental para que o método numérico ofereça boas respostas. Uma malha que possui muitos elementos de baixa qualidade tende a aumentar significativamente o número de iterações necessárias para que a convergência seja alcançada, podendo até tornar o algoritmo computacionalmente impraticável. Compreender e controlar estes erros nas soluções numéricas é uma tarefa complexa, constituindo um campo de pesquisa fértil e pujante até os dias de hoje

¹⁸Remete a quão rápido o erro associado à discretização cai em função do espaçamento médio da malha. Este assunto será melhor detalhado ao longo do texto.

¹⁹A distorção de um elemento pode ser interpretada como o grau de afastamento do tipo ideal deste mesmo elemento. No caso particular de elementos triangulares, o tipo ideal é o triângulo equilátero [1].

[8, 60, 87].

Conforme já mencionado, a área de estudo sobre geração de malhas é extremamente vasta. Este trabalho não possui a ambição de aprofundar os pormenores que envolvem tal campo, se satisfazendo apenas em apresentar o suficiente para que o leitor seja capaz de compreender o que será desenvolvido adiante e os obstáculos envolvidos no processo. Contudo, o leitor interessado é fortemente encorajado a consultar a bibliografia especializada, como os trabalhos de Mazumder [60], Moukalled, Mangani e Darwish [61], Versteeg e Malalasekera [87], Thompson, Soni e Weatherill [83], Thompson *et al.* [84], Lisekin [54], Bern e Plassmann [12] e outros.

2.2.3 Método dos volumes finitos

Foco principal do presente trabalho, o Método dos Volumes Finitos (MVF) é outro método numérico para resolver EDPs. Seu nome origina-se do fato de que sua formulação é fundamentada para satisfazer a equação governante em volumes de controle de tamanhos finitos, que discretizam o domínio do problema. Estes volumes também são conhecidos por células ou elementos, e podem possuir tamanhos e formatos diversos, sendo comum polígonos (para o caso 2D) ou poliedros (para o caso 3D) convexos, trazendo consigo os benefícios de adaptatividade a geometrias complexas, tal como o MEF, mas com uma formulação consideravelmente mais simples. Moukalled [61] e Patankar [71] apontam que na DFC, é impositivo que a grandeza transportada seja conservada também na equação discretizada. A natureza do MVF faz com que ele seja a principal opção para resolver numericamente EDPs de problemas da DFC, pois garante conservação local (em cada volume de controle) e global (no sistema todo) das grandezas, uma vez que sua formulação é construída com base na integração dos fluxos nas faces compartilhadas entre dois volumes. Desta forma, o fluxo entre dois volumes possui sempre a mesma magnitude, mas direção oposta, o que naturalmente atribui ao método a propriedade de conservação [60, 71]. Outro benefício atribuído ao MVF relaciona-se a propriedade de que a discretização do domínio pode ser feita diretamente no espaço físico, sem haver necessidade de transformações entre este domínio e o computacional [61].

Mazumder [60] mostra que os primeiros exemplos de utilização do MVF datam de 1965, quando Harlow e Welch [39] apresentaram uma metodologia para analisar problemas de escoamentos incompressíveis enquanto trabalhavam no Laboratório de Los Alamos. A percepção de que a conservação das propriedades físicas era necessária fez com que o MVF ganhasse popularidade na área dos fenômenos de transporte, mas apesar de sua hegemonia no campo da DFC, o MVF também passou a ser utilizado para resolver problemas de diversas áreas, como mecânica dos sólidos [16], eletromagnetismo [38], astrofísica [55] e outros. Moukalled, Mangani e Darwish [61] complementam que o sucesso do MVF também foi influenciado pelos trabalhos do grupo de DFC do Imperial College nos anos 1970 sob coordenação do Professor Brian Spalding, a quem Patankar [71] também atribui o avanço do método.

O MVF pode ser formulado de duas maneiras equivalentes, conhecidas como

cell-centered e *nodal point*, ilustradas pela Figura 2.10. Na primeira abordagem, as equações são formuladas tendo os centróides dos elementos da malha como pontos de referência, enquanto que na segunda, os vértices são o foco, e algumas manipulações extras são necessárias para delimitar o domínio de cada volume [58, 71].

No MVF, a EDP não é resolvida diretamente, e na formulação *cell-centered* não há volumes centrados sobre a fronteira do domínio, de forma que as condições de contorno não podem ser propriamente satisfeitas, havendo a necessidade de algumas manipulações algébricas para se obter as informações desejadas localizadas no bordo do domínio. Por estas razões, a solução numérica obtida por esta técnica é dita uma solução fraca [60].

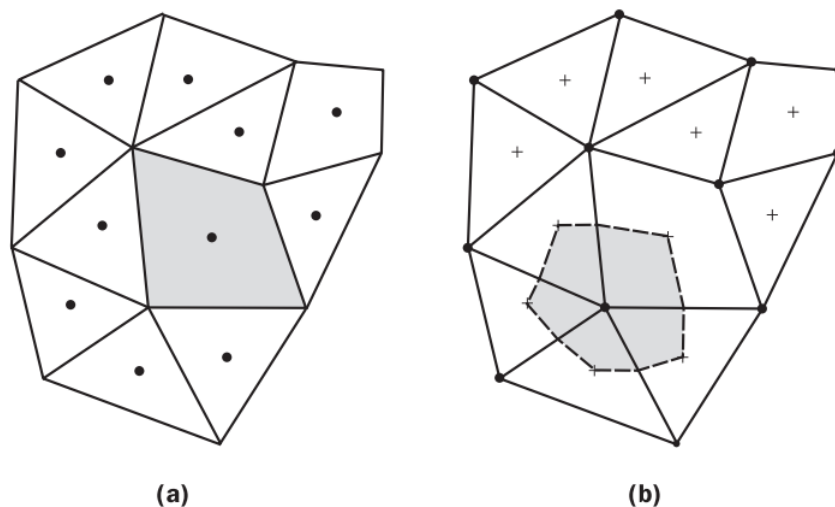


Figura 2.10: Exemplo do volume de controle utilizado nas formulações *cell-centered*, mostrada por (a), e *nodal point*, dada em (b). A formulação *cell-centered* é mais evidente e computacionalmente mais simples, facilitando sua implementação em malhas não estruturadas. Fonte: [87].

Fortuna [34] menciona que em DFC as equações elípticas modelam situações onde há fluxos difusivos. Nestes casos, as equações destes fenômenos podem ser obtidas excluindo os termos 1 e 2 da Equação (2.1), restando apenas

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi = 0. \quad (2.19)$$

Visto que o presente trabalho busca desenvolver um código computacional para solucionar equações do tipo da Equação (2.19), o MVF será apresentado diretamente para tais problemas, considerando a abordagem *cell-centered*. O leitor pode buscar informações sobre as formulações *nodal point* nas principais referências citadas nesta seção.

A primeira etapa envolvida no processo de discretização de uma EDP pelo MVF é a discretização do domínio. Esta discretização não precisa seguir um padrão estruturado como é preferível para o MDF, podendo ser feita por uma malha não estruturada, tal como o MEF, que se ajusta com mais facilidade às possíveis sinuosidades ou descontinuidades do domínio [60]. Considere a EDP da difusão bidimensional em regime permanente dada pela

Equação (2.19), com Γ sendo o coeficiente de difusão do meio, que em geral pode ser função da coordenada espacial ou da própria variável escalar ϕ , de modo que $\Gamma(x, y, \phi)$.

A formulação *cell-centered* inicia-se pela integração da EDP governante sobre cada volume da malha. Tomando o caso da equação de Poisson, dada pela Equação (2.19), isolando o termo fonte S_ϕ e integrando-a sobre um volume de controle i qualquer obtém-se:

$$\int_{V_i} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV = - \int_{V_i} S_\phi dV , \quad (2.20)$$

onde V_i representa o volume (ou área, para o caso $2D$) da i -ésima célula.

Recordando-se de uma importante ferramenta do cálculo vetorial, o Teorema da Divergência de Gauss, tem-se uma igualdade que relaciona uma integral de superfície (ou de bordo) do fluxo de um campo vetorial através desta superfície fechada, com uma integral de volume sobre o divergente daquele campo vetorial. Abaixo apresenta-se o enunciado deste teorema conforme encontrado em Kreyszig, Kreyszig e Norminton [49].

Teorema 2.1. *(Teorema da Divergência de Gauss) Seja V uma região fechada e limitada no espaço, cuja fronteira ∂V seja orientável e suave por partes. Seja $\mathbb{F}(x, y, z)$ uma função vetorial contínua e que possua derivadas parciais de primeira ordem também contínuas em algum domínio que contenha V . Então, vale a seguinte igualdade:*

$$\int_V \nabla \cdot \mathbb{F} dV = \int_{\partial V} \mathbb{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA , \quad (2.21)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ representa o vetor normal à superfície ∂V .

Demonstração: disponível em Arfken et al. [6], pg. 164.

Arfken et al. [6] frizam que o Teorema da Divergência de Gauss estabelece um balanço do fluxo líquido da grandeza \mathbb{F} dentro da região V .

Aplicando este teorema sobre o lado esquerdo da Equação (2.20) obtém-se:

$$\int_{\partial V_i} (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{\mathbf{n}} dA = - \int_{V_i} S_\phi dV , \quad (2.22)$$

sendo ∂V_i a superfície externa do i -ésimo volume de controle e dA um elemento diferencial de área em ∂V_i com vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$ apontando para fora de ∂V_i . O lado direito da equação calcula toda a grandeza ϕ que é gerada ou destruída em V_i , e pode ser avaliado utilizando-se o Teorema do Valor Médio, encontrado em Kreyszig, Kreyszig e Norminton [49], enunciado em sequência:

Teorema 2.2. *(Teorema do Valor Médio) Seja $f(x, y, z)$ uma função contínua definida em um domínio simplesmente conexo Ω . Então existe um ponto $Q := (x_0, y_0, z_0) \in \Omega$ tal que é válido:*

$$\int_{\Omega} f(x, y, z) dV = f(x_0, y_0, z_0) V_{\Omega} , \quad (2.23)$$

onde V_Ω é o volume da região Ω .

Demonstração: disponível em Dougherty [29].

Desta forma, é possível aproximar o lado direito da Equação (2.22) assumindo que o valor médio de S_ϕ , denotado por \bar{S}_ϕ , coincide com o valor de S_ϕ localizado no centróide do i -ésimo volume de controle, S_{V_i} . Assim,

$$\int_{V_i} S_\phi dV = \bar{S}_\phi V_i \approx S_{V_i} V_i, \quad (2.24)$$

com V_i sendo o volume do i -ésimo volume. Se a função S_ϕ for linear, então a aproximação por \bar{S}_ϕ é exata, caso contrário a aproximação só torna-se exata no limite em que $V_i \rightarrow 0$, fazendo o erro também tender à zero. Para evitar um acúmulo de erro por conta da aproximação de S_ϕ , é comum que este termo fonte seja linearizado [71, 60]. Este procedimento será apresentado adiante, em um momento oportuno.

Substituindo a Equação (2.24) na Equação (2.22) obtém-se:

$$\int_{\partial V_i} (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{\mathbf{n}} dA = -\bar{S}_\phi V_i \approx -S_{V_i} V_i. \quad (2.25)$$

O Teorema da Divergência de Gauss permite que um passo fundamental seja dado: a forma integral da EDP agora é representada por uma integral de superfície que contabiliza o balanço do fluxo da grandeza ϕ que cruza a superfície ∂V_i . Desta forma, como o domínio físico foi discretizado em pequenos volumes de controle, tais volumes formam uma superfície gaussiana em volta de seus centróides, que são os pontos onde admite-se que as informações são levadas em consideração, e pode-se aproximar a integral sobre toda a superfície ∂V_i por uma soma das integrais avaliadas em cada face f do volume [87, 61, 60].

Em linguagem matemática, esta afirmação pode ser escrita como:

$$\int_{\partial V_i} (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{\mathbf{n}} dA = \sum_{f=1}^{N_f} \int_f (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{\mathbf{n}} dA, \quad (2.26)$$

sendo N_f o número de faces que um volume i qualquer possui.

A esta altura a discretização da EDP pelo MVF começa a tornar-se perceptível, mas alguns pontos da Equação (2.26) ainda precisam ser tratados. Nota-se que, no lado direito, ainda há uma integral cujo domínio é cada uma das faces do volume de controle, que também pode ser aproximada utilizando o Teorema do Valor Médio. Admitindo que $(\Gamma \nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}$ é constante em cada face f , pode-se escrever:

$$\int_f (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{\mathbf{n}} dA = (\Gamma \nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} \int_f dA = (\Gamma \nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} A_f, \quad (2.27)$$

sendo A_f a área da face f do volume e $(\Gamma \nabla \phi)_f$ o fluxo difusivo através de f .

Substituindo os resultados obtidos pela Equação (2.27) na Equação (2.26), e utilizando-os em sequência na Equação (2.24), obtém-se:

$$\sum_{f=1}^{N_f} (\Gamma \nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f A_f = -S_{V_i} V_i . \quad (2.28)$$

sendo esta a forma discretizada da EDP original por meio do MVF.

Mazumder [60] destaca que para calcular a solução numérica de uma EDP por meio do MVF deve-se conhecer uma maneira de discretizar o termo $(\nabla \phi)_f$ da Equação (2.28), e o tipo de malha utilizado na discretização leva a uma divisão substancial entre as possibilidades de tratamento deste termo. Em malhas estruturadas ortogonais, este gradiente pode ser facilmente discretizado por expansão em série de Taylor. Para isto, considere a definição do vetor gradiente dada por:

$$\nabla \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \hat{\mathbf{j}} . \quad (2.29)$$

Tratando-se de uma malha ortogonal, é possível que os termos $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ e $\frac{\partial \phi}{\partial y}$ sejam discretizados por diferenças avançadas, com os pontos: i e $i + 1$ representando os centróides do volume principal P e seus vizinhos W , E , N ou S , tal como ilustrado pela Figura 2.11. Esta possibilidade existe por dois fatores: o vetor normal $\hat{\mathbf{n}}$ de cada face é colinear ao vetor gradiente do fluxo difusivo e o centróide da face encontra-se exatamente sobre a metade da distância entre os CGs dos dois volumes [61].

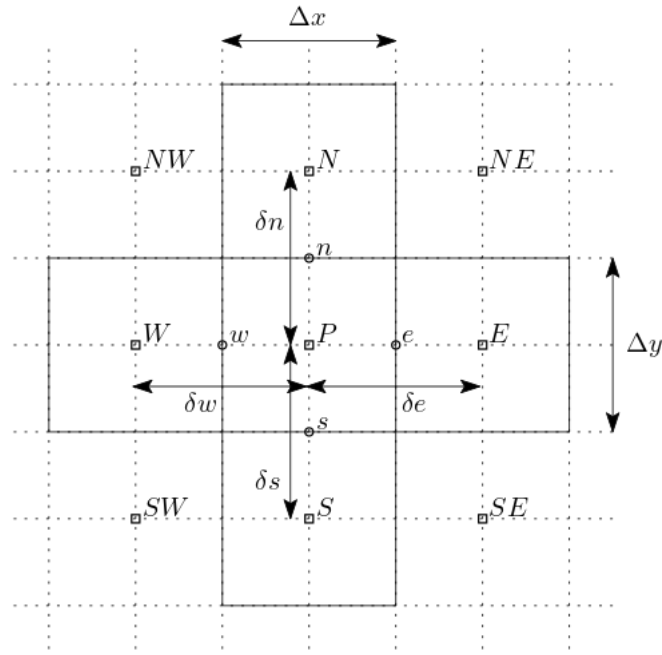


Figura 2.11: Estencil para uma formulação do FVM em malha cartesiana ortogonal. Os centróides dos volumes retangulares de tamanho Δx por Δy são denotados por um retângulo vazado e letras maiúsculas, sendo P o volume principal, aquele para o qual a equação está sendo construída. Os pontos médios de cada face (arestas para o caso 2D) são dados por círculos vazados e letras minúsculas, em malhas estruturadas cartesianas estes pontos coincidem com o ponto médio de cada aresta e o ponto médio da distância entre os CGs. Fonte: autoria própria.

Desta forma, os gradientes em cada face w, e, n e s são dados, respectivamente, pelas equações abaixo:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_w &= \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta w}, \\ \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_e &= \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta e}, \\ \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_n &= \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta n}, \\ \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_s &= \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta s}. \end{aligned} \tag{2.30}$$

Abrindo a Equação (2.28) e substituindo seus gradientes pelas aproximações mostradas na Equação (2.30), obtém-se:

$$-\Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta w} \right) + \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta e} \right) + \Gamma_n A_n \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{\delta n} \right) - \Gamma_s A_s \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{\delta s} \right) = -S_{V_i} V_i, \tag{2.31}$$

com A_w, A_e, A_n e A_s significando, no caso 2D, os comprimentos das arestas w, e, n e s ,

respectivamente. De forma compacta, a Equação (2.31) pode ser escrita como:

$$a_{P_i}\phi_{P_i} + \sum_{n=1}^{N_b} a_n\phi_n = -S_{V_i}V_i, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (2.32)$$

onde N é o número de volumes internos P_i da malha, N_b é o número de volumes que compartilham arestas com o i -ésimo volume P_i interno (neste caso, $N_b = 4$) e a_{P_i} e a_n representam os coeficientes que multiplicam, respectivamente. Os termos ϕ_{P_i} e ϕ_n são obtidos manipulando-se a Equação (2.31). A Equação (2.32) representa o sistema linear construído pela discretização da EDP governante utilizando as técnicas do MVF, pois o termo N_b indica o total de volumes internos pertencentes à malha, e é a forma canônica de apresentação de uma discretização pelo MVF [71]. Maiores detalhes para a formulação do MVF em malhas estruturadas podem ser obtidos em Patankar [71], Fortuna [34], LeVeque [50], Ferziger e Peric [31], Maliska [58], Versteeg e Malalasekeera [87], Blazek [13], Mazumder [60] e Moukalled, Mangani e Darwish [61].

2.2.4 Método dos volumes finitos em malhas não estruturadas

Em discretizações obtidas utilizando-se malhas não estruturadas triangulares, a reconstrução do fluxo normal às faces das células não é, em geral, direta. Isto se deve à natureza de tais malhas, que permitem que os volumes possuam formatos diversos, fazendo com que o vetor que liga os centróides de dois volumes vizinhos não seja necessariamente perpendicular à face que estes volumes compartilham. Se as células da malha não forem ortogonais, é possível também que a linha que conecta os dois centróides não intercepte o ponto médio da face, tal como observado em malhas ortogonais. Nestes casos, uma discretização acurada do gradiente normal à face é crucial para a obtenção de resultados consistentes, em especial se a malha possuir volumes altamente distorcidos, pois a precisão dos resultados é inversamente proporcional ao grau de distorção dos volumes [60, 61, 88]. A Figura 2.12 apresenta quatro possíveis casos de fluxos entre dois volumes quaisquer; o primeiro é o caso ideal em que o segmento \overline{PN} é normal à face e seu ponto médio intercepta o ponto médio da face, denotado por f ; o segundo é quando o segmento \overline{PN} é ortogonal à face, mas não intercepta o ponto médio desta; o terceiro ocorre se o ponto médio do segmento \overline{PN} intercepta o ponto f , mas não é ortogonal à face; o quarto e último é o caso em que o segmento \overline{PN} não é ortogonal à face e nem intercepta o ponto f .

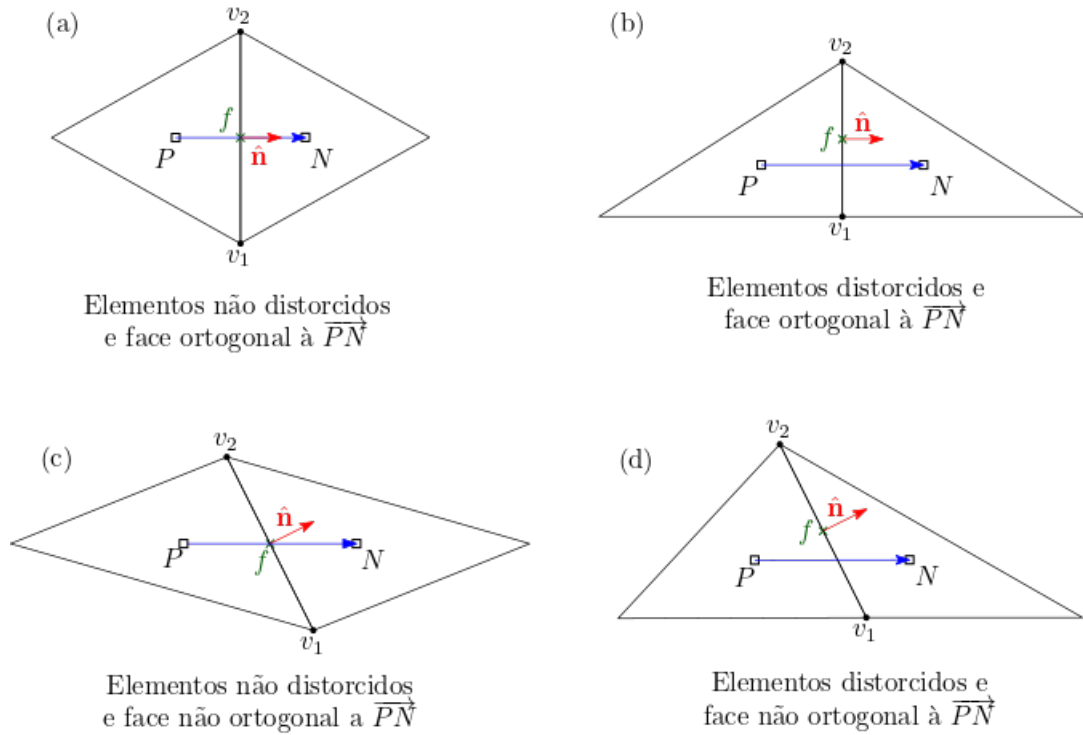


Figura 2.12: Exemplos das possibilidades de distorções em volumes triangulares. P denota o centróide do volume principal, N denota o centróide de seu vizinho, f denota o ponto médio da face compartilhada entre eles e \hat{n} denota o vetor normal à f . Volumes distorcidos são definidos como aqueles onde o ponto médio do segmento \overline{PN} não intercepta o ponto f . Fonte: autoria própria.

Se tratando de formulações *cell-centered*, Blazek [13] aponta que existem duas maneiras básicas de aproximar $(\nabla\phi)_f$, uma baseada em construir os gradientes utilizando propriedades geométricas dos volumes e outra constituída por criar ponderações entre gradientes previamente conhecidos. Dentre as possíveis formas de ponderações, Yan *et al.* [89] afirmam que a maneira mais fácil de reconstruir $(\nabla\phi)_f$ é tomando a média aritmética simples dos gradientes nos CGs das células que compartilham a face em questão. No entanto, esta estratégia torna-se imprecisa se as malhas utilizadas na discretização forem não uniformes, não ortogonais e distorcidas. Os autores também apresentam abordagens mais aprimoradas utilizando médias ponderadas, com os fatores de ponderação sendo o volume de cada célula envolvida (ênfatizando a maior delas) ou a distância entre o CG de cada célula até o ponto médio da face (privilegiando a mais próxima). Estas expressões são mostradas pelas Equações (2.33).

$$\text{Média simples: } (\nabla\phi)_f = \frac{(\nabla\phi)_P + (\nabla\phi)_N}{2} \quad (2.33a)$$

$$\text{Média ponderada por volume: } (\nabla\phi)_f = \frac{V_P}{V_P + V_N} (\nabla\phi)_P + \frac{V_N}{V_P + V_N} (\nabla\phi)_N \quad (2.33b)$$

$$\text{Média ponderada por distância: } (\nabla\phi)_f = \frac{d_{Pf}}{d_{Pf} + d_{Nf}} (\nabla\phi)_P + \frac{d_{Nf}}{d_{Pf} + d_{Nf}} (\nabla\phi)_N. \quad (2.33c)$$

Muzaferija [62] já utilizava a estratégia de ponderações entre os gradientes avaliados nos centros de cada volume de controle para obter o gradiente na face em sua tese de doutorado, defendida em 1994. No mesmo ano, Palmer [70] também publicou um trabalho onde o gradiente no centro da face compartilhada entre dois volumes também era obtido por uma média ponderada entre os gradientes avaliados nos centróides destes volumes, sendo a distância entre o centro da face e os CGs o fator de ponderação.

Jalali *et al.* [44] frizam que, nos dias atuais, a bibliografia já acumula dados suficientes para afirmar que os métodos baseados em médias de gradientes conhecidos são suscetíveis a erros de alta frequência. O fator chave envolvido na discretização de fluxos difusivos em malhas distorcidas é a busca por um esquema de discretização consistente para os gradientes normais às faces das células [73, 89, 46]. Cardiff e Demirdžić [16] complementam que uma das principais fontes de diferenciação das variantes do MVF é dada pelo modo com o qual o gradiente nas faces $(\nabla\phi)_f$ é discretizado. A seguir serão apresentadas algumas das mais consolidadas formas de cálculo do termo $(\nabla\phi)_f \cdot \hat{n}$ disponíveis na literatura.

Os primeiros métodos de tratamento do termo $(\nabla\phi)_f \cdot \hat{n}$ em discretizações não ortogonais apareceram em trabalhos voltados às malhas do tipo *body-fitted*, sendo o de Demirdžić (1983) [24] um dos mais relevantes. Em 1990, Demirdžić e Perić [28] utilizaram a equação proposta por [24] para a discretização do termo difusivo da equação geral do transporte discretizada em volumes de controle quadrilaterais, representados pelo diagrama exposto na Figura 2.13. Tal equação é dada abaixo:

$$(\nabla\phi)_e \approx \frac{\Gamma_e}{\mathbf{S}_e \cdot \overrightarrow{PE}} [(\phi_E - \phi_P)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_e) + (\phi_n - \phi_s)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_n)]_e, \quad (2.34)$$

em que \overrightarrow{PE} é o vetor que vai do ponto P ao ponto E , e os vetores \mathbf{S}_e e \mathbf{S}_n são os vetores superfície das faces e e n , respectivamente. Em um trabalho posterior, Demirdžić, Lilek e Perić (1993) [26] apresentaram uma outra maneira de tratar o termo difusivo da equação geral do transporte em malhas *body-fitted* não ortogonais. O volume de controle geral utilizado pelos autores para a construção das equações pode ser observado na Figura 2.14. Utilizando diferenças centrais para lidar com os operadores diferenciais, os pesquisadores utilizaram a mesma equação para o termo $(\nabla\phi)_e$, apenas modificada para o modelo da malha:

$$(\nabla\phi)_e \approx \frac{\Gamma_e}{\mathbf{S}_{1e} \cdot \overrightarrow{PE}} [(\phi_E - \phi_P)(\mathbf{S}_{1e} \cdot \mathbf{S}_{1e}) + (\phi_n - \phi_s)_f(\mathbf{S}_{1e} \cdot \mathbf{S}_{2e})], \quad (2.35)$$

em que \mathbf{S}_{1e} é o vetor superfície da face e , com direção normal à esta face e sentido para fora e \mathbf{S}_{2e} é o vetor ortogonal a \overrightarrow{PE} com sentido ξ_2 positivo, representando a área na superfície $\xi_2 = 0$ limitada por P e E . Assim como as equações anteriores, a proposta de Demirdžić, Lilek e Perić considera a ação de um termo de difusão direta ortogonal à face e e a ação de um termo de

difusão cruzada, cuja influência é calculada diretamente pelo produto interno $\mathbf{S}_{1e} \cdot \mathbf{S}_{2e}$, sendo mais significativo quanto maior for o ângulo formado entre os dois vetores de superfície.

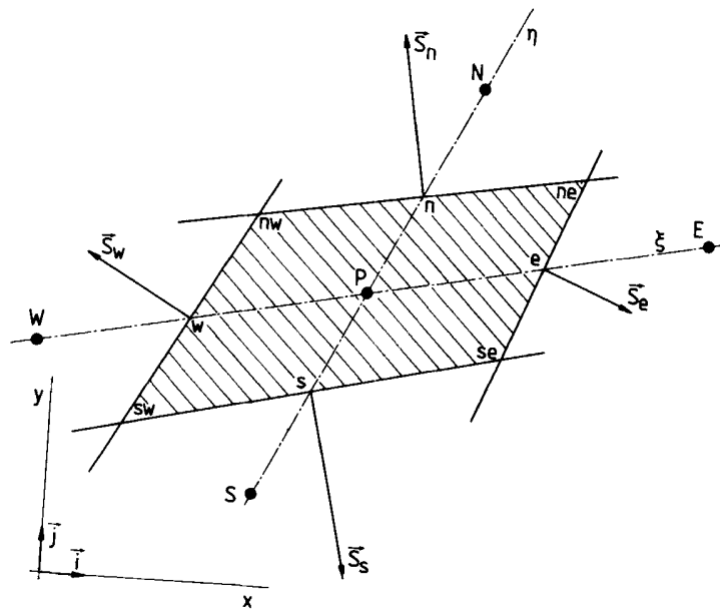


Figura 2.13: Esquema de volume de controle utilizado para a discretização do termo difusivo apresentado por Demirdžić e Perić (1990). Fonte: [28].

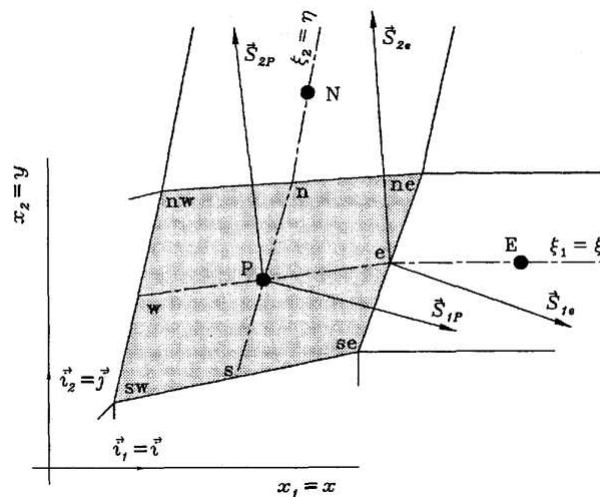


Figura 2.14: Esquema de volume de controle utilizado para a discretização do termo difusivo apresentado por Demirdžić, Lilek e Perić (1993). Fonte: [26].

Muzaferija (1994) [62] aproximou o fluxo difusivo entre dois volumes de controle tridimensionais a partir da diferença entre o valor obtido via aproximação de diferenças centrais entre os gradientes nos CGs de cada volume e o valor obtido ao se interpolar os gradientes dos centróides, resultando na seguinte expressão:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} \approx \Gamma \frac{\mathbf{d}_f \cdot \mathbf{A}_f}{\mathbf{d}_f \cdot \mathbf{d}_f} (\phi_N - \phi_P) + \Gamma \left[(\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{A}_f - \frac{\mathbf{d}_f \cdot \mathbf{A}_f}{\mathbf{d}_f \cdot \mathbf{d}_f} (\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{d}_f \right] \quad (2.36)$$

com $\mathbf{d}_f = \overrightarrow{PN}$ e $\mathbf{A}_f = A_f \hat{\mathbf{n}}$ de acordo com o esquema ilustrado pela Figura 2.15. Na Equação (2.36), os termos fora dos colchetes são tratados implicitamente, enquanto que os termos restantes são tratados explicitamente, e o vetor $(\nabla\phi)_f$ fora obtido por uma interpolação entre os gradientes nos centróides dos volumes de controle adjacentes. Esta equação também foi utilizada em Muzaferija e Gosman (1997) [63], além de ter sido catalogada por Jasak [45] em sua tese, onde receberia o nome de equação da correção mínima.

Demirdžić e Muzaferija (1995) [27] modificaram ligeiramente a equação utilizada por Muzaferija [62] para obter:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = (\nabla\phi)_f + \left[\frac{\phi_{N_j} - \phi_{P_i}}{|\overrightarrow{P_i N_j}|} \cdot \hat{\mathbf{n}} - \frac{1}{2} \frac{(\nabla\phi_{P_i}) + (\nabla\phi_{N_j})}{|\overrightarrow{P_i N_j}|} \cdot \hat{\mathbf{n}} \right]. \quad (2.37)$$

Os autores argumentam que o segundo termo dentro dos colchetes aprimora o comportamento da discretização em relação às oscilações numéricas.

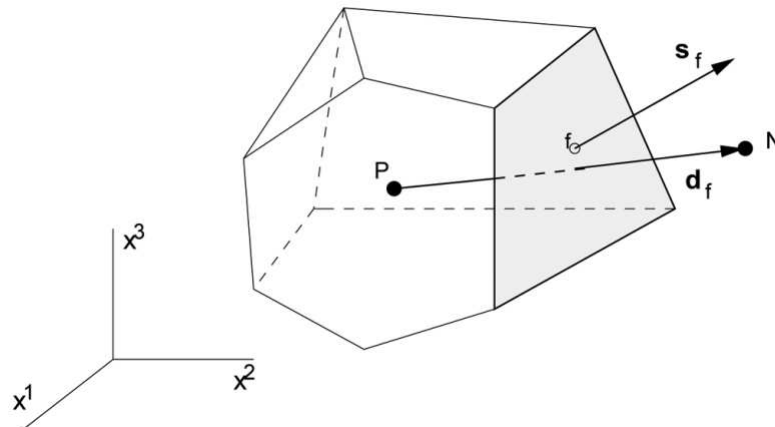


Figura 2.15: Esquema utilizado por Muzaferija e Gosman [63] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: [25].

Em 1995, Davidson e Stolcis [23] publicaram um trabalho no qual investigavam um procedimento para resolver problemas de fluxos turbulentos compressíveis em malhas não estruturadas com volumes de diversas formas. Os autores discretizaram o termo difusivo da equação do transporte por uma estratégia baseada no teorema da divergência de Gauss. A Figura 2.16, disposta a seguir, ilustra o diagrama empregado para a construção da equação.

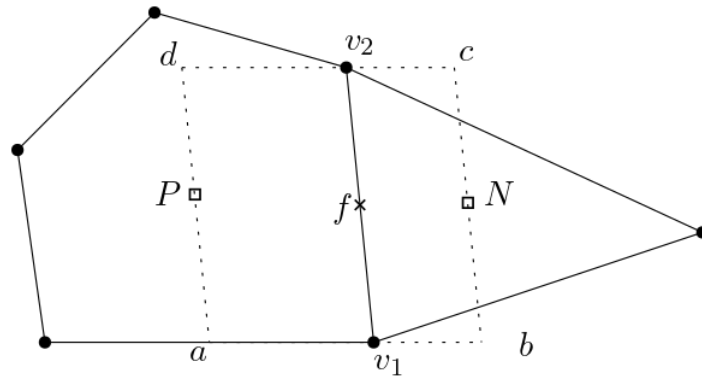


Figura 2.16: Dois volumes de controle que compartilham uma face. O fluxo difusivo por esta face é avaliado no ponto médio desta, f , indicado por um círculo aberto. Os círculos preenchidos indicam os nós da malha e os pontos denotados por quadrados vazados indicam os centróides dos dois volumes em questão. O quadrilátero formado pelos pontos a, b, c e d é utilizado para o cálculo de $(\nabla\phi)_f \cdot \hat{n}$. Fonte: adaptado de [23].

Um quadrilátero contendo os vértices de uma face qualquer e os centróides dos dois volumes que a compartilham é construído de forma que $\hat{n}_{A_P} = \hat{n}_{A_f} = \hat{n}_{A_N}$ e $\hat{n}_{A_{v_1}} = \hat{n}_{A_{v_2}}$, com os centros das áreas \hat{n}_{A_P} e \hat{n}_{A_N} os pontos P e N , respectivamente. As coordenadas exatas dos pontos a, b, c , e d não serão necessárias, como poderá ser notado adiante.

Uma vez que, pela lei de difusão de Fick, o fluxo difusivo que passa pela face f é dado por $D_f = (\Gamma\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{A}_f$, pode-se escrever:

$$D_f = (\Gamma\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{A}_f = \Gamma \left(\mathbf{A}_x \frac{\partial\phi}{\partial x} + \mathbf{A}_y \frac{\partial\phi}{\partial y} \right)_f = \Gamma |\mathbf{A}| \left(n_x \frac{\partial\phi}{\partial x} + n_y \frac{\partial\phi}{\partial y} \right)_f, \quad (2.38)$$

sendo \mathbf{A}_f o vetor área da face f , \mathbf{A}_x e \mathbf{A}_y suas componentes cartesianas e n_x e n_y as componentes do vetor unitário da face nas direções de \mathbf{A}_x e \mathbf{A}_y , respectivamente, e calculados como:

$$n_x = \frac{y_{v_2} - y_{v_1}}{d}; \quad (2.39a)$$

$$n_y = \frac{x_{v_2} - x_{v_1}}{d}; \quad (2.39b)$$

$$d = \sqrt{(y_{v_2} - y_{v_1})^2 + (x_{v_2} - x_{v_1})^2}. \quad (2.39c)$$

Da Equação (2.38) percebe-se a necessidade de avaliar os termos $\frac{\partial\phi}{\partial x}|_f$ e $\frac{\partial\phi}{\partial y}|_f$, o que pode ser feito aplicando o teorema da divergência de Gauss sobre o quadrilátero $(a - b - c - d)$ que circunda o ponto médio da face, assim:

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} = \frac{1}{|\Lambda|} \oint_{\Lambda} \phi n_x dA \quad \text{e} \quad \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{1}{|\Lambda|} \oint_{\Lambda} \phi n_y dA, \quad (2.40)$$

de modo que Λ denota o quadrilátero $(a - b - c - d)$ e $|\Lambda|$ é a área de Λ . Com estas igualdades, obtém-se:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}n_x\right)_f &= \frac{n_x}{|\Lambda|}[(\phi n_x A)_N + (\phi n_x A)_{v2} - (\phi n_x A)_P - (\phi n_x A)_{v1}] \\ \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}n_y\right)_f &= \frac{n_y}{|\Lambda|}[(\phi n_y A)_N + (\phi n_y A)_{v2} - (\phi n_y A)_P - (\phi n_y A)_{v1}]. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Somando os dois termos da Equação (2.41) e sabendo que $(n_x^2 + n_y^2) = 1$, o resultado é dado por:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}n_x\right)_f + \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}n_y\right)_f &= \frac{1}{|\Lambda|} \underbrace{\{A_f(\phi_N - \phi_P)\}}_{\text{Difusão ortogonal}} + \\ &\quad + \underbrace{A_{v2}[(n_x)_f(n_x)_{v2} + (n_y)_f(n_y)_{v2}]}_{\text{Difusão não ortogonal}}(\phi_{v2} - \phi_{v1}). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Nota-se que em malhas ortogonais, o termo de Difusão não ortogonal desaparece, uma vez que $\overrightarrow{PN} \cdot \overrightarrow{v1v2} = 0$. Finalmente, a equação para o termo difusivo pode ser reescrita em sua forma final, mostrada na Equação (2.38):

$$\begin{aligned} (\Gamma\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{A}_f &= \frac{\Gamma|\mathbf{A}|}{|\Lambda|} \{A_f(\phi_N - \phi_P) + \\ &\quad + A_{v2}[(n_x)_f(n_x)_{v2} + (n_y)_f(n_y)_{v2}](\phi_{v2} - \phi_{v1})\} \end{aligned} \quad (2.43)$$

de forma que os termos mostrados na primeira linha são tratados de forma implícita, enquanto que os da linha abaixo são tratados explicitamente.

Em (1996), Jasak [45] apresenta em sua tese interpretações geométricas de três maneiras de discretizar o termo difusivo que consideram um termo de correção pela não ortogonalidade das malhas. Moukalled, Mangani e Darwish (2016) [61] mostram em seu trabalho, com detalhes, os cálculos desenvolvidos por Jasak para modelar o termo $(\nabla\phi) \cdot \hat{n}$ para volumes não ortogonais. Considere o diagrama expresso na Figura 2.17. Para se avaliar o fluxo tangencial à face, o autor propõe decompor o fluxo normal em duas componentes e ressaltam que esta abordagem considera que o ponto médio do segmento \overline{PN} e o ponto f , que denota o ponto médio da face, se interceptam. Seja \mathbf{S}_f o vetor área da face compartilhada, podendo ser escrito como $\mathbf{S}_f = S_f \hat{n}$, onde S_f é a área da face e \hat{n} seu vetor normal unitário. Seja o vetor \hat{e} um vetor unitário que possui a direção do vetor que liga os centróides, \overrightarrow{PN} , e seja \hat{t} o vetor unitário colinear à face compartilhada. Deve-se ressaltar que esta abordagem considera que o ponto médio do segmento \overline{PN} e o ponto f que denota o ponto médio da face se interceptam.

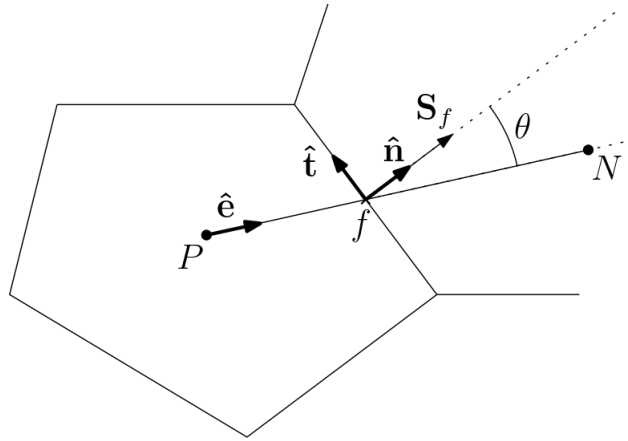


Figura 2.17: Esquema de construção do vetor fluxo normal entre dois volumes em uma malha não ortogonal. Fonte: adaptado de [61].

Considere que o vetor área \mathbf{S}_f seja escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{S}_f = \mathbf{E}_f + \mathbf{T}_f \quad (2.44)$$

de maneira que \mathbf{E}_f e \mathbf{T}_f sejam as componentes dos \mathbf{S}_f nas direções de $\hat{\mathbf{e}}$ e $\hat{\mathbf{t}}$, respectivamente. Desta forma é possível escrever que

$$(\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{S}_f = \underbrace{(\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{E}_f}_{\text{Contribuição dos CGs}} + \underbrace{(\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{T}_f}_{\text{Difusão cruzada}}, \quad (2.45)$$

tornando-se necessário desenvolver maneiras de tratar os termos do lado direito. Uma primeira opção para a parcela que relacionada aos CGs pode ser obtida facilmente ao tomar-se

$$\begin{aligned} (\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{E}_f &= (\nabla\phi)_f \cdot (E_f \hat{\mathbf{e}}_f) \\ &= E_f (\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{e}}_f \\ &= E_f \left. \frac{\partial\phi}{\partial e} \right|_f \\ &= E_f \frac{\phi_N - \phi_P}{d_{PN}}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

com d_{PN} sendo a distância entre os CGs. É evidente a necessidade de se construir um modo de calcular E_f . Algumas alternativas mostradas pelos autores são então apresentadas:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_f &= (\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{S}_f) \hat{\mathbf{e}} \\ &= \underbrace{(S_f \cos \theta)}_{E_f} \hat{\mathbf{e}}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

nomeada por Jasak como correção mínima, esta abordagem mantém o termo não ortogonal o menor possível e é representada pelo diagrama (a) da Figura 2.18. Conforme a não ortogonalidade aumenta, a contribuição do fluxo entre os CGs diminui.

Outra possibilidade é considerar que as contribuições entre os dois fluxos, direto e tangencial, serão as mesmas, levando a

$$\mathbf{E}_f = S_f \hat{\mathbf{e}} \implies E_f = S_f, \quad (2.48)$$

tal como ilustrado pelo diagrama (b) da Figura 2.18, sendo esta abordagem nomeada por Jasak como correção ortogonal.

Por último, Moukalled, Mangani e Darwish [61] apresentam o procedimento utilizado por Jasak [45] para a obtenção da abordagem sobre-relaxada. O autor nota que o protagonismo do termo envolvendo ϕ_N e ϕ_P aumenta com a diminuição da ortogonalidade, resultando em uma maior estabilidade mesmo em malhas altamente distorcidas, sendo esta a melhor das três abordagens estudadas. Matematicamente isso é obtido ao forçar que \mathbf{T}_f seja ortogonal a \mathbf{S}_f , resultando em

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_f &= \left(\frac{S_f}{\cos \theta} \right) \hat{\mathbf{e}} \\ &= \left(\frac{S_f^2}{S_f \cos \theta} \right) \hat{\mathbf{e}} \\ &= \frac{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_f}{\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{S}_f} \hat{\mathbf{e}}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

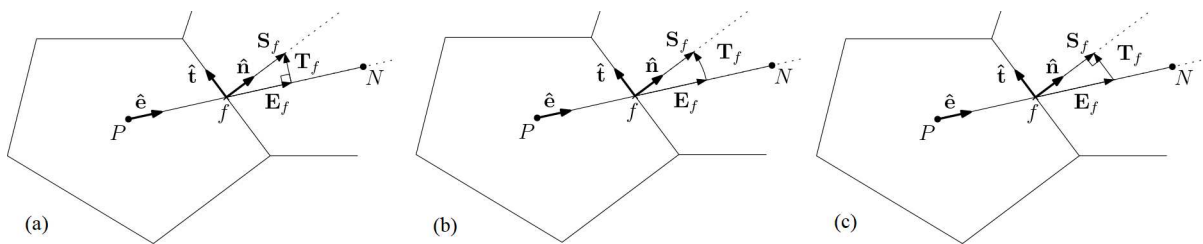


Figura 2.18: Interpretação geométrica dos três modos de avaliação do termo de difusão cruzada. Em (a) tem-se a correção mínima, em (b) tem-se a correção ortogonal e em (c) tem-se a correção sobre-relaxada. Fonte: adaptado de [61].

O termo de difusão cruzada exibido pela Equação (2.45) pode ser aproximado isolando \mathbf{T}_f , resultando em $\mathbf{T}_f = \mathbf{S}_f - \mathbf{E}_f$, que pode ser calculado pelos mesmos métodos utilizados para \mathbf{E}_f , isto é, da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
(\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{T}_f &= (\nabla\phi)_f \cdot (\mathbf{S}_f - \mathbf{E}_f) \\
&= \begin{cases} (\nabla\phi)_f \cdot (\hat{\mathbf{n}} - \cos\theta\hat{\mathbf{e}})S_f & \text{Correção mínima} \\ (\nabla\phi)_f \cdot (\hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{e}})S_f & \text{Correção ortogonal} \\ (\nabla\phi)_f \cdot (\hat{\mathbf{n}} - \frac{1}{\cos\theta}\hat{\mathbf{e}})S_f & \text{Correção sobre-relaxada} \end{cases}, \quad (2.50)
\end{aligned}$$

havendo a necessidade de se encontrar um modo de calcular $(\nabla\phi)_f$ a partir das informações conhecidas, que são os valores de ϕ nos vértices e CGs. O teorema da divergência de Gauss aplicado sobre um campo de escalares estabelece a seguinte igualdade:

$$\int_V \nabla\phi dV = \oint_{\partial V} \phi d\mathbf{S}, \quad (2.51)$$

sendo V um volume fechado, ∂V sua superfície de fronteira e $d\mathbf{S}$ o vetor, apontado para fora, de um diferencial de área de \mathbf{S} .

Aplicando o teorema do valor médio para o lado esquerdo da Equação (2.51) obtém-se:

$$\overline{\nabla\phi} V_P = \int_V \nabla\phi dV. \quad (2.52)$$

Substituindo a Equação (2.52) na Equação (2.51) e aplicando para o cálculo do gradiente para o volume C tem-se:

$$(\overline{\nabla\phi})_P = \frac{1}{V_P} \oint_{\partial V} \phi_f d\mathbf{S}_f. \quad (2.53)$$

Este mesmo procedimento pode ser repetido para se obter o valor de $(\overline{\nabla\phi})_N$.

Falta ainda obter uma aproximação para o termo do lado direito da Equação (2.51), uma alternativa é escolher uma superfície gaussiana poligonal (para o caso 2D) e admitir que a integral sobre cada uma das faces é dada por um valor médio no centro da face multiplicado pela área desta mesma face. Assim:

$$\oint_{\partial V} \phi_f d\mathbf{S}_f \approx \sum_{f=1}^{N_f} \phi_f \mathbf{S}_f \implies (\overline{\nabla\phi})_P \approx \frac{1}{V_P} \sum_{f=1}^{N_f} \phi_f \mathbf{S}_f. \quad (2.54)$$

Admitindo que $(\overline{\nabla\phi})_P \approx (\nabla\phi)_P$, pode-se escrever uma expressão que permite calcular $(\nabla\phi)_f$ por meio de $(\nabla\phi)_P$ e $(\nabla\phi)_N$, dada por:

$$(\nabla\phi)_f = g_P(\nabla\phi)_P + g_N(\nabla\phi)_N, \quad (2.55)$$

de forma que g_P e g_N são constantes de interpolação que permitem escrever as coordenadas de f a partir das coordenadas de P e N , sendo a média ponderada pela distância uma alternativa possível.

As equações apresentadas em Jasak [45] são conhecidas na literatura como correções diferidas, uma vez que o termo de difusão cruzada é avaliado explicitamente, isto é, com valores de ϕ atrasados. Diversos trabalhos utilizaram as aproximações descritas em [45], tais como: Kim (2001) [48], Perez-Segarra (2004) *et al.* [74], Perez-Segarra (2006) *et al.* [73], Tsui e Pan (2006) [86], Traoré *et al.* (2009) [85], Cary, Dorgan e Mani (2009) [17], Jalali, Sharbatdar e Ollivier-Gooch (2014) [44] entre outros.

Mathur e Murthy (1997) [59] derivaram uma equação a partir de malhas generalizadas, tal como ilustrado pela Figura 2.19, e chegaram à uma equação semelhante à de correção diferida sobrerelaxada de [45], com a particularidade de considerar $(\nabla\phi)_f = \frac{1}{2}(\nabla\phi)_P + (\nabla\phi)_N$.

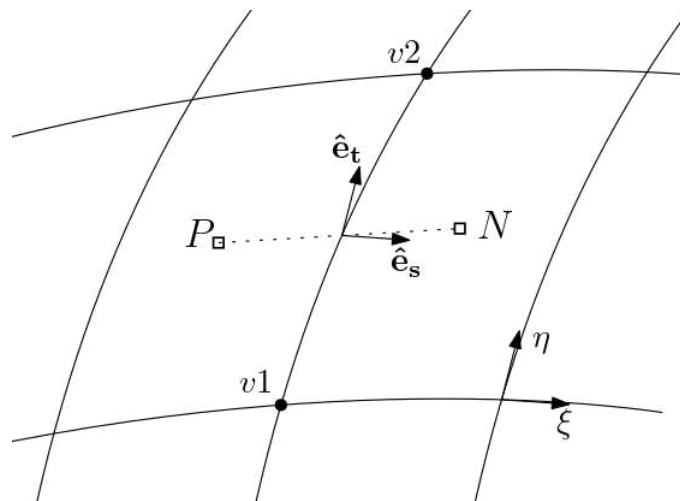


Figura 2.19: Esquema proposto por Mathur e Murthy [59] para a discretização do fluxo difusivo entre dois volumes em malhas curvilíneas. Fonte: adaptado de [59].

Coudière, Vila e Villedieu (1999) [20] utilizaram uma abordagem semelhante a de [22], onde o fluxo difusivo para uma face é calculado a partir do teorema da divergência de Gauss. Os autores adaptaram às malhas triangulares o método introduzido por Coirier (1994) [19] em sua tese de doutorado, onde a malha utilizada era cartesiana e adaptativa. Coirier ainda propôs o termo "reconstrução diamante", em alusão ao formato produzido pela região de integração, ilustrada pela Figura 2.20.

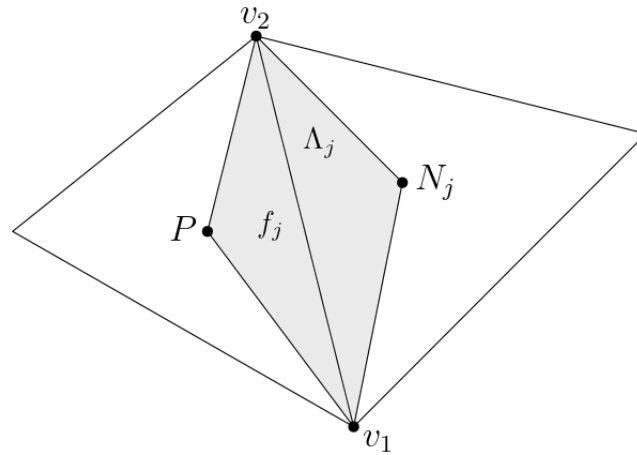


Figura 2.20: Ilustração do diagrama utilizado por Coudière, Vila e Villedieu (1999) [20] para a construção do fluxo difusivo entre dois triângulos vizinhos. Fonte: adaptado de [20].

Considerando a equação geral de uma EDP Elíptica dada pela Equação (2.20) e aplicando o teorema da divergência de Gauss no lado esquerdo da equação, sobre a região denotada por Λ_j , tem-se:

$$\int_{V_i} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV = \oint_{\partial V_i} (\Gamma \nabla \phi \cdot \hat{\mathbf{n}}) dS. \quad (2.56)$$

Como todos os volumes da malha são polígonos, o lado direito da Equação (2.56) pode ser substituído por uma soma das integrais sobre cada face f_j para cada volume de controle V_i , resultando em

$$\oint_{\partial V_i} (\Gamma \nabla \phi \cdot \hat{\mathbf{n}}) dS = \sum_j^{N_f} \oint_{f_j} (\Gamma \nabla \phi \cdot \hat{\mathbf{n}}_j) d\sigma, \quad (2.57)$$

onde N_f é o número de faces que o i -ésimo volume possui e o diferencial $d\sigma$ identifica uma integral de caminho (unidimensional). A integral sobre a face do lado direito pode ter seu integrando separado em dois termos, de forma que:

$$\sum_j^{N_f} \oint_{f_j} (\Gamma \nabla \phi \cdot \hat{\mathbf{n}}_j) d\sigma = \sum_j^{N_f} \underbrace{\int_{f_j} \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} n_{jx} + \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} n_{jy} \right] d\sigma}_{(I)}. \quad (2.58)$$

O termo (I) destacado na Equação (2.58) deve ser calculado para cada face e pode ser avaliado como duas integrais separadas. Os cálculos desenvolvidos para ambas são análogos, logo, apenas uma delas será detalhada. Considerando a parte relacionada à variável x , admitindo Γ e $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ constantes, tem-se

$$\int_{f_j} \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} n_{jx} d\sigma = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{f_j} n_{jx} d\sigma = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{f_j} \Delta x_j. \quad (2.59)$$

de modo que $\Delta x_j = x_{v_2} - x_{v_1}$. Supondo que $\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{f_j}$ seja dado por um valor médio dentro de Λ_j e utilizando o teorema do valor médio, tal como feito na Equação (2.52), pode-se dizer que:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{f_j} \approx \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x}} = \frac{1}{|\Lambda_j|} \int_{\Lambda_j} \frac{\partial \phi}{\partial x} dA, \quad (2.60)$$

com $|\Lambda_j|$ sendo a área de Λ_j . Utilizando o teorema da divergência, a integral dada na Equação (2.60) pode ser substituída por uma integral de linha, de tal forma que

$$\int_{\Lambda_j} \frac{\partial \phi}{\partial x} dA = \oint_{\partial \Lambda_j} \phi_x d\mathbf{S} = \oint_{\partial \Lambda_j} \phi n_x d\sigma. \quad (2.61)$$

Uma vez que $\partial \Lambda_j$ é um polígono de 4 lados, seja ε tal que $\varepsilon \in \{1, 2, 3, 4\}$ a variável que denote tais lados. Sejam v_1^* e v_2^* os vértices que originam o lado ε . Admitindo que ϕ em cada aresta ε seja constante e dada por uma média dos valores de cada vértice, então o valor do fluxo na direção x é dado por:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{f_j} = \frac{1}{|\Lambda_j|} \sum_{\varepsilon} \frac{\phi_{v_1^*} + \phi_{v_2^*}}{2} \Delta x_{\varepsilon}. \quad (2.62)$$

com $\Delta x_{\varepsilon} = x_{v_2^*} - x_{v_1^*}$.

Empregando o mesmo processo para avaliar $\left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_{f_j}$, pode-se escrever a seguinte expressão para o fluxo difusivo que transpõe a face f_j :

$$\Gamma(\nabla \phi) \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\Gamma \Delta x_j}{|\Lambda_j|} \left[\sum_{\varepsilon} \frac{\phi_{v_1^*} + \phi_{v_2^*}}{2} \Delta x_{\varepsilon} \right] + \left[\frac{\Gamma \Delta y_j}{|\Lambda_j|} \sum_{\varepsilon} \frac{\phi_{v_1^*} + \phi_{v_2^*}}{2} \Delta y_{\varepsilon} \right]. \quad (2.63)$$

Benkhaldoun *et al.* (2007) [11], que também utilizaram as equações de Coudière, Vila e Villedieu [20], citam que as vantagens desta metodologia são várias, dentre as principais destacam-se: a ordem de convergência (segunda ordem), a possibilidade de ser aplicada para qualquer tipo de malha independentemente da forma dos volumes, inclusive em malhas híbridas, e a ausência de restrições severas para os ângulos internos dos volumes. A metodologia de Coudière, Vila e Villedieu [20] também é encontrada no trabalho de Elmahi *et al.* (2007) [30], que frizam que o método de Coudière, Vila e Villedieu [20] também é funcional para esquemas de malhas adaptativas gerais, tal como visto em Asmouh *et al.* (2020) [7]. Ademais, Couediere, Vila e Villedieu [20] provam a convergência deste método, bastando que as malhas utilizadas sejam regulares.

Kim e Choi (2000) [47] também apresentam uma maneira de avaliar $(\nabla \phi)_f$, os autores utilizam os valores de ϕ nos vértices que definem a face em estudo para construir a parcela de correção devido à não ortogonalidade. Considerando o diagrama mostrado pela Figura 2.21, o gradiente de ϕ no ponto de interseção do segmento \overline{PN} com a face f , denotado

por f' , pode ser escrito como:

$$(\nabla\phi)_f = \frac{\partial\phi}{\partial\xi}\mathbf{e}_1 + \frac{\partial\phi}{\partial\eta}\mathbf{e}_2 \quad (2.64)$$

sendo ξ e η as direções dos vetores \overrightarrow{PN} e $\overrightarrow{v_1v_2}$, respectivamente. A componente normal do gradiente $\nabla\phi$ avaliado no ponto P_f pode ser escrita como:

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial n}\right|_{P_f} = \nabla\phi \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta_1 + \delta_2} - \frac{\phi_{v_2} - \phi_{v_1}}{\Delta\eta} \tan\theta, \quad (2.65)$$

de modo que δ_1 e δ_2 são os módulos das projeções dos segmentos $\overline{Pf'}$ e $\overline{Nf'}$ sobre a direção de $\hat{\mathbf{n}}$, θ é o ângulo formado entre \mathbf{e}_1 e $\hat{\mathbf{n}}$ e $\Delta\eta$ é a distância entre v_1 e v_2 .

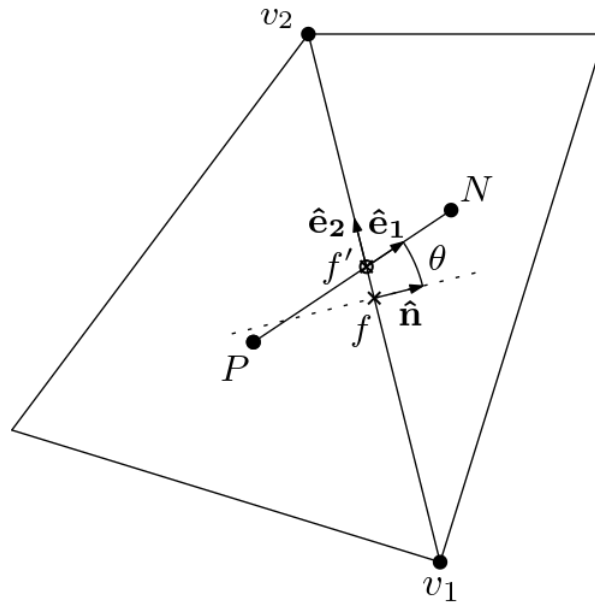


Figura 2.21: Esquema utilizado por Kim e Choi para o cálculo de $\nabla\phi$ na face compartilhada pelos dois volumes, P e N . Fonte: adaptado de [47].

Versteeg e Malalasekera (2007) [87] apresentam em detalhes o desenvolvimento de uma expressão para o fluxo difusivo que coincide na mesma equação utilizada por Kim e Choi [47]. Os autores adotam como premissa que os valores de ϕ nos CGs dos triângulos e nos vértices da face são conhecidos, e que o ponto médio do segmento que liga os pontos P e N intercepta a face ab também em seu ponto médio. Considere os volumes de controle mostrados para Figura 2.22 (a), os pontos P , N , v_1 e v_2 representam, respectivamente, o centróide do volume para o qual se desenvolve a equação, o centróide de seu vizinho e os vértices que ambos compartilham e formam a face onde o fluxo será analisado. O eixo n representa a direção normal à face, enquanto o eixo η representa a direção tangencial à esta, já o eixo ξ é aquele na direção do vetor que liga os pontos P e N ; $\hat{\mathbf{n}}$, $\hat{\mathbf{e}}_\eta$ e $\hat{\mathbf{e}}_\xi$ são os vetores unitários destas direções, respectivamente, e θ é o ângulo formado entre $\hat{\mathbf{n}}$ e $\hat{\mathbf{e}}_\xi$.

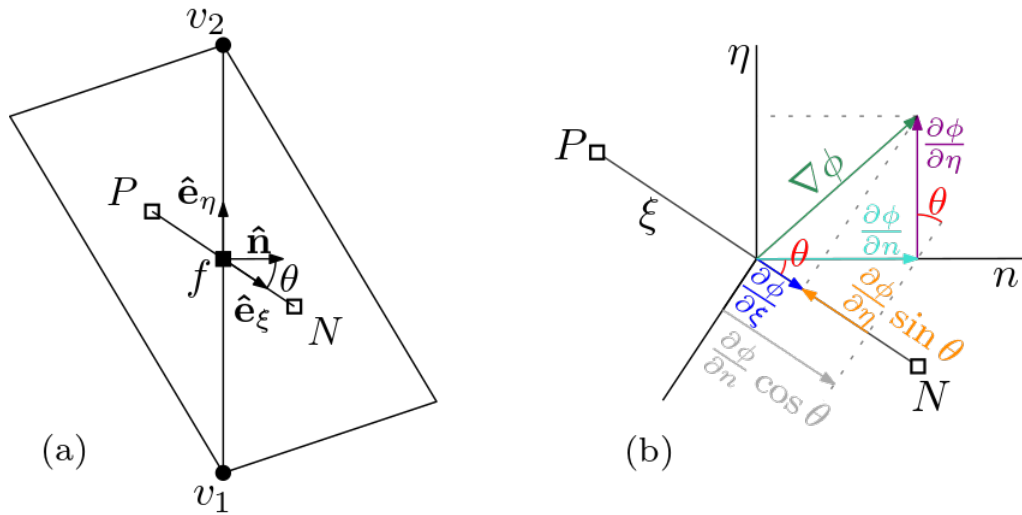


Figura 2.22: Esquemas para a discretização do fluxo normal à face compartilhada por dois volumes triangulares utilizado por Versteeg e Malalasekera [87]. Em (a) mostra-se os volumes vizinhos e os vetores unitários nas direções de interesse. Em (b) ilustra-se as componentes do vetor $\nabla\phi$ decompostas nas direções dos vetores unitários mostrados em (a). Fonte: adaptado de [87].

Por meio de manipulações algébricas as projeções mostradas na Figura 2.22 (b) são obtidas, de forma que pode-se concluir a seguinte expressão:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_\xi} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \Big|_f - \frac{\hat{\mathbf{e}}_\xi \cdot \hat{\mathbf{e}}_\eta}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_\xi} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \Big|_f, \quad (2.66)$$

que está escrita em função dos fluxos na direção \overrightarrow{PN} e $\overrightarrow{v_1v_2}$. A lógica por trás desta equação é permitir escrever o fluxo normal de ϕ através da face v_1v_2 , requerido pela Equação (2.28), dita equação de discretização, utilizando os fluxos entre os pontos onde a grandeza ϕ é conhecida, sendo possível assim substituir os operadores diferenciais por seus análogos algébricos:

$$\frac{\partial\phi}{\partial\xi} \approx \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta\xi} \quad \text{e} \quad \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \approx \frac{\phi_{v_2} - \phi_{v_1}}{\Delta\eta} \quad (2.67)$$

com $\Delta\xi$ sendo a distância entre P e N e $\Delta\eta$ a distância entre v_1 e v_2 .

Substituindo a Equação (2.67) na Equação (2.66) obtém-se:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f = \underbrace{\frac{1}{\cos\theta} \frac{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_\xi} \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta\xi} \right)}_{\text{Gradiente direto}} - \underbrace{\frac{\tan\theta}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_\xi} \left(\frac{\phi_{v_2} - \phi_{v_1}}{\Delta\eta} \right)}_{\text{Difusão cruzada}}, \quad (2.68)$$

que é a equação discretizada para o fluxo normal à uma face de um volume triangular. Note que, para o caso em que os vetores $\hat{\mathbf{n}}$ e \overrightarrow{PN} forem colineares, o termo de difusão cruzada desaparece e todo o fluxo é dado pelo gradiente direto. Perez-Segarra *et al.* [74] também apresentam esta

equação em sua compilação identificando-a como "abordagem de decomposição de superfície", uma vez que a estratégia baseia-se em decompor o vetor superfície em duas componentes, uma tangencial à face e outra na direção do vetor que liga os CGs. Uma desvantagem percebida nesta formulação é que quando $\theta \rightarrow 90^\circ$, a equação retorna valores absurdos.

Jayantha e Turner (2001) [46] compilaram algumas equações para o fluxo difusivo entre volumes de malhas não ortogonais e compararam os resultados numéricos destes esquemas de discretização. Dentre as equações apresentadas estão as equações já citadas anteriormente, com exceção da próxima equação, que projeta o fluxo através do ponto médio da face. Considerando o diagrama ilustrado na Figura 2.23, a equação dada pelos autores para o fluxo é:

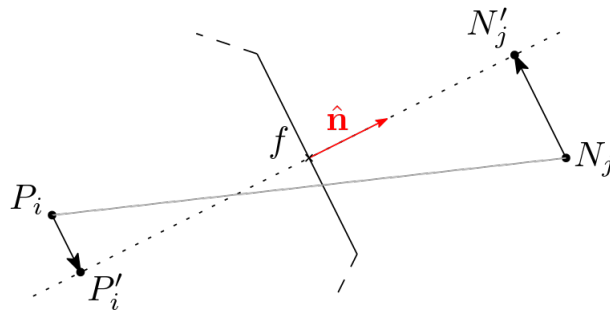


Figura 2.23: Diagrama utilizado por Jayantha e Turner [46] para a discretização do fluxo difusivo. Fonte: autoria própria.

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{|\overrightarrow{P'_j N'_j}|} (\phi_{N'_j} - \phi_{P'_j}), \quad (2.69)$$

de forma que os valores de $\phi_{N'_j}$ e $\phi_{P'_j}$ são obtidos por meio de uma expansão dos valores de ϕ_N e ϕ_P por meio de uma série de Taylor de primeira ordem, isto é:

$$\phi_{N'_j} = \phi_N + (\nabla\phi)_N \cdot \overrightarrow{N_i N'_j} \quad e \quad \phi_{P'_j} = \phi_P + (\nabla\phi)_P \cdot \overrightarrow{P_i P'_j}. \quad (2.70)$$

Substituindo os valores de $\phi_{N'_j}$ e $\phi_{P'_j}$ dados pela Equação (2.70) na Equação (2.69), obtém-se:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{|\overrightarrow{P'_j N'_j}|} (\phi_{N_j} - \phi_{P_i}) + \frac{1}{|\overrightarrow{P'_j N'_j}|} \left[(\nabla\phi)_{N_j} \cdot \overrightarrow{N_i N'_j} - (\nabla\phi)_{P_i} \cdot \overrightarrow{P_i P'_j} \right], \quad (2.71)$$

de tal forma que os termos $(\nabla\phi)_{N_j}$ e $(\nabla\phi)_{P_i}$ devem ser obtidos por procedimentos tais quais os demonstrados na Equação (2.53).

Perez-Segarra *et al.* (2006) [73] também publicaram um trabalho avaliando as particularidades de algumas discretizações para o fluxo difusivo entre volumes de controle de

diversas malhas. Dentre as equações apresentadas nesta coletânea estão as já citadas equações de Jasak [45] e a equação de Jayantha e Turner [46] apresentada anteriormente. Contudo, os autores também apresentam uma modificação para a equação de Jayantha e Turner [46], utilizando pontos intermediários entre os centróides e o ponto médio da face, de maneira a melhorar sua acurácia.

O esquema utilizado por Perez-Segarra *et al.* (2006) [73] é ilustrado pela Figura 2.24. Em (a) tem-se centróides dos volumes que compartilham a face, denotados por P e N , o ponto médio da face compartilhada denotado por f e f^* denotando o ponto médio do segmento que liga os centróides. O vetor \vec{n} é o vetor unitário diretor da face, e os ângulos α e θ são, respectivamente, o ângulo formado entre o vetor \vec{n} e o segmento \overline{Pf} e o ângulo entre segmento \overline{Ff} e o prolongamento do segmento \overline{Pf} . Em (b) tem-se, sobre a reta definida por \hat{n} , os pontos P' e N' , que são as respectivas projeções dos pontos P e N sobre esta reta e os pontos q^- e q^+ , definidos de forma que verifiquem $d_{Pq^-} = d_{fq^-}$ e $d_{Nq^+} = d_{fq^+}$. O vetor \hat{t} é unitário e coincidente com a face compartilhada.

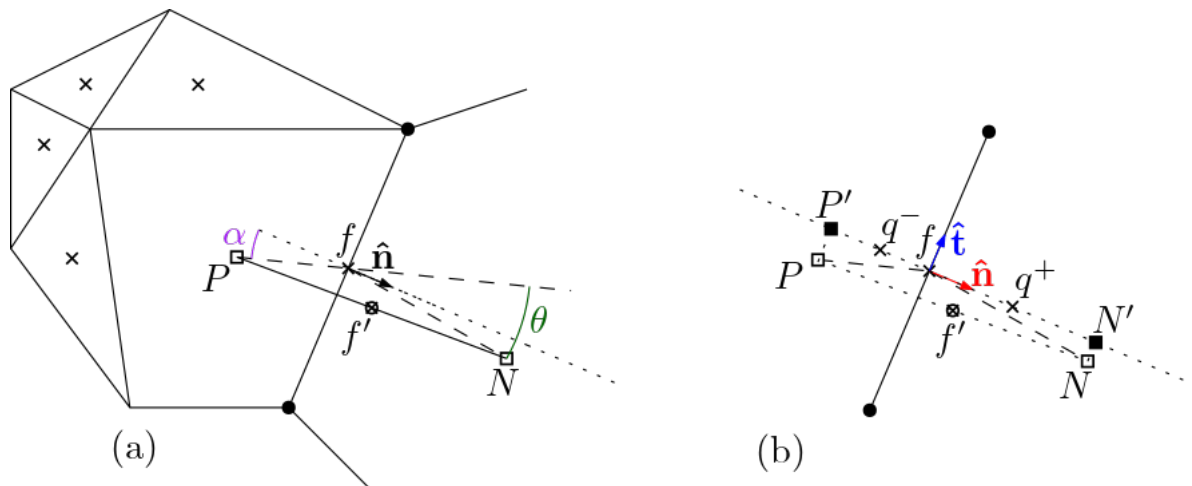


Figura 2.24: Detalhe dos parâmetros utilizados por Perez-Segarra *et al.* [74] para construir uma equação para o fluxo difusivo. Fonte: adaptado de [74].

Partindo do esquema ilustrado pela Figura 2.24, a modificação da Equação (2.71) apresentada por Perez-Segarra *et al.* [73] por meio da utilização de valores de ϕ nos pontos q^- e q^+ inicia-se a partir da obtenção dos valores de ϕ_{q^-} e ϕ_{q^+} , calculados por meio de expansões em série de Taylor, mostradas nas seguintes equações:

$$\phi_{q^-} \approx \phi_P + (\nabla\phi)_P \cdot \overrightarrow{Pq^-} \quad (2.72)$$

$$\phi_{q^-} \approx \phi_f + (\nabla\phi)_f \cdot \overrightarrow{fq^-} = \phi_f - (\nabla\phi)_f \cdot \hat{n} d_{fq^-} \quad (2.73)$$

$$\phi_{q^+} \approx \phi_f + (\nabla\phi)_f \cdot \overrightarrow{fq^+} = \phi_f + (\nabla\phi)_f \cdot \hat{n} d_{fq^+} \quad (2.74)$$

$$\phi_{q^+} \approx \phi_N + (\nabla\phi)_N \cdot \overrightarrow{Nq^+} . \quad (2.75)$$

Igualando entre si as Equações (2.72) e (2.73), e de forma análoga as Equações

ções (2.74) e (2.75), de modo que expressões para ϕ_{q^-} e ϕ_{q^+} possam ser obtidas; isolando o termo ϕ_f de cada uma delas, tal que seja possível firmar uma igualdade entre as duas novas expressões, obtém-se então a equação melhorada para $(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}$:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\phi_N - \phi_P}{(d_{fq^-} + d_{fq^+})} + \frac{(\nabla\phi)_N \cdot \overrightarrow{Nq^+} - (\nabla\phi)_P \cdot \overrightarrow{Pq^-}}{(d_{fq^-} + d_{fq^+})}. \quad (2.76)$$

A metodologia utilizada por [74] para derivar o termo $(\nabla\phi)_f$ nesta equação é conhecida por "avaliação direta do gradiente"²⁰, por ser fundamentada em projetar os pontos e valores das variáveis na linha média normal da face.

Xue e Barton (2013) [88] relembram que para casos onde a linha que conecta os centróides, P e N , de dois volumes vizinhos é normal à face compartilhada e passa por seu ponto médio, a avaliação dos gradientes é direta, bastando uma aproximação de diferenças centrais. Os autores, contudo, consideraram em seu trabalho o caso mais geral de fluxo, onde não necessariamente este cenário ideal ocorre. A inexistência das condições acima citadas origina o surgimento de uma condição reconhecida pela literatura como *skewness*²¹. Nestes casos, o fluxo difusivo deve considerar uma correção para a distorção dos volumes, e Xue e Barton [88] empregam uma decomposição vetorial ao longo de um segmento imaginário, paralelo ao segmento que liga os centróides, que intercepta o centro da face, denotado por f , conforme ilustrado pela Figura 2.25. Tomando a diferença entre os vetores posição dos pontos f' e f , tem-se $\mathbf{r}_{ff'} = \mathbf{r}_{f'} - \mathbf{r}_f$. Utilizando uma interpolação linear de segunda ordem, tal como a utilizada na Equação (2.70), pode-se obter os valores de ϕ para os pontos P' e N' a partir dos valores dos respectivos centróides.

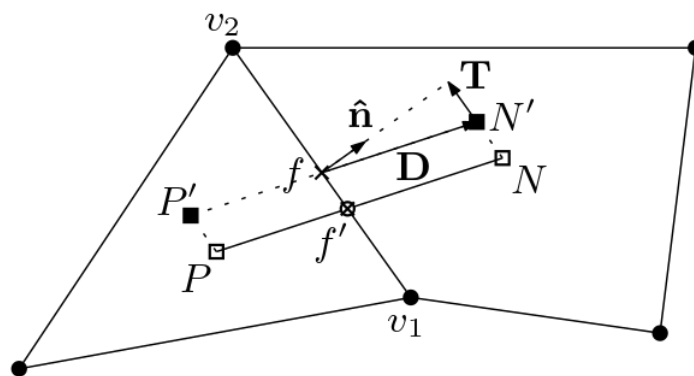


Figura 2.25: Esquema utilizado por Xue e Barton [88] para a reconstrução do fluxo difusivo. Fonte: Xue e Barton [88].

Decompondo o vetor normal $\hat{\mathbf{n}}$ em uma componente na direção do segmento $\overline{P'N'}$ e outra na direção tangencial à face, tem-se:

²⁰Tradução livre do termo em inglês *direct gradient evaluation*.

²¹Em tradução literal do Inglês: assimetria ou distorção.

$$\hat{\mathbf{n}} = \alpha_f \hat{\mathbf{d}} + \gamma_f \hat{\mathbf{t}}, \quad (2.77)$$

de modo que $\hat{\mathbf{d}}$ e $\hat{\mathbf{t}}$ são os vetores unitários nas direções $\overline{P'N'}$ e tangencial à face v_1v_2 , respectivamente, e α_f e γ_f são escalares definidos de modo que $\gamma_f = -\alpha_f(\hat{\mathbf{t}} \cdot \hat{\mathbf{d}})$ e com $\alpha_f = 1$ em malhas ortogonais. Tais restrições para α_f não fornecem uma maneira única de defini-lo, mas neste trabalho os autores utilizam

$$\alpha_f = \frac{1}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{d}}}, \quad (2.78)$$

com o benefício de que esta condição garante que $\alpha_f \geq 1$, aprimorando a dominância diagonal da matriz de coeficientes.

Deste modo, a equação para o termo $(\nabla\phi \cdot \hat{\mathbf{n}})_f$ utilizada por Xue e Barton (2013) [88] é dada por:

$$(\nabla\phi \cdot \hat{\mathbf{n}})_f = \frac{\alpha_f}{PN}(\phi_N - \phi_P) + \frac{\alpha_f}{PN} [(\nabla\phi)_N - (\nabla\phi)_P] \cdot \mathbf{r}_{ff'} + \gamma_f \frac{(\phi_{v_2} - \phi_{v_1})}{A_f} \quad (2.79)$$

sendo \overline{PN} a distância entre os centróides e A_f a área da face em estudo.

Mazumder (2016) [60] apresenta um modo de discretizar o termo difusivo baseado na obtenção dos operadores diferenciais via série de Taylor. Considerando o diagrama exposto pela Figura 2.26 e que o vetor gradiente de ϕ , situado no ponto médio de uma face f e normal à esta, então $(\nabla\phi)_f$ pode ser escrito como

$$(\nabla\phi)_f = \left. \frac{\partial\phi}{\partial x} \right|_f \hat{\mathbf{i}} + \left. \frac{\partial\phi}{\partial y} \right|_f \hat{\mathbf{j}} = [(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{i}}] \hat{\mathbf{i}} + [(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{j}}] \hat{\mathbf{j}}. \quad (2.80)$$

Pode-se decompor o vetor gradiente em quaisquer direções arbitrárias perpendiculares entre si, de forma que ao escolher as direções normal, $\hat{\mathbf{n}}$ (apontando para fora), e tangencial (apontando de v_1 para v_2), $\hat{\mathbf{t}}$, à face f tem-se:

$$(\nabla\phi)_f = [(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}] \hat{\mathbf{n}} + [(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}] \hat{\mathbf{t}}. \quad (2.81)$$

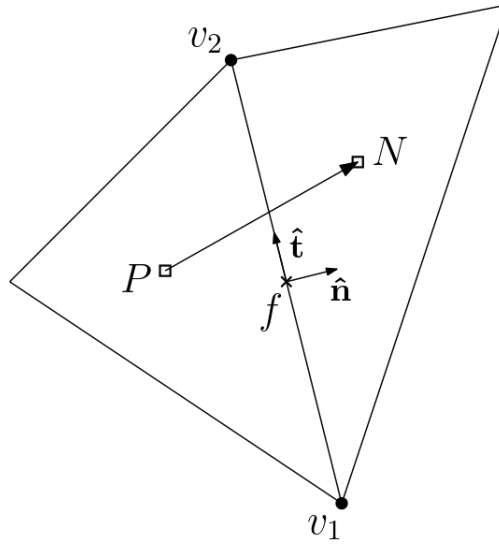


Figura 2.26: Esquema de discretização do fluxo entre dois volumes triangulares. Fonte: adaptado de Mazumder [60].

Calculando o produto interno entre a Equação (2.81) e o vetor \overrightarrow{PN} , obtém-se:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \overrightarrow{PN} = [(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}] \hat{\mathbf{n}} \cdot \overrightarrow{PN} + [(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}] \hat{\mathbf{t}} \cdot \overrightarrow{PN}. \quad (2.82)$$

Isolando o termo $(\nabla\phi) \cdot \hat{\mathbf{n}}$, obtém-se:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}_f = \frac{(\nabla\phi)_f \cdot \overrightarrow{PN}}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \overrightarrow{PN}} - \frac{[(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}] \hat{\mathbf{t}} \cdot \overrightarrow{PN}}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \overrightarrow{PN}}. \quad (2.83)$$

Expandindo ϕ_N e ϕ_P por série de Taylor em torno de f , o resultado é dado por:

$$\begin{aligned} \phi_N = \phi_f + \frac{\partial\phi}{\partial x}\bigg|_f (x_N - x_f) + \frac{\partial\phi}{\partial y}\bigg|_f (y_N - y_f) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\bigg|_f (x_N - x_f)^2 + \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\bigg|_f (y_N - y_f)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\bigg|_f (x_N - x_f)(y_N - y_f) + \dots, \quad (2.84) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \phi_P = \phi_f + \frac{\partial\phi}{\partial x}\bigg|_f (x_P - x_f) + \frac{\partial\phi}{\partial y}\bigg|_f (y_P - y_f) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\bigg|_f (x_P - x_f)^2 + \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\bigg|_f (y_P - y_f)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\bigg|_f (x_P - x_f)(y_P - y_f) + \dots. \quad (2.85) \end{aligned}$$

Subtraindo a Equação (2.86) da Equação (2.84) obtém-se:

$$\phi_N - \phi_P = \underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_f (x_N - x_P) + \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_f (y_N - y_P)}_{(\nabla \phi)_f \cdot \overrightarrow{PN}} + \varepsilon, \quad (2.86)$$

pois $\overrightarrow{PN} = (x_N - x_P)\hat{\mathbf{i}} + (y_N - y_P)\hat{\mathbf{j}}$, e sendo ε o erro de truncamento, dado por:

$$\begin{aligned} \varepsilon = & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_f [(x_N - x_f)^2 - (x_P - x_f)^2] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \Big|_f [(y_N - y_f)^2 - (y_P - y_f)^2] + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \Big|_f [(x_N - x_f)(y_N - y_f) - (x_P - x_f)(y_P - y_f)] + \dots \quad (2.87) \end{aligned}$$

Desprezando ε , pode-se estabelecer a seguinte aproximação:

$$\phi_N - \phi_P \approx (\nabla \phi)_f \cdot \overrightarrow{PN}. \quad (2.88)$$

Reescrevendo a Equação (2.83) utilizando o resultado dado pela Equação (2.88), fica-se com:

$$(\nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\phi_N - \phi_P}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \overrightarrow{PN}} - \frac{[(\nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}] \hat{\mathbf{t}} \cdot \overrightarrow{PN}}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \overrightarrow{PN}}. \quad (2.89)$$

O termo $(\nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}$ pode ser discretizado pelo mesmo procedimento utilizado para $(\nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}}$, resultando em:

$$(\nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{t}} \approx \phi_{v_2} - \phi_{v_1}, \quad (2.90)$$

o que implica que $(\nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{t}}$ é dado por

$$(\nabla \phi)_f \cdot \hat{\mathbf{t}} \approx \frac{\phi_{v_2} - \phi_{v_1}}{|\hat{\mathbf{t}}|}, \quad (2.91)$$

sendo $|\hat{\mathbf{t}}|$ o módulo do vetor que liga os pontos v_1 e v_2 . Resta apenas calcular o escalar $\hat{\mathbf{t}} \cdot \overrightarrow{PN}$, que pode ser feito por meio da expressão

$$\hat{\mathbf{t}} \cdot \overrightarrow{PN} = (x_{v_2} - x_{v_1})(x_N - x_P) + (y_{v_2} - y_{v_1})(y_N - y_P) \quad (2.92)$$

sendo estas as coordenadas x e y dos pontos v_1, v_2, N e P .

Finalmente, tem-se uma expressão para o fluxo normal à face compartilhada entre dois volumes:

$$(\nabla\phi)_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\phi_N - \phi_P}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \overrightarrow{PN}} - \left(\frac{\phi_{v_2} - \phi_{v_1}}{|\hat{\mathbf{t}}|} \right) \frac{(x_{v_2} - x_{v_1})(x_N - x_P) + (y_{v_2} - y_{v_1})(y_N - y_P)}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \overrightarrow{PN}} \quad (2.93)$$

O autor deixa claro que nesta formulação os valores de ϕ nos nós v_1 e v_2 não são conhecidos, podendo ser aproximados por uma média ponderada dos valores de ϕ nos centróides das células que compartilham tais vértices. Ainda, quanto mais distorcidos forem os volumes de controle, maior será a importância do termo de difusão cruzada, aumentando a dependência das informações nos nós, que não são calculadas diretamente, sendo então menos precisas e resultando em uma convergência lenta.

Em um trabalho publicado em 2019, Nishikawa e White [64] propõem o cálculo do gradiente nas faces $(\nabla\phi)_f$ a partir da média aritmética simples dos gradientes nos nós v_1 e v_2 , conforme ilustrado na Figura 2.27, pertencentes à face compartilhada. Utiliza-se técnicas ordinárias, tal como o teorema da divergência de Gauss, para reconstruir o gradiente nos nós, e então calcular o gradiente no ponto médio da face como:

$$(\nabla\phi)_f = \frac{1}{2}[(\nabla\phi)_{v_1} + (\nabla\phi)_{v_2}]. \quad (2.94)$$

Os autores argumentam que este método é interessante por requerer menos esforço computacional quando comparado aos métodos ordinários, baseados nos gradientes dos centróides, uma vez que o número de variáveis envolvidas é claramente menor, necessitando de menos memória para armazenar as informações necessárias para o cálculo. Também é vantajoso porque o ponto médio da face obviamente sempre está na direção dos vértices, livrando a discretização dos problemas relacionados à não ortogonalidade da malha. Além disso, a simplicidade leva à facilidade de paralelização, tornando o consumo de memória, em circunstâncias específicas, até quatro vezes menor do que os métodos tradicionais.

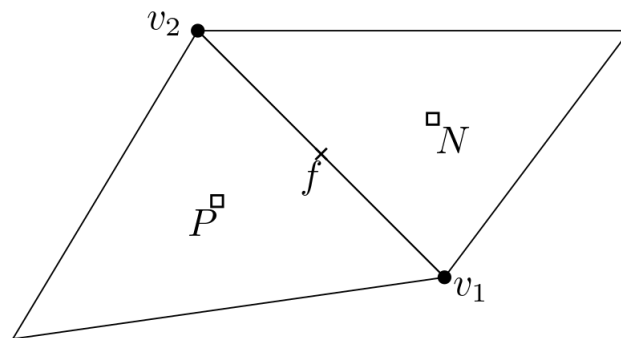


Figura 2.27: Esquema utilizado em Nishikawa [64]. Fonte: autoria própria.

A pesquisa empenhada para formular uma revisão bibliográfica a respeito do tema é extremamente laboriosa, mas importante na mesma proporção. Na busca de tentar reconhecer as possíveis origens das equações deduzidas para discretizar o fluxo difusivo, há o interesse de respeitar os trabalhos destes pesquisadores. Por outro lado, em um cenário onde o

conhecimento científico cresce com velocidade exponencial graças à integração proporcionada pela internet, o uso destas equações foi amplamente reproduzido em diversos artigos, teses e *softwares* livres, nem sempre referenciado de maneira correta.

Como exposto anteriormente, o que diferencia uma abordagem do MVF é o modo como o termo difusivo é tratado. A bibliografia neste assunto é densa, e a pesquisa mostrou que diversas abordagens aparentemente inovadoras eram, na verdade, releituras de equações já conhecidas. Seguramente é vantajoso chegar nestas equações por métodos diferentes, o que reforça o caráter de legitimidade destes objetos, mas há a necessidade de se empenhar uma profunda investigação para estabelecer a originalidade de uma publicação. A falta deste cuidado foi duramente criticada por Demirdžić (2015) [25], em uma publicação onde ele escrutiniza os trabalhos de um grupo de autores, por redigirem, e o corpo editorial de revistas prestigiadas na área de DFC, por permitirem que, artigos clamando novas equações para o fluxo difusivo fossem publicados, quando na verdade as equações apresentadas eram conhecidas na bibliografia há décadas.

Estes equívocos foram abertamente criticados por Demirdžić, que disse em seu trabalho:

"Seja lá o que estes autores desejam ao submeter tais artigos, eles não seriam publicados se os revisores tivessem feito seu trabalho. Aqui falamos de artigos publicados em quatro revistas, o que significa pelo menos oito revisores. O fato é que uma revisão de artigo pode levar desde alguns dias a algumas semanas, mas é justo recusar uma revisão se este empenho não puder ser realizado, não dizer que o trabalho é publicável."(DEMIRDZIC, 2015, p. 9, tradução nossa).²² [25]

Alguns trabalhos revisados para a construção desta revisão poderiam se enquadrar no contexto da fala de [25], inclusive o trabalho de Traoré *et al.* (2009) [85], que é citado por [25].

Em respeito a outros autores que possam ter concebido tal metodologia com antecedência e optando pela prudência, o presente trabalho apresentará e utilizará uma abordagem para o tratamento do fluxo difusivo influenciada pelos trabalhos de Swanson e Radespiel [81], Coudière, Vila e Villedieu [20] e Elmahi *et al.* [30]. A referida abordagem possui diversas semelhanças com as apresentadas nesta revisão, mas os trabalhos analisados não demonstraram os procedimentos matemáticos utilizados para a obtenção da equação discretizada, fator que dificulta o estabelecimento de um critério objetivo de comparação. É importante destacar que o objetivo deste trabalho é apresentar uma solução numérica eficiente para os problemas modelados por EDPEs, ou seja, uma contribuição original para a área, mesmo que o método, que será apresentado no próximo capítulo desta dissertação, não seja considerado, por cautela,

²²"Whatever those authors' motives in submitting such manuscripts, they would not have been published if the reviewers did their job. Here, we are talking about articles in four journals, which means at least eight reviewers. The fact is that a thorough article review can take anything between a couple of days and a couple of weeks, but it is only fair to decline to review a manuscript if that effort cannot be invested, instead of ticking it off as publishable."

integralmente inédito. Acredita-se que a dedução, a compreensão e a influência da qualidade da malha sobre o método possam ser relevantes para outras pesquisas da área. Certamente o entendimento dos princípios matemáticos colabora para que outros pesquisadores utilizem este método de forma mais eficiente e efetiva, além de ter o potencial para ajudar na identificação de suas limitações e sugerir novas modificações. Outrossim, uma profunda assimilação matemática desta técnica também pode corroborar ao desenvolvimento de novas abordagens e aplicações. Portanto, mesmo que a metodologia a ser apresentada não possa ser qualificada em sua totalidade como inédita, a exposição rigorosa dos métodos matemáticos que a suportam é seguramente relevante e valiosa.

3 FORMULAÇÃO DO MVF EM MALHAS NÃO ESTRUTURADAS PARA EDPS ELÍPTICAS

A seguir apresenta-se o processo de discretização da forma geral de uma EDPE, principal objeto de estudo deste trabalho, por meio de uma formulação baseada no MVF para malhas não estruturadas triangulares.

Seja a forma geral de uma EDPE dada pela Equação (2.4), mostrada novamente a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = -S_\phi(x, y). \quad (3.1)$$

Esta equação é definida em um domínio Ω cuja propriedade Γ é isotrópica mas dependente da posição, e com $S_\phi(x, y)$ sendo o termo fonte da variável ϕ . A discretização do domínio Ω produz uma malha \mathcal{M} com N subdomínios P_i , os volumes de controle, de forma que para quaisquer dois subdomínios P_i e $P_j \in \mathcal{M}$, $P_i \cap P_j = \emptyset$ e $\cup_{i=1}^N P_i = \mathcal{M}$.

Seja a malha \mathcal{M} composta por N subdomínios de formato triangular, sendo N_P destes N volumes, com $N_P < N$, volumes ditos internos (definidos como volumes que não possuem nenhuma aresta sobre a fronteira $\partial\Omega$) e N_B sendo os domínios ditos de fronteira (definidos como volumes que possuem ao menos uma aresta sobre a fronteira $\partial\Omega$), satisfazendo $N = N_P + N_B$. A discretização da forma geral de uma EDPE dada pela Equação (3.1) por meio do MVF é obtida integrando-se todos os termos desta equação sobre um volume de controle interno arbitrário P_i com $i \in 1, 2, \dots, N_P$ (isto é, com exceção dos volumes de fronteira, que são tratados de outra maneira, ainda a ser exposta), conforme os passos descritos a seguir. Utilizando a regra do ponto médio na integral sobre o termo fonte tem-se:

$$\int_{P_i} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] dA = -\bar{S}_{\phi_i} |P_i|, \quad (3.2)$$

de modo que \bar{S}_{ϕ_i} é o valor médio de S_ϕ em P_i e $|P_i|$ é a área do volume de controle P_i .

3.1 LINEARIZAÇÃO DO TERMO FONTE \bar{S}_{ϕ_i}

Há a necessidade de se dedicar um cuidado especial com o termo fonte \bar{S}_{ϕ_i} antes de prosseguir com os passos da discretização. A discretização das equações governantes via MVF resulta em um sistema de equações lineares. Contudo, as equações diferenciais governantes podem tornar-se não lineares pela presença de alguns termos, tais como termos convectivos, propriedades físicas dependentes da grandeza em estudo ou termos fontes não lineares, sendo

este último normalmente presente em problemas de reações químicas que geram ou destroem massas, ou problemas de transferência de calor onde haja troca de energia térmica com algum meio [57, 60]. Neste trabalho problemas convectivos e propriedades físicas dependentes de ϕ não fazem parte do escopo, logo, somente não linearidades advindas dos termos fontes serão consideradas.

A notação \bar{S}_{ϕ_i} denota que considera-se que o valor calculado de S_ϕ no centróide de P_i é válido para qualquer ponto $(x, y) \in P_i$, de forma que o efeito total de S_ϕ neste volume de controle é dado por $\bar{S}_{\phi_i}|P_i|$, criando um perfil de variação de \bar{S}_{ϕ_i} entre diferentes células em forma de degraus. Contudo, a função \bar{S}_{ϕ_i} pode depender tanto das variáveis espaciais quanto da própria variável ϕ , fato este que tornaria a EDPE não linear, saindo do escopo do MVF, que é baseado na construção e solução de um sistema de equações lineares¹. Para contornar este inconveniente, pode-se executar um procedimento de linearização do termo fonte, conforme recomendado por Patankar [71] e Mazumder [60], de forma que este termo seja escrito na forma:

$$\bar{S}_{\phi_i} = S_{C_i} + S_{P_i}\phi_{P_i} \quad (3.3)$$

com S_{C_i} representando a parte constante de \bar{S}_{ϕ_i} e S_{P_i} ² sendo a constante de proporcionalidade entre ϕ_{P_i} ³ e S_{ϕ_i} . O método utilizado para linearizar \bar{S}_{ϕ_i} deriva de uma expansão do termo fonte em série de Taylor, truncado após o termo de ordem um⁴. Mazumder [60] apresenta a equação utilizada da seguinte maneira:

$$\bar{S}_{\phi_i}^{(it+1)} = \bar{S}_{\phi_i}^{(it)} + \left. \frac{d\bar{S}_{\phi_i}}{d\phi} \right|^{(it)} (\phi_{P_i}^{(it+1)} - \phi_{P_i}^{(it)}), \quad (3.4)$$

de maneira que (it) denota os termos avaliados na iteração atual.

Patankar [71] recomenda que o coeficiente S_{P_i} seja sempre menor ou igual a zero, de forma a evitar que o termo enfraqueça a dominância diagonal do sistema linear resultante. O autor argumenta que além do efeito prático, esta recomendação possui significado físico, uma vez que a maioria dos processos possuem uma relação de inclinação negativa entre a variável ϕ e o termo fonte S_{P_i} .

Tanto S_{C_i} quanto S_{P_i} podem depender de ϕ e devem ser recalculados a cada

¹Feynman [32] evidencia de forma simples e direta a importância de técnicas baseadas em sistemas lineares na Física e na Matemática: "porque nós podemos resolvê-los!" Desta forma, processos de linearização são essenciais para aproveitar este poderoso ferramental e, portanto, termos não lineares devem ser transformados em termos lineares que forneçam uma descrição coerente da física do problema.

²Patankar [71] sinaliza que este termo não denota S avaliado em P_i .

³Lembrando que ϕ_{P_i} é uma função.

⁴Mazumder [60] friza que o truncamento desta expansão não afeta a solução final, uma vez que na condição de convergência tem-se $\phi_{P_i}^{(it+1)} \approx \phi_{P_i}^{(it)}$. O autor complementa que a convergência também é obtida mesmo ao truncar a expansão no termo de ordem zero, que seria tratado como constante com relação a $\phi_{P_i}^{(it+1)}$, e apareceria como um termo fonte avaliado explicitamente com os valores de $\phi_{P_i}^{(it)}$. Esta condição alteraria apenas o número de iterações até a convergência do método.

nova iteração, conforme mostrado pela Equação (3.4). O valor obtido é então utilizado no sistema linear gerado pela discretização das equações governantes, que é enfim resolvido. Os novos valores de ϕ atualizam os termos linearizados e este processo é repetido até a convergência do método como um todo ser obtida [71, 57].

3.2 OBTENÇÃO DA EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO (EQUAÇÃO CANÔNICA)

Diante da necessidade da utilização do Teorema de Green para a continuidade do presente trabalho, faz-se necessário enunciá-lo previamente. A forma escolhida para a apresentação do teorema é dada conforme a encontrada em Apostol [5].

Teorema 3.1. (Teorema de Green) *Sejam P e Q campos escalares continuamente diferenciáveis em um conjunto aberto $S \in \mathbb{R}^2$. Seja C uma curva suave, definida por partes, e seja R uma região definida pela união de C e seu interior. Assumindo que $R \in S$, então tem-se a identidade*

$$\int_R \left(\frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y} \right) dA = \oint_C P dx + Q dy, \quad (3.5)$$

onde a integral de linha do lado direito é tomada no sentido anti-horário de C .

Demonstração: disponível em Apostol [5].

Seguindo o esquema ilustrado pelo diagrama mostrado na Figura 3.1, P_i denota o volume que está sendo avaliado (concentrando-se em seu centróide) e N_j um de seus j -ésimos vizinhos (também concentrando-se em seu centróide). Os vértices são denotados por v_{ijk} , referindo-se ao k -ésimo vértice da face ij , tendo esta o seu ponto médio denotado por f_{ij} . A região delimitada pelos trechos ε_{ij1} , ε_{ij2} , ε_{ij3} e ε_{ij4} é denotada por Λ_{ij} , de modo que a união dos segmentos ε_{ijk} forma seu contorno, representado por $\partial\Lambda_{ij}$. Os pontos médios dos segmentos ε_{ijk} (que ligam os vértices v_{ijk} aos centróides) são representados por setas cuja direção informa a direção considerada para os cálculos. Fazendo $F = \Gamma(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial x}$ e $G = \Gamma(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial y}$, aplicando o teorema de Green na integral do lado esquerdo da igualdade dada pela Equação (3.2), utilizando novamente a regra do ponto médio e escrevendo conforme a convenção de Einstein para somatórios (sobre j), obtém-se:

$$\int_{P_i} \left[\Gamma(x, y) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \Gamma(x, y) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right] dA = \oint_{\partial P_i} (F dy - G dx) = (F|_{f_{ij}} \Delta y_{ij} - G|_{f_{ij}} \Delta x_{ij}) \quad \forall i \in \{1, \dots, N_b\}, \quad (3.6)$$

sendo $\Delta y_{ij} = yv_{ij2} - yv_{ij1}$ e $\Delta x_{ij} = xv_{ij2} - xv_{ij1}$ de maneira que a ordem entre v_{ij1} e v_{ij2} é sempre mantida em relação à direção de $\overrightarrow{P_i N_j}$ e com v_{ij1} sendo sempre o vértice à direita de $\overrightarrow{P_i N_j}$. Os termos $F|_{f_{ij}}$ e $G|_{f_{ij}}$ representam os respectivos valores de F e G avaliados no ponto médio da face f_{ij} conforme o diagrama exibido na Figura 3.1.

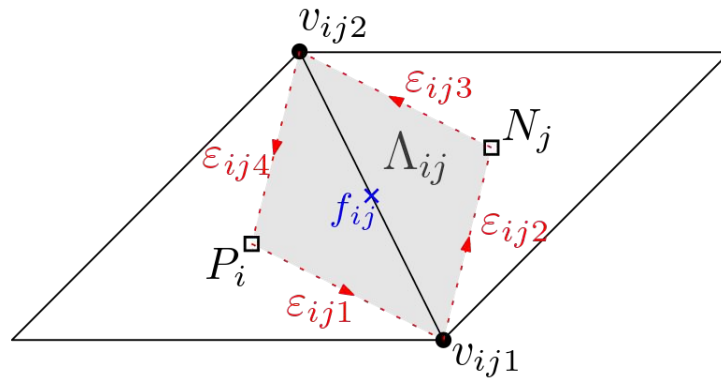


Figura 3.1: Ilustração do esquema utilizado para calcular o fluxo difusivo entre um volume e seu vizinho.

A seguir, deve-se obter uma aproximação para os termos $F|_{f_{ij}}$ e $G|_{f_{ij}}$. Como um primeiro passo, tenta-se representar o coeficiente de difusão na interface entre os volumes $\Gamma|_{f_{ij}}$ de forma fidedigna, que possibilite lidar com possíveis descontinuidades, como por exemplo no caso em que um dos dois elementos possua condutividade nula, resultando na ausência de fluxo difusivo entre eles. Uma média simples dada por $\Gamma|_{f_{ij}} = \frac{1}{2}(\Gamma|_{P_i} + \Gamma|_{N_j})$ é incapaz de representar corretamente este caso, uma vez que deveria-se ter $\Gamma|_{f_{ij}} = 0$, mas a avaliação da média retorna $\Gamma|_{f_{ij}} > 0$ se $\Gamma|_{P_i} > 0$ ou $\Gamma|_{N_j} > 0$. A abordagem utilizada para a construção do coeficiente $\Gamma|_{f_{ij}}$ é inspirada nos procedimentos apresentados por Patankar [71], onde utiliza-se uma média harmônica entre os valores de Γ dos dois volumes. Contudo, de modo a melhorar a acurácia da aproximação, inclui-se a influência dos valores de Γ nos vértices que constituem a face f_{ij} ao definir-se dois coeficientes médios, $\bar{\Gamma}_{P_i}$ e $\bar{\Gamma}_{N_j}$, da seguinte forma:

$$\bar{\Gamma}_{P_i} = \frac{\frac{\Gamma|_{P_i}}{d_{P_i f_{ij}}} + \frac{\Gamma|_{v_{ij1}}}{d_{v_{ij1} f_{ij}}} + \frac{\Gamma|_{v_{ij2}}}{d_{v_{ij2} f_{ij}}}}{\frac{1}{d_{P_i f_{ij}}} + \frac{1}{d_{v_{ij1} f_{ij}}} + \frac{1}{d_{v_{ij2} f_{ij}}}} \quad (3.7)$$

sendo $d_{P_i f_{ij}}$ a distância entre os pontos P_i e f_{ij} (e os demais de forma análoga)

$$\bar{\Gamma}_{N_j} = \frac{\frac{\Gamma|_{N_j}}{d_{N_j f_{ij}}} + \frac{\Gamma|_{v_{ij1}}}{d_{v_{ij1} f_{ij}}} + \frac{\Gamma|_{v_{ij2}}}{d_{v_{ij2} f_{ij}}}}{\frac{1}{d_{N_j f_{ij}}} + \frac{1}{d_{v_{ij1} f_{ij}}} + \frac{1}{d_{v_{ij2} f_{ij}}}} \quad (3.8)$$

Finalmente, o coeficiente $\Gamma|_{f_{ij}}$ é construído a partir da média harmônica entre os dois coeficientes médios obtidos:

$$\Gamma|_{f_{ij}} = \frac{\bar{\Gamma}_{P_i} \bar{\Gamma}_{N_j}}{\bar{\Gamma}_{P_i} d_{N_j f_{ij}} + \bar{\Gamma}_{N_j} d_{P_i f_{ij}}} \quad (3.9)$$

Dando seguimento à construção da equação de discretização, considerando

que $F|_{f_{ij}} = \Gamma|_{f_{ij}} \frac{\partial \phi}{\partial x}|_{f_{ij}}$ e $G|_{f_{ij}} = \Gamma|_{f_{ij}} \frac{\partial \phi}{\partial y}|_{f_{ij}}$, e fazendo uma aproximação pela regra do ponto médio, tem-se:

$$F|_{f_{ij}} \approx \bar{F}|_{f_{ij}} = \frac{1}{|\Lambda_{ij}|} \int_{\Lambda_{ij}} F|_{f_{ij}} dA \quad (3.10)$$

e

$$G|_{f_{ij}} \approx \bar{G}|_{f_{ij}} = \frac{1}{|\Lambda_{ij}|} \int_{\Lambda_{ij}} G|_{f_{ij}} dA, \quad (3.11)$$

de forma que $\bar{F}|_{f_{ij}}$ e $\bar{G}|_{f_{ij}}$ representam os valores médios aproximados para $F|_{f_{ij}}$ e $G|_{f_{ij}}$, respectivamente, e $|\Lambda_{ij}|$ refere-se à área da região Λ_{ij} .

Uma vez que supôs-se que $\Gamma|_{f_{ij}}$ é constante na face f_{ij} , fazendo uso do teorema da divergência de Gauss sobre a região sombreada Λ_{ij} pode-se avaliar os termos $F|_{f_{ij}}$ e $G|_{f_{ij}}$ no ponto f_{ij} como:

$$F|_{f_{ij}} \approx \frac{1}{|\Lambda_{ij}|} \int_{\Lambda_{ij}} \Gamma|_{f_{ij}} \frac{\partial \phi}{\partial x}|_{f_{ij}} dA = \frac{\Gamma|_{f_{ij}}}{|\Lambda_{ij}|} \oint_{\partial \Lambda_{ij}} \phi dy \quad (3.12)$$

e

$$G|_{f_{ij}} \approx \frac{1}{|\Lambda_{ij}|} \int_{\Lambda_{ij}} \Gamma|_{f_{ij}} \frac{\partial \phi}{\partial y}|_{f_{ij}} dA = \frac{\Gamma|_{f_{ij}}}{|\Lambda_{ij}|} \oint_{\partial \Lambda_{ij}} \phi dx, \quad (3.13)$$

com o sentido identificado pelas setas apresentadas no diagrama da Figura 3.1. Definindo $\phi|_{\varepsilon k}$ como sendo a média simples entre os valores de ϕ nos pontos que compõem cada segmento ε_{ijk} , $k \in \{1, 2, 3, 4\}$, $\Delta y_{\varepsilon k}$ como sendo a diferença entre as componentes y do vetor posição dos dois pontos que compõem o segmento ε_{ijk} (respeitando a convenção denotada pelo sentido do segmento conforme a Figura 3.1), $\Delta x_{\varepsilon k}$ de forma análoga, utilizando a regra do ponto médio e novamente a convenção de Einstein para somatórios, então pode-se escrever:

$$F|_{f_{ij}} \approx \frac{\Gamma|_{f_{ij}}}{|\Lambda_{ij}|} \phi|_{\varepsilon k} \Delta y_{\varepsilon k}, \quad \forall i \in \{1, \dots, N_P\}; j \in \{1, 2, 3\} \quad (3.14)$$

e

$$G|_{f_{ij}} \approx \frac{\Gamma|_{f_{ij}}}{|\Lambda_{ij}|} \phi|_{\varepsilon k} \Delta x_{\varepsilon k}, \quad \forall i \in \{1, \dots, N_P\}; j \in \{1, 2, 3\}. \quad (3.15)$$

Substituindo as Equações (3.14) e (3.15) na Equação (3.6) e utilizando tais resultados para reescrever a igualdade dada pela Equação (3.2), considerando o termo fonte linearizado conforme a Equação (3.3), após algumas manipulações algébricas a equação final discretizada pode ser escrita (novamente utilizando a convenção de soma) na seguinte forma:

$$a_{P_i} \phi_{P_i} + a_{N_{ij}} \phi_{N_{ij}} = -a_{v_{ij}} \phi_{v_{ij}} - S_{C_i}, \quad \forall i \in \{1, \dots, N_P\}, \quad (3.16)$$

sendo $\phi_{v_{ij}}$ o valor de ϕ nos vértices⁵ que compõem o volume P_i e a_{P_i} , $a_{N_{ij}}$ e $a_{v_{ij}}$ representando os escalares que aparecem multiplicando ϕ_{P_i} , $\phi_{N_{ij}}$ e $\phi_{v_{P_i}}$, respectivamente, dados por:

$$a_{P_i} = \frac{\Gamma|f_{ij}|}{2|\Lambda_{ij}|} [\Delta y_{ij}(\Delta y\varepsilon_{ij1} + \Delta y\varepsilon_{ij4}) + \Delta x_{ij}(\Delta x\varepsilon_{ij1} + \Delta x\varepsilon_{ij4})] + S_{P_i}; \quad (3.17)$$

$$a_{N_{ij}} = \frac{\Gamma|f_{ij}|}{2|\Lambda_{ij}|} [\Delta y_{ij}(\Delta y\varepsilon_{ij2} + \Delta y\varepsilon_{ij3}) + \Delta x_{ij}(\Delta x\varepsilon_{ij2} + \Delta x\varepsilon_{ij3})]; \quad (3.18)$$

$$a_{v_{ij}} = \frac{1}{2} \left[\frac{\Gamma|f_{ij}|}{|\Lambda_{ij}|} (\Delta y_{ij}(\Delta y\varepsilon_{ij1} + \Delta y\varepsilon_{ij2}) + (\Delta x_{ij}(\Delta x\varepsilon_{ij1} + \Delta x\varepsilon_{ij2}))) + \frac{\Gamma|f_{i(j+2)}|}{|\Lambda_{i(j+2)}|} (\Delta y_{i(j+2)}(\Delta y\varepsilon_{i(j+2)3} + \Delta y\varepsilon_{i(j+2)4}) + (\Delta x_{i(j+2)}(\Delta x\varepsilon_{i(j+2)3} + \Delta x\varepsilon_{i(j+2)4}))) \right]. \quad (3.19)$$

A Equação (3.16) apresenta o sistema linear resultante do processo de discretização, que deve ser resolvido por alguma técnica conveniente. O presente trabalho adota, por questão de simplicidade e confiabilidade, o método de Gauss-Seidel como opção para resolver tal sistema de forma iterativa. Maiores detalhes sobre o método podem ser encontrados em Ortega [68].

Um cuidado especial recai sobre os coeficientes $a_{v_{ij}}$: como $j \in \{1, 2, 3\}$, o termo $(j + 2)$ deve ser tomado como uma permutação cíclica de j nesta ordem, de modo que o índice na segunda dimensão do *array* informe o vizinho N_j correto, para que então os dados referentes a este volume possam ser acessados na memória.

A forma em que a equação de discretização está mostrada na Equação (3.16) é a forma canônica das discretizações obtidas mediante o uso do MVF, tal como exposto por Patankar [71]. Ressalta-se que o termo do lado esquerdo é calculado implicitamente, enquanto que o termo do lado direito (dependente dos nós da malha) é avaliado explicitamente, e que a Equação (3.16) é válida apenas para os triângulos internos, aqueles que não possuem nenhuma face localizada na fronteira $\partial\Omega$ do domínio.

O termo do lado esquerdo da Equação (3.16) é tratado implicitamente e dá origem aos coeficientes da matriz do sistema de equações lineares, já o lado direito da Equação (3.16) contém, além do termo fonte, o termo de difusão cruzada, que aparece em casos onde o vetor normal da face f_{ij} não é paralelo ao vetor $\overrightarrow{P_i N_j}$, gerando uma parcela de fluxo tangente à esta face, e é calculado utilizando-se os valores das variáveis obtidos numa iteração anterior (tratado explicitamente), ou seja, é somado ao termo fonte. Em malhas ortogonais este

⁵Note que são os vértices denotados por v_{ij1} e v_{ij2} na Figura 3.1, compreendidos em relação ao vetor $\overrightarrow{P_i N_j}$ da face compartilhada f_{ij} . Convencionou-se que o vértice $\phi_{v_{ij}}$ é sempre o vértice à direita de $\overrightarrow{P_i N_j}$.

termo se anula, mas em malhas não ortogonais, a depender do grau de distorção do volume, este termo pode tornar-se muito significativo, introduzindo dificuldades para a convergência do sistema linear e instabilidades na ordem de convergência do método [62, 23, 8, 2].

3.3 VOLUMES DE FRONTEIRA E CONDIÇÕES DE CONTORNO

Os valores de ϕ nos CGs dos volumes que possuem uma ou mais faces localizadas sobre $\partial\Omega$, ditos volumes de fronteira, não são calculados como variáveis do sistema linear governante, mas são avaliados diretamente a partir de uma média ponderada entre o valor de ϕ em seus vértices, de forma que:

$$\phi_{B_i} = \frac{\sum_{j=1}^3 \frac{\phi_{v_{ij}}}{d_{v_{ij}CG}}}{\sum_{j=1}^3 \frac{1}{d_{v_{ij}CG}}} \quad \forall i \in \{1, \dots, N_B\}, \quad (3.20)$$

onde $d_{v_{ij}CG}$ representa a distância entre o vértice v_{ij} e o CG do triângulo de fronteira B_i .

Por sua vez, os valores de ϕ nos vértices destes triângulos são calculados a partir das informações dadas pelas condições de contorno, mas apenas os vértices que fazem parte da fronteira do domínio recebem a informação diretamente, enquanto que o vértice interno, quando existir, terá sua grandeza ϕ estimada a partir de uma interpolação dos valores dos vértices localizados na fronteira. A metodologia descrita a seguir é iterada para todos os triângulos de fronteira B_i , $i \in \{1, 2, \dots, N_B\}$, de modo que todos os vértices de fronteira recebam as informações de suas respectivas condições de contorno.

Neste trabalho as condições de contorno são avaliadas por meio de uma equação única, que condensa os três tipos de condições canônicas para EDPEs: Dirichlet, Neumann e Robin. Tal equação é obtida ao se adicionar um termo artificial γ à equação da condição de contorno de Robin, dada pela Equação (2.14). Este termo não possui significado físico explícito, servindo apenas de artifício para que os três tipos de condição de contorno possam ser unificados na mesma expressão. Assim, a equação utilizada é dada por:

$$\mathbf{q}_i = -\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{n}}} \Big|_{\partial\Omega} = h_{ic}(\phi|_{\partial\Omega} - \phi_\infty) + \gamma, \quad (3.21)$$

com $\phi|_{\partial\Omega} = \phi_{m_{i1}}$, sendo o ponto m_{i1} localizado de acordo com o esquema apresentado pela Figura 3.2.

O desenvolvimento da equação discretizada para as condições de contorno é baseado nos diagramas apresentados na Figura 3.2. O ponto m_{i1} é o ponto médio da face de fronteira, a seta que chega em m_{i1} representa a informação sobre o fluxo normal \mathbf{q}_{i1} da grandeza ϕ através desta face, m'_{i1} representa o ponto de encontro entre a reta normal à face em análise (passando pelo ponto m_{i1}) e uma das arestas do triângulo de fronteira e, por fim, os pontos em vermelho denotam os centróides de cada triângulo, sendo B_i o i -ésimo triângulo de fronteira e

N_1 e N_2 seus vizinhos.

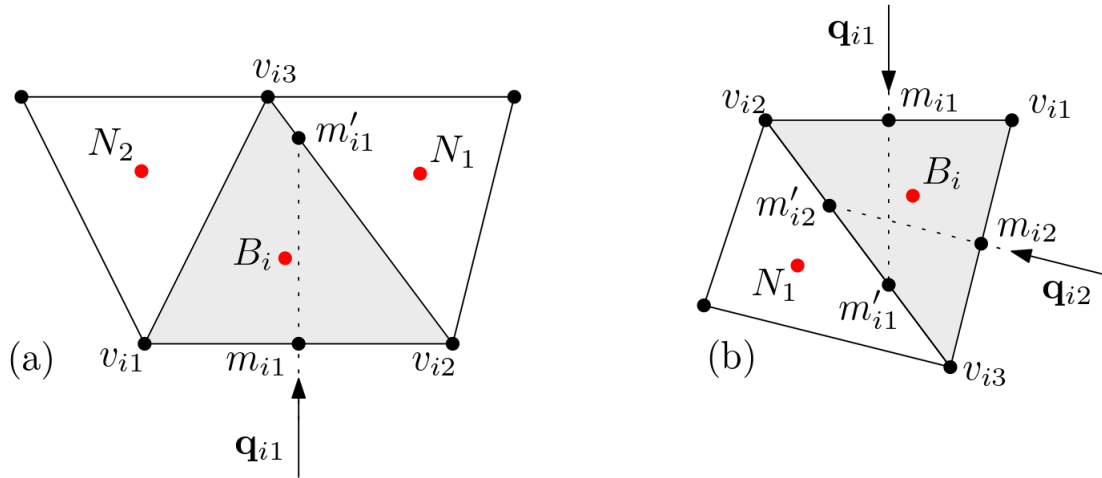


Figura 3.2: Esquema de tratamento dos triângulos de fronteira. Em (a) apresenta-se o exemplo de um triângulo que possui apenas uma face sobre a fronteira $\partial\Omega$ (preenchido). Em (b) apresenta-se o exemplo de um triângulo que possui duas faces sobre $\partial\Omega$, com a simbologia análoga ao caso (a). Fonte: autoria própria.

A linha $m_{i1} - m'_{i1}$ é, por hipótese, perpendicular à face de fronteira, de modo que é possível estabelecer uma aproximação algébrica para o termo diferencial da Equação (3.21) ao se utilizar os valores de $\phi_{m_{i1}}$, $\phi_{m'_{i1}}$ e a distância $d_{m_{i1}m'_{i1}}$ entre os dois pontos, de tal forma que tem-se:

$$-\Gamma \left(\frac{\phi_{m'_{i1}} - \phi_{m_{i1}}}{d_{m_{i1}m'_{i1}}} \right) = h_{ic}(\phi_{m_{i1}} - \phi_{\infty}) + \gamma. \quad (3.22)$$

Contudo, uma questão sensível reside ao tentar encontrar o valor de $\phi_{m'_{i1}}$: este valor pode ser interpolado por uma média ponderada pela distância com os valores de ϕ nos vértices que formam a aresta que o contém, mas para se executar tal operação, deve-se propor uma metodologia que forneça qual das duas arestas internas é esta, bem como as coordenadas de m'_{i1} . Assim, considerando os vetores: $\mathbf{u}_{i1} = \overrightarrow{v_{i2}v_{i3}}$, $\mathbf{u}_{i2} = \overrightarrow{v_{i2}v_{i1}}$ e $\mathbf{u}_{i3} = \overrightarrow{v_{i2}m'_{i1}}$ tem-se que:

$$\begin{aligned} |\mathbf{u}_{i1}| \left[\frac{\mathbf{u}_{i1}}{|\mathbf{u}_{i1}|} \cdot \frac{\mathbf{u}_{i2}}{|\mathbf{u}_{i2}|} \right] < |\mathbf{u}_{i3}| &\implies m'_{i1} \in \overline{v_{i1}v_{i3}}; \\ |\mathbf{u}_{i1}| \left[\frac{\mathbf{u}_{i1}}{|\mathbf{u}_{i1}|} \cdot \frac{\mathbf{u}_{i2}}{|\mathbf{u}_{i2}|} \right] = |\mathbf{u}_{i3}| &\implies m'_{i1} = v_{i3}; \\ |\mathbf{u}_{i1}| \left[\frac{\mathbf{u}_{i1}}{|\mathbf{u}_{i1}|} \cdot \frac{\mathbf{u}_{i2}}{|\mathbf{u}_{i2}|} \right] > |\mathbf{u}_{i3}| &\implies m'_{i1} \in \overline{v_{i2}v_{i3}}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

De modo que este resultado possibilita que se encontre as coordenadas de m'_{i1} . Uma vez que sabe-se qual segmento contém o ponto m'_{i1} , pode-se realizar uma combinação convexa com as coordenadas dos vértices que definem tal segmento e calcular as coordenadas de m'_{i1} . Este

cálculo pode ser realizado a partir da seguinte equação:

$$(x_{m'_{i1}}, y_{m'_{i1}}) = \kappa_i(x_{v_{ib}}, y_{v_{ib}}) + (1 - \kappa_i)(x_{v_{ia}}, y_{v_{ia}}), \quad (3.24)$$

sendo a e b os vértices que definem a aresta em questão (não importando a ordem) e κ_i dado por:

$$\kappa_i = \frac{|\mathbf{u}_{i3}|}{|\mathbf{u}_{aresta}| \cos \theta} \quad 0 \leq \kappa_i \leq 1, \quad (3.25)$$

com $|\mathbf{u}_{aresta}|$ sendo o módulo do vetor que representa a aresta que contém m'_{i1} e θ o ângulo formado entre esta aresta e a aresta $\overline{v_{i2}v_{i3}}$.

A identificação da aresta que contém m'_{i1} também possibilita que um valor de ϕ seja atribuído a este ponto. A mesma estratégia utilizada para encontrar a coordenada deste ponto é então novamente aproveitada:

$$\phi_{m'_{i1}} = \kappa_i \phi_{v_{ib}} + (1 - \kappa_i) \phi_{v_{ia}}. \quad (3.26)$$

Como o coeficiente Γ pode ser função da posição, uma ponderação semelhante à utilizada para o tratamento do fluxo difusivo entre dois volumes internos é empregada para a atribuição das condições de contorno. Neste caso, o coeficiente Γ para o ponto m_{i1} é construído por meio de uma ponderação dos coeficientes Γ avaliados nos vértices que definem a aresta que contém o ponto m_{i1} e do Γ avaliado no CG do volume de controle, resultando na seguinte equação:

$$\bar{\Gamma}_{m_{i1}} = \frac{\frac{\Gamma|_{B_i}}{d_{B_i m_{i1}}} + \frac{\Gamma|_{v_{i1}}}{d_{v_{i1} m_{i1}}} + \frac{\Gamma|_{v_{i2}}}{d_{v_{i2} m_{i1}}}}{\frac{1}{d_{B_i m_{i1}}} + \frac{1}{d_{v_{i1} m_{i1}}} + \frac{1}{d_{v_{i2} m_{i1}}}}. \quad (3.27)$$

Finalmente, pode-se utilizar a Equação (3.22) para se obter uma aproximação para ϕ no ponto m_{i1} . Manipulando-a algebricamente obtém-se:

$$\phi|_{\partial\Omega} = \phi_{m_{i1}} = \left(\frac{h_{ic} d_{m_{i1} m'_{i1}}}{\bar{\Gamma}_{m_{i1}}} - 1 \right)^{-1} \left[\frac{h_{ic} d_{m_{i1} m'_{i1}}}{\bar{\Gamma}_{m_{i1}}} \phi_{\infty} - \frac{h_{ic} d_{m_{i1} m'_{i1}}}{\bar{\Gamma}_{m_{i1}}} \gamma + \phi_{m'_{i1}} \right]. \quad (3.28)$$

A Equação (3.28) incorpora os três tipos canônicos de condições de contorno da seguinte forma:

$$\text{Se } h_{ic} \rightarrow \infty \text{ e } \gamma = 0 \implies \phi_{m_{i1}} = \phi_{\infty} \quad (3.29)$$

\therefore Condição de Dirichlet com $\phi_{m_{i1}} = \phi_{\infty}$

$$\text{Se } h_{ic} = 0 \text{ e } \gamma = 0 \implies \phi_{m_{i1}} = \phi_{m'_{i1}} \implies -\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{n}}} = 0 \quad (3.30)$$

\therefore Condição de Neumann homogênea

$$\text{Se } h_{ic} = 0 \text{ e } \gamma = \Theta \implies -\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{n}}} = \Theta \quad (3.31)$$

\therefore Condição de Neumann com fluxo = Θ

$$\text{Se } \gamma = 0 \implies -\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{n}}} = h_{ic}(\phi_{\infty} - \phi_{m_1}) \quad (3.32)$$

\therefore Condição de Robin com fluxo = $h_{ic}(\phi_{\infty} - \phi_{m_1})$.

Em casos onde o volume de fronteira possui duas faces na fronteira $\partial\Omega$, tal como ilustrado no item (b) da Figura 3.2, os procedimentos acima descritos são aplicados separadamente para cada uma das faces.

Uma vez que todas as faces localizadas sobre a fronteira $\partial\Omega$ tiverem um valor de $\phi_{m_{i1}}$ atribuído (ou $\phi_{m_{i2}}$, se existir), os valores de ϕ nos vértices localizados sobre a fronteira são calculados a partir uma média simples dos valores de ϕ dos dois pontos m_{i1} (ou m_{i2}) vizinhos. Este esquema é de ordem de convergência $O(h)$ por ser baseado em uma aproximação de primeira ordem para o gradiente de ϕ na fronteira $\partial\Omega$.

4 DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL PARA PROBLEMAS ELÍPTICOS

Neste capítulo apresenta-se o desenvolvimento do código computacional em linguagem *MATLAB*® que soluciona numericamente, por meio do MVF, EDPEs definidas em domínios bidimensionais, fisicamente isotrópicos e com coeficiente de difusão dependente da posição (x, y) .

4.1 CÓDIGO PRINCIPAL PARA UMA EDPE

O código principal, mostrado pelo Algoritmo 1, foi construído de forma modular, de modo que as funções necessárias para a execução do algoritmo são compiladas de forma separada e somente quando há necessidade. Optou-se por esta abordagem pois, além de ser naturalmente mais gerenciável, permite uma maior flexibilidade de adaptações e implementação de novas funcionalidades, uma vez que o processo de depuração é mais simplificado em relação à abordagens de código contínuo.

Salienta-se que mesmo utilizando o *software Distmesh*, desenvolvido por Persson [75], como gerador de malhas, houve a necessidade de se construir uma função geradora de malhas própria. Isto foi motivado pela incapacidade do *Distmesh* em gerar malhas triangulares com triângulos equiláteros, necessárias para desempenhar o estudo do efeito das distorções dos volumes de controle sobre o termo de difusão cruzada e, por conseguinte, na ordem de convergência da metodologia de discretização.

Também é importante destacar que todas as funções necessárias para o desenvolvimento do código são de autoria própria, não sendo necessário recorrer à nenhuma função pertencente à biblioteca do *MATLAB*® que pudessem cumprir determinado papel¹. Optou-se por esta conduta por diversos motivos, sendo os principais: o aprimoramento pessoal do autor e a facilidade em transpor o código para linguagens de mais baixo nível. Alguns exemplos de funções básicas desenvolvidas são:

- Sub-rotina para identificação dos triângulos que compartilham uma aresta;
- Sub-rotina para identificação dos triângulos que compartilham determinado vértice;
- Sub-rotina para a plotagem da malha, identificação de um determinado volume, seus vizinhos e vértices;
- Sub-rotina para a resolução do sistema linear por meio do método de Gauss-Seidel;
- Sub-rotina para avaliação de parâmetros de qualidade das malhas utilizadas;

¹Apenas as funções embarcadas em qualquer linguagem de programação foram utilizadas, como: operações matemáticas, estruturas condicionais e estruturas de repetição.

- Sub-rotina para ordenação dos volumes: os volumes mais próximos das fronteiras do domínio têm preferência na ordem de cálculo;
- Sub-rotina para geração de resultados no formato ".vtk" para visualização de dados no *software ParaView*;
- Sub-rotina para identificação dos volumes vizinhos à um determinado volume.

A descrição mostrada a seguir não tem como objetivo ser pormenorizada, de modo que apenas os aspectos mais gerais, que delineiam as ações necessárias, são apresentados. Decidiu-se por suprimir diversas subfunções de menor relevância e complexidade para tornar a exibição mais enxuta e amigável.

Algoritmo 1 Código principal simplificado - Caso de uma EDPE

Entrada: nome da simulação (nomeSim); tamanho da malha (tamMalha); domínio (dom); plotar; Sc; Sp; resíduo máximo (maxRes); máximo de iterações (maxIt); máximo de iterações Gauss-Seidel (maxItGS); Gamma; h_{ic} (alpha); ϕ_{∞} (beta); γ (gamma)

Saída: resultados; gráficos

- 1: Gerar a malha com refinamento "tamMalha", e geometria "dom"(função **distmesh**);
- 2: Criar a lista de ordem dos volumes;
- 3: Criar a lista dos vértices de fronteira;
- 4: Calcular as condições de contorno com os dados "alpha", "beta" e "gamma";
- 5: Atribuir as condições de contorno;
- 6: Atualizar a(s) variável(is) nos vértices internos;
- 7: Calcular as propriedades físicas e geométricas dos volumes de fronteira;
- 8: Calcular as propriedades geométricas dos volumes internos;
- 9: Montar a matriz de coeficientes;
- 10: **for** i = 1:"maxIt" **do**
- 11: Calcular os vetores Sc e Sp;
- 12: Atualizar o vetor de constantes;
- 13: Calcular o resíduo para o vetor solução atual;
- 14: **if** Resíduo < "maxRes" **then**
- 15: Pare, o vetor solução atual foi aceito;
- 16: **else**
- 17: Continue;
- 18: **end if**
- 19: Resolver o sistema linear pelo método Gauss-Seidel com os parâmetros "maxRes" e "maxItGS";
- 20: Atualizar as condições de contorno;
- 21: Atualizar os volumes de fronteira;
- 22: Atualizar os vértices internos;
- 23: **if** i == "maxIt" **then**
- 24: Mostrar: "Método não convergiu";
- 25: **else**
- 26: Continue;
- 27: **end if**
- 28: **end for**
- 29: Calcular a solução analítica;
- 30: Calcular os índices de qualidade da malha;
- 31: Criar o arquivo de resultados;
- 32: Criar o arquivo .vtk;
- 33: **if** plotar == true **then**
- 34: Plotar gráficos;
- 35: **else**
- 36: Continue;
- 37: **end if**

Apesar do *MATLAB*® disponibilizar certas ferramentas para criação de gráficos com as superfícies das soluções obtidas, tais gráficos possuem certas limitações de qualidade e detalhamento, em especial se os domínios não forem retangulares. Almejando superar esta limitação, buscou-se uma melhor opção para a visualização dos dados, optando pelo *software ParaView*. O *ParaView* é o *software* livre de visualização de dados líder mundial do segmento, possui integração com diversas plataformas e permite o tratamento de grandes quantidades de informações de grandezas de natureza escalar ou vetorial, em duas ou três dimensões [3].

O *ParaView* baseia-se em uma biblioteca de visualização gráfica chamada *Visualization Toolkit* (VTK), desenvolvida por Will Schroeder, Ken Martin e Bill Lorensen [79]. Ainda que o *ParaView* possua integração com várias plataformas, o *MATLAB*® não é contemplado nesta lista, necessitando que haja uma tradução dos dados obtidos pela simulação via *MATLAB*® para o formato ".vtk"². Por tal motivo, houve a necessidade de se construir uma função que transformasse os dados obtidos pela simulação para um arquivo .vtk válido, que pudesse ser interpretado dentro do *ParaView*.

4.2 SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE DUAS EDPEs ACOPLADAS

Até aqui o presente trabalho apresentou uma metodologia para resolver EDPEs por meio do MVF. Contudo, diversos fenômenos naturais são modelados por não apenas uma, mas várias EDPs acopladas, que requerem ser resolvidas simultaneamente. Mazumder [60] explica que uma das origens deste comportamento é a própria descrição física da natureza, que considera a ação simultânea de diversas leis e princípios, por exemplo o da conservação da massa e da energia. Outro exemplo citado pelo autor é o caso de problemas definidos em campos vetoriais, onde há uma equação para cada dimensão, levando naturalmente ao surgimento de mais equações.

A solução numérica de várias equações simultaneamente pode ser obtida por duas maneiras distintas: a primeira é conhecida por abordagem segregada e a segunda é abordagem acoplada [60]. Por sorte, todo o trabalho até aqui desenvolvido pode ser aproveitado na elaboração de um algoritmo capaz de contemplar casos com mais de uma EDPE. Este novo algoritmo é baseado na abordagem segregada, pois a formulação acoplada requer um esquema diferente de discretização.

De acordo com Mazumder [60], a abordagem segregada é definida como a solução sequencial de cada EDP mantendo-se fixas as variáveis dependentes que não fazem parte da EDP tratada naquela iteração.

Considere o exemplo onde deseja-se resolver um sistema de duas EDPEs, cujas respectivas variáveis dependentes são $\phi(x, y)$ e $\psi(x, y)$. Cada EDP é resolvida de forma isolada utilizando os procedimentos apresentados no Algoritmo 1, de modo que o vetor solução

²O arquivo .vtk possui esta extensão em alusão à linguagem *Visualization Toolkit* [79].

para obtido como saída do método de Gauss-Seidel é utilizado como estimativa para o cálculo do vetor solução da próxima variável. Seja ϕ a primeira variável a ser resolvida. Após o processo de discretização, o sistema linear resultante para a variável ϕ é resolvido considerando-se dois vetores de condições iniciais, um para a própria ϕ e outro para ψ . Após algumas iterações do Gauss-Seidel, obtém-se uma solução provisória ϕ^* , que será utilizada como estimativa inicial para resolver o sistema linear referente à próxima variável: ψ . Após obter-se soluções provisórias para ϕ e ψ , verifica-se se o critério de convergência, e caso este não seja validado, uma nova iteração global se inicia. Os valores de ϕ e ψ obtidos na iteração prévia são tomados como palpites para a nova iteração. A convergência deste processo é obtida quando os resíduos relativos à cada uma das variáveis forem satisfeitos simultaneamente.

A abordagem segregada possui como vantagem em relação à sua antagonista o baixo uso de memória, uma vez que não é necessário manter armazenado coeficientes relativos à diversas variáveis de maneira simultânea. Contudo, a abordagem acoplada necessita de um número consideravelmente menor de iterações para atingir o critério de parada [60].

O presente trabalho se limitará ao caso de duas variáveis dependentes, apesar da abordagem segregada ser escalável para mais equações, bastando adicionar os respectivos sistemas lineares de cada uma das novas variáveis. O Algoritmo 2 ilustra o código desenvolvido para esta tarefa.

Algoritmo 2 Código principal simplificado - Caso de duas EDPEs

Entrada: nome da simulação (nomeSim); tamanho da malha (tamMalha); domínio (dom); plotar; ScPhi; SpPhi; ScPsi; SpPsi; resíduo máximo (maxRes); máximo de iterações (maxIt); máximo de iterações Gauss-Seidel (maxItGS); GammaPhi; GammaPsi; $h_{i\phi}$ (alphaPhi) ; ϕ_{∞} (betaPhi) ; γ_{ϕ} (gammaPhi), $h_{i\psi}$ (alphaPsi) ; ϕ_{∞} (betaPsi) ; γ_{ψ} (gammaPsi)

Saída: resultados; gráficos

- 1: Gerar a malha com refinamento "tamMalha", e geometria "dom"(função **distmesh**);
- 2: Criar a lista de ordem dos volumes;
- 3: Criar a lista dos vértices de fronteira;
- 4: Calcular as condições de contorno com os dados "alpha", "beta" e "gamma";
- 5: Atribuir as condições de contorno;
- 6: Atualizar a(s) variável(is) nos vértices internos;
- 7: Calcular as propriedades físicas e geométricas dos volumes de fronteira em relação à ϕ ;
- 8: Calcular as propriedades físicas e geométricas dos volumes de fronteira em relação à ψ ;
- 9: Calcular as propriedades geométricas dos volumes internos;
- 10: Montar a matriz de coeficientes relativa à ϕ ;
- 11: Montar a matriz de coeficientes relativa à ψ ;
- 12: **for** i = 1:"maxIt" **do**
- 13: Calcular os vetores ScPhi, SpPhi, ScPsi e SpPsi;
- 14: Atualizar os vetores de constantes BPhi e BPsi;
- 15: Calcular os resíduos para os vetores solução atuais RPhi e RPsi;
- 16: **if** ResíduoPhi < "maxRes" **E** ResíduoPsi < "maxRes" **then**
- 17: Pare, os vetores solução atuais foram aceitos;
- 18: **else**
- 19: Continue;
- 20: **end if**
- 21: Resolver o sistema linear para ϕ pelo método Gauss-Seidel com os parâmetros "maxRes", "maxItGS" e ψ^* ;
- 22: Resolver o sistema linear para ψ pelo método Gauss-Seidel com os parâmetros "maxRes", "maxItGS" e ϕ^* ;
- 23: Atualizar as condições de contorno para ϕ e ψ ;
- 24: Atualizar os volumes de fronteira para ϕ e ψ ;
- 25: Atualizar os vértices internos para ϕ e ψ ;
- 26: **if** i == "maxIt" **then**
- 27: Mostrar: "Método não convergiu";
- 28: **else**
- 29: Continue;
- 30: **end if**
- 31: **end for**
- 32: Calcular as soluções analíticas;
- 33: Calcular os índices de qualidade da malha;
- 34: Criar o arquivo de resultados;
- 35: Criar os arquivos .vtk;
- 36: **if** plotar == true **then**
- 37: Plotar gráficos;
- 38: **else**
- 39: Continue;
- 40: **end if**

5 VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO, ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA E ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

5.1 CONCEITOS BÁSICOS: VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO

Roache [76], em concordância com outros pesquisadores, adota a seguinte definição para descrever os processos de verificação¹ e validação de modelos matemáticos e suas soluções:

"Nós adotamos uma descrição sucinta para verificação, que é resolver corretamente as equações, enquanto que, para validação, seria resolver as equações corretas."(ROACHE, 1998, p.1, tradução nossa).² [76]

De acordo com Roache [76], para verificar um código o programador deve apresentar precisamente qual EDP está sendo resolvida e convencer os usuários que a resposta fornecida é correta, que apresenta um certo limite de precisão e que é consistente. Validar um código, por outro lado, é uma tarefa ilógica, uma vez que apenas os resultados do código podem ser validados experimentalmente, e representam um processo complexo e iterativo, baseado no questionamento entre a acurácia do modelo matemático desenvolvido para um certo fenômeno e suas simplificações conceituais, somado aos erros numéricos oriundos da natureza computacional do código e erros de medições experimentais. O autor ainda friza que os dois processos podem ser feitos de maneiras totalmente separadas, justamente por lidarem com coisas completamente diferentes. Em um trabalho posterior, Roache [77] acentua esta discussão ao afirmar que processos de verificação são puramente matemáticos, enquanto que a validação é a concordância entre os fenômenos físicos e sua captura pela modelagem matemática empregada.

5.2 MÉTODO DAS SOLUÇÕES FABRICADAS

Conforme exposto acima, verificar um código é confrontar a solução numérica fornecida por este código com a respectiva solução exata do problema. Contudo, como a maioria das EDPs disponíveis na literatura são voltadas ao aprendizado de técnicas de soluções analíticas, é raro que apresentem as características desejadas para servir de parâmetro para uma comparação com resultados simulados, dado que a necessidade de serem resolvíveis "à mão" limita o nível de complexidade de seus termos. Em consequência disso, é comum que as EDPs utilizadas para a verificação de técnicas numéricas sejam fabricadas especialmente para este intuito.

¹Para mais detalhes, ver Roache [76], Salari e Knupp [78], Roache [77], Fisher [33], Ferziger e Peric [31], Moukalled Mangani e Darwish [61], Mazumder [60] e outros.

²"We adopt the succinct description of verification as "solving the equations right" and of validation as "solving the right equations."

Uma técnica capaz de construir EDPs especificamente para verificar soluções numéricas é o Método das Soluções Fabricadas (MSF). O MSF produz, via de regra, soluções sem significado físico, mas que gozam de características desejáveis para sua finalidade que, além da exatidão, também requer complexidade suficiente para exercitar todos os termos da EDP governante [77].

A ideia básica do MSF é obter uma solução exata para um EDP resolvendo o problema na ordem inversa. Cria-se uma função candidata para ser a solução exata e aplica-se sobre ela os operadores diferenciais da EDP governante. O resultado destas derivações é então somado ao termo fonte da EDP. As condições de contorno e o domínio são ajustados, geralmente, após a obtenção da EDP governante, sendo esta etapa a mais minuciosa do método. Ressalta-se que cada variável dependente da EDP necessita de sua condição de contorno. Condições do tipo Dirichlet são simplesmente o resultado da solução exata avaliados nas coordenadas definidas como contorno do domínio. Condições de Neumann e Robin carecem de um cuidado maior, e são concebidas ao se calcular o campo gradiente da solução analítica e avaliá-lo nas coordenadas que definem o contorno domínio³ [77, 78].

Salari e Knupp [78] elencam sete diretrizes que devem ser seguidas ao se utilizar o MSF, são elas:

1. As soluções eleitas devem ser compostas por funções suaves tais como funções polinômiais, trigonométricas ou exponenciais. Soluções que envolvem séries infinitas devem ser evitadas.
2. A solução deve ser geral o suficiente de tal forma que estimule todos os termos da equação governante.
3. A solução deve possuir um número suficiente de derivadas não triviais, e de ordens iguais ou maiores que a ordem de convergência teórica do método.
4. As derivadas da função solução devem ser limitadas por uma constante pequena, de forma a garantir que a solução não varie abruptamente com as coordenadas espaciais ou temporais, ou seja, a solução não deve possuir singularidades.
5. A solução fabricada não pode impedir o código de funcionar corretamente, robustez não faz parte do processo de verificação.
6. A solução deve ser definida em um subconjunto conexo do espaço bi ou tridimensional.
7. A solução deve ser construída de maneira que os operadores diferenciais na EDP façam sentido.

Detalhes menores são elencados por Salari e Knupp e recomenda-se ao leitor interessado a leitura integral do texto. Roache [77] complementa que soluções analíticas

³Para casos mais específicos, recomenda-se a leitura direta dos trabalhos citados.

que envolvam séries infinitas podem ser inevitáveis, e neste caso deve-se contabilizar o maior número de termos possíveis.

Alguns dos problemas utilizados para verificar o programa desenvolvido pelo presente trabalho foram construídos pelo Método das Soluções Fabricadas (MSF). As equações obtidas possuem combinações não triviais de condições de contorno e termos fonte, de tal modo que permitem demonstrar a capacidade do código em lidar com casos complexos de EDPEs.

5.3 VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO POR MEIO DA ANÁLISE DE ORDEM DE CONVERGÊNCIA

Para verificar um código, a metodologia padrão ouro consiste em desempenhar testes de convergência de modo a medir a evolução do erro de discretização ao refinar a malha utilizada e estabelecer bandas limite para este [76]. Salari e Knupp [78] avançam na mesma direção ao mencionar que o critério mais rigoroso aceito para atestar a verificação de um código é a aferição de sua ordem de convergência, que resume-se em testar a consistência do método de discretização utilizado ao se comparar a evolução das soluções obtidas com o refinamento sucessivo da malha, bem como estabelecer o valor da ordem de convergência observada experimentalmente quando comparada com a ordem de convergência teórica do método.

Versteeg e Malalasekeera [87] indicam que todo processo de solução numérica de uma EDP possui um erro associado que condensa erros de discretização, arredondamento e iteração. A ordem de convergência de um método numérico representa a taxa de decaimento deste erro com o refinamento da malha.

Mazumder [60] salienta que é desejável que se refine uma malha até que o erro de truncamento entre as soluções de uma malha e sua antecessora seja menor que o erro de arredondamento utilizado. Se este critério puder⁴ ser atingido, as soluções obtidas são ditas independentes da malha.

Benkhaldoun, ElMahi e Seaid [11] apontam que esquemas de reconstrução do gradiente nas faces baseados no uso do teorema da divergência de Gauss, tal como a metodologia utilizada pelo presente trabalho, são de segunda ordem ($O(h^2)$) e podem ser aplicados sobre malhas não estruturadas com alto grau de distorção. Esta afirmação será investigada para a metodologia deste trabalho pelos procedimentos aqui descritos.

Coudière, Vila e Villedieu [20] provam que o esquema de reconstrução do gradiente por meio do Teorema de Gauss em uma região de forma de diamante ao redor das faces fornece, na pior das hipóteses, ordem de convergência $O(h)$. Tais cenários podem ser diversos, mas os autores frizam casos onde há malhas de elementos quadrilaterais e triangulares de formatos variados. Tal afirmação será tomada como o limite inferior dos valores de ordem de convergência a serem observados no presente trabalho, obtidos por malhas com níveis severos de distorção.

⁴Em alguns casos o custo computacional envolvido é proibitivo e uma condição mais branda é adotada: uma diferença de 0.01% entre as soluções de duas malhas refinadas por um fator de 1/2 [60].

O procedimento empregado para a análise de convergência do presente esquema de discretização é baseado nas diretrizes descritas por Salari e Knupp [78], LeVeque [51], Zhiming [90] e Jacq [43]. Primeiramente, definiu-se uma constante h para representar o índice de refinamento da malha, de tal forma que:

$$h = \left(\frac{|\Omega|}{N} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (5.1)$$

sendo $|\Omega|$ a área do domínio onde a EDPE é definida e N o número de volumes que compõem a malha em questão. Definindo como $\hat{\phi}_{P_i}^h$ a solução analítica avaliada no CG de um volume de controle qualquer P_i , de área $|P_i|$ e que é parte de uma malha com índice h , e $\phi_{P_i}^h$ como o valor obtido numericamente para este mesmo CG, pôde-se calcular os erros E_2^h e E_{RMS}^h baseados nas normas discretas L_2 e L_{RMS} , respectivamente, como:

$$E_2^h = \sqrt{\sum_{i=1}^N (\phi_{P_i}^h - \hat{\phi}_{P_i}^h)^2 |P_i|} \quad (5.2)$$

e

$$E_{RMS}^h = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\phi_{P_i}^h - \hat{\phi}_{P_i}^h)^2}. \quad (5.3)$$

Jacq [43] estima o erro assintótico para uma norma Θ por meio da equação

$$E_{\Theta}^h = C_{\Theta} h^{q_{\Theta}} + O(h^{q_{\Theta}+1}) \quad \forall \Theta \in \{2, RMS\}, \quad (5.4)$$

onde q_{Θ} denota a ordem do erro em relação à norma Θ e C_{Θ} a constante de ordem de convergência, que independe de h . Considerando o erro assintótico de duas malhas com índices de refinamento $h_2 < h_1$ e manipulando algebricamente a Equação (5.4), uma estimativa para a ordem de convergência do erro associado à cada solução foi obtida, dada por:

$$q_{\Theta} = \frac{\log E_{\Theta}^{h_2} - \log E_{\Theta}^{h_1}}{\log h_2 - \log h_1}. \quad (5.5)$$

A partir da Equação (5.4) pôde-se examinar a evolução do erro de discretização dos problemas solucionados numericamente pelo código desenvolvido. Os resultados obtidos foram compilados em tabelas que serão apresentadas adiante.

5.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE À DISTORÇÃO DA MALHA

Tendo em vista que o código desenvolvido trabalha com malhas não estruturadas triangulares, fora dos casos especiais de domínios como o apresentado na Figura 5.1, é sabido, conforme relatado na revisão bibliográfica, que a irregularidade no tamanho dos lados dos triângulos origina o aparecimento do termo de difusão cruzada na equação de discretização.

Para aferir os efeitos deste termo (que é função do grau de distorção das malhas utilizadas) na ordem de convergência do método de discretização apresentado, um processo de avaliação da ordem de convergência foi empreendido ao comparar-se as soluções de um problema cujo domínio foi discretizado por malhas de diferentes índices de distorção.

Define-se por distorção de um elemento de malha o grau de afastamento de sua forma geométrica em relação à sua referência equilátera, isto é, quão diferentes seus ângulos internos e lados são em relação a um polígono equilátero com o mesmo número de arestas. Para os elementos triangulares, o caso ideal é o triângulo equilátero [60, 61, 88].

Aproveitando as métricas para a qualidade de uma malha não estruturada triangular encontradas na literatura, já relatadas na Seção 2.2.2, como por exemplo a definida em ANSYS [1] e aqui novamente apresentada:

$$D = \max \left[\frac{\theta_{\max} - 60}{180 - 60}, \frac{60 - \theta_{\min}}{60} \right], \quad (5.6)$$

e também o índice de qualidade de um elemento dado naquela mesma Seção:

$$Q = \left[\frac{4\sqrt{3} * \text{Área}}{\Sigma(\text{Tamanho da aresta})^2} \right], \quad (5.7)$$

pôde-se verificar a ordem de convergência do método desenvolvido utilizando-se uma variante de um problema encontrado em Maliska [58], ilustrado pela Figura 5.1. O problema e o domínio foram adaptados⁵, uma vez que tal como postos originalmente, seria impossível que o domínio fosse discretizado por volumes triangulares perfeitamente equiláteros, que proporcionam a ocorrência de ortogonalidade dos fluxos entre dois triângulos vizinhos, situação esta onde o termo de difusão cruzada desaparece. Assim, cria-se um cenário controle para aferir a ordem de convergência da metodologia de discretização apresentada, tendo-o como referência para os testes subsequentes, que serão afetados pela variação das distorções dos volumes.

⁵Um novo problema foi construído aproveitando o problema exposto por Maliska [58] seguindo-se as diretrizes de fabricação de soluções dadas por Roache [76, 77] e Salari e Knupp [78].

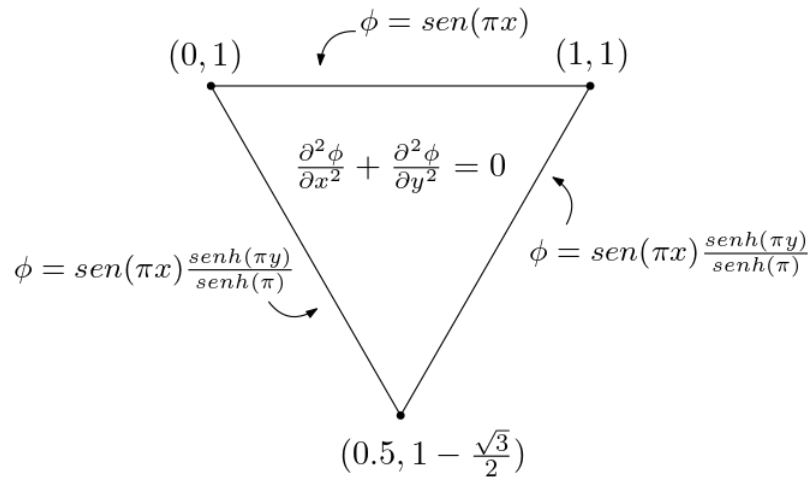


Figura 5.1: Problema proposto para o estudo da ordem de convergência do esquema de discretização apresentado. A solução analítica para uma variante deste problema, apresentada por Maliska [58], é exatamente a equação descrita para as condições de contorno das arestas diagonais. Fonte: autoria própria.

Devido ao modo que foi construído, o *Distmesh* não é capaz de gerar uma malha ortogonal, ou com índices D e Q definidos. Desta forma, uma malha ortogonal ($D = 0$ e $Q = 1$) foi obtida por meio do desenvolvimento próprio de uma sub-rotina de refinamento, cujo funcionamento é ilustrado pela Figura 5.2. As malhas com 4, 16, 64, 256 e 1024 volumes geradas por esta metodologia foram submetidas a uma outra sub-rotina, cujo intuito era deformar o domínio deslocando-se o vértice inferior, originalmente na posição $(0.5, 1 - \frac{\sqrt{3}}{2})$, de modo que todos os volumes sofressem o mesmo deslocamento, culminando em um grau de distorção D e qualidade Q uniforme entre eles⁶. Tal esquema de distorção dos volumes é ilustrado pela Figura 5.3, e é interessante notar que o deslocamento deste vértice altera o domínio da EDP, mas tal alteração não modifica o problema em questão, uma vez que as condições de contorno e a solução analítica são as mesmas⁷, fato que permite a comparação do efeito da distorção dos volumes entre os diversos problemas. Assim, cada uma das cinco malhas ortogonais foi distorcida de forma a gerar 4 novas malhas, com graus de distorção D iguais a 0.025, 0, 05, 0, 25 e 0.5, cujos respectivos índices de qualidade foram: $Q = 0.998$, $Q = 0.995$, $Q = 0.861$ e $Q = 0.771$. No total foram produzidas $5 \times 4 = 20$ malhas para a realização dos experimentos numéricos.

⁶Ressalta-se que os índices D e Q medem propriedades de cada elemento da malha. Contudo, em casos onde as malhas possuem todos os elementos com os mesmos valores de D e Q , a malha toda será caracterizada pelos valores destes índices, uma vez representam todos os seus elementos. Em situações onde houver variabilidade de D e Q entre os elementos, a malha será caracterizada pelos valores médios destes índices: $D_{\text{méd}}$ e $Q_{\text{méd}}$.

⁷Isto se deve ao fato de que o problema é originalmente definido num domínio quadrado, com vértices $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$ e $(0, 1)$. Logo, qualquer geometria que seja um subconjunto do domínio original terá como solução analítica a mesma equação do problema original, permitindo a comparação das soluções obtidas com as malhas distorcidas, que alteram o subconjunto escolhido sem alterar o problema em si.

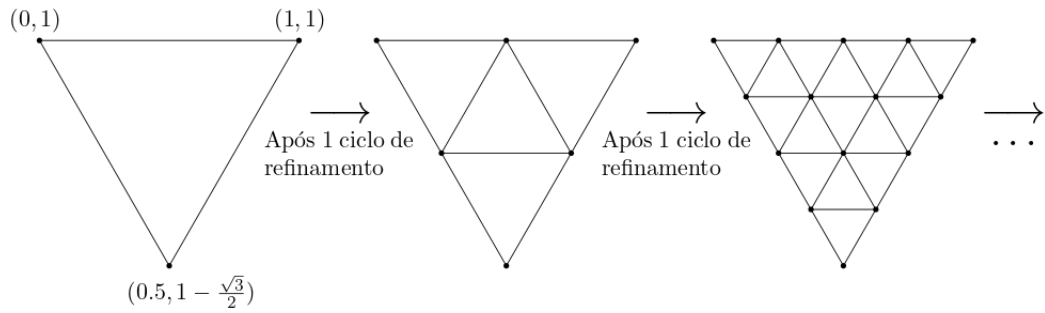


Figura 5.2: Estratégia utilizada para o refinamento da malha ortogonal. A partir do triângulo inicial denotado pelos seus respectivos vértices, cada ciclo de refinamento transforma cada triângulo da malha de entrada, denominado triângulo pai, em 4 triângulos filhos na malha de saída ao dividir ao meio cada aresta do triângulo pai

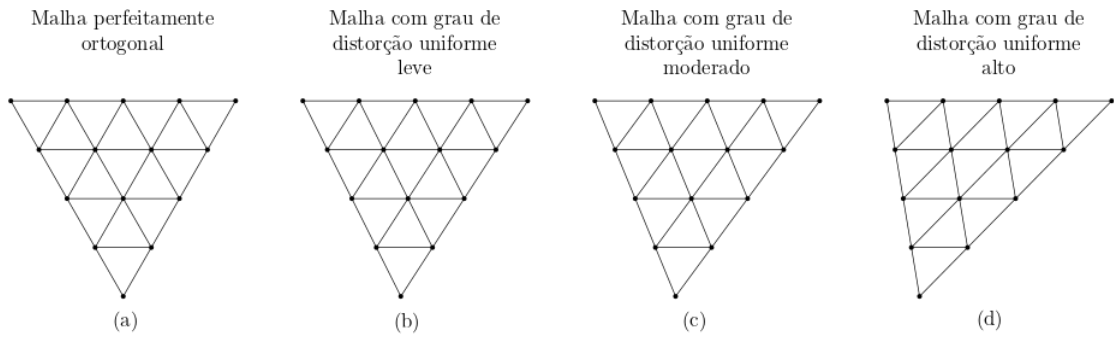


Figura 5.3: Ilustração do processo de distorção utilizado no presente trabalho. O grau de distorção obtido é proporcional ao deslocamento do vértice mais ao sul do domínio, este procedimento garante que todos os volumes possuam os mesmos índices D e Q . Esta imagem é apenas ilustrativa e não representa totalmente o procedimento realizado.

De acordo com as diretrizes elencadas por Salari e Knupp [78], Jacq [43] e Zhimming [90], o problema descrito pela EDP exposta na Figura 5.1 foi simulado para cada uma das malhas desenvolvidas, com seus respectivos índices de resolução h , de distorção D e qualidade Q . Os resultados obtidos pelos experimentos serão apresentados no próximo capítulo.

6 PROBLEMAS INVESTIGADOS E RESULTADOS OBTIDOS

6.1 PROBLEMA 1: AVALIAÇÃO DA ORDEM DE CONVERGÊNCIA E DE SENSIBILIDADE À DISTORÇÃO DA MALHA PARA A METODOLOGIA DE DISCRETIZAÇÃO APRESENTADA

6.1.1 Apresentação

O Problema 1 consiste na aplicação da metodologia exposta durante a Seção 5.4. Desta forma, o problema ilustrado pela Figura 5.1 foi resolvido utilizando cada uma das 20 malhas obtidas pelos procedimentos descritos naquela Seção. Os resultados obtidos por meio de malhas com $D = 0$ e $Q = 1$ foram tomados como referência, pois evidenciam o caso ideal onde a malha utilizada é ortogonal e não origina difusão cruzada.

A solução analítica do Problema 1 é apresentada por Maliska [58], dada por:

$$\phi(x, y) = \sin(\pi x) \frac{\sinh(\pi y)}{\sinh(\pi)}. \quad (6.1)$$

O sistema linear resultante da discretização da EDP governante foi resolvido pelo método de Gauss-Seidel com critérios de parada por número máximo de iterações $maxItGS = 1$ e de resíduo máximo $R_\infty \leq 10^{-8}$, sendo R_∞ definido por:

$$R_\infty = \max(|R_i|), \quad i \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (6.2)$$

onde R_i é a i -ésima posição do vetor resíduo R . Optou-se pelo valor 10^{-8} após algumas simulações utilizando 10^{-14} , em que não foi observado, nas condições exploradas, alterações nos valores obtidos para a ordem de convergência dentro da precisão utilizada. Desta forma, de modo a economizar um considerável custo computacional, decidiu-se pelo valor 10^{-8} .

6.1.2 Resultados

Os resultados obtidos pelos experimentos realizados de acordo com a metodologia expressa na Seção 5.4 podem ser observados com detalhes na Tabela 6.1. As Figuras 6.1 e 6.2 apresentam dois gráficos e uma malha cada: um gráfico da solução numérica para o problema e outro para a distribuição do Erro Relativo Percentual (ERP) entre o resultado numérico e os valores calculados por meio da solução analítica, bem como as malhas utilizadas em cada um dos casos.

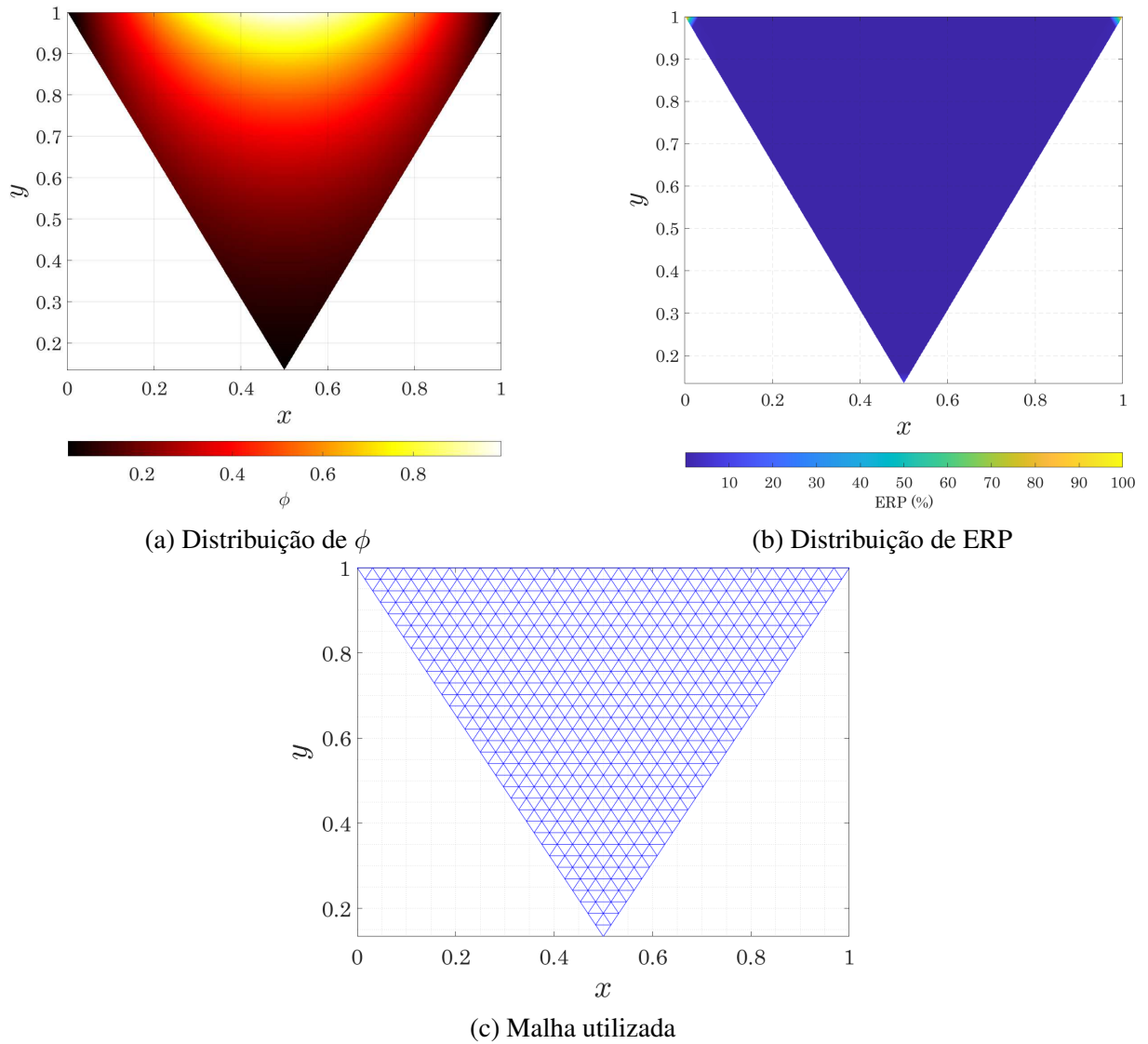


Figura 6.1: Gráficos da distribuição de ϕ e do ERP para o Problema 1, plotados com os resultados obtidos pela malha de 1024 volumes de controle e com distorção $D = 0$. Fonte: autoria própria.

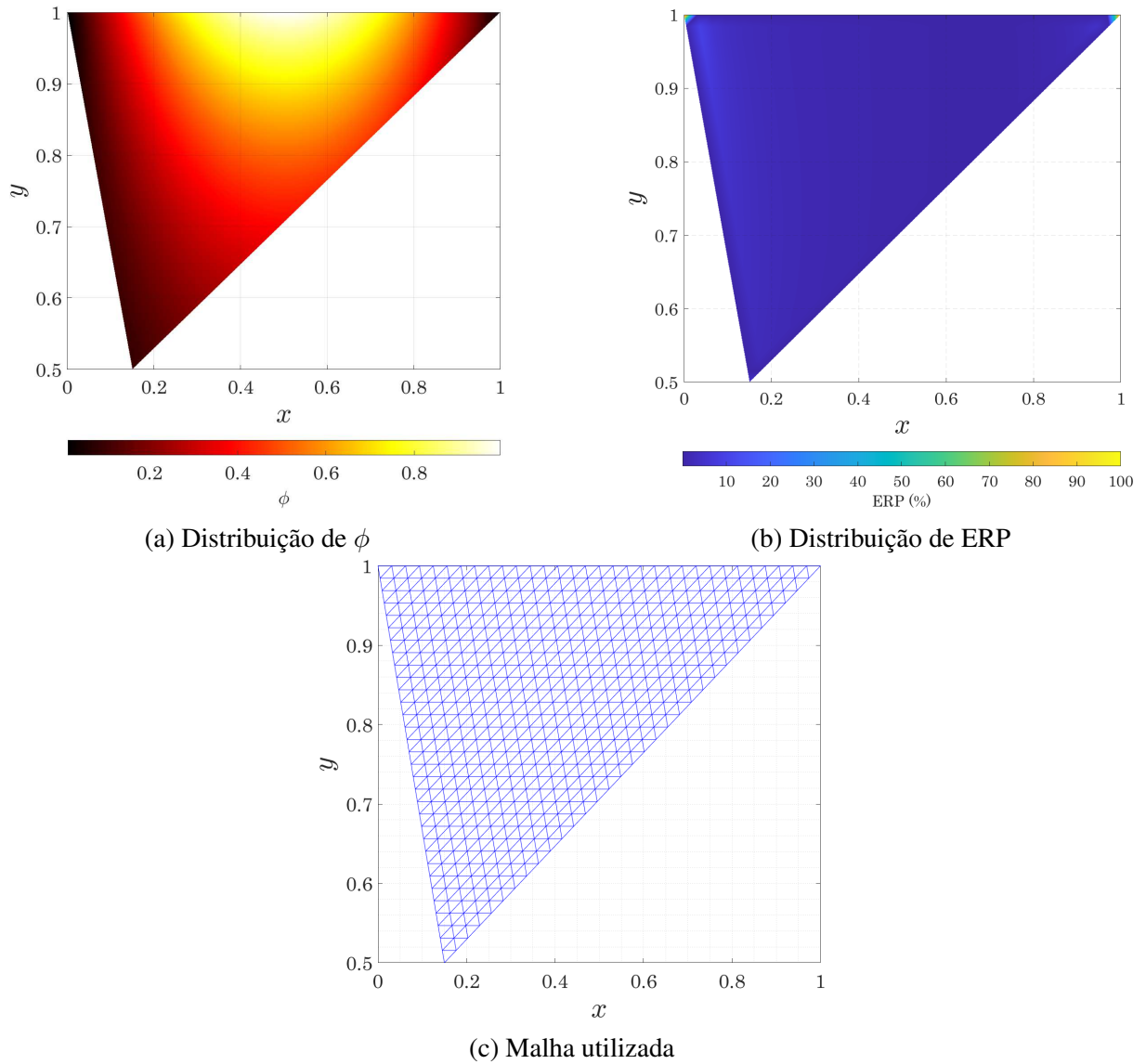


Figura 6.2: Gráficos da distribuição de ϕ e do ERP para o Problema 1, plotados com os resultados obtidos pela malha de 1024 volumes de controle e com distorção $D = 0.50$. Fonte: autoria própria.

Resultado 1 (a) - $D = 0$; $Q = 1$; $maxItGS = 1$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3290	2.1145E-02	8.9707E-02	**	**	**	**
16	32	0.1645	1.5432E-02	1.0005E-01	1.3702	0.8966	0.4544	-0.1574
64	125	0.0823	5.1048E-03	2.8419E-02	3.0230	3.5205	1.5960	1.8158
256	472	0.0411	1.3754E-03	7.3005E-03	3.7115	3.8927	1.8920	1.9608
1024	1735	0.0206	3.5316E-04	1.8412E-03	3.8946	3.9651	1.9615	1.9874
Resultado 1 (b) - $D = 0,025$; $Q = 0.998$; $maxItGS = 1$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3202	2.4378E-02	1.0890E-01	**	**	**	**
16	32	0.1601	1.7536E-02	1.0787E-01	1.3902	1.0095	0.4753	0.0137
64	125	0.0800	6.2781E-03	3.2262E-02	2.7932	3.3436	1.4819	1.7414
256	473	0.0400	1.9734E-03	9.1537E-03	3.1814	3.5245	1.6697	1.8174
1024	1747	0.0200	6.5226E-04	2.7731E-03	3.0255	3.3009	1.5972	1.7229
Resultado 1 (c) - $D = 0,05$; $Q = 0.995$; $maxItGS = 1$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3123	2.7044E-02	1.2598E-01	**	**	**	**
16	32	0.1561	1.9270E-02	1.1496E-01	1.4034	1.0959	0.4890	0.1321
64	125	0.0781	7.2498E-03	3.5766E-02	2.6580	3.2142	1.4103	1.6845
256	475	0.0390	2.4724E-03	1.0889E-02	2.9323	3.2846	1.5520	1.7157
1024	1747	0.0195	9.0306E-04	3.6593E-03	2.7378	2.9757	1.4531	1.5733
Resultado 1 (d) - $D = 0,25$; $Q = 0.861$; $maxItGS = 1$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.2500	4.0145E-02	2.2272E-01	**	**	**	**
16	32	0.1250	2.7026E-02	1.5679E-01	1.4854	1.4205	0.5709	0.5064
64	134	0.0625	1.1774E-02	5.6002E-02	2.2954	2.7997	1.1987	1.4853
256	511	0.0313	4.8845E-03	2.0889E-02	2.4105	2.6809	1.2693	1.4227
1024	1891	0.0156	2.1351E-03	8.6363E-03	2.2877	2.4187	1.1939	1.2743
Resultado 1 (e) - $D = 0,5$; $Q = 0.771$; $maxItGS = 1$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.2500	4.3443E-02	2.4975E-01	**	**	**	**
16	32	0.1250	2.7684E-02	1.6360E-01	1.5692	1.5266	0.6501	0.6103
64	140	0.0625	1.2211E-02	5.9692E-02	2.2671	2.7407	1.1809	1.4546
256	537	0.0313	5.5452E-03	2.4732E-02	2.2021	2.4136	1.1388	1.2711
1024	1992	0.0156	2.7077E-03	1.1466E-02	2.0479	2.1570	1.0342	1.1091

Tabela 6.1: Dados obtidos pelas simulações do problema apresentado pela Figura 5.1 para malhas com diferentes índices de refinamento h e fatores de distorção D . Fonte: autoria própria.

6.1.3 Discussões

A afirmação sobre a ordem de convergência levantada por Benkhaldoun, *et al.* [11] se mostrou verdadeira para o caso em que o problema foi resolvido em um domínio discretizado pela malha perfeitamente ortogonal, com $D = 0$. Observa-se pelos dados da Tabela 6.1 que, para este caso, a ordem de convergência $q \rightarrow 2$ quando $h \rightarrow 0$ para as duas normas analisadas: qE_2 e qE_{RMS} . Os fatores $QuocienteE_2$ e $QuocienteE_{RMS}$, que indicam a razão entre o erro da solução obtida com uma malha em relação à sua antecessora, corroboram com a hipótese, uma vez que a razão entre os erros E_2 e E_{RMS} quando $h \rightarrow 0$ tornam-se muito próximos de 4, indicando que ao dividir h pela metade, o erro associado à discretização cai por um fator de $(1/2)^2$. Portanto, os experimentos confirmam que o método é de segunda ordem $O(h^2)$.

Contudo, assim como observado por Davidson e Stolcis [23], Aftosmis e Gai-tonde [2] e Azevedo, Figueira da Silva e Strauss [8], a ordem de convergência foi consideravelmente afetada pelo grau de distorção das malhas utilizadas, que origina e impulsiona o termo de difusão cruzada. Tal efeito pôde ser percebido mesmo nas malhas com grau de distorção $D = 0.025$, considerado baixo, onde as ordens de convergência passam a ser 1.6 para a norma E_2 e 1.7 para a norma E_{RMS} . Este fato se acentua nas malhas mais distorcidas, chegando em uma razão entre os erros das malhas mais finas próxima de 2, conforme sinalizado pelos valores $QuocienteE_2$ e $QuocienteE_{RMS}$. Estes valores sinalizam uma melhora no resultado da solução numérica proporcional ao tamanho médio da malha, mas que é mais custosa computacionalmente do que o caso ideal, conforme pode-se notar pelo acréscimo de cerca de 15% no número de iterações necessárias para atingir o critério de convergência do Gauss-Seidel.

Ressalta-se os valores de ERP próximos de 0%, que evidenciam uma consistência da solução numérica em relação à solução analítica, mesmo no caso de malhas com maiores níveis de distorção.

6.2 PROBLEMA 2: AVALIAÇÃO DOS EFEITOS DA VARIAÇÃO DO LIMITE MÁXIMO DE ITERAÇÕES PARA O MÉTODO DE GAUSS-SEIDEL NO TEMPO COMPUTACIONAL E ERRO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

6.2.1 Apresentação

A EDP do Problema 1, ilustrada pela Figura 5.1, foi novamente estudada, desta vez com o objetivo de avaliar como a quantidade máxima de iterações permitidas para o algoritmo de Gauss-Seidel (variável $maxItGS$ no Algoritmo 1) afeta o tempo computacional necessário para que a convergência da solução numérica seja atingida (alterando a quantidade de iterações globais necessárias). Para tal, utilizou-se três malhas ortogonais (distorção $D = 0$ e qualidade $Q = 1$), compostas por 64, 256 e 1024 volumes. Para cada uma destas malhas, resolveu-se a EDP da Figura 5.1 variando o parâmetro $maxItGS$ entre os seguintes valores:

1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048.

6.2.2 Resultados

De modo a melhorar o significado estatístico dos valores de tempo mostrados na Tabela 6.2, os números exibidos são valores médios de 5 simulações arredondados. Não foi possível obter alguma documentação do *MATLAB*® que informasse a incerteza da função *tic toc*, utilizada para medir o tempo de processamento, contudo, conforme os resultados sugerem, este valor está próximo de 0.01s. Ressalta-se também que os erros E_2 e E_{RMS} se mantiveram fixos para cada malha, uma vez que o critério de parada R_∞ é o mesmo para todas as simulações e que o erro é função do índice de refinamento das malhas utilizadas e não do número de iterações permitidas.

Resultado 2 (a): $nT = 64$; $h = 0.0823$; $maxRes = 10^{-8}$				
maxItGS	Iterações	Tempo (s)	E_2	E_{RMS}
1	125	0.41165	5.1048E-03	2.8419E-02
2	65	0.22226	5.1048E-03	2.8419E-02
4	35	0.11890	5.1048E-03	2.8419E-02
8	23	0.09145	5.1048E-03	2.8419E-02
16	19	0.07978	5.1048E-03	2.8419E-02
32	18	0.07874	5.1048E-03	2.8419E-02
64	18	0.07853	5.1048E-03	2.8419E-02
128	18	0.08066	5.1048E-03	2.8419E-02
256	18	0.08166	5.1048E-03	2.8419E-02
512	18	0.07931	5.1048E-03	2.8419E-02
1024	18	0.08543	5.1048E-03	2.8419E-02
2048	18	0.08287	5.1048E-03	2.8419E-02
Resultado 2 (b): $nT = 256$; $h = 0.0411$; $maxRes = 10^{-8}$				
maxItGS	Iterações	Tempo (s)	E_2	E_{RMS}
1	472	3.62970	1.3754E-03	7.3005E-03
2	238	1.67810	1.3754E-03	7.3005E-03
4	121	0.95762	1.3754E-03	7.3005E-03
8	62	0.45339	1.3754E-03	7.3005E-03
16	35	0.35129	1.3754E-03	7.3005E-03
32	22	0.18894	1.3754E-03	7.3005E-03
64	19	0.19791	1.3754E-03	7.3005E-03
128	18	0.15496	1.3754E-03	7.3005E-03
256	18	0.15120	1.3754E-03	7.3005E-03
512	18	0.14761	1.3754E-03	7.3005E-03
1024	18	0.14934	1.3754E-03	7.3005E-03
2048	18	0.14340	1.3754E-03	7.3005E-03
Resultado 2 (c): $nT = 1024$; $h = 0.0206$; $maxRes = 10^{-8}$				
maxItGS	Iterações	Tempo (s)	E_2	E_{RMS}
1	1736	42.8360	3.5320E-04	1.8413E-03
2	869	20.4580	3.5320E-04	1.8413E-03
4	436	10.4258	3.5320E-04	1.8413E-03
8	219	5.2125	3.5320E-04	1.8413E-03
16	111	2.8081	3.5320E-04	1.8413E-03
32	58	1.6744	3.5320E-04	1.8413E-03
64	33	0.9521	3.5320E-04	1.8413E-03
128	21	0.5267	3.5320E-04	1.8413E-03
256	19	0.5469	3.5320E-04	1.8413E-03
512	18	0.5352	3.5320E-04	1.8413E-03
1024	18	0.5032	3.5320E-04	1.8413E-03
2048	18	0.5224	3.5320E-04	1.8413E-03

Tabela 6.2: Resultados do experimento realizado para avaliação do efeito da variação do limite de iterações para o método de Gauss-Seidel no problema definido pela Figura 5.1. Fonte: autoria própria.

6.2.3 Discussões

O tempo necessário para que o programa retorne a solução final mostrou-se diretamente proporcional à quantidade de iterações globais executadas. Tais iterações são compostas por diversas etapas, conforme mostrado no Algoritmo 1, sendo uma delas a resolução do sistema linear pelo método de Gauss-Seidel. A Tabela 6.2 demonstra que o número de iterações máximas permitidas para o algoritmo de Gauss-Seidel está correlacionado com o tempo necessário para a convergência da solução numérica de forma inversamente proporcional. Isto ocorre pois a condição para que uma determinada solução ϕ^{it} seja aceita é baseada na satisfação do critério $R^{it} < \max Res$, sendo R^{it} calculado com os parâmetros relativos à iteração it .

Há uma melhora significativa de desempenho ao permitir-se que o Gauss-Seidel execute várias iterações antes de atualizar as variáveis explícitas da iteração global. A razão por trás deste fato é simples: uma melhor estimativa (construída após várias iterações do Gauss-Seidel) na próxima iteração global faz com que os resultados corretos sejam obtidos de forma mais rápida, isto é, requerendo menos iterações globais, dispensando a execução completa do *script* para atualizar o sistema linear a cada nova resposta do Gauss-Seidel e reduzindo significativamente o custo computacional envolvido.

Por outro lado, observa-se que este ganho é limitado, pois a partir de um certo número de iterações $\max ItGS$, o Gauss-Seidel é interrompido pelo critério interno de convergência, ou seja, a tolerância para o sistema linear que foi fornecido como entrada fora satisfeita, logo, torna-se indiferente a possibilidade de se executar novas iterações. Pode-se observar dos dados expostos na Tabela 6.2 que o valor ótimo do número de iterações $\max ItGS$ varia de acordo com o número de incógnitas no sistema linear gerado pela discretização do problema, e proporcional ao número de volumes de controle que compõem a malha.

6.3 PROBLEMA 3: ESTUDO DA ORDEM DE CONVERGÊNCIA PARA UMA EDPE NÃO HOMOGÊNEA E COM TERMO FONTE NÃO LINEAR

6.3.1 Apresentação

Considerando o mesmo domínio triangular utilizado no Problema 1 (Seção 6.1), dado por $\Omega = \{(0, 1); (0.5, 1 - \sqrt{0.75}); (1, 1)\} \in \mathbb{R}^2$, bem como os mesmos procedimentos para o estudo da ordem de convergência, desta vez resolveu-se uma EDPE não homogênea com termo fonte não linear, dependente de ϕ de forma exponencial, obtida por meio do Método das Soluções Fabricadas e expressa pela equação:

$$0.1 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial^2 y} \right) = -\frac{1}{2} e^{-\phi} - 0.2 \pi^2 \sin(\pi x) \sin(\pi y) + \frac{1}{2} e^{-\sin(\pi x) \sin(\pi y)}, \quad (6.3)$$

com condições de contorno de Dirichlet em todas as três fronteiras, sendo a equação para os valores de $\phi|_{\partial\Omega}$ dada como:

$$\phi|_{\partial\Omega} = \sin(\pi x) \sin(\pi y), \quad (6.4)$$

que também é a solução analítica do problema.

Linearizando o termo fonte da Equação (6.3) de acordo com os procedimentos abordados no Capítulo 3.1 tem-se:

$$S_{C_i} = \frac{1}{2}e^{-\phi_i^{(it-1)}} + 0.2\pi^2 \sin(\pi x_i) \sin(\pi y_i) - \frac{1}{2}e^{-\sin(\pi x_i) \sin(\pi y_i)}$$

e (6.5)

$$S_{P_i} = -\frac{1}{2}e^{-\phi_i^{(it-1)}}.$$

As simulações foram resolvidas com parâmetros $maxItGS = 10000$ e resíduo máximo $R_\infty \leq 10^{-8}$.

6.3.2 Resultados

Os resultados da análise de ordem de convergência do Problema 3 foram divididos em dois subresultados: Resultado 3(a) e Resultado 3(b), de modo que os dados do Resultado 3(a) foram obtidos com uma malha perfeitamente ortogonal, $D = 0$ e $Q = 1$, enquanto que os dados do Resultado 3(b) foram obtidos para malhas geradas pelo *software Distmesh*, que gera malhas com volumes de controle de formatos aleatórios, e são caracterizada por níveis médios de distorção $D_{méd.}$ e qualidade $Q_{méd.}$ variados. As Tabelas 6.3 e 6.4 apresentam, respectivamente, os resultados para cada uma das simulações. Os gráficos com as distribuições de ϕ e ERP para cada caso são dadas pelas Figuras 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6, nesta ordem. As malhas utilizadas para o Resultado 3(b) são mostradas na Figura 6.7.

Resultado 3 (a): $D = 0$; $Q = 1$; $\Gamma = 0.1$; $\max It = 10000$; $\max ItGS = 10000$; $\max Res = 10^{-8}$

N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente	Quociente	q_2	q_{RMS}
					E_2	E_{RMS}		
4	4	0.3290	3.4119E-02	2.8667E-01	**	**	**	**
16	15	0.1645	4.9228E-02	1.8569E-01	0.6931	1.5438	-0.5289	0.6265
64	16	0.0823	1.6696E-02	5.1101E-02	2.9485	3.6338	1.5600	1.8615
256	16	0.0411	4.5953E-03	1.2716E-02	3.6333	4.0186	1.8612	2.0067
1024	17	0.0206	1.1939E-03	3.1393E-03	3.8490	4.0506	1.9445	2.0182
4096	17	0.0103	3.0380E-04	7.7839E-04	3.9299	4.0331	1.9745	2.0119

Tabela 6.3: Dados obtidos pelo procedimento de análise de convergência para a EDPE dada pela Equação (6.3) definida em um domínio triangular $\Omega = \{(0, 1); (0.5, (1 - \sqrt{0.75})); (1, 1)\} \in \mathbb{R}^2$ discretizado por uma malha não estruturada triangular ortogonal, isto é, $D = 0$ e $Q = 1$. Fonte: autoria própria.

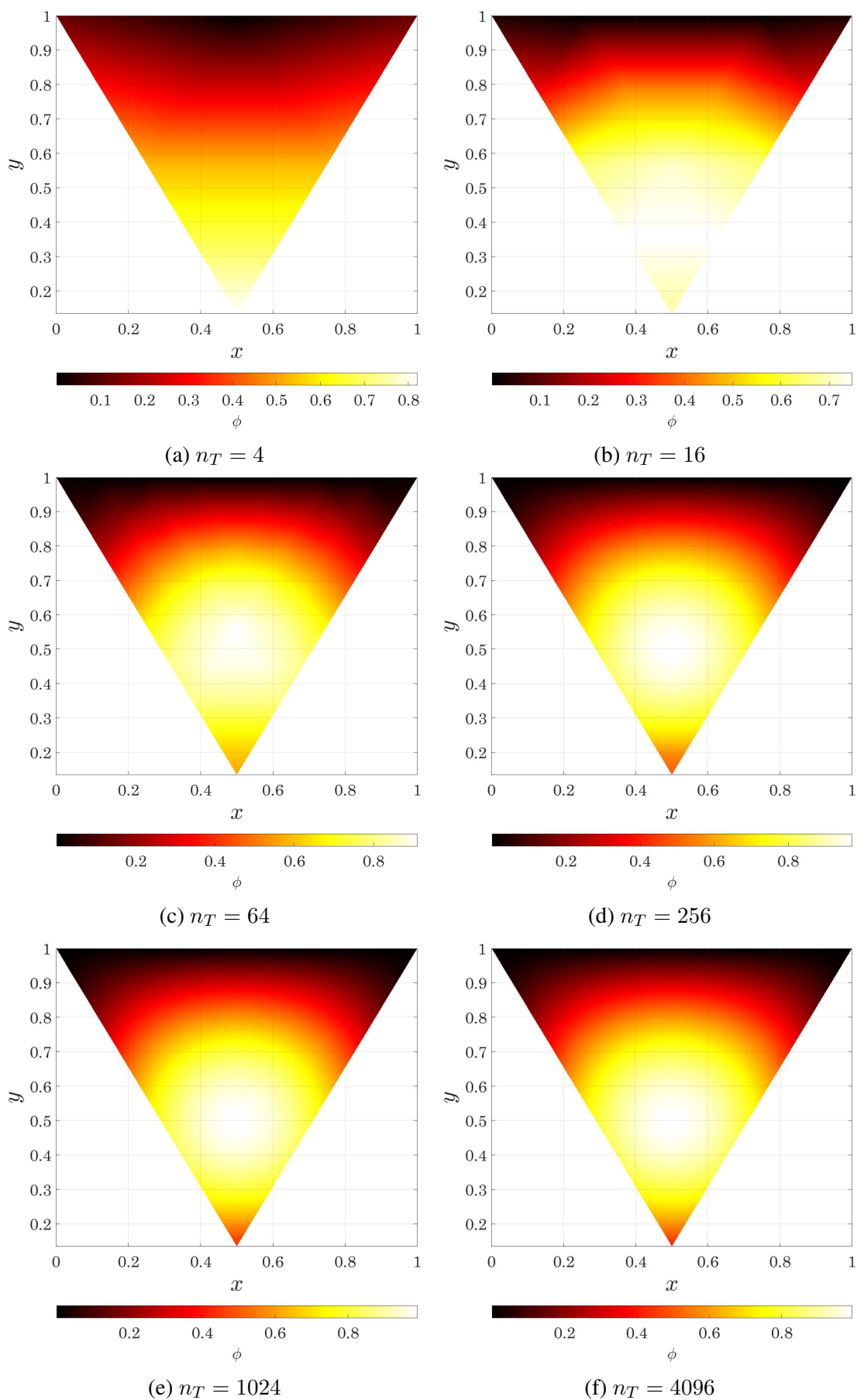


Figura 6.3: Distribuição de ϕ para o Problema 3(a) em malhas ortogonais com números variados de volumes n_T . Fonte: autoria própria.

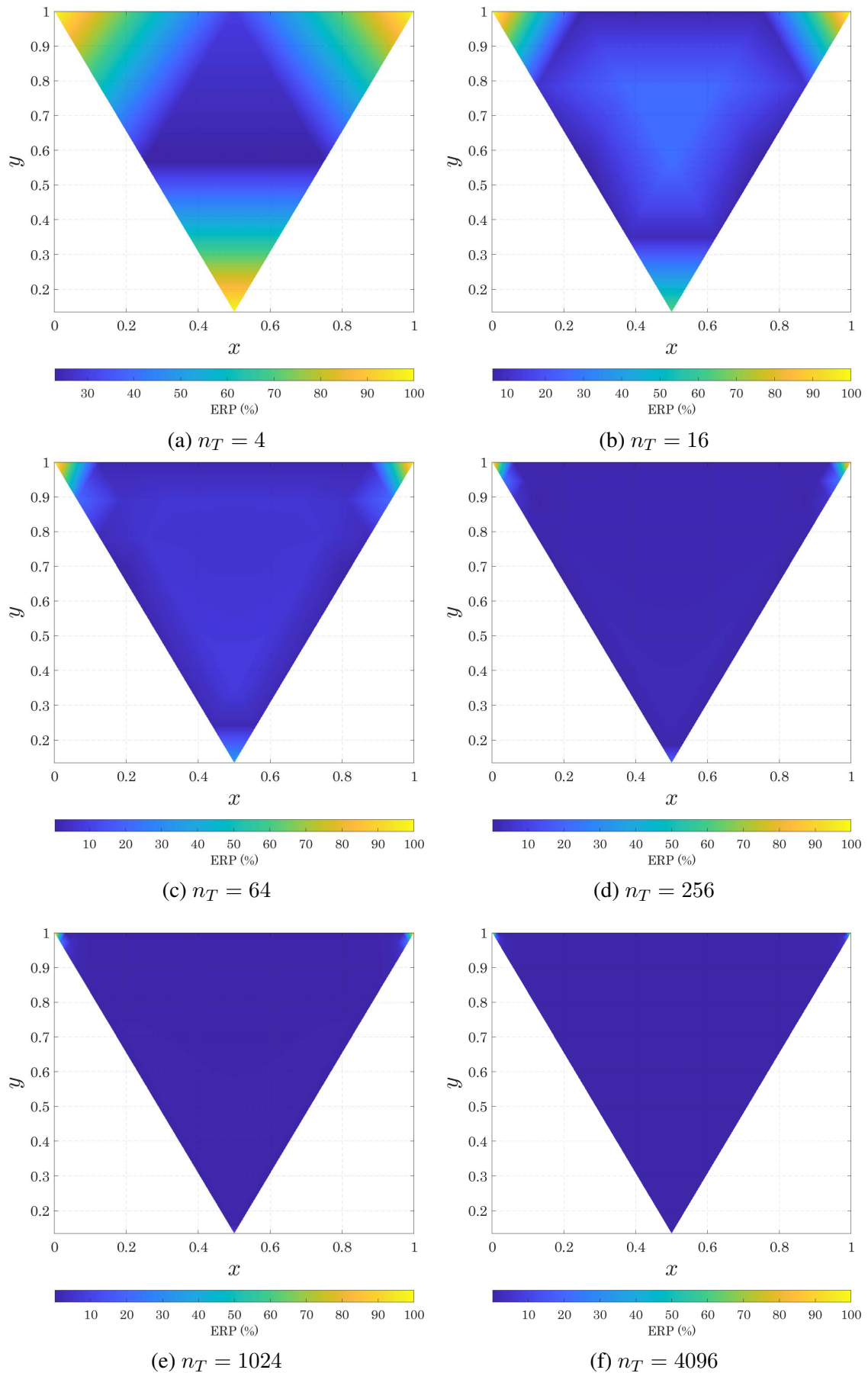


Figura 6.4: Distribuição do ERP para o Problema 3(a) em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

Resultado 3 (b): Malha <i>Distmesh</i>; $\Gamma = 0.1$; $maxIt = 10000$; $maxItGS = 10000$; $maxRes = 10^{-8}$										
N° de volumes	h	$D_{méd}$	$Q_{méd}$	Iterações	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	q_2	q_{RMS}
52	0.0913	1.0116E-01	9.7090E-01	16	2.5419E-02	7.7804E-02	**	**	**	**
259	0.0409	3.3001E-02	9.9215E-01	17	5.7044E-03	1.5622E-02	4.4560	4.9804	1.8613	1.9999
1027	0.0205	1.6127E-02	9.9804E-01	17	1.4147E-03	3.7089E-03	4.0322	4.2120	2.0244	2.0877
4228	0.0101	1.2700E-02	9.9943E-01	17	3.5544E-04	9.0666E-04	3.9801	4.0907	1.9522	1.9909

Tabela 6.4: Dados da análise de convergência do Problema 3b, onde as malhas utilizadas foram geradas pelo *Distmesh* e possuem distorções e qualidades médias ($D_{méd}$. e $Q_{méd}$.) variáveis. Fonte: autoria própria.

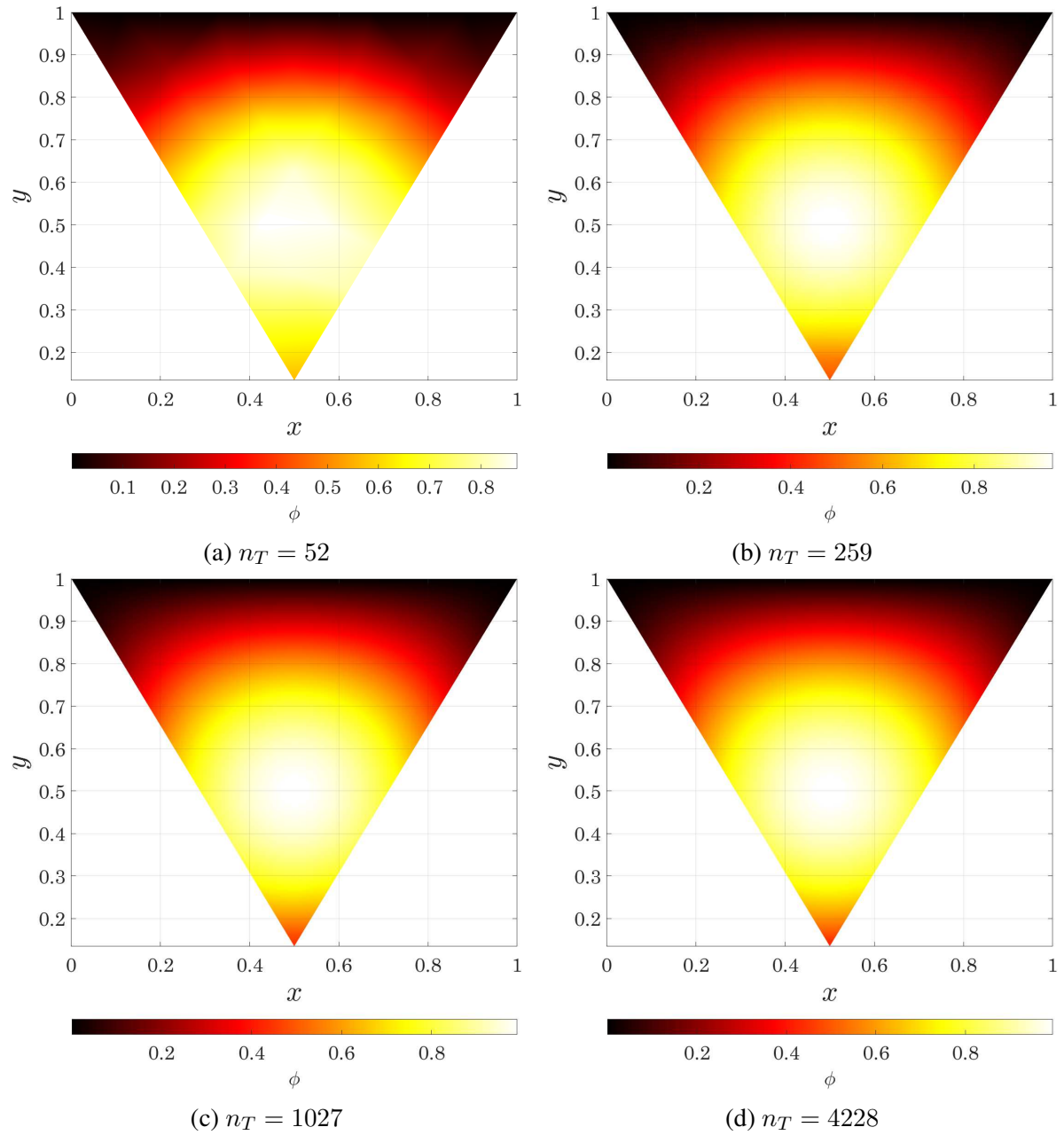


Figura 6.5: Distribuição de ϕ para o Problema 3(b) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

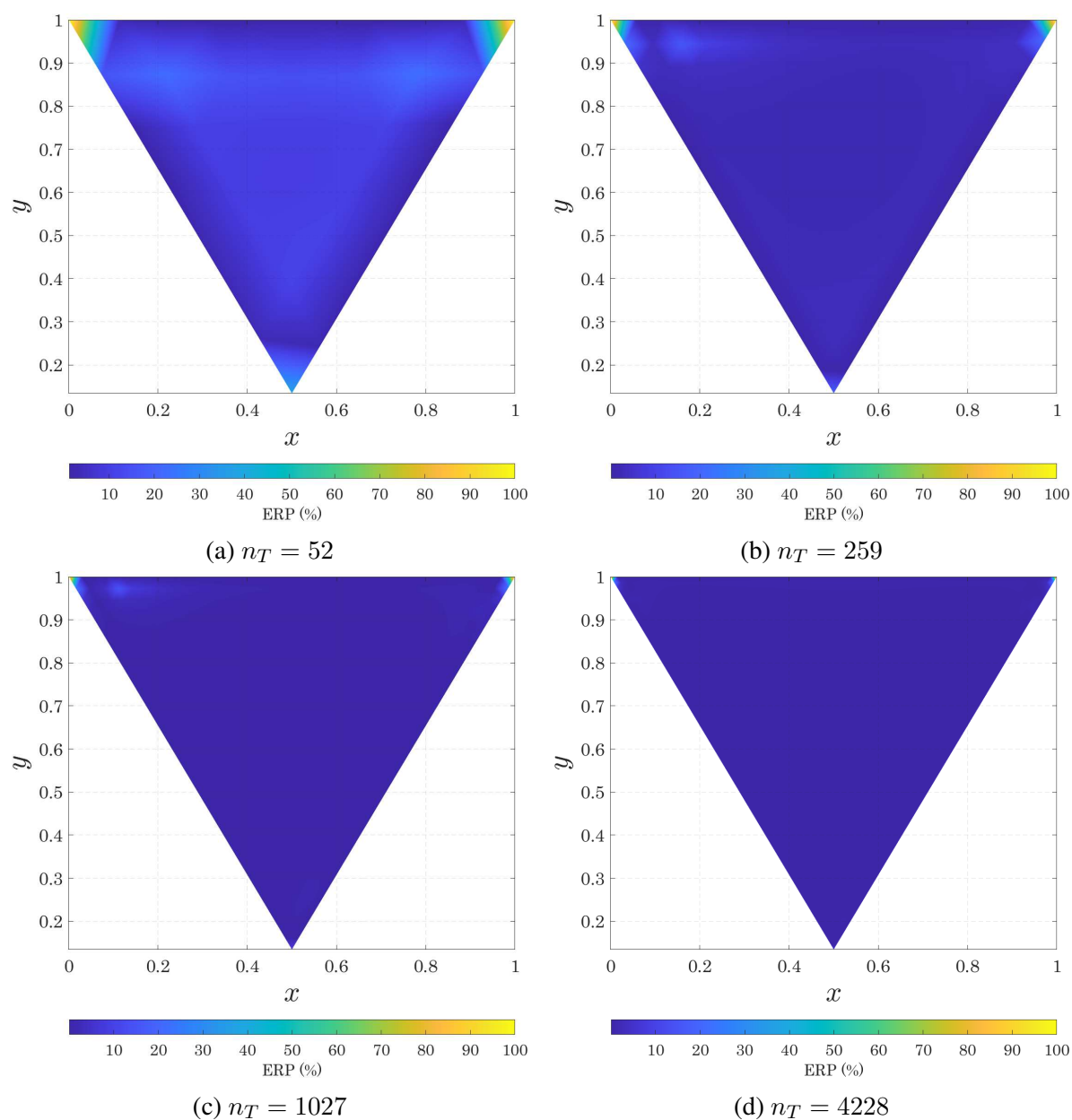


Figura 6.6: Distribuição de ERP para o Problema 3(b) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

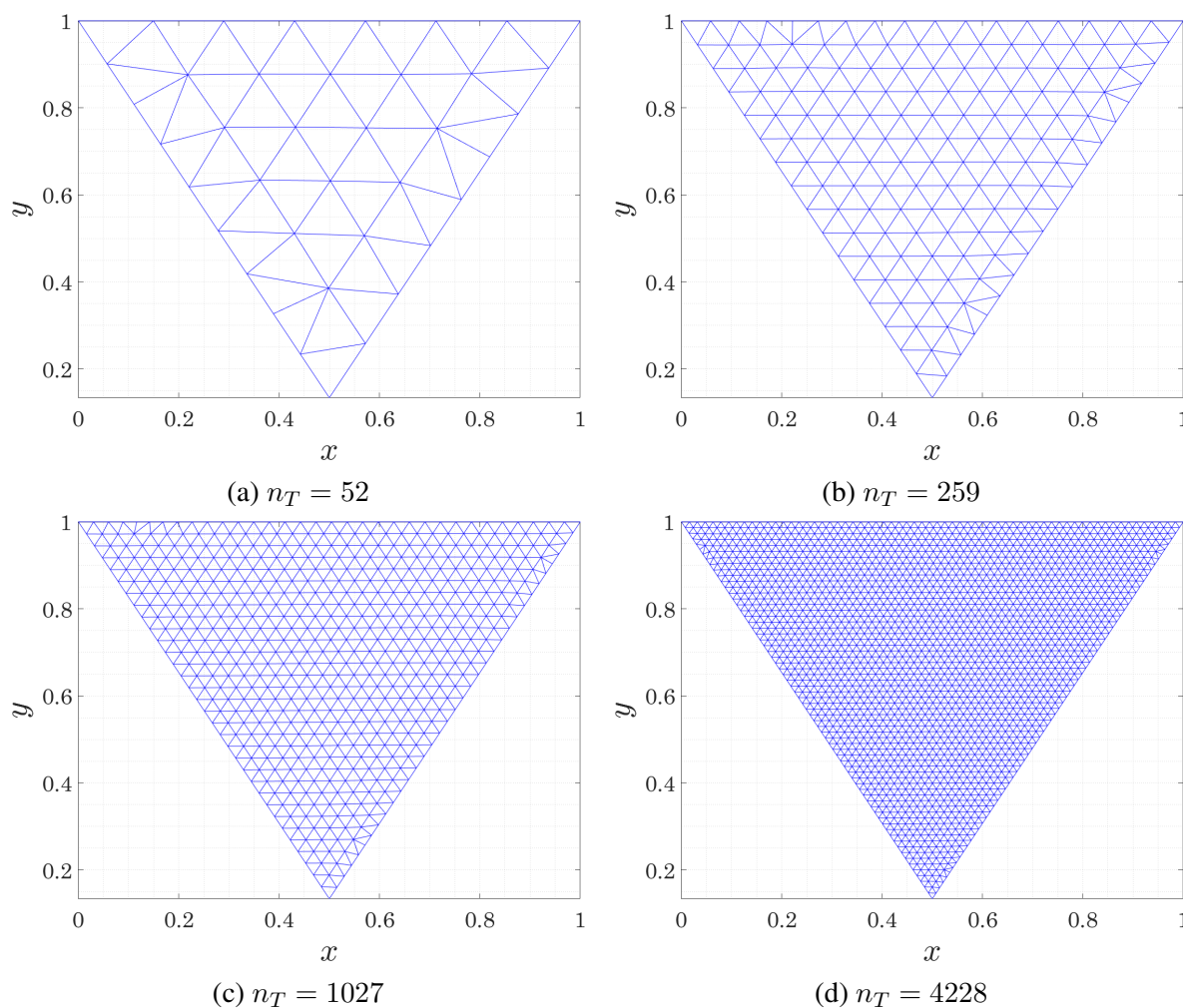


Figura 6.7: Malhas utilizadas para as simulações do Problema 3(b). Fonte: autoria própria.

6.3.3 Discussões

De acordo com os dados expostos na Tabela 6.3, observa-se claramente que, tal como no Problema 1, a ordem de convergência teórica $O(h^2)$ também fora atingida, o que corrobora a hipótese inicial, de que na ausência de distorções nos volumes da malha os efeitos da difusão cruzada não se manifestam e a ordem de convergência permanece inalterada, mesmo em situações onde o termo fonte é dependente de ϕ . Neste problema, a discretização utilizada e a linearização do termo fonte se mostraram capazes de representar a solução analítica de forma fidedigna, conforme pode-se observar também pelos gráficos obtidos para a distribuição de ϕ e do ERP para o problema em questão.

Por sua vez, os dados exibidos na Tabela 6.4 também não evidenciam o efeito da difusão cruzada nos erros de cada solução e, por consequência, na ordem de convergência do problema. Um ponto a ser notado neste caso é que, como o *Distmesh* não permite que se construa malhas com parâmetros D e Q definidos, o refinamento da malha leva ao aparecimento de volumes de controle com melhores índices de qualidade, conforme pode-se observar nas co-

lunas $D_{\text{méd}}$ e $Q_{\text{méd}}$, uma vez que a diminuição do tamanho médio de cada volume permite uma maior acomodação de elementos ortogonais. Por esta maneira, apesar dos números da ordem de convergência serem próximos dos valores teóricos, seguramente há um pequeno efeito dos termos de difusão cruzada, especialmente nas malhas mais grossas, mas que não foi percebido dentro dos limites de precisão avaliados. Ressalta-se também que os valores observados para q_2 e q_{RMS} não foram obtidos por meio de malhas cujos volumes possuem todos os mesmos níveis de qualidade e distorção, logo, pode-se inferir que a ordem de convergência deve ser ligeiramente menor do que os números observados, uma vez que o refinamento, além de aumentar o número de volumes, acaba por introduzir volumes de melhor qualidade.

Sobre o custo computacional envolvido, pode-se afirmar que não houve um aumento considerável de iterações para a obtenção das soluções finais de cada simulação.

Ao se observar as figuras de distribuição de ϕ e ERP obtidos para cada uma das simulações do Resultado 3(b), pode-se identificar que os maiores níveis de erro concentram-se nos vértices das pontas (tal como nos gráficos de ERP do Resultado 3(a)), uma vez que os valores de ϕ nestes locais são atualizados com uma média dos valores de ϕ avaliado no meio das arestas que criam tais vértices. Logo, é improvável que o valor coincida com o valor analítico, mas o erro diminui de modo muito significativo com a diminuição do tamanho dos elementos da malha.

6.4 PROBLEMA 4: ORDEM DE CONVERGÊNCIA DE UMA EDP ELÍPTICA NÃO HOMO- GÊNEA COM TERMO FONTE CONSTANTE E CONDIÇÕES DE CONTORNO MISTAS

A aplicação das condições de contorno do tipo Neumann ou Robin não é tão simples quanto as do tipo Dirichlet. A dificuldade, na maioria dos casos, é a localização dos nós internos dos volumes de fronteira, de tal forma que o gradiente normal à superfície não pode ser definido diretamente. Entretanto, por meio do esquema iterativo apresentado na Seção 3.3 as condições de contorno que envolvem o fluxo da grandeza ϕ podem ser aplicadas. Para testar a capacidade do código em lidar com problemas que apresentam diversas condições de contorno, resolveu-se um problema de distribuição de temperatura em regime permanente em uma placa sujeita à condições de contorno mistas, encontrado em Mackowski [56] e apresentado em sequência.

6.4.1 Apresentação

Considere um domínio bidimensional quadrado, com coeficiente de difusão constante $\Gamma = 1$. A superfície em $y = 0$ é mantida à uma magnitude constante ϕ_1 , enquanto que na fronteira oposta, $y = L$, ocorre um fenômeno convectivo com coeficiente h_c e ϕ_∞ . A superfície em $x = 0$ é adiabática, e um fluxo uniforme q_0'' é aplicado em $x = L$. Por último, uma fonte de geração uniforme, de magnitude q_0''' atua dentro da região. A partir destas informações, pode-se modelar o problema da maneira ilustrada pela Figura 6.8 adiante:

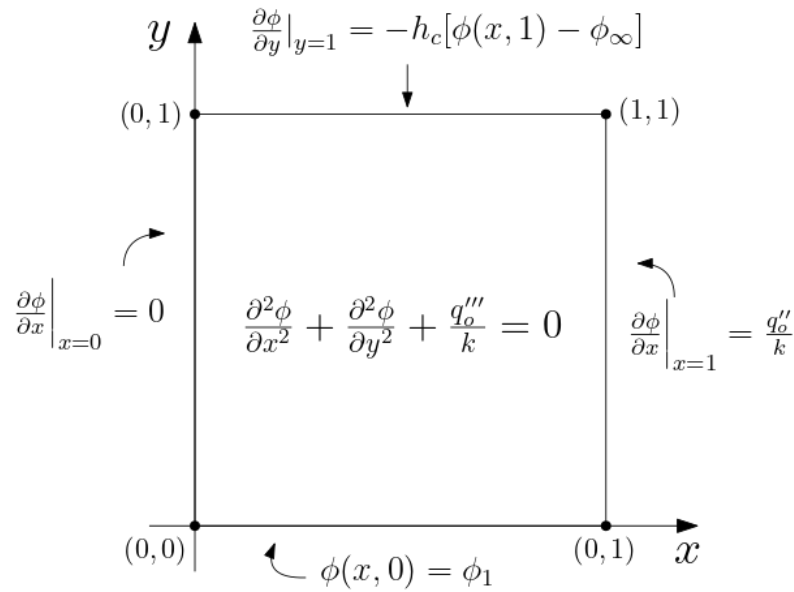


Figura 6.8: Ilustração do Problema 4. Ao centro apresenta-se a EDP Elíptica a ser resolvida, enquanto que as condições de contorno são definidas para cada fronteira do domínio. Fonte: autoria própria.

Nestas condições, a solução analítica para este problema, apresentada por Mackowski [56], é dada por:

$$\bar{\phi} = 1 - \frac{\bar{q}'''}{2} \bar{y}^2 + \bar{y} \left(\frac{(2 + 2Bi)\bar{q}'''}{Bi + 2} - Bi \right) + 2\bar{q}'' \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[1 - \cos(\lambda_n)] \cosh(\lambda_n \bar{x}) \sin(\lambda_n \bar{y})}{\lambda_n \sinh(\lambda_n) [\lambda_n - \cos(\lambda_n) \sin(\lambda_n)]} \quad (6.6)$$

em que:

$$\lambda_n \cos(\lambda_n) + Bi \sin(\lambda_n) = 0, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.7)$$

é a equação dos autovalores da equação característica adimensional do problema,

$$Bi = \frac{h_c L}{k} \quad (6.8)$$

é o número de Biot¹, os valores adimensionais $\bar{\phi}$, \bar{q}'' e \bar{q}''' são dados respectivamente por

$$\bar{\phi} = \frac{\phi - \phi_\infty}{\phi_1 - \phi_\infty}, \quad \bar{q}'' = \frac{\bar{q}_0'' L}{k(\phi_1 - \phi_\infty)} \quad \text{e} \quad \bar{q}''' = \frac{\bar{q}_0''' L^2}{k(\phi_1 - \phi_\infty)}; \quad (6.9)$$

e, finalmente, os valores adimensionais \bar{x} e \bar{y} , são tais que

$$\bar{x} = \frac{x}{L} \quad \text{e} \quad \bar{y} = \frac{y}{L}. \quad (6.10)$$

¹Em referência ao físico francês Jean-Baptiste Biot (1774~1862) [53].

A análise de convergência para este problema foi realizada adotando-se os seguintes parâmetros: $L = 1$; $\phi_1 = 25$; $k = 1$; $\phi_\infty = 50$; $h_c = 5$; $q_0'' = 2$; $q_0''' = 4$. Convertendo-os de acordo com o formato da equação utilizada para atribuir as condições de contorno tem-se os seguintes *inputs* apresentados pela Tabela 6.5:

Inputs das condições de contorno			
Fronteira	α	β	γ
Norte	10^{100}	25	0
Sul	0	0	-2
Leste	5	50	0
Oeste	0	0	0

Tabela 6.5: *Inputs* para as condições de contorno de acordo com os parâmetros apresentados pelo problema. Fonte: autoria própria.

6.4.2 Resultados

Para garantir uma boa precisão do processo de verificação, a avaliação do somatório presente na solução analítica foi realizada considerando-se os primeiros 500 termos, de modo que a ordem de grandeza dos termos truncados fosse menor que 10^{-16} . Os resultados obtidos para o problema estão apresentados na Tabela 6.6, enquanto que os gráficos para as soluções numéricas e os ERPs de cada uma destas são dados pelas Figuras 6.9 e 6.10. As malhas utilizadas para cada uma das simulações são mostradas na Figura 6.11.

Resultado 4: Problema com condições de contorno mistas; $maxItGS = 10000$; $maxRes = 10^{-8}$										
Nº de volumes	h	$D_{méd}$	$Q_{méd}$	Iterações	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	q_2	q_{RMS}
16	0.2500	2.3032E-01	9.0948E-01	78	2.4363E-01	1.2001E-02	**	**	**	**
64	0.1250	1.8722E-01	9.4602E-01	157	1.1634E-01	6.3425E-03	2.0941	1.8922	1.0663	0.9200
256	0.0625	9.6604E-02	9.7641E-01	306	1.0509E-01	3.5240E-03	1.1071	1.7998	0.1467	0.8478
1078	0.0305	5.1104E-02	9.8870E-01	697	6.3333E-02	1.8854E-03	1.6593	1.8691	0.7045	0.8701
4441	0.0150	2.8882E-02	9.9535E-01	1283	3.2398E-02	9.2314E-04	1.9548	2.0424	0.9469	1.0088

Tabela 6.6: Dados obtidos a partir das simulações do problema definido na Seção 6.4. Fonte: autoria própria.

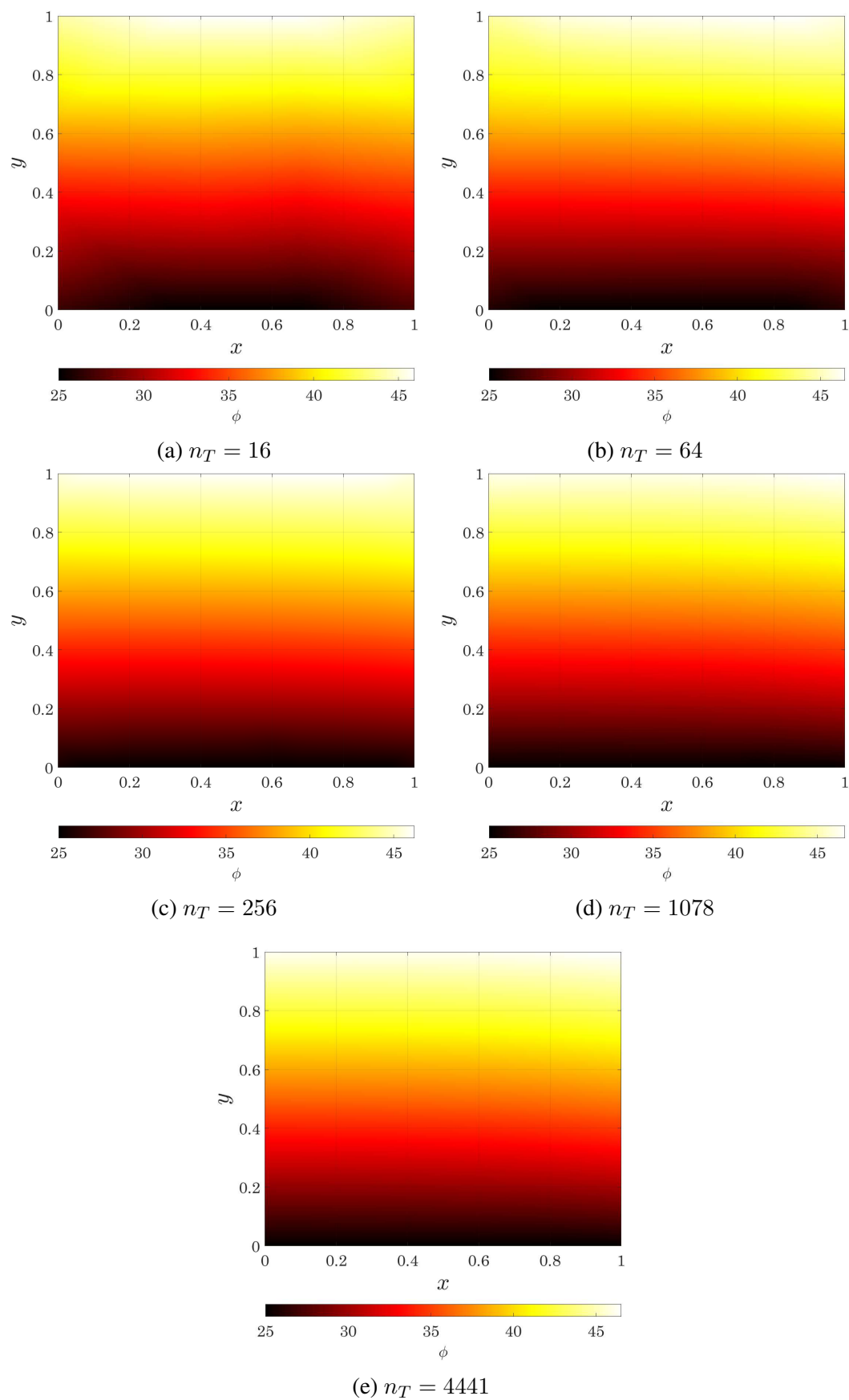


Figura 6.9: Gráficos da distribuição de ϕ para o Problema 4 em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

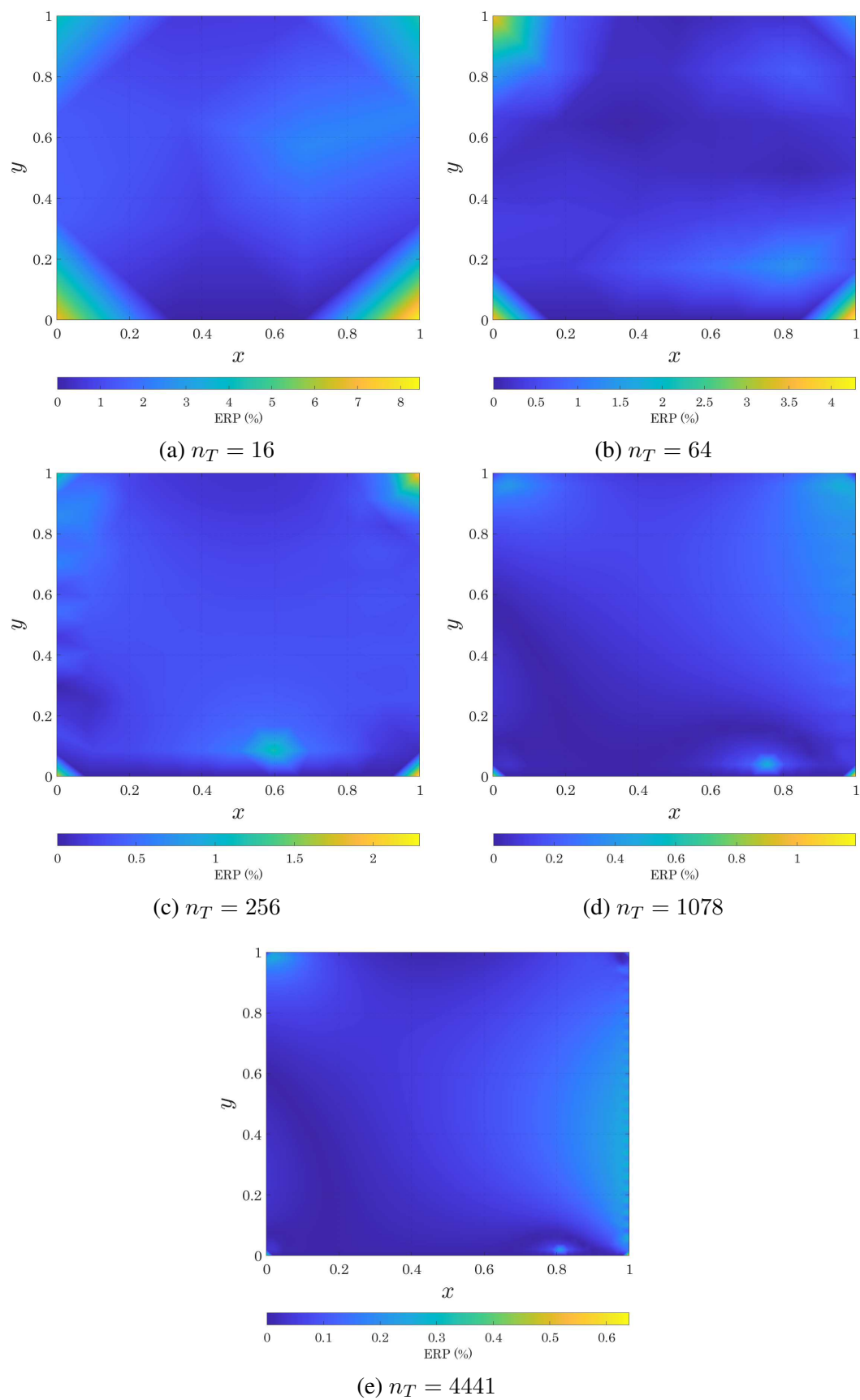


Figura 6.10: Gráficos da distribuição de ERP para o Problema 4 em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

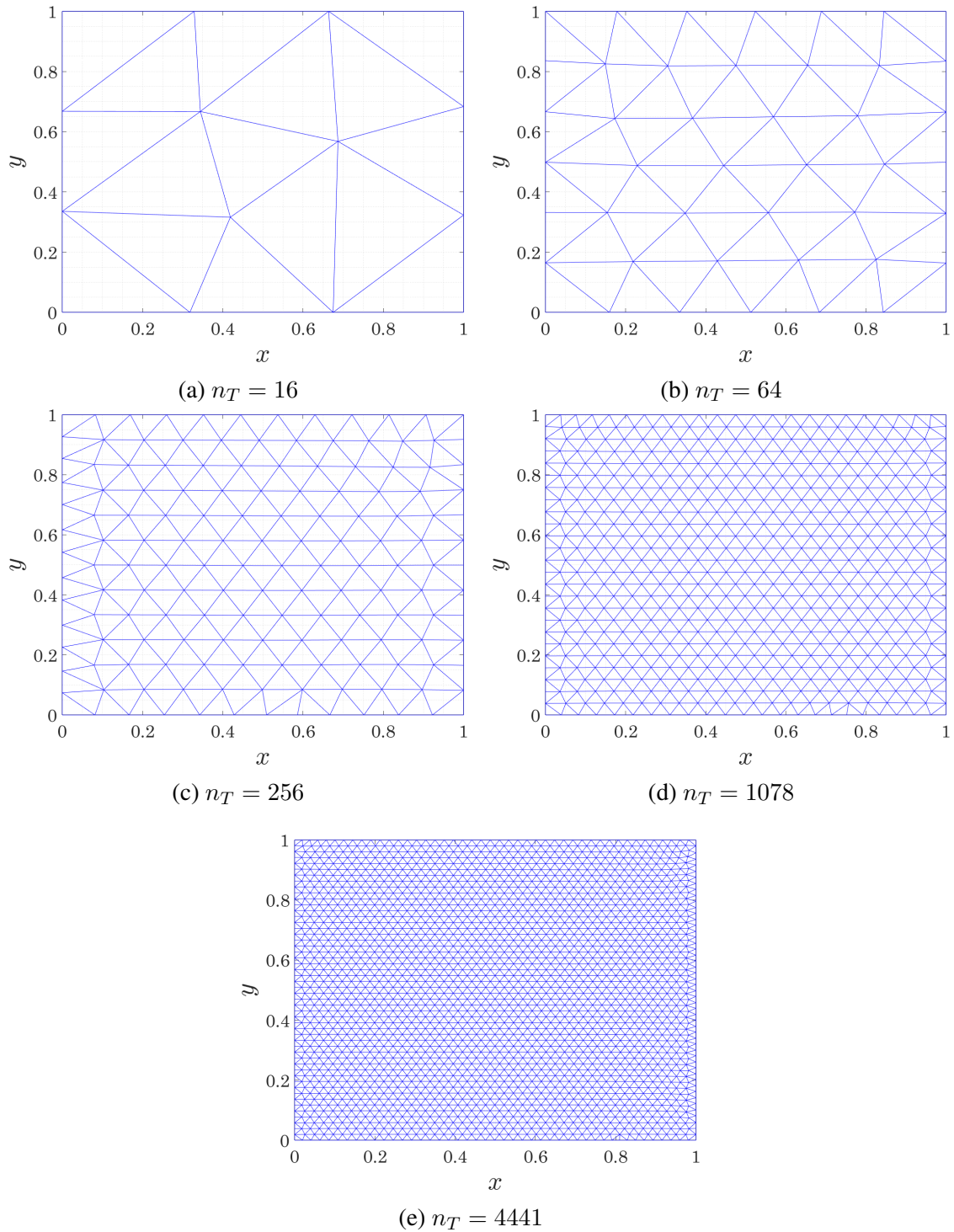


Figura 6.11: Malhas utilizadas para as simulações do Problema 4. Fonte: autoria própria.

6.4.3 Discussões

Observa-se que as soluções obtidas possuem erros com ordens de grandeza semelhante aos problemas apresentados anteriormente, o que mostra que o esquema de implementação das condições de contorno mistas foi bem sucedido. O estudo da ordem de convergência foi comprometido pela incapacidade do *Distmesh* gerar malhas com graus de distorções

idênticos, logo, ao se requisitar uma malha com o dobro de volumes (aproximadamente), a distorção média da malha mais refinada foi, em geral, menor (até em uma ordem de grandeza) que a da antecessora. Esta dificuldade diminui a precisão dos dados a respeito da ordem de convergência do método para este problema, de modo que os valores reais são, ligeiramente menores que os apresentados pela Tabela 6.6. Por outro lado, pode-se observar que para as malhas mais refinadas, o valor observado é próximo do valor teórico $O(h)$. Isto pode ser creditado ao fato de que os índices de qualidades destas malhas são muito próximo aos valores ideais. É importante ressaltar que não seria possível observar ordens de convergência $O(h^2)$, uma vez que o esquema implementado para a atribuição das condições de contorno dos tipos Neumann e Robin cria um gargalo de ordem $O(h)$ na melhora da solução numérica.

Todavia, de modo geral os resultados obtidos com malhas refinadas oferecem erros baixos e são confiáveis, tal como pode ser observado nos gráficos da solução numérica na Figura 6.9 e do ERP na Figura 6.10. Nota-se que nos pontos onde o ERP se concentra, especialmente nas malhas mais grossas, observa-se nitidamente a ocorrência de triângulos distorcidos, como os ilustrados na Figura 2.12 e conforme esperado de acordo com a literatura.

6.5 PROBLEMA 5 - ORDEM DE CONVERGÊNCIA DE UM PROBLEMA DE DIFUSÃO EM UM DOMÍNIO COM INTERFACE ENTRE MEIOS DISTINTOS

6.5.1 Apresentação

Em busca de atestar a capacidade do código desenvolvido em lidar com variações do coeficiente de difusão, buscou-se resolver um problema onde houvesse uma variação abrupta desta propriedade, a exemplo do que acontece no processo de difusão de alguma grandeza física em uma região que apresenta uma interface entre dois meios de características distintas. Este problema foi separado em dois subproblemas: Problema 5(a) e Problema (b), pois as simulações foram realizadas com duas malhas distintas, de modo a se estabelecer uma comparação entre os resultados. A primeira delas (Problema 5(a)) foi feita com malhas geradas pelo *Distmesh*, enquanto que a segunda foi feita com uma malha de autoria própria, refinada pelo mesmo algoritmo utilizado nos Problemas 1 e 3.

O problema analisado é tal como o apresentado por Jacq [43]. Trata-se de encontrar a solução para o problema definido pela seguinte EDPE:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] = 0, \quad (6.11)$$

com Γ sendo dado por:

$$\Gamma(x) = \begin{cases} \Gamma_1 & \text{se } 0 \leq x \leq \frac{1}{2}, \\ \Gamma_2 & \text{se } \frac{1}{2} < x \leq 1. \end{cases} \quad (6.12)$$

Sob estas condições, a solução analítica deste problema possui a seguinte forma:

$$\phi(x, y) = \begin{cases} a + bx + cy & \text{se } 0 \leq x \leq \frac{1}{2}, \\ a + \frac{1}{2}b\frac{\Gamma_2 - \Gamma_1}{\Gamma_2} + b\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} + cy & \text{se } \frac{1}{2} < x \leq 1, \end{cases} \quad (6.13)$$

com os coeficientes a , b e c sendo constantes reais. Para a simulação em questão escolheu-se $\Gamma_1 = 4$, $\Gamma_2 = 1$ e $a = b = c = 1$.

O domínio empregado é um quadrado idêntico ao apresentado no Problema 4, conforme ilustrado pela Figura 6.12, e as condições de contorno nas quatro fronteiras são do tipo Dirichlet, sendo dadas pela aplicação direta da solução analítica $\phi(x, y)$ em cada parte do contorno. De modo a otimizar o custo computacional envolvido, escolheu-se $maxIt = 10000$ e o resíduo mínimo para a aceitação da resposta foi $maxRes = 10^{-8}$.

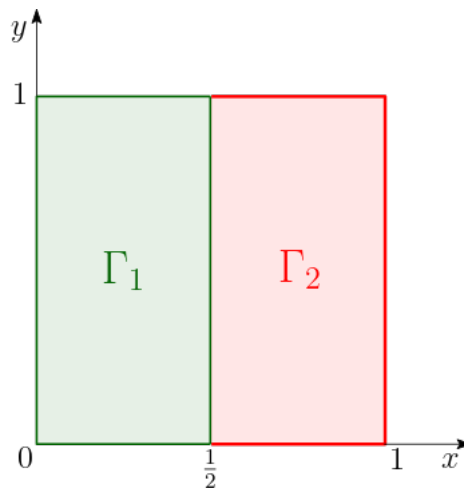


Figura 6.12: Ilustração do domínio que define o Problema 5. Note que em $x = \frac{1}{2}$ a linha está da cor verde, evidenciando que estes pontos pertencem à região de coeficiente de difusão Γ_1 . Fonte: autoria própria.

Conforme já relatado, malhas de dois padrões distintos foram utilizados, tendo sido as malhas do primeiro padrão geradas pelo *Distmesh* e idênticas às malhas do Problema 4. O segundo padrão foi gerado por meio de um algoritmo próprio.

De modo a definir qual valor de Γ cada triângulo receberia, uma vez que as malhas geradas pelo *Distmesh* têm caráter aleatório, optou-se por separá-los pela coordenada x dos seus respectivos baricentros. Por este motivo, as atribuições de Γ podem ser imprecisas, uma vez que muitos triângulos que são cortados pela linha da interface podem ser contabilizados para o lado errado do domínio. Com o intuito de investigar a magnitude dos erros introduzidos por esta metodologia, a segunda malha desenvolvida foi feita de tal modo que as arestas dos triângulos se situassem perfeitamente sobre a linha da interface $x = \frac{1}{2}$, sem que nenhum volume seja cortado por ela.

6.5.2 Resultados

Os resultados obtidos para o Problema 5(a) são expostos na Tabela 6.7, os gráficos para a solução $\phi(x, y)$ e para o ERP deste problema, bem como as malhas utilizadas podem ser observados nas Figuras 6.13, 6.14 e 6.15 respectivamente.

De modo semelhante, os resultados obtidos para o Problema 5(b) são expostos na Tabela 6.8, enquanto que seus gráficos de distribuição de ϕ , ERP e malhas encontram-se nas Figuras 6.16, 6.17 e 6.18.

Resultado 5(a): $maxIt = 10000$; $maxItGS = 10000$; $maxRes = 10^{-8}$										
N° de volumes	h	$D_{méd}$	$Q_{méd}$	Iterações	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	q_2	q_{RMS}
16	0.2500	2.3032E-01	9.0948E-01	19	4.7237E-02	3.2929E-02	**	**	**	**
64	0.1250	1.8722E-01	9.4602E-01	22	2.9157E-02	1.4729E-02	1.6201	2.2357	0.6961	1.1607
256	0.0625	9.6604E-02	9.7641E-01	22	2.2995E-02	9.5085E-03	1.2680	1.5490	0.3425	0.6314
1078	0.0305	5.1104E-02	9.8870E-01	21	1.0913E-02	4.4387E-03	2.1071	2.1422	1.0368	1.0598
4441	0.0150	2.8882E-02	9.9535E-01	22	5.6898E-03	2.2791E-03	1.9180	1.9476	0.9201	0.9417

Tabela 6.7: Resultados obtidos para as simulações de ordem de convergência do Problema 5(a).
Fonte: autoria própria.

Resultado 5(b): $D = 0.557$; $Q = 0.629$; $maxIt = 10000$; $maxItGS = 10000$; $maxRes = 10^{-8}$									
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	q_2	q_{RMS}	
16	24	0.2500	6.4634E-02	3.9896E-02	**	**	**	**	
64	24	0.1250	3.5792E-02	1.6896E-02	1.8058	2.3613	0.8527	1.2396	
256	26	0.0625	1.9955E-02	8.5062E-03	1.7936	1.9863	0.8429	0.9901	
1024	28	0.0313	1.0698E-02	4.3924E-03	1.8653	1.9366	0.8994	0.9535	
4096	29	0.0156	5.5577E-03	2.2466E-03	1.9249	1.9551	0.9448	0.9673	

Tabela 6.8: Resultados obtidos para as simulações de ordem de convergência do Problema 5(b).
Fonte: autoria própria.

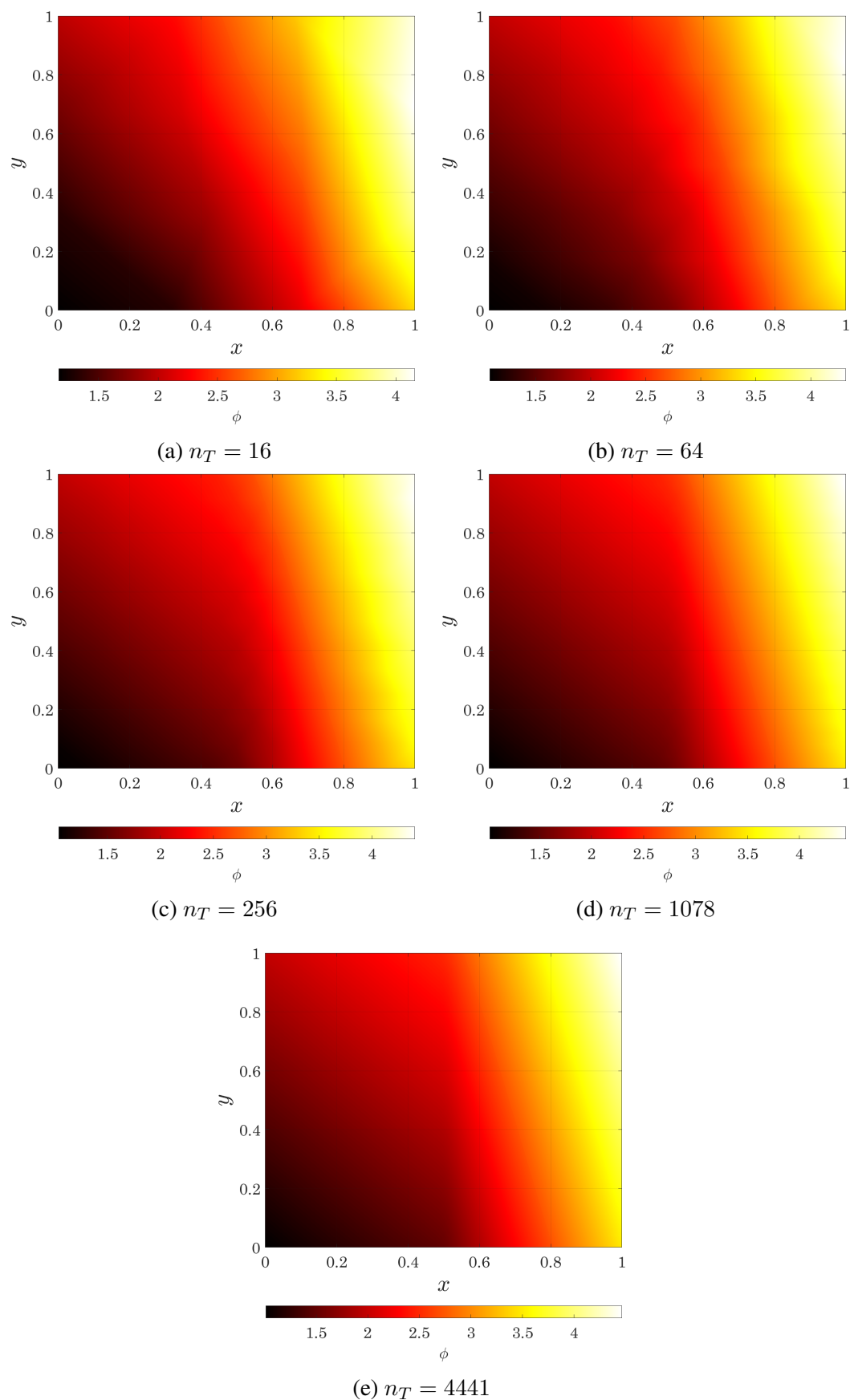


Figura 6.13: Gráficos da distribuição de ϕ para o Problema 5(a) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

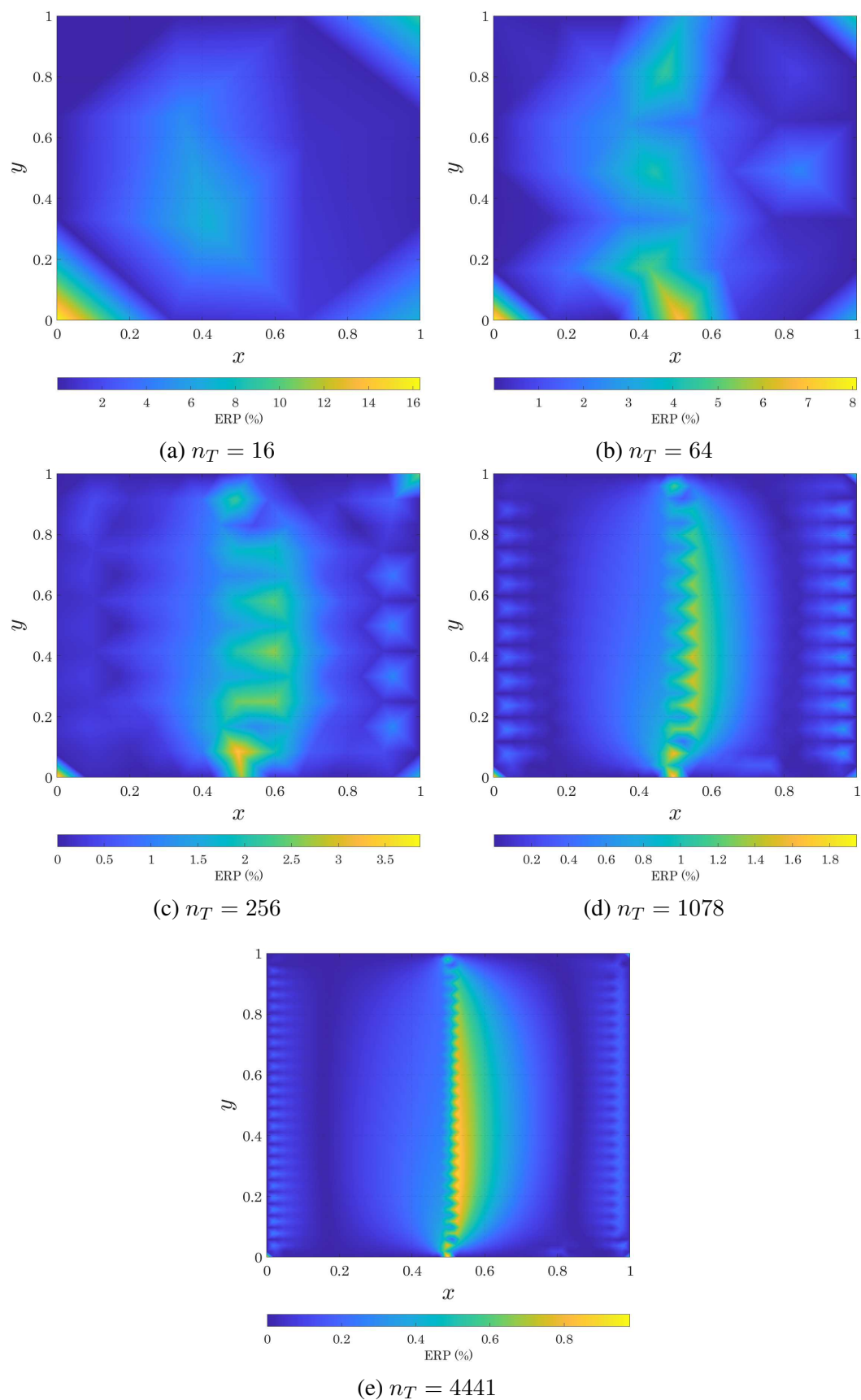


Figura 6.14: Gráficos da distribuição de ERP para o Problema 5(a) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

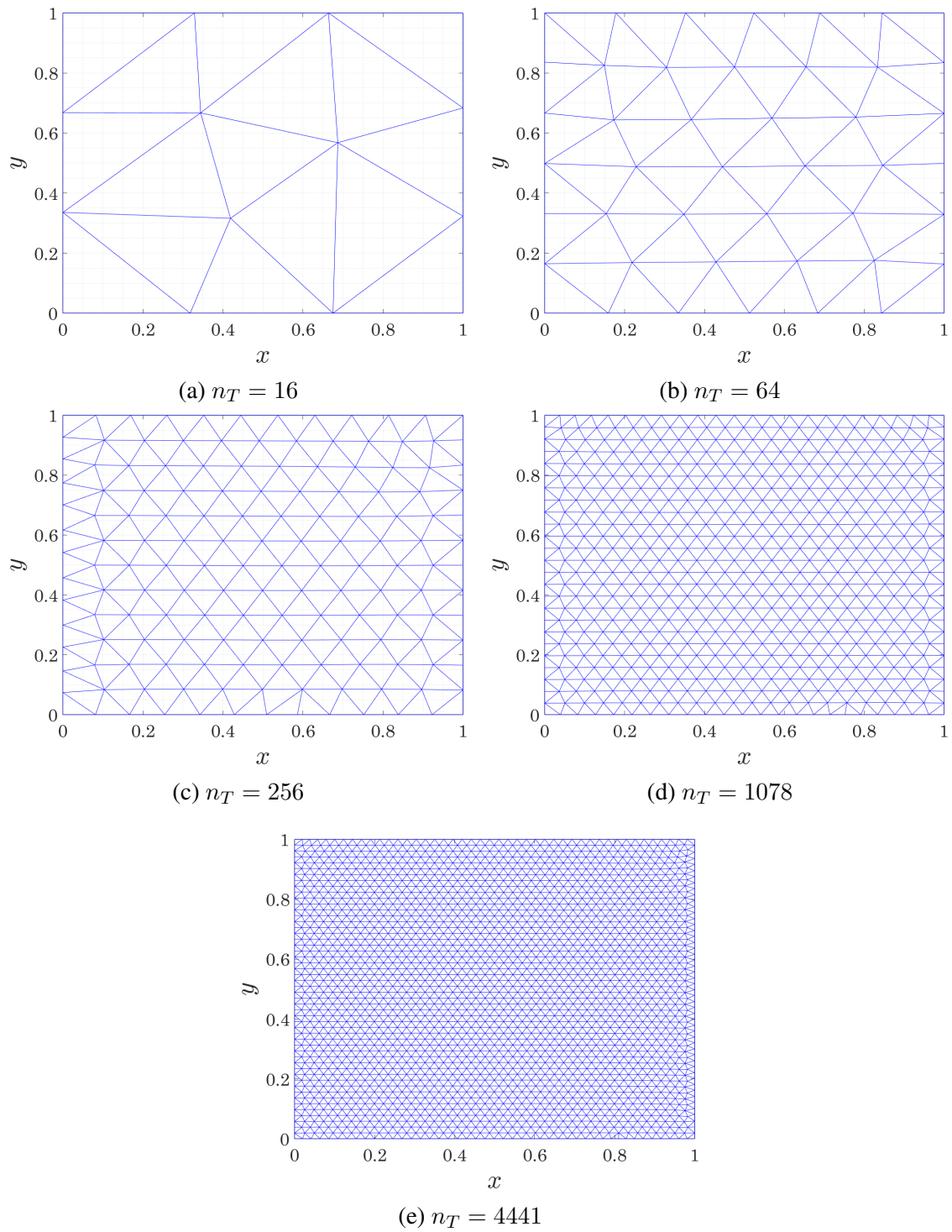


Figura 6.15: Malhas utilizadas para as simulações do Problema 5(a). Fonte: autoria própria.

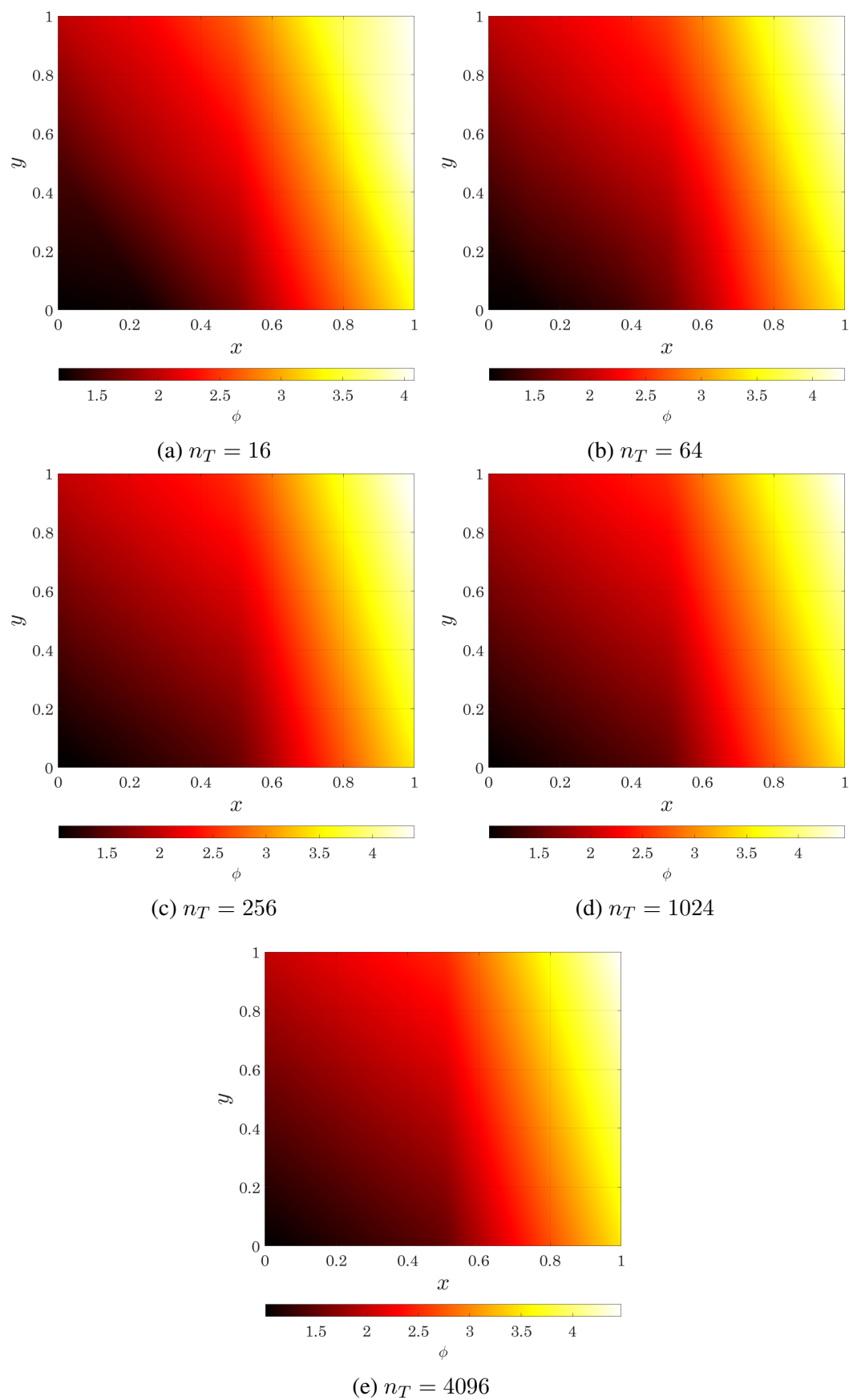


Figura 6.16: Gráficos da distribuição de ϕ para o Problema 5(b) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

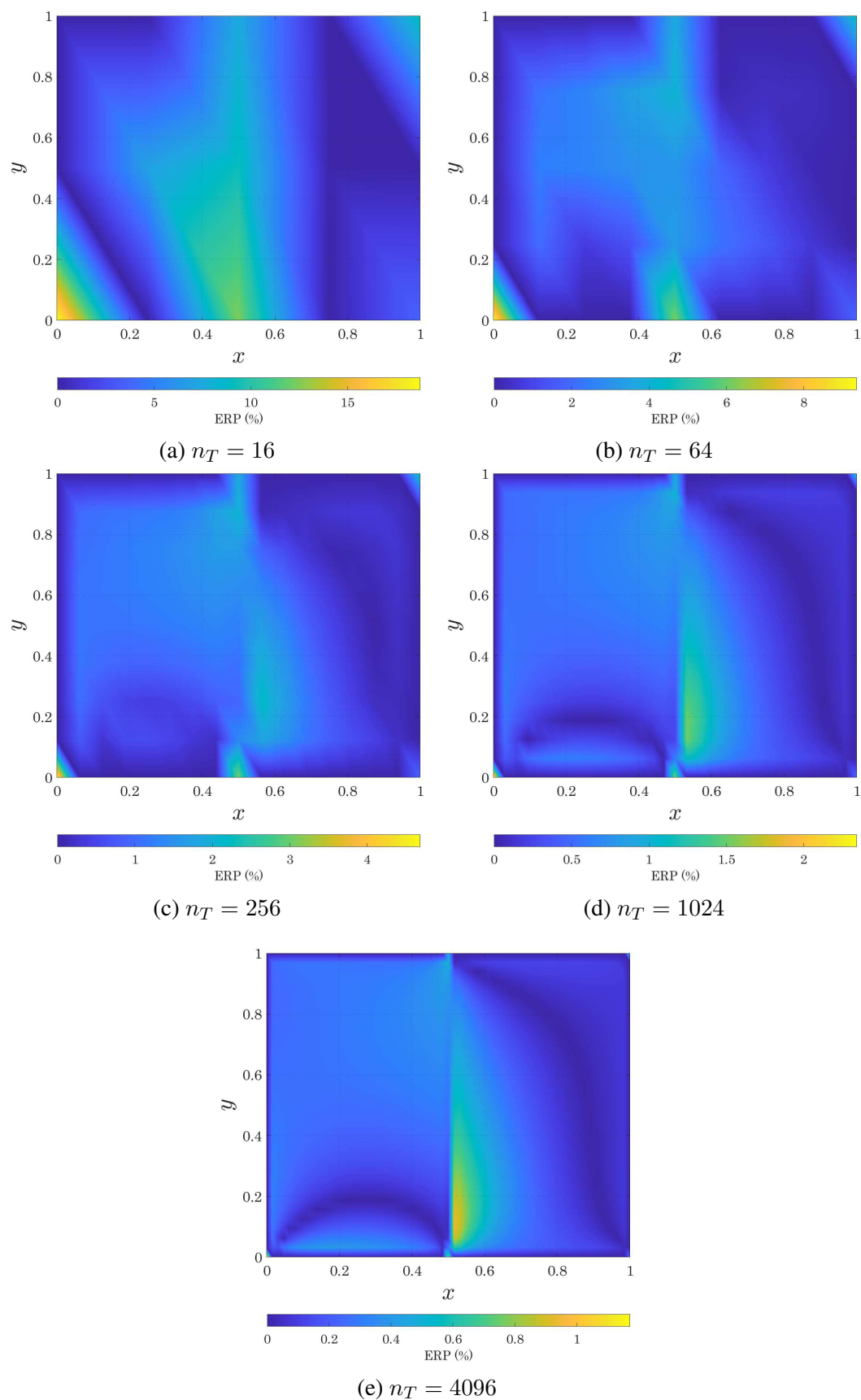


Figura 6.17: Gráficos da distribuição de ERP para o Problema 5(b) em malhas não ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

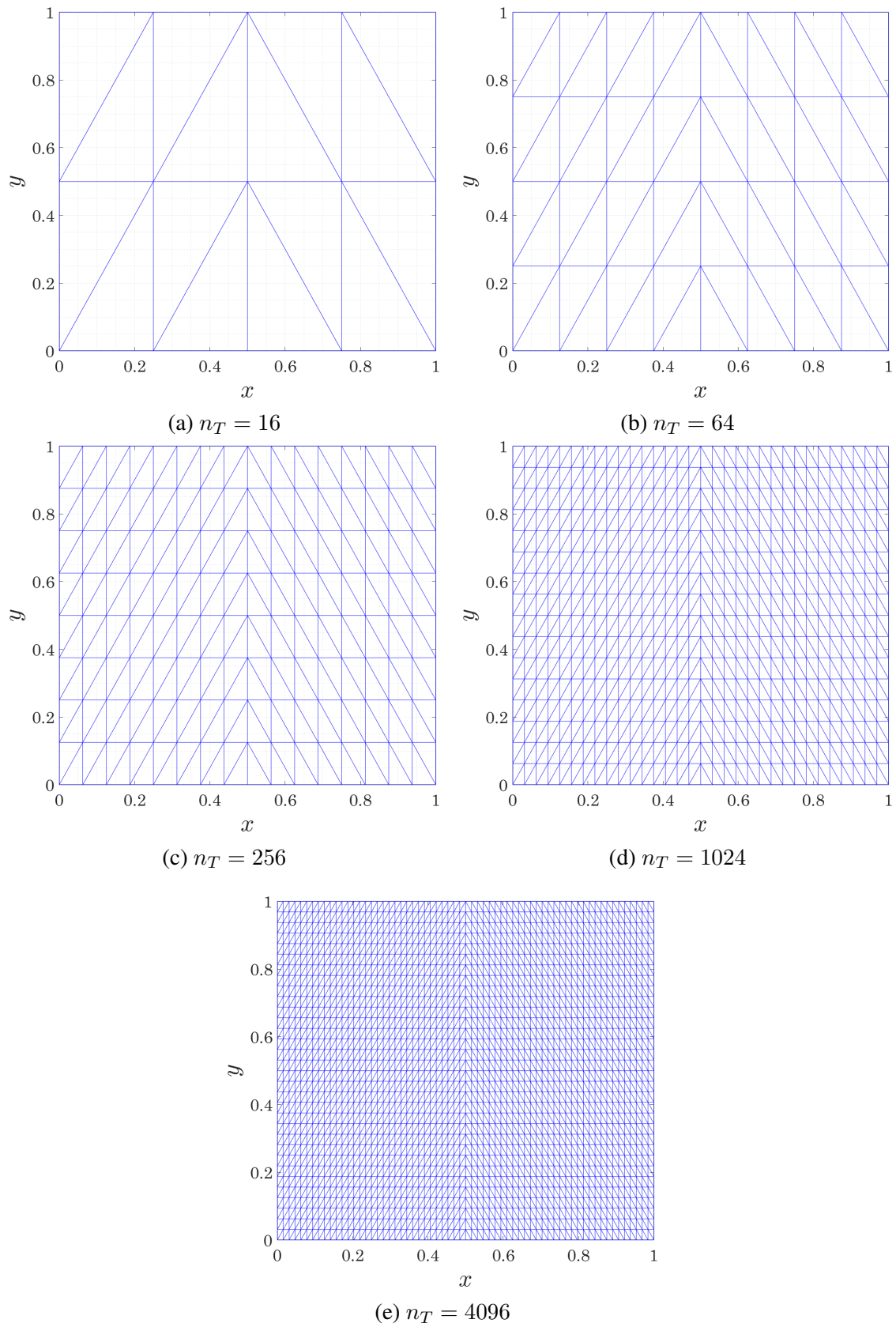


Figura 6.18: Malhas utilizadas para as simulações do Problema 5(b). Fonte: autoria própria.

6.5.3 Discussões

Analisando os dados do Problema 5(a) expostos na Tabela 6.7, pode-se notar que as malhas utilizadas possuem bons índices de qualidade e distorção, e que conforme esperado, tais índices melhoram com o aumento do número de volumes de controle, uma vez que o tamanho médio de cada volume diminui, facilitando a inserção de volumes com formatos próximos ao do triângulo equilátero. Contudo, mesmo com elementos de formatos apropriados e condições de contorno de Dirichlet, nota-se que a ordem de convergência obtida é ligeiramente menor que 1, o que pode ser explicado pelo método praticado para a atribuição da propriedade Γ , que acaba inputando um único valor para toda a área de um triângulo que possui partes nas duas regiões. Esta hipótese é reforçada ao observar-se os gráficos de ERP da Figura 6.14, onde percebe-se uma correlação direta entre a magnitude do erro e a posição do elemento (nas proximidades da reta $x = \frac{1}{2}$).

Apesar deste inconveniente, o ERP se manteve em níveis consideravelmente baixos, reforçando a qualidade da solução obtida. Nota-se também que fora da região de interface, os maiores valores são encontrados nos triângulos das fronteiras, uma vez que são estes os que possuem os formatos mais afastados do triângulo equilátero e, portanto, menor qualidade e maior influência da difusão cruzada.

Os resultados observados para o Problema 5(b) são semelhantes aos de seu antecessor. Porém, neste caso não há a introdução de erros devido à atribuição incorreta de Γ na linha da interface $x = \frac{1}{2}$, e a baixa ordem de convergência observada é devida à má qualidade dos elementos utilizados. A comparação entre estes resultados permite observar de forma intuitiva a magnitude do efeito de se optar por malhas de baixa qualidade.

Por fim salienta-se que ambas as soluções mostraram-se satisfatórias, com erros $\leq 1\%$. E mesmo sob o efeito de atribuição equivocada do coeficiente Γ , os resultados obtidos por meio da malha *Distmesh* apresentam um menor ERP máximo em relação ao Problema 5(b), apesar de observar-se neste uma ordem de convergência $\approx 3\%$ maior que naquele.

6.6 PROBLEMA 6: ORDEM DE CONVERGÊNCIA DE UMA EDP ELÍPTICA NÃO HOMO- GÊNEA COM COEFICIENTE DE DIFUSÃO VARIÁVEL LINEAR

6.6.1 Apresentação

Neste problema, buscou-se avaliar a ordem de convergência do método para um caso de uma EDPE definida no domínio triangular $\Omega = \{(0, 1); (0.5, (1 - \sqrt{0.75})); (1, 1)\} \in \mathbb{R}^2$, discretizado por uma malha não estruturada triangular ortogonal e com coeficiente de difusão variável, dado por $\Gamma(x, y) = x + y$. Para tal, utilizando o Método das Soluções Fabricadas e escolhendo como solução analítica a função $\phi(x, y) = \frac{\sin(\pi x) \sinh(\pi y)}{\sinh(\pi)}$ obteve-se a seguinte EDPE a ser resolvida:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[(x+y) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(x+y) \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] - \frac{\pi \cos(\pi x) \sinh(\pi y)}{\sinh(\pi)} - \frac{\pi \sin(\pi x) \cosh(\pi y)}{\sinh(\pi)} = 0, \quad (6.14)$$

submetida às condições de contorno do tipo Dirichlet em todas as fronteiras, com o valor destas sendo obtido por meio da aplicação direta da solução analítica em cada uma das fronteiras.

6.6.2 Resultados

Os resultados colhidos nas simulações do Problema 6 são mostrados na Tabela 6.9, enquanto que os gráficos obtidos para a distribuição de ϕ e do ERP são mostrados pelas Figuras 6.19 e 6.20, nesta ordem.

Resultado 6: $D = 0$; $Q = 1$; $\Gamma = x + y$; $\max It = 10000$; $\max It_{GS} = 10000$; $\max Res = 10^{-8}$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	q_2	q_{RMS}
4	2	0.3290	2.4490E-02	1.0227E-01	**	**	**	**
16	18	0.1645	1.6425E-02	1.0273E-01	1.4910	0.9955	0.5763	-0.0065
64	18	0.0823	5.3615E-03	2.9106E-02	3.0635	3.5295	1.6152	1.8195
256	19	0.0411	1.4307E-03	7.4452E-03	3.7475	3.9094	1.9059	1.9669
1024	19	0.0206	3.6525E-04	1.8726E-03	3.9170	3.9759	1.9698	1.9913
4096	19	0.0103	9.2085E-05	4.6923E-04	3.9664	3.9908	1.9878	1.9967

Tabela 6.9: Dados obtidos pelo procedimento de análise de convergência para a EDPE dada pela Equação (6.14) definida em um domínio triangular $\Omega = \{(0, 1); (0.5, (1 - \sqrt{0.75})); (1, 1)\} \in \mathbb{R}^2$ discretizado por uma malha não estruturada triangular ortogonal. Fonte: autoria própria.

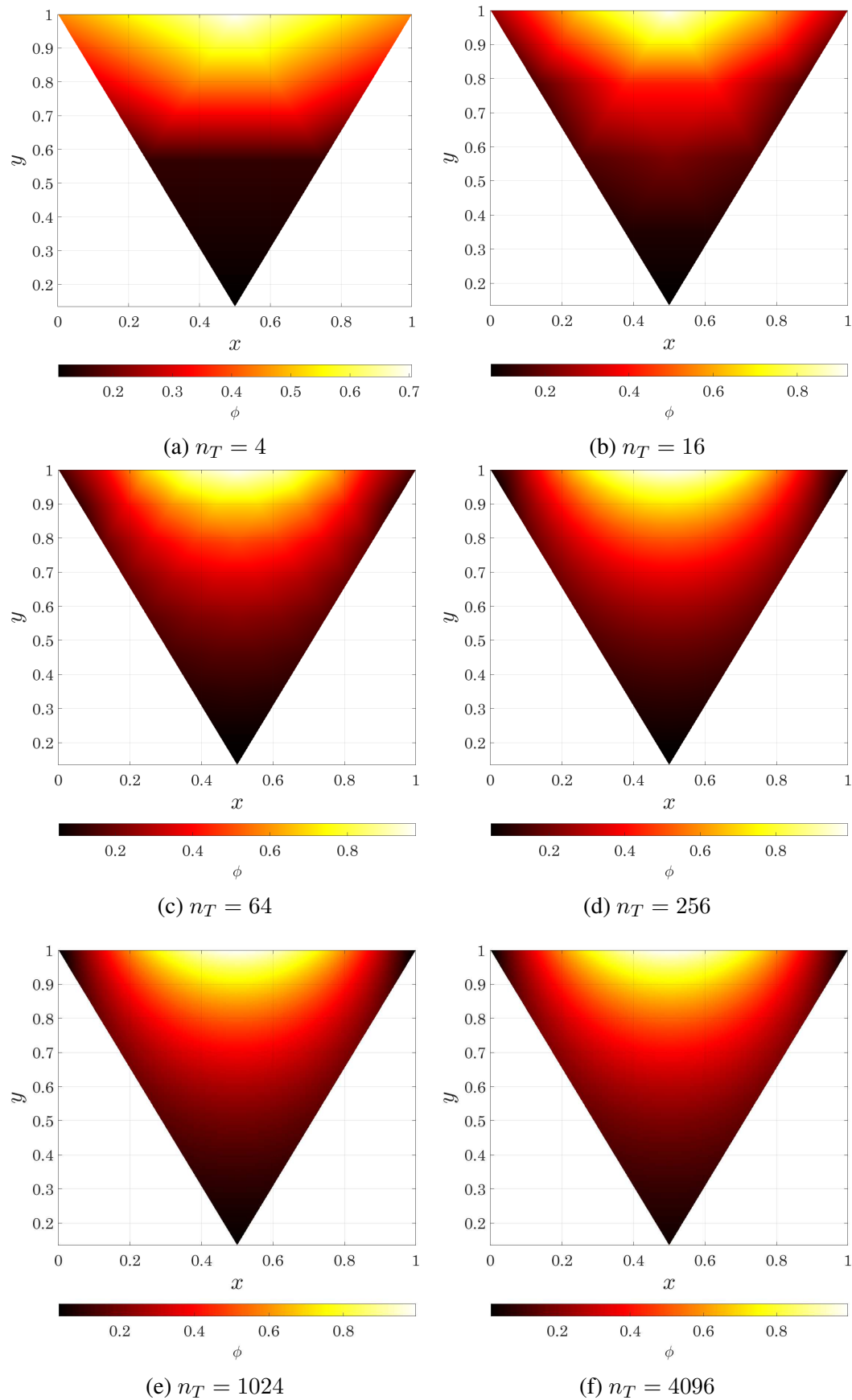


Figura 6.19: Distribuição de ϕ para o Problema 6 em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

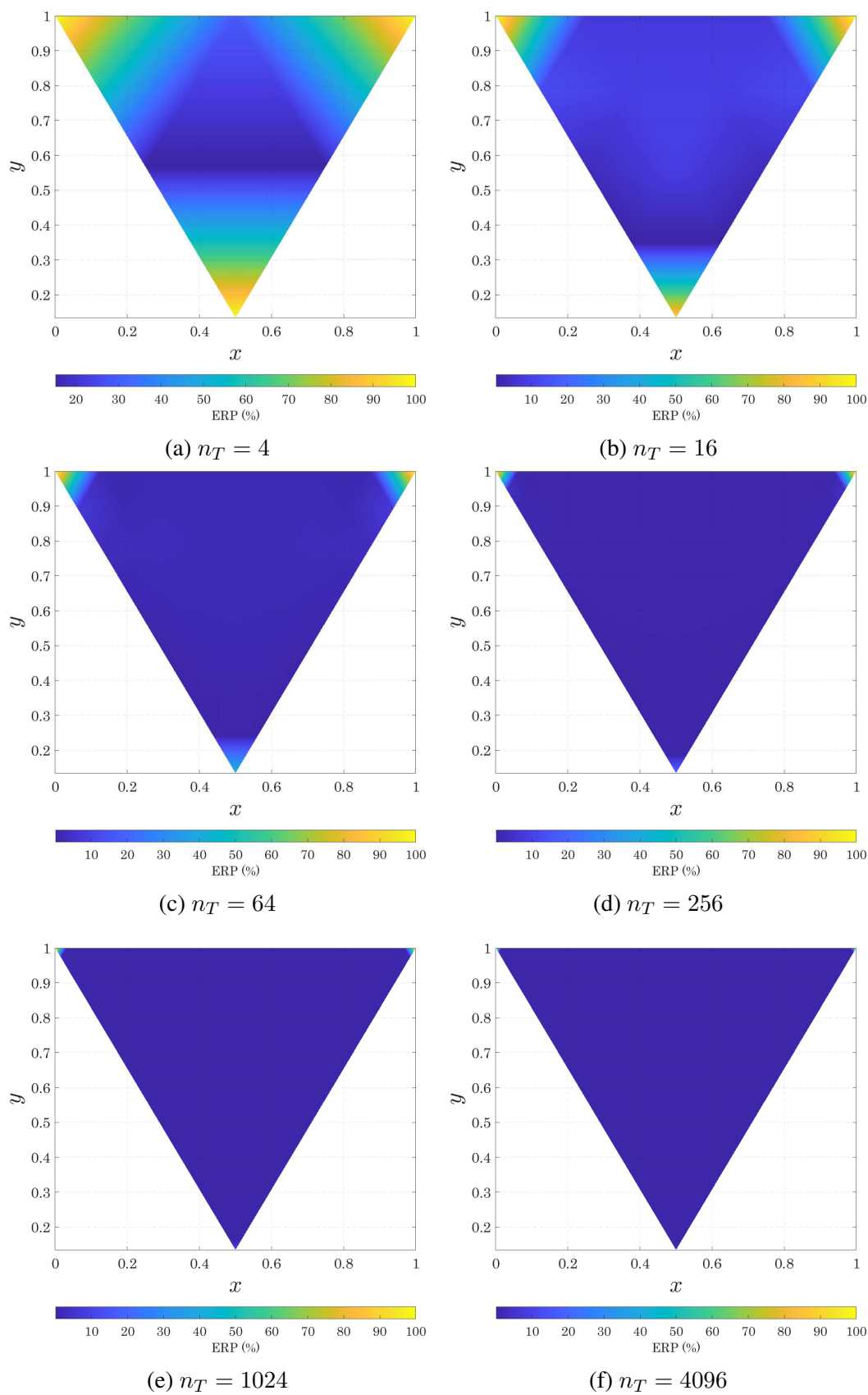


Figura 6.20: Distribuição de ERP para o Problema 6 em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

6.6.3 Discussão

Novamente, tal como observado nos problemas anteriores, a acumulação de ERP se dá nos vértices dos triângulos das pontas, pelo já mencionado mecanismo de atribuição de ϕ nos vértices destes locais. O valor de ERP próximo à 100% deve-se ao fato de que, nos dois vértices da fronteira superior do domínio, o valor analítico de ϕ é zero, o que torna-o impossível de ser alcançado pelos meios de cálculo de ϕ apresentados no presente trabalho. Contudo, observa-se que o valor numérico encontrado é muito próximo de zero, oferecendo uma boa aproximação. No resto do domínio, o nível de ERP observado é extremamente baixo, confirmando a hipótese de que a solução obtida é apropriada.

Com relação à ordem de convergência obtida, pode-se afirmar que as complicações algébricas adicionadas ao problema não foram capazes de comprometer o desempenho observado em problemas mais simples, reforçando a hipótese de que apenas a difusão cruzada é o fator responsável pela diminuição da ordem de convergência, de tal forma que na ausência deste fator, os valores continuam muito próximos do limite teórico $O(h^2)$.

6.7 PROBLEMA 7: ORDEM DE CONVERGÊNCIA DE UMA EDP ELÍPTICA NÃO HOMOGENEA COM COEFICIENTE DE DIFUSÃO VARIÁVEL NÃO LINEAR

6.7.1 Apresentação

Uma vez que no problema anterior o coeficiente Γ utilizado era dado por uma equação linear, havia o interesse em investigar se o código seria capaz de lidar com problemas onde tal coeficiente fosse não linear, bem como saber se e como esta não linearidade afetaria a ordem de convergência observada. Por tal motivo, o Problema 6 foi reformulado considerando $\Gamma(x, y) = \sin(xy)$, $\phi(x, y) = x^2 + y^2$ como solução analítica e mantendo-se fixos o domínio e a malha utilizada. Nestas condições, a EDPE resolvida é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\sin(xy) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\sin(xy) \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] - 4xy \cos(xy) - 4 \sin(xy) = 0, \quad (6.15)$$

submetida às condições de contorno do tipo Dirichlet em todas as fronteiras, com o valor destas sendo obtido por meio da aplicação direta da solução analítica em cada uma das fronteiras.

6.7.2 Resultados

Os resultados da análise de ordem de convergência para o Problema 7 estão expostos na Tabela 6.10, enquanto que a Figura 6.21 mostra os gráficos da distribuição de ϕ para o problema. Por sua vez, os gráficos da distribuição do ERP deste problema são expostos na Figura 6.22.

Resultado 7: $D = 0$; $Q = 1$; $\Gamma = \sin(xy)$; $maxIt = 10000$; $maxItGS = 10000$; $maxRes = 10^{-8}$

N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente	Quociente	q_2	q_{RMS}
					E_2	E_{RMS}		
4	2	0.3290	1.2279E-02	1.0952E-01	**	**	**	**
16	18	0.1645	2.1049E-02	5.5820E-02	0.5834	1.9620	-0.7776	0.9723
64	18	0.0823	7.4109E-03	1.5975E-02	2.8403	3.4942	1.5060	1.8050
256	19	0.0411	2.1103E-03	4.1778E-03	3.5118	3.8238	1.8122	1.9350
1024	19	0.0206	5.5953E-04	1.0643E-03	3.7716	3.9254	1.9152	1.9729
4096	19	0.0103	1.4386E-04	2.6836E-04	3.8894	3.9659	1.9595	1.9877

Tabela 6.10: Dados obtidos pelo procedimento de análise de convergência para a EDPE dada pela Equação (6.15). Fonte: autoria própria.

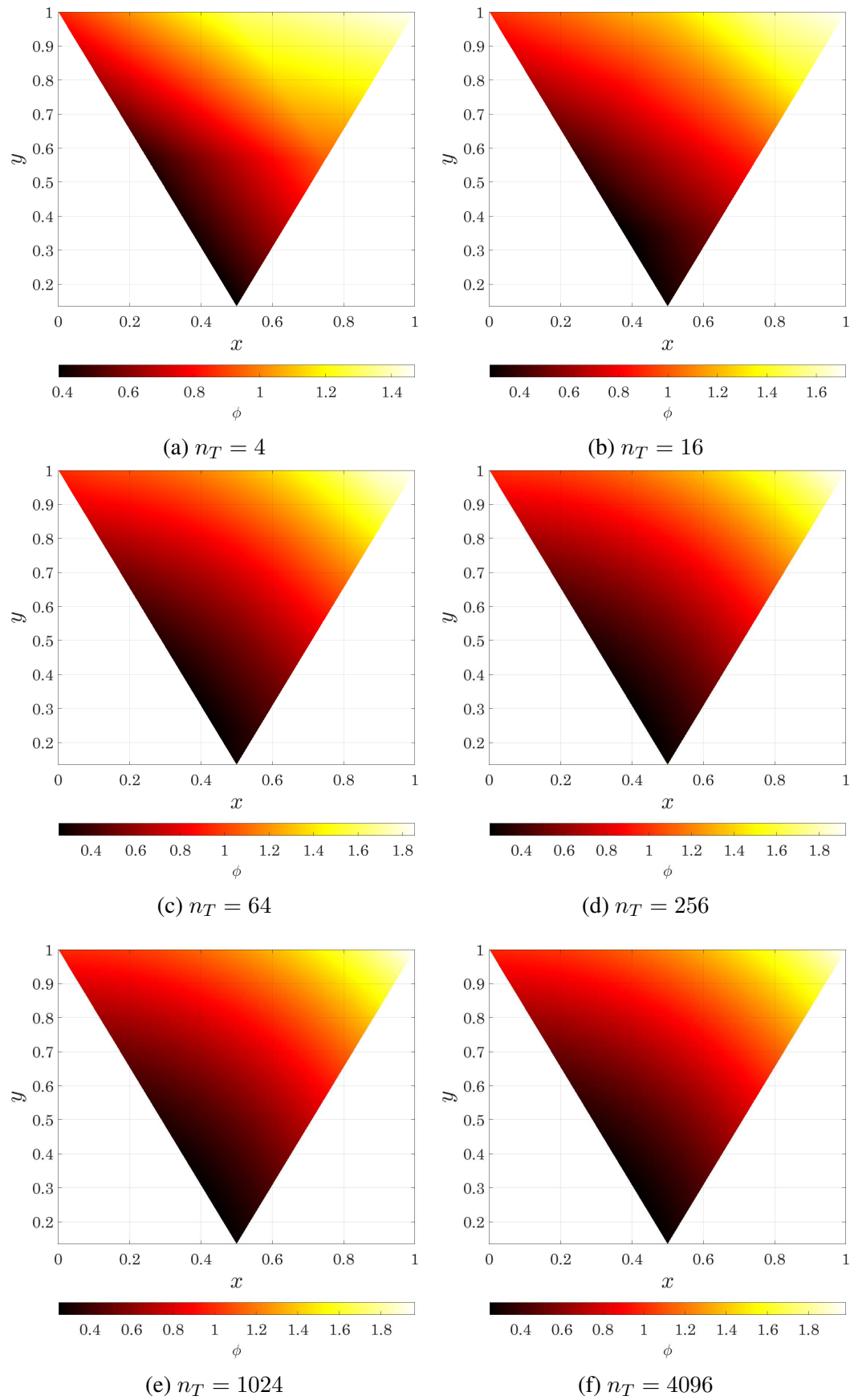


Figura 6.21: Distribuição de ϕ para o Problema 7 em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

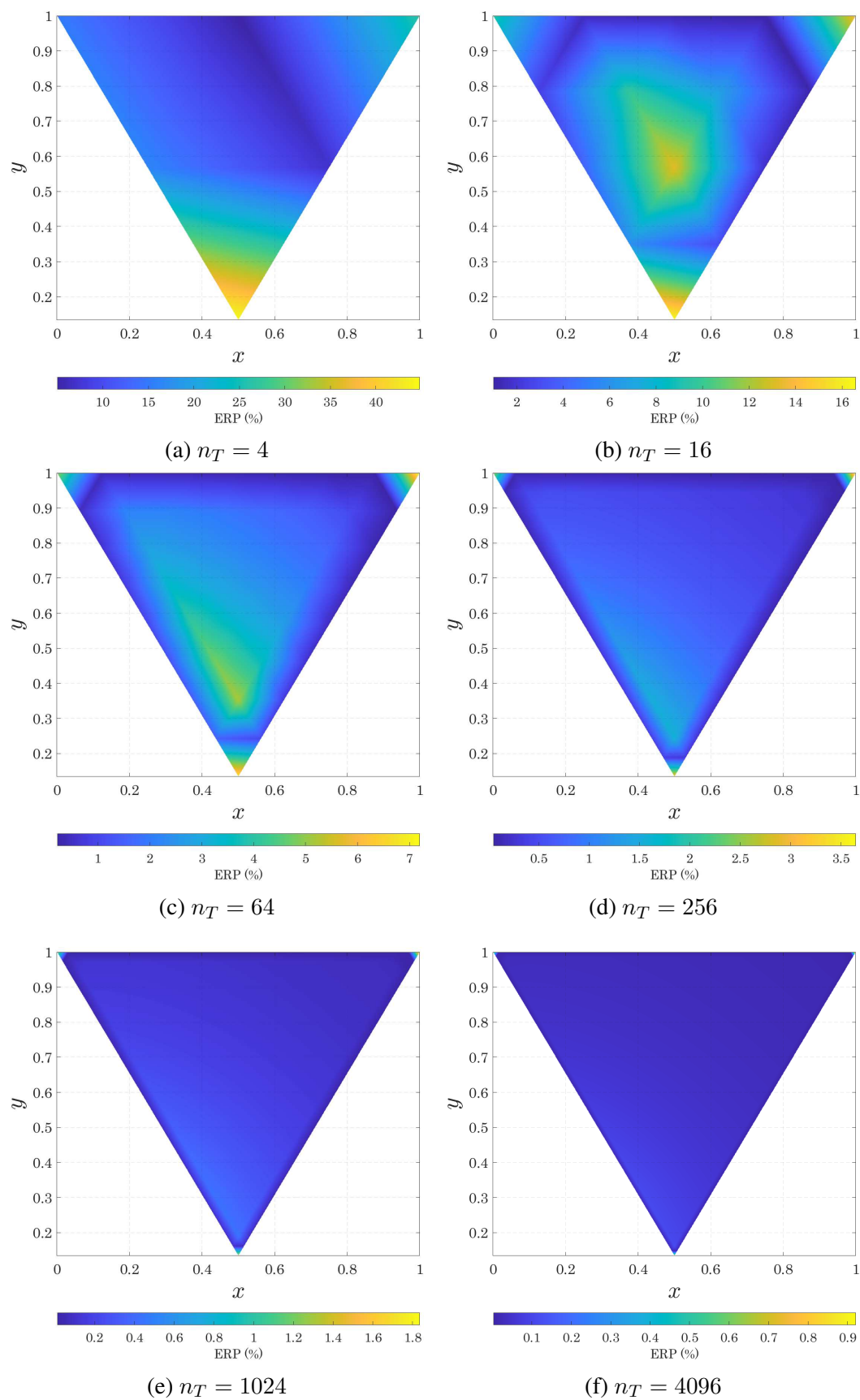


Figura 6.22: Distribuição de ERP para o Problema 7 em malhas ortogonais com números variados de volumes. Fonte: autoria própria.

6.7.3 Discussões

Novamente observou-se um nível de ERP muito baixo, conforme esperado de acordo com as experiências anteriores. Dentro do limite de precisão explorado, os resultados avaliados para a ordem de convergência do Problema 7 são muito próximos aos apresentados no problema anterior, ficando ligeiramente abaixo ($\approx 2\%$) dos valores observados para o caso linear do coeficiente Γ . Levando em consideração a importância já demonstrada da qualidade da malha, isso reafirma que a não linearidade do coeficiente de difusão não impõe maiores dificuldades ao sistema, bastando apenas que o termo fonte e as condições de contorno sejam tratados corretamente.

6.8 PROBLEMA 8 - SOLUÇÃO DE UMA EDPE DEFINIDA EM UM DOMÍNIO COM DESCONTINUIDADES E GEOMETRIA ARBITRÁRIA

6.8.1 Apresentação

Com o intuito de investigar também a eficácia do código em lidar com geometrias complexas, resolveu-se novamente o Problema 7, mas desta vez definido-o em um domínio com diversas descontinuidades topológicas. Domínios deste tipo são utilizados com frequência na modelagem de problemas de escoamentos em meios porosos, tal como pode-se observar nos trabalhos de Baqer e Chen [9], Gao *et al.* [35] e Holzbecher e Oehlmann[41].

Desta forma, desenvolveu-se uma malha que tivesse diversas descontinuidades com formatos elípticos de tamanhos diversos, utilizados para modelar partículas que obstruem o escoamento de alguma grandeza física pelo meio. A malha utilizada possui $n_T = 7376$ elementos e apresenta refinamentos locais nas proximidades de cada furo, aumentando sem dificuldades o número de elementos apenas em regiões críticas, vantagem esta que a formulação em malha não estruturada permite ser explorada.

6.8.2 Resultados

Uma vez que o foco deste problema é apenas exibir a capacidade do código em resolver EDPEs definidas em domínios de geometria complexa, abdicou-se de empreender o procedimento de verificação da ordem de convergência.

Os gráficos obtidos para esta simulação estão dispostos na Figura 6.23, de modo que a distribuição de ϕ encontra-se no item (a), a distribuição do ERP no item (b) e a malha utilizada no item (c) da referida figura.

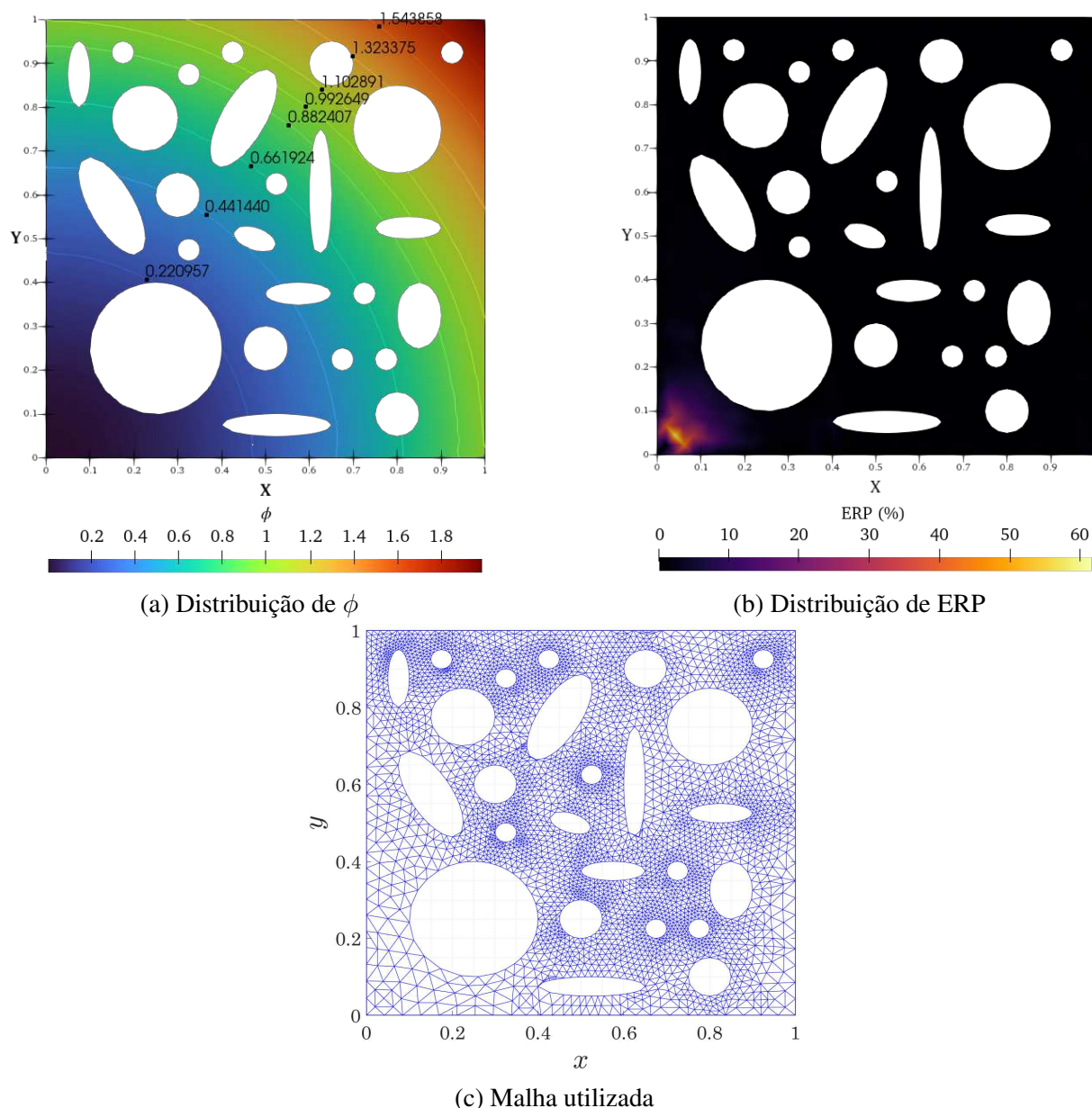


Figura 6.23: Gráficos da distribuição de ϕ e do ERP para o Problema 8, plotados com os resultados obtidos por meio de uma malha composta por 7376 volumes de controle. Fonte: autoria própria.

6.8.3 Discussões

A malha utilizada possui índice de distorção médio $D_{med} = 2.0212e - 01$, e índice de qualidade médio $Q_{med} = 9.3748e - 01$, o que a coloca como uma malha de boa qualidade geral. Nota-se, que o nível do ERP em quase a totalidade do domínio é baixa, de modo que os maiores números concentram-se nas proximidades do canto inferior esquerdo. Acredita-se que tal discrepância deve-se ao fato de que o valor exato de $\phi(0, 0) = 0$, e que dada a metodologia adotada para o tratamento das condições de contorno (apresentada na Seção 3.3), seria impossível de se atingir tal valor, visto que os valores numéricos para $\phi(0, 0)$ seriam muito pequenos, embora não iguais a zero.

De modo geral, obteve-se novamente uma excelente solução numérica, ampliando a convicção sobre as capacidades do código desenvolvido em desempenhar sua função de forma satisfatória em cenários desafiadores.

6.9 PROBLEMA 9 - SIMULAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURA EM UM SEIO HUMANO COM ACOMETIDO POR TUMORES

6.9.1 Apresentação

Como forma de apresentar uma possível aplicação prática do código desenvolvido, buscou-se avaliar a distribuição de temperatura em uma mama humana feminina acometida por tumores. Tal escolha deve-se ao fato de que o seio possui, obviamente, uma geometria não trivial e estudos sugerem que as regiões do tecido humano que desenvolvem tumores possuem, em geral, maior calor metabólico e maior fluxo sanguíneo, culminando em um aumento local da temperatura [92, 91]. Desta maneira, o calor emanado da região lesionada é transferido por meio de um processo difusivo para as regiões vizinhas, modificando a distribuição de temperatura em relação às condições de tecidos saudáveis.

O modelo no qual o presente trabalho se baseará para as simulações é o modelo de biocalor de Pennes [72]. Inicialmente desenvolvido por Harry Pennes para descrever os efeitos da transferência de calor no antebraço por meio do fluxo sanguíneo e da atividade metabólica das células, o modelo foi amplamente explorado e utilizado para diversas situações, como por exemplo a modelagem térmica de tecidos com crescimento tumoral, como exposto por Centigul e Herman [92].

A equação do modelo de Pennes tal como apresentada por [92] é dada por:

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 T + \rho_b C_b \omega_b (T_b - T) + Q_T, \quad (6.16)$$

onde ρ , C , T , Γ e Q_T denotam a densidade, calor específico, temperatura local do tecido, condutividade térmica do tecido e taxa de geração de calor metabólico por unidade de volume, nesta ordem. As propriedades ρ_b , C_b , T_b e ω_b são, respectivamente, a densidade do sangue, calor específico do sangue, temperatura do sangue arterial e taxa de perfusão do sangue.

Uma vez que o foco do presente trabalho está nas EDP Elípticas, será considerado apenas o caso da Equação (6.16) em regime permanente, fazendo com que o termo temporal do lado esquerdo seja zero.

Em seus estudos, Centigul e Herman [92] investigaram as propriedades térmicas de peles que apresentavam lesões do tipo melanoma. Os valores utilizados pelos autores como parâmetros para o modelo de Pennes, tanto para tecidos saudáveis quando para tecidos acometidos pelo tumor são mostrados pela Tabela 6.11 a seguir:

Parâmetro	Pele saudável	Pele lesionada
$C_b(JKg^{-1}K^{-1})$	3589	3852
$\Gamma(Wm^{-1}K^{-1})$	0.445	0.558
$\rho_b(Kgm^{-3})$	1086.2	1030
$\omega_b(m^3s^{-1}m^{-3})$	0.0002	0.0315
$T_b(^{\circ}C)$	37	37
$Q_T(Wm^{-3})$	582.9	3680

Tabela 6.11: Parâmetros termofísicos utilizados na simulação térmica de tumores por meio do modelo de Pennes. Fonte: Centigul e Herman [92].

Por meio dos dados da Tabela 6.11 pôde-se simular a EDP do modelo de Pennes, dada na Equação (6.16), para dois casos: um relativo à uma região de pele saudável e outro relativo à uma região lesionada. Desta forma, o código identifica pela posição de cada elemento se eles se encontram dentro de uma região lesionada ou não, e atribui os coeficientes pertinentes à cada caso.

Como condições de contorno para esta simulação, utilizou-se duas possibilidades: na parte do domínio em que a fronteira encontra-se na parte interna do corpo humano, a condição de contorno imposta foi do tipo Dirichlet com $T = 37^{\circ}C$. Já para a fronteira do domínio que encontra-se em contato com o ambiente externo, a condição de contorno especificada foi a de Robin, com coeficientes $h_{ic} = 10Wm^{-2}$ e $T_{\infty} = 25^{\circ}C$. A Figura 6.24 ilustra o esquema proposto para as condições de contorno, onde a região delimitada pela linha verde refere-se à parte do domínio que encontra-se dentro do corpo humano, enquanto que a parte delimitada pela linha vermelha encontra-se em contato com o ambiente externo. A linha roxa tracejada define o critério para atribuição das condições de contorno: volumes de controle à esquerda desta recebem a C.C. de Dirichlet, enquanto que volumes de controle à direita recebem a C.C. de Robin.

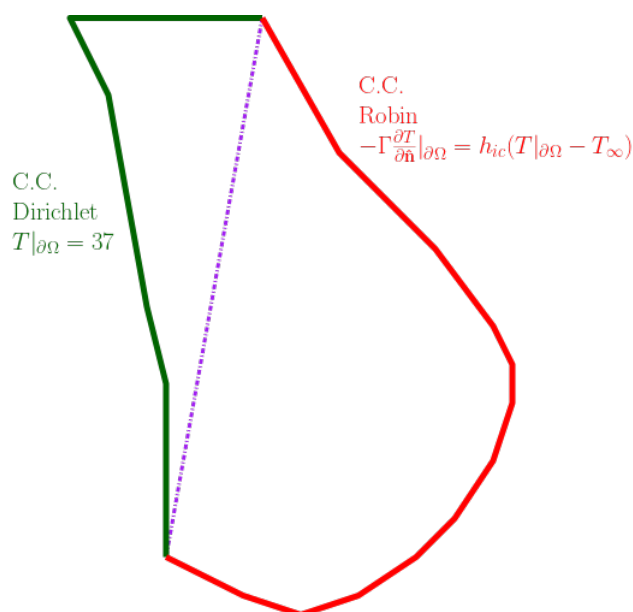


Figura 6.24: Esquema utilizado para modelagem das condições de contorno para a simulação da distribuição de temperatura em um seio acometido por tumores. Fonte: autoria própria.

Ressalta-se peremptoriamente que o problema e as condições tal como modelados para esta aplicação não retratam fielmente um caso real. Diversas considerações simplificadoras foram feitas para executar esta simulação, mas que atendem ao escopo do presente trabalho para o estudo das simulações computacionais.

Destaca-se também a existência de modelos mais precisos para a modelagem de fenômenos desta natureza, como por exemplo os modelos *Single Phase Lag* e *Dual Phase Lag* encontrados no trabalho de Oliveira *et al.* [66].

6.9.2 Resultados

Três simulações foram realizadas, sendo a primeira delas a distribuição de temperatura em um seio considerado saudável (sem a presença de tumores), que será tomado como caso de controle, um seio com apenas um tumor localizado nas proximidades da fronteira externa e outra com dois tumores, sendo um deles localizado próximo à superfície da pele e outro na região central da malha. Os resultados de cada simulação serão apresentados nesta ordem.

Resultado para o caso do seio saudável

Nesta simulação optou-se por utilizar uma malha com refinamentos locais nos dois pontos onde os tumores seriam posicionados para as próximas simulações, de modo que a tecelagem originou 1377 volumes de controle. Decidiu-se por tal prática para que as isolinhas de temperatura nestas regiões tivessem uma boa definição, a fim de proporcionar uma boa situação de controle.

Os gráficos com a distribuição de temperatura e da malha utilizada são mostrados na Figura 6.25.

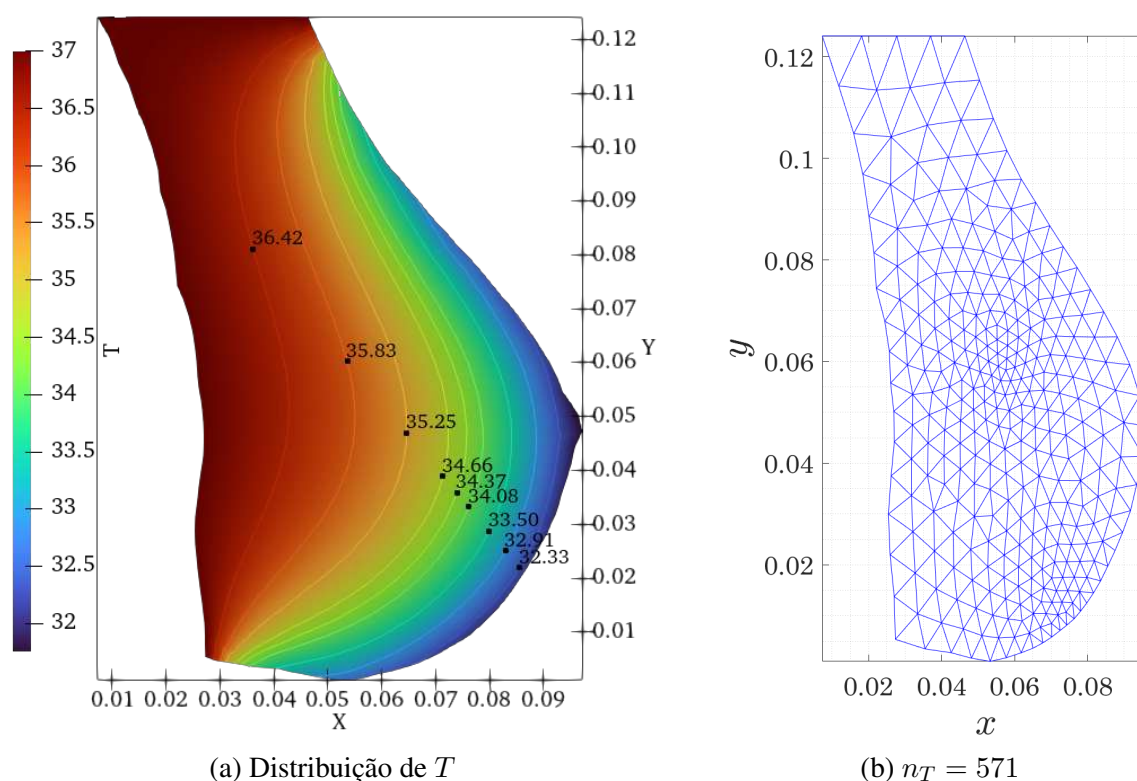


Figura 6.25: Gráficos da distribuição de T e da malha utilizada para a simulação da distribuição de temperatura de um seio saudável. Fonte: autoria própria.

Resultado para o caso do seio com um tumor

Novamente optou-se por utilizar uma malha com refinamento local na região onde o tumor está localizado, mas com um maior grau de refinamento que o apresentado na malha do seio saudável. O ponto exato do tumor é também o ponto focal do refinamento. Esta malha apresentou 3328 volumes de controle.

O tumor foi modelado por um círculo de raio $r = 0.0025m$ centrado no ponto $(0.073, 0.011)$. O mesmo aparece representado no item (b) da Figura 6.26, que também mostra a malha utilizada, enquanto que o item (a) desta figura apresenta a distribuição de temperatura.

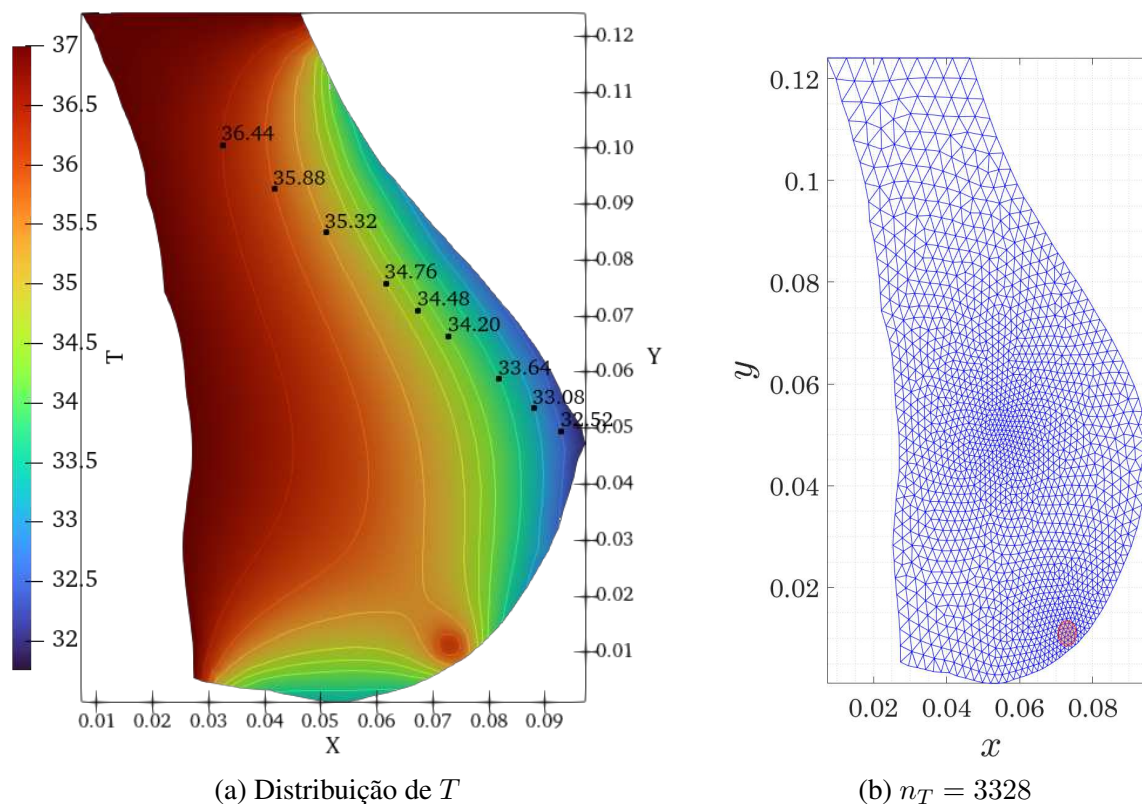


Figura 6.26: Gráficos da distribuição de T e da malha utilizada para a simulação da distribuição de temperatura de um seio com um tumor. O círculo no item (b) representa o tumor em tamanho real. Fonte: autoria própria.

Resultado para o caso do seio com dois tumores

Tal como nas duas simulações anteriores, utilizou-se uma malha com refinamentos locais, desta vez composta por 3328 volumes e cujos centros dos refinamentos também encontram-se sobre os pontos onde os tumores se localizam. Ambos os tumores foram modelados círculos de raio $r = 0.0025m$, sendo o primeiro deles centrado no ponto $(0.073, 0.011)$ enquanto que o centro do segundo encontra-se no ponto $(0.056, 0.051)$.

A Figura 6.27 mostra a distribuição de T no item (a) e a malha utilizada, bem como os dois tumores, no item (b).

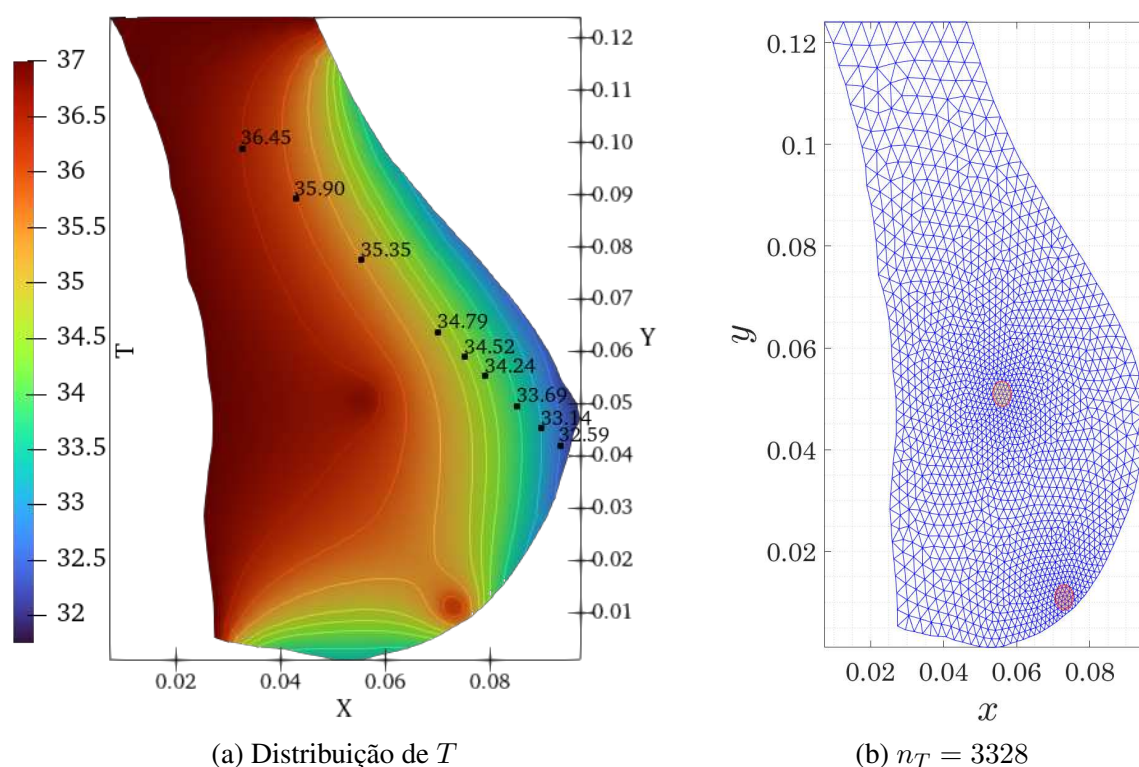


Figura 6.27: Gráficos da distribuição de T e da malha utilizada para a simulação da distribuição de temperatura de um seio com dois tumores. Os círculos no item (b) representam os tumores em tamanho real. Fonte: autoria própria.

6.9.3 Discussões

Discussão acerca do seio saudável

Para o caso do seio saudável, é interessante notar a regularidade das isotermais, que variam de forma suave entre temperaturas pouco abaixo de 32°C na fronteira da mama em contato com o ambiente externo, resfriada por convecção do ar, até os 37°C das fronteiras internas do domínio, onde a temperatura é a temperatura constante do corpo humano em homeostase.

Discussão acerca do seio com um tumor

Nesta simulação, observa-se a presença do tumor na região inferior direita do domínio dada a distorção na distribuição das isotermais causada por este. A presença do tumor alterou significativamente a temperatura do local em relação ao caso controle, saindo de meados de 32.5°C para algo próximo de 36°C , sendo um comportamento esperado de acordo com os argumentos apontados por Centigul e Herman [91].

Neste caso, o aumento de temperatura causado pela presença do tumor nas proximidades da superfície da pele é suficiente para que equipamentos de imageamento térmico possam identificá-lo, tal como nos experimentos conduzidos por [92].

Nota-se também que o refinamento local mostrou-se adequado e de grande importância, uma vez que proporcionou uma boa definição nas isotermas nas vizinhanças da região acometida pela doença.

Discussão acerca do seio com dois tumores

Os resultados para esta simulação são similares aos encontrados na simulação anterior com apenas um tumor. Novamente percebe-se a presença das lesões pela modificação significativa das isotermas, com temperaturas próximas aos $36^{\circ}C$ nos núcleos de cada região afetada.

Contudo, pode-se afirmar também que o tamanho escolhido para as lesões não ocasiona grandes alterações na distribuição de temperatura em todo o seio, com os efeitos mais vigorosos restringindo-se apenas às vizinhanças imediatas de cada tumor. Em particular, o tumor localizado mais ao centro da malha, com o tamanho escolhido para a simulação, não é capaz de alterar de forma perceptível a distribuição de temperatura nas fronteiras da pele mais próximas, fato este que demonstra que o exame de imageamento térmico praticado por Centigul e Herman [92] não seria suficiente para detectá-lo.

Por fim, observa-se que a malha utilizada foi capaz de proporcionar uma boa definição para o gráfico final, enfatizando o benefício possibilitado pelo uso de malhas não estruturadas em obter, de forma simples, um maior número de elementos apenas nas regiões desejadas, evitando sobrecargas computacionais desnecessárias.

6.10 PROBLEMA 10 - ORDEM DE CONVERGÊNCIA DA METODOLOGIA EXPOSTA PARA UM SISTEMA DE DUAS EDPEs ACOPLADAS

6.10.1 Apresentação

Visando investigar o comportamento e a eficácia da metodologia apresentada neste trabalho na solução de sistemas de duas EDPEs acopladas, buscou-se resolver numericamente um sistema de equações oriundo da modelagem de um fenômeno reativo-difusivo, conhecido na Química por sistema Brusselator. Grzybowski [37] aponta que o sistema de equações do tipo Brusselator modela reações onde há transformações entre diferentes espécies químicas por meio de difusão, de modo que a taxa de variação da concentração de cada espécie interfere nas taxas de variação da concentração das outras.

Ang [4] apresenta as equações do sistema Brusselator, dadas por:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = B + \phi^2 \psi - (A + 1)\phi + \Gamma \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \\ \frac{\partial \psi}{\partial t} = A\phi - \phi^2 \psi + \Gamma \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right), \end{cases} \quad (6.17)$$

sendo A e B constantes conhecidas e Γ o coeficiente de difusão do meio em que as espécies químicas reagem. Este modelo é definido em uma região $D \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+$, limitada por uma fronteira simplesmente fechada.

A fim de se obter a ordem de convergência da metodologia apresentada pelo presente trabalho para problemas do tipo descrito na Equação (6.17), utilizou-se como caso a ser estudado um problema proposto também por Ang [4], considerando $A = 1, B = 0$ e $\Gamma = \frac{1}{4}$, definido no domínio triangular $\Omega = \{(0, 1); (0.5, (1 - \sqrt{0.75})); (1, 1)\} \in \mathbb{R}^2$. Nestas condições, as soluções analíticas do sistema são dadas por $\phi(x, y, t) = \exp(-\frac{t}{2} - x - y)$ e $\psi(x, y, t) = \exp(\frac{t}{2} + x + y)$.

Uma vez que o presente trabalho limita-se a investigar EDPs elípticas, o termo temporal das equações mostradas na Equação (6.17) são iguais a zero, e as soluções analíticas aplicadas como condição de contorno do tipo Dirichlet também levam este fator em consideração. Assim, o problema aqui resolvido resume-se ao caso estacionário do problema de Ang [4] quando $t = 0$.

6.10.2 Resultados

A seguir serão apresentados os resultados para a análise de ordem de convergência para o sistema Brusselator. O procedimento utilizado nesta etapa foi exatamente o mesmo dos utilizados para as análises de ordem de convergência anteriores, apenas estendendo as etapas necessárias para a nova variável ψ .

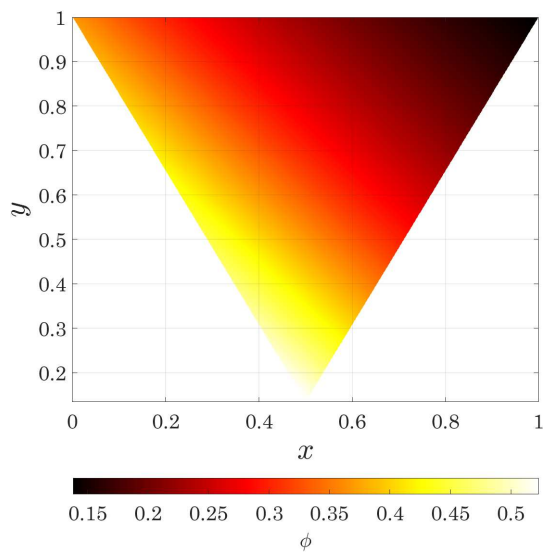
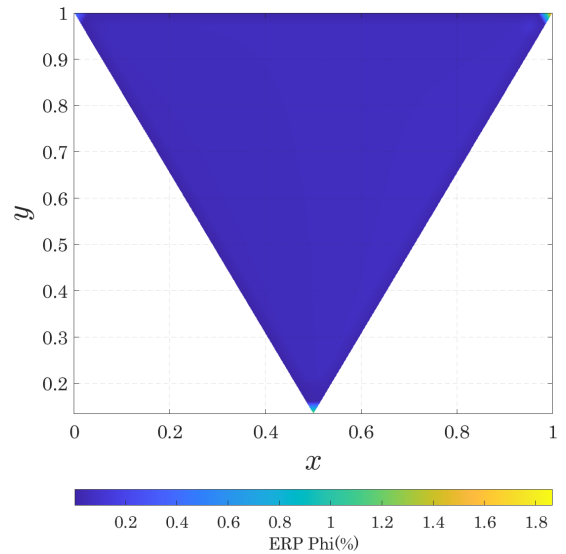
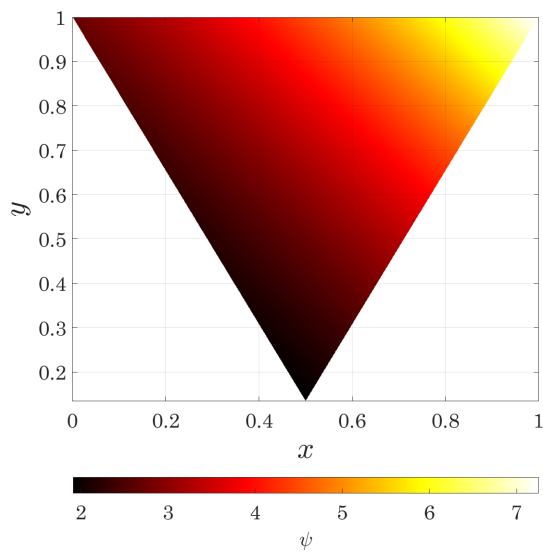
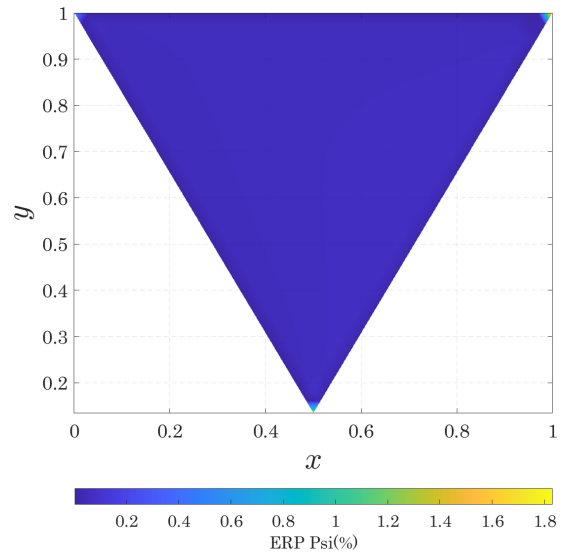
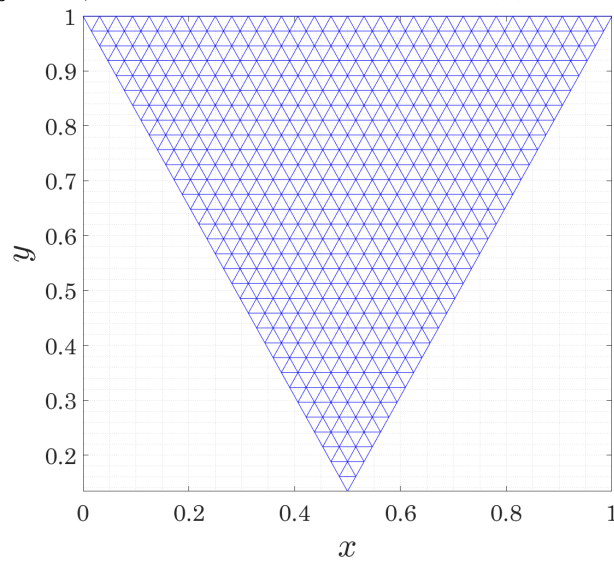
As Tabelas 6.12 e 6.13 mostram, respectivamente, os dados coletados para as duas variáveis, em simulações com malhas de índices de distorção e qualidade variados. Os gráficos das distribuições de ϕ e ψ , bem como as respectivas distribuições de ERP e malhas utilizadas para os casos de $D = 0$ com $nT = 1024$ elementos e $D = 0.5$ com $nT = 1024$ elementos são apresentados nas Figuras 6.28 e 6.29 nesta ordem.

Resultado 10 (a) - $D = 0$; $Q = 1$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3290	2.9432E-03	5.6380E-02	**	**	**	**
16	18	0.1645	3.1289E-03	2.4644E-02	0.9407	2.2878	-0.0883	1.1939
64	19	0.0823	1.1289E-03	7.2377E-03	2.7716	3.4049	1.4707	1.7676
256	19	0.0411	3.2817E-04	1.9329E-03	3.4400	3.7445	1.7824	1.9047
1024	19	0.0206	8.7980E-05	4.9794E-04	3.7301	3.8818	1.8993	1.9568
Resultado 10 (b) - $D = 0.025$; $Q = 0.998$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3202	2.8012E-03	5.5615E-02	**	**	**	**
16	18	0.1601	3.1514E-03	2.5390E-02	0.8889	2.1904	-0.1699	1.1312
64	19	0.0800	1.2483E-03	8.0505E-03	2.5246	3.1538	1.3360	1.6571
256	19	0.0400	4.2651E-04	2.4669E-03	2.9268	3.2634	1.5493	1.7064
1024	19	0.0200	1.4857E-04	8.0289E-04	2.8708	3.0725	1.5214	1.6194
Resultado 10 (c) - $D = 0.05$; $Q = 0.995$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3123	2.6946E-03	5.5023E-02	**	**	**	**
16	18	0.1561	3.1614E-03	2.6103E-02	0.8523	2.1079	-0.2305	1.0758
64	19	0.0781	1.3397E-03	8.7992E-03	2.3598	2.9665	1.2387	1.5688
256	19	0.0390	5.0352E-04	2.9589E-03	2.6607	2.9738	1.4118	1.5723
1024	19	0.0195	1.9632E-04	1.0830E-03	2.5648	2.7321	1.3589	1.4501
Resultado 10 (d) - $D = 0.25$; $Q = 0.861$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.2500	2.1901E-03	5.1789E-02	**	**	**	**
16	18	0.1250	2.8283E-03	3.1062E-02	0.7744	1.6673	-0.3689	0.7375
64	19	0.0625	1.5452E-03	1.3572E-02	1.8304	2.2887	0.8721	1.1945
256	20	0.0313	7.5659E-04	6.0171E-03	2.0423	2.2556	1.0302	1.1735
1024	20	0.0156	3.6772E-04	2.7857E-03	2.0575	2.1600	1.0409	1.1110
Resultado 10 (e) - $D = 0.5$; $Q = 0.771$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.2500	5.6477E-03	8.5717E-02	**	**	**	**
16	19	0.1250	5.9752E-03	5.4901E-02	0.9452	1.5613	-0.0813	0.6427
64	20	0.0625	3.3346E-03	2.5145E-02	1.7919	2.1834	0.8415	1.1266
256	22	0.0313	1.6693E-03	1.1497E-02	1.9976	2.1871	0.9983	1.1290
1024	24	0.0156	8.2482E-04	5.4245E-03	2.0238	2.1195	1.0171	1.0837

Tabela 6.12: Dados obtidos para a variável ϕ a partir das simulações do problema Brusselator, apresentado por Ang [4] e modelado pela Equação (6.17) para malhas com diferentes índices de refinamento h e fatores de distorção D . Fonte: autoria própria.

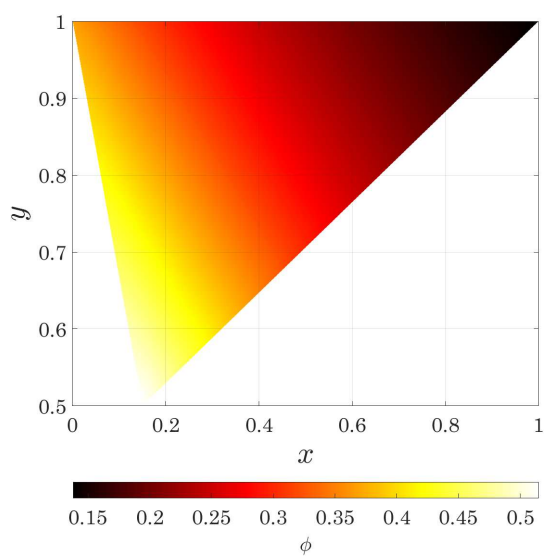
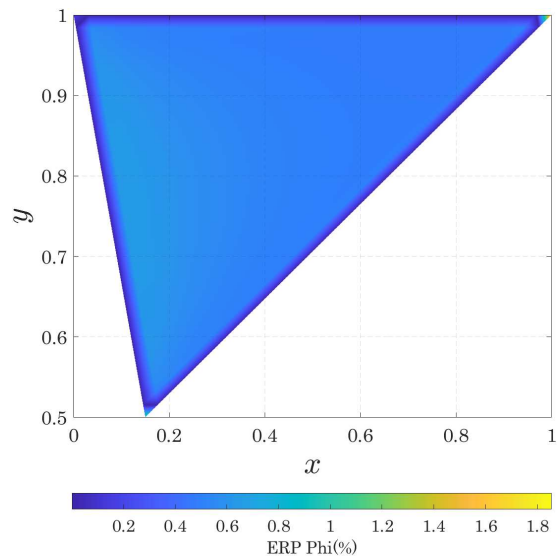
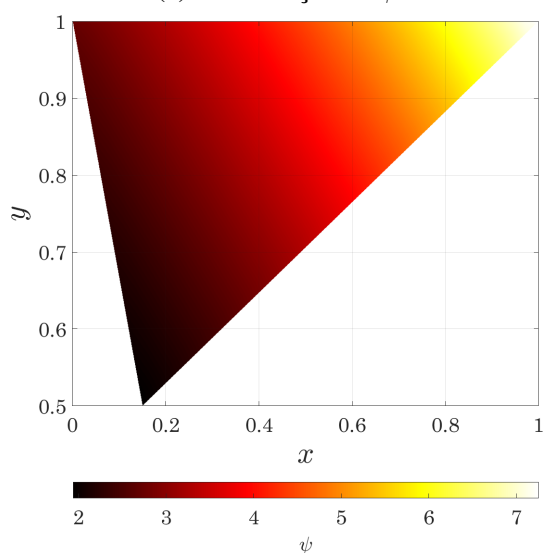
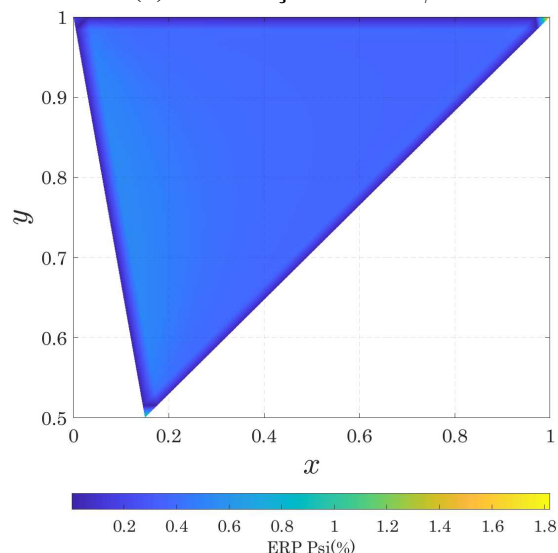
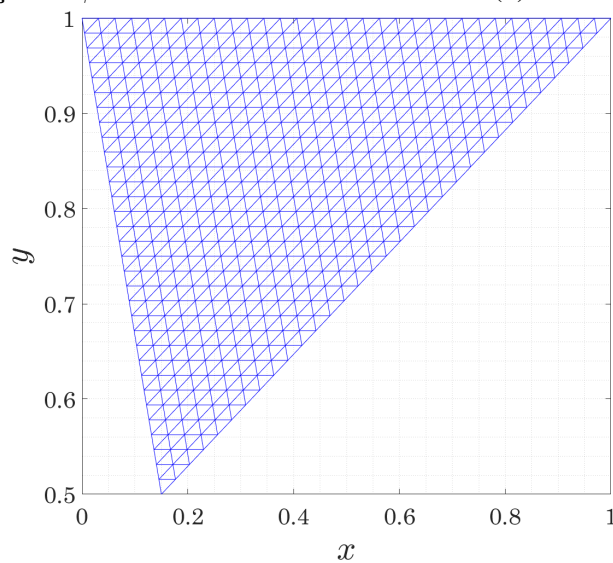
Resultado 10 (f) - $D = 0$; $Q = 1$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3290	3.8826E-02	7.5116E-02	**	**	**	**
16	18	0.1645	4.0082E-02	3.0500E-02	0.9687	2.4628	-0.0459	1.3003
64	19	0.0823	1.4464E-02	8.9581E-03	2.7712	3.4047	1.4705	1.7675
256	19	0.0411	4.2207E-03	2.4039E-03	3.4269	3.7265	1.7769	1.8978
1024	19	0.0206	1.1347E-03	6.2144E-04	3.7197	3.8683	1.8952	1.9518
Resultado 10 (g) - $D = 0.025$; $Q = 0.998$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3202	3.4934E-02	7.2410E-02	**	**	**	**
16	18	0.1601	3.4106E-02	2.7821E-02	1.0243	2.6027	0.0346	1.3800
64	19	0.0800	1.0995E-02	7.6659E-03	3.1020	3.6292	1.6331	1.8596
256	19	0.0400	2.5164E-03	1.8442E-03	4.3693	4.1568	2.1275	2.0555
1024	19	0.0200	3.7014E-04	4.0866E-04	6.7985	4.5128	2.7652	2.1740
Resultado 10 (h) - $D = 0.05$; $Q = 0.995$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.3123	3.1844E-02	7.0140E-02	**	**	**	**
16	18	0.1561	2.9207E-02	2.5668E-02	1.0903	2.7326	0.1247	1.4502
64	19	0.0781	8.2239E-03	6.7152E-03	3.5515	3.8224	1.8285	1.9345
256	19	0.0390	1.3451E-03	1.5524E-03	6.1140	4.3257	2.6121	2.1129
1024	19	0.0195	6.1120E-04	4.6275E-04	2.2008	3.3547	1.1380	1.7463
Resultado 10 (i) - $D = 0.25$; $Q = 0.861$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.2500	1.6421E-02	5.5057E-02	**	**	**	**
16	18	0.1250	8.8261E-03	1.7071E-02	1.8605	3.2252	0.8957	1.6894
64	19	0.0625	8.4748E-03	6.9647E-03	1.0415	2.4511	0.0586	1.2934
256	20	0.0313	6.6059E-03	3.8743E-03	1.2829	1.7977	0.3594	0.8461
1024	20	0.0156	4.0202E-03	2.1384E-03	1.6432	1.8118	0.7165	0.8574
Resultado 10 (j) - $D = 0.5$; $Q = 0.771$; $maxItGS = 10000$								
N° de volumes	Iterações	h	E_2	E_{RMS}	Quociente E_2	Quociente E_{RMS}	qE_2	qE_{RMS}
4	2	0.2500	2.0003E-02	6.1240E-02	**	**	**	**
16	19	0.1250	1.2966E-02	2.3587E-02	1.5427	2.5963	0.6255	1.3765
64	20	0.0625	1.6748E-02	1.3162E-02	0.7742	1.7921	-0.3693	0.8416
256	22	0.0313	1.1955E-02	7.5760E-03	1.4009	1.7373	0.4864	0.7969
1024	24	0.0156	7.0203E-03	4.0992E-03	1.7029	1.8482	0.7680	0.8861

Tabela 6.13: Dados obtidos para a variável ψ a partir das simulações do problema Brusselator, apresentado por Ang [4] e modelado pela Equação (6.17) para malhas com diferentes índices de refinamento h e fatores de distorção D . Fonte: autoria própria.

(a) Distribuição de ϕ (b) Distribuição de ERP ϕ (c) Distribuição de ψ (d) Distribuição de ERP ψ 

(e) Malha utilizada

Figura 6.28: Gráficos da distribuição de ϕ , ERP ϕ , ψ , ERP ψ para o Problema 10, plotados com os resultados obtidos pela malha de 1024 volumes de controle e com distorção $D = 0$. Fonte: autoria própria.

(a) Distribuição de ϕ (b) Distribuição de ERP ϕ (c) Distribuição de ψ (d) Distribuição de ERP ψ 

(e) Malha utilizada

Figura 6.29: Gráficos da distribuição de ϕ , ERP ϕ , ψ , ERP ψ para o Problema 10, plotados com os resultados obtidos pela malha de 1024 volumes de controle e com distorção $D = 0.5$. Fonte: autoria própria.

6.10.3 Discussões

Como primeiro fato a se observar a partir dos dados expostos, a ordem de convergência em relação ao caso de uma variável, abordado no Problema 1, manteve-se muito semelhante para a variável ϕ , mas o mesmo resultado não foi o observado para a variável ψ . Acredita-se que a ordem em que as variáveis foram resolvidas pelo código pode ser um fator que justifique este acontecimento.

Contudo, mesmo com resultados menos favoráveis, as simulações para a variável ψ não destoaram muito dos valores teóricos apontados por Benkhaldoun *et al.* [11] e Coudiere, Villa e Viledieu [20]. Não encontrou-se na literatura alguma informação à respeito da abordagem segregada na resolução de sistemas de EDPEs e diminuição na ordem de convergência do método. Novamente pode-se creditar, com certa confiabilidade, que a qualidade das malhas utilizadas foi o fator preponderante para a redução na ordem de convergência percebida, mais uma vez reiterando a importância de malhas de boa qualidade para que bons resultados sejam atingidos.

Por fim, percebe-se que o algoritmo desenvolvido foi capaz de atender à demanda proposta, novamente entregando soluções com baixos índices de ERP e custo computacional reduzido. O tratamento do acoplamento das equações por meio dos termos fontes também mostrou-se satisfatório.

7 CONCLUSÃO

A partir dos resultados expostos, pode-se concluir que a formulação e o algoritmo apresentado são capazes de resolver problemas Elípticos definidos em domínios bidimensionais, com coeficientes de difusão uniforme e não uniforme, com ou sem interfaces, discretizados por malhas não estruturadas triangulares de diversos níveis de distorção, além de terem se mostrado eficazes em atingir a ordem de convergência teórica $O(h^2)$. Também conclui-se que a estrutura do algoritmo pôde ser adaptada para a resolução de problemas modelados por EDPs elípticas acopladas, tal como visto na literatura, e que os resultados obtidos são condizentes com os resultados apresentados para o caso de uma única EDPE. O código também mostrou ser uma ferramenta capaz de entregar os benefícios oriundos da formulação não estruturada no que se refere à possibilidade de se trabalhar com geometrias arbitrárias, descontinuidades e malhas com refinamentos locais.

Entretanto, apesar de sabido na literatura que a qualidade da malha influencia a precisão dos resultados e aumenta o custo computacional de obtê-los, a metodologia utilizada também se mostrou desfavoravelmente sensível aos índices de distorção D e de qualidade Q , de tal forma que a ordem de convergência ao se utilizar malhas distorcidas fora consideravelmente menor do que o caso ideal, apesar de permanecer próxima aos limites previstos. Estes dados indicam que a obtenção de bons resultados é sempre precedida pela geração de malhas de boa qualidade, porém, até os resultados obtidos por malhas de menor qualidade continuam oferecendo soluções com boa acurácia.

No que tange o processo iterativo de solução do sistema linear, constatou-se uma grande economia de processamento ao permitir que o método de Gauss-Seidel completasse diversas iterações antes de se atualizar a parcela explícita do sistema linear (oriunda dos termos fontes e do efeito da difusão cruzada), de modo que o tempo necessário para a resolução de problemas com malhas refinadas pode ser drasticamente reduzido ao se adotar esta solução. Este benefício foi amplamente explorado na resolução de EDPEs acopladas, uma vez que o custo computacional é proporcional ao número de variáveis analisadas. Desta forma, soluções foram obtidas de maneira rápida e com baixo acréscimo de custo computacional.

8 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A realização deste trabalho possibilitou a identificação de caminhos a serem seguidos para um desenvolvimento continuado dos temas tratados. Algumas ideias possíveis são apresentadas a seguir:

- Utilizar outras técnicas de resolução de sistemas lineares para comparar o tempo computacional necessário para a obtenção dos resultados;
- Implementar uma interface de entrada de dados amigável;
- Aprimorar o código para ser capaz de lidar com malhas formadas pela união de polígonos de diversas formas;
- Implementar um esquema *multigrid* para melhorar a velocidade de convergência;
- Comparação do método de discretização proposto com o método *over-relaxed*;
- Investigar se a ordem das variáveis na solução das EDPs acoplada importa para a ordem de convergência;
- Aprimorar o código para torná-lo capaz de resolver problemas Parabólicos (em regime não permanente);
- Aplicar outras abordagens de discretização e de implementação das condições de contorno dos tipos Neumann e Robin.

REFERÊNCIAS

- [1] *Ansys® Fluent User's Guide*, release 12.1 ed., 2008.
- [2] AFTOSMIS, M., GAITONDE, D., AND TAVARES, T. S. Behavior of linear reconstruction techniques on unstructured meshes. *AIAA Journal* 33, 11 (1995), 2038–2049.
- [3] AHRENS, J., GEVECI, B., AND LAW, C. *ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization*. Visualization Handbook. Elsevier, 2005.
- [4] ANG, W.-T. The two-dimensional reaction–diffusion brusselator system: a dual-reciprocity boundary element solution. *Engineering Analysis with Boundary Elements* 27, 9 (2003), 897–903.
- [5] APOSTOL, T. M. *Calculus, Vol. 2: Multi-Variable Calculus and Linear Algebra with Applications to Differential Equations and Probability*, 2nd ed., vol. 2. Wiley, 1969.
- [6] ARFKEN, G. B., HARRIS, F. E., AND WEBER, H.-J. *Mathematical Methods for Physicists, Seventh Edition: A Comprehensive Guide*, 7ed. ed. Elsevier, 2013.
- [7] ASMOUH, I., EL-AMRANI, M., SEAID, M., AND YEBARI, N. A conservative semi-lagrangian finite volume method for convection-diffusion problems on unstructured grids. *Journal of Scientific Computing* 85, 1 (2020), 1–25.
- [8] AZEVEDO, J. L. F., FIGUEIRA DA SILVA, L. F., AND STRAUSS, D. Order of accuracy study of unstructured grid finite volume upwind schemes. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering* 32 (2010), 78–93.
- [9] BAQER, Y., AND CHEN, X. A review on reactive transport model and porosity evolution in the porous media. *Environmental Science and Pollution Research* 29, 32 (Jul 2022), 47873–47901.
- [10] BASSANEZI, R. C., AND JUNIOR, W. C. F. *Equações Diferenciais com aplicações*. Harbra, 1988.
- [11] BENKHALDOUN, F., ELMAHI, I., AND SEAID, M. Well-balanced finite volume schemes for pollutant transport by shallow water equations on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics* 226, 1 (2007), 180–203.
- [12] BERN, M., AND PLASSMANN, P. *Handbook of Computational Geometry*. North-Holland, Amsterdam, 2000, ch. Chapter 6 - Mesh Generation, pp. 291–332.

- [13] BLAZEK, J. *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*, 3 ed. Butterworth-Heinemann, 2015.
- [14] BOYCE, W. E., DIPRIMA, R. C., AND MEADE, D. B. *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*, 11th ed. Wiley, 2017.
- [15] CALDWELL, J., AND KWAN, Y. Numerical methods for one-dimensional stefan problems. *Communications in numerical methods in engineering* 20, 7 (2004), 535–545.
- [16] CARDIFF, P., AND DEMIRDŽIĆ, I. A. Thirty years of the finite volume method for solid mechanics. *Archives of Computational Methods in Engineering* 28, 5 (2021), 3721–3780.
- [17] CARY, A., DORGAN, A., AND MANI, M. *Towards Accurate Flow Predictions Using Unstructured Meshes*.
- [18] CHAPRA, S. C., AND CANALE, R. P. *Numerical Methods for Engineers*, 5 ed. Mcgraw-hill, New York, 2011.
- [19] COIRIER, W. J. *An adaptively-refined, Cartesian, cell-based scheme for the Euler and Navier-Stokes equations*. PhD thesis, 1994.
- [20] COUDIÈRE, Y., VILA, J. P., AND VILLEDIEU, P. Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. *ESAIM: M2AN* 33, 3 (1999), 493–516.
- [21] DALAL, A., ESWARAN, V., AND BISWAS, G. A finite-volume method for navier-stokes equations on unstructured meshes. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 54, 3 (2008), 238–259.
- [22] DAVIDSON, L. A pressure correction method for unstructured meshes with arbitrary control volumes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 22, 4 (1996), 265–281.
- [23] DAVIDSON, L., AND STOLCIS, L. *An efficient and stable solution procedure of compressible turbulent flow on general unstructured meshes using transport turbulence models*. 1995.
- [24] DEMIRDŽIĆ, I. A. Finite-volume method for general geometries based on cartesian velocity components and non-staggered grid arrangement.
- [25] DEMIRDŽIĆ, I. A. On the discretization of the diffusion term in finite-volume continuum mechanics. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 68, 1 (2015), 1–10.
- [26] DEMIRDŽIĆ, I. A., LILEK, Ž., AND PERIĆ, M. A collocated finite volume method for predicting flows at all speeds. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 16, 12 (1993), 1029–1050.

- [27] DEMIRDŽIĆ, I. A., AND MUZAFERIJA, S. Numerical method for coupled fluid flow, heat transfer and stress analysis using unstructured moving meshes with cells of arbitrary topology. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 125, 1 (1995), 235–255.
- [28] DEMIRDŽIĆ, I. A., AND PERIĆ, M. Finite volume method for prediction of fluid flow in arbitrarily shaped domains with moving boundaries. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 10, 7 (1990), 771–790.
- [29] DOUGHERTY, B. On the average of a function and the mean value theorem for integrals. *Pi Mu Epsilon journal* 14, 4 (2016), 251–254.
- [30] ELMAHI, I., BENKHALDOUN, F., BORGHI, R., AND RAGHAY, S. Ignition of fuel issuing from a porous cylinder located adjacent to a heated wall: A numerical study. *Combustion Theory and Modelling* 8, 4 (2004), 789–809.
- [31] FERZIGER, J. H., AND PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 3rd ed. Springer, 2002.
- [32] FEYNMAN, R. P., LEIGHTON, R. B., AND SANDS, M. *The Feynman Lectures on Physics, Vol. I: The New Millennium Edition: Mainly Mechanics, Radiation, and Heat*, vol. 1. Basic Books, 2013.
- [33] FISHER, M. S. *Software verification and validation: an engineering and scientific approach*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [34] FORTUNA, A. D. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. Editora edusp, São Paulo, 2000.
- [35] GAO, H., TATOMIR, A. B., KARADIMITRIOU, N. K., STEEB, H., AND SAUTER, M. Effect of pore space stagnant zones on interphase mass transfer in porous media, for two-phase flow conditions. *Transport in Porous Media* 146, 3 (Feb 2023), 639–667.
- [36] GILAT, A., AND SUBRAMANIAM, V. *Métodos numéricos para engenheiros e cientistas: uma introdução com aplicações usando o MATLAB*. Bookman Editora, 2009.
- [37] GRZYBOWSKI, B. A. *Chemistry in Motion Reaction-Diffusion Systems for Micro- and Nanotechnology*, vol. 1. Wiley, 2009.
- [38] HABER, E., AND ASCHER, U. M. Fast finite volume simulation of 3d electromagnetic problems with highly discontinuous coefficients. *SIAM Journal on Scientific Computing* 22, 6 (2001), 1943–1961.

- [39] HARLOW, F. H., AND WELCH, J. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The physics of fluids* 8, 12 (1965), 2182–2189.
- [40] HIGDON, R. L. Radiation boundary conditions for dispersive waves. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 31, 1 (1994), 64–100.
- [41] HOLZBECHER, E., AND OEHLMANN, S. Comparison of heat and mass transport at the micro-scale.
- [42] ISRAEL, G., AND GASCA, A. M. *The world as a mathematical game: John von Neumann and twentieth century science*, 1 ed. Science Networks. Historical Studies. Birkhäuser Basel, 2009.
- [43] JACQ, P. *Finite Volume methods on unstructured grids for solving anisotropic heat transfer and compressible Navier-Stokes equations*. PhD thesis, Université de Bordeaux, 2014.
- [44] JALALI, A., SHARBATDAR, M., AND OLLIVIER-GOOCH, C. Accuracy analysis of unstructured finite volume discretization schemes for diffusive fluxes. *Computers and Fluids* 101 (2014), 220–232.
- [45] JASAK, H. *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*. PhD thesis, 1996.
- [46] JAYANTHA, P. A., AND TURNER, I. W. A comparison of gradient approximations for use in finite-volume computational models for two-dimensional diffusion equations. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 40, 5 (2001), 367–390.
- [47] KIM, D., AND CHOI, H. A second-order time-accurate finite volume method for unsteady incompressible flow on hybrid unstructured grids. *Journal of computational physics* 162, 2 (2000), 411–428.
- [48] KIM, S.-E. Unstructured mesh based reynolds stress transport modeling of complex turbulent shear flows. In *39th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2001), p. 728.
- [49] KREYSZIG, E., KREYSZIG, H., AND NORMINTON, E. J. *Advanced engineering mathematics*, 10th ed ed. Wiley, 2011.
- [50] LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, 1 ed. Cambridge texts in applied mathematics. Cambridge University Press, 2002.
- [51] LEVEQUE, R. J. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*. Classics in Applied Mathematics. SIAM, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007.

- [52] LI, D. *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*. Springer US, 2014.
- [53] LIENHARD IV, J. H., AND LIENHARD V, J. H. *A Heat Transfer Textbook: Fourth Edition*, 4 ed. Dover Publications, 2011.
- [54] LISEIKIN, V. D. *Grid Generation Methods*, 3 ed. Scientific Computation. Springer International Publishing, 2017.
- [55] LOPES, M. M., DOMINGUES, M. O., SCHNEIDER, K., AND MENDES, O. Local time-stepping for adaptive multiresolution using natural extension of runge-kutta methods. *Journal of Computational Physics* 382 (2019), 291–318.
- [56] MACKOWSKI, D. W. *Conduction heat transfer: Notes for MECH 7210*. 2011.
- [57] MAJUMDAR, P. *Computational Methods for Heat and Mass Transfer*, 1 ed. Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and. CRC Press, 2005.
- [58] MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, 2 ed. LTC Editora, Rio de Janeiro, 2004.
- [59] MATHUR, S. R., AND MURTHY, J. Y. A pressure-based method for unstructured meshes. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 31, 2 (1997), 195–215.
- [60] MAZUMDER, S. *Numerical Methods for Partial Differential Equations. Finite Difference and Finite Volume Methods*, 1 ed. Academic Press, 2016.
- [61] MOUKALLED, F., MANGANI, L., AND DARWISH, M. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab®*. Fluid Mechanics and Its Applications 113. Springer, 2016.
- [62] MUZAFERIJA, S. *Adaptive finite volume method for flow prediction using unstructured meshes and multigrid approach*. PhD thesis, University of London UK, 1994.
- [63] MUZAFERIJA, S., AND GOSMAN, D. Finite-volume cfd procedure and adaptive error control strategy for grids of arbitrary topology. *Journal of Computational Physics* 138, 2 (1997), 766–787.
- [64] NISHIKAWA, H., AND WHITE, J. A. *Face-Averaged Nodal-Gradient Approach to Cell-Centered Finite-Volume Method on Triangular Grids*.
- [65] NUSSENZVEIG, H. M. *Curso de física básica: Ótica Relatividade Física Quântica*, 1 ed., vol. 4. Blucher, São Paulo, 2010.
- [66] OLIVEIRA, T. R. M. DE, S. G. R. R. N. M. L. . S. G. L. Estudo de modelos matemáticos para a análise térmica na pele humana. *Revista Brasileira De Física Médica* 12 (2018), 42–48.

- [67] ORLANSKI, I. A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows. *Journal of computational physics* 21, 3 (1976), 251–269.
- [68] ORTEGA, J. *Numerical Analysis: A Second Course*. Classics in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1990.
- [69] ÖZİŞİK, M., ORLANDE, H. R. B., COLAÇO, M. J., AND COTTA, R. M. *Finite Difference Methods in Heat Transfer*. CRC Press, Boca Raton, 2017.
- [70] PALMER, T. S. A new point-centered diffusion differencing for unstructured meshes.
- [71] PATANKAR, S. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1 ed. Hemisphere Series on Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Taylor Francis, 1980.
- [72] PENNES, H. H. Analysis of tissue and arterial blood temperatures in the resting human forearm. *Journal of Applied Physiology* 1, 2 (1948), 93–122.
- [73] PEREZ-SEGARRA, C. D., FARRE, C., CADAFALCH, J., AND OLIVA, A. Analysis of different numerical schemes for the resolution of convection-diffusion equations using finite-volume methods on three-dimensional unstructured grids. part i: Discretization schemes. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 49, 4 (2006), 333–350.
- [74] PEREZ-SEGARRA, C. D., FARRE, C., SORIA, M., AND CADAFALCH, J. Analysis different numerical schemes for the resolution of convection-diffusion equations using finite volume methods on unstructured grids. In *42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2004), p. 245.
- [75] PERSSON, P.-O., AND STRANG, G. A simple mesh generator in matlab. *SIAM review* 46, 2 (2004), 329–345.
- [76] ROACHE, P. J. Verification of codes and calculations. *AIAA Journal* 36, 5 (1998), 696–702.
- [77] ROACHE, P. J. Code verification by the method of manufactured solutions. *Journal of Fluids Engineering* 124, 1 (11 2001), 4–10.
- [78] SALARI, K., AND KNUPP, P. Code verification by the method of manufactured solutions. *Sandia National Laboratories* (6 2000).
- [79] SCHROEDER, W., MARTIN, K., AND LORENSEN, B. *The Visualization Toolkit: An Object Oriented Approach to 3D Graphics 3rd Edition*, 4 ed. Kitware, Inc., 2006.
- [80] STRAUSS, W. A. *Partial Differential Equations*. Wiley, 2008.
- [81] SWANSON, R. C., AND RADESPIEL, R. Cell centered and cell vertex multigrid schemes for the navier-stokes equations. *AIAA Journal* 29, 5 (1991), 697–703.

- [82] THOMPSON, J. F. The national grid project. *Computing Systems in Engineering* 3, 1-4 (1992), 393–399.
- [83] THOMPSON, J. F., SONI, B. K., AND WEATHERILL, N. P. *Handbook of Grid Generation*, 1 ed. CRC-Press, 1998.
- [84] THOMPSON, J. F., WARSI, Z. U. A., AND MASTIN, C. W. *Numerical grid generation: foundations and applications*, draft ed. Elsevier Science Ltd, 1985.
- [85] TRAORÉ, P., AHIPO, Y. M., AND LOUSTE, C. A robust and efficient finite volume scheme for the discretization of diffusive flux on extremely skewed meshes in complex geometries. *Journal of Computational Physics* 228, 14 (2009), 5148–5159.
- [86] TSUI, Y.-Y., AND PAN, Y.-F. A pressure-correction method for incompressible flows using unstructured meshes. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 49, 1 (2006), 43–65.
- [87] VERSTEEG, H. K., AND MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, 2 ed. Pearson, 2007.
- [88] XUE, S. C., AND BARTON, G. W. A finite volume formulation for transient convection and diffusion equations with unstructured distorted grids and its applications in fluid flow simulations with a collocated variable arrangement. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 253 (2013), 146–159.
- [89] YAN, G., PUNERIA, V. P., JALALI, A., AND GOOCH, C. F. O. *Truncation and Discretization Error for Diffusion Schemes on Unstructured Meshes*.
- [90] ZHIMING, G., AND JIMING, W. A linearity preserving cell-centered scheme for the heterogeneous and anisotropic diffusion equations on general meshes. Research report, 2011.
- [91] ÇETİNGÜL, M. P., AND HERMAN, C. A heat transfer model of skin tissue for the detection of lesions: sensitivity analysis. *Phys Med Biol* (2010).
- [92] ÇETİNGÜL, M. P., AND HERMAN, C. Quantification of the thermal signature of a melanoma lesion. *International Journal of Thermal Sciences* 50, 4 (2011), 421–431.