



UNIVERSIDADE
ESTADUAL de LONDRINA

NATHALIA ALVARES

**UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS PARA EDP ELÍPTICA
BIDIMENSIONAL COM CÉLULAS TRIANGULARES E
QUADRANGULARES**

LONDRINA

2026

NATHALIA ALVARES

**UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS PARA EDP ELÍPTICA
BIDIMENSIONAL COM CÉLULAS TRIANGULARES E
QUADRANGULARES**

Dissertação apresentada ao Departamento de
Matemática da Universidade Estadual de Lon-
drina para obtenção do título de Mestre em Ma-
temática Aplicada e Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Gylles Ricardo
Ströher

**LONDRINA
2026**

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

A473u Alvares, Nathalia.

Um método de volumes finitos para EDP elíptica bidimensional com células triangulares e quadrangulares / Nathalia Alvares. - Londrina, 2026.
102 f. : il.

Orientador: Gylles Ricardo Ströher.

Dissertação (Mestrado em Matemática em Rede Nacional) - Universidade Estadual de Londrina, Centro de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Matemática em Rede Nacional, 2026.

Inclui bibliografia.

1. Método de Volumes Finitos - Tese. 2. Malhas não estruturadas - Tese. 3. Reconstrução do Gradiente - Tese. 4. Método de Green-Gauss - Tese. I. Ströher, Gylles Ricardo. II. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Matemática em Rede Nacional. III. Título.

CDU 51

NATHALIA ALVARES

**UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS PARA EDP ELÍPTICA
BIDIMENSIONAL COM CÉLULAS TRIANGULARES E
QUADRANGULARES**

Dissertação apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

BANCA EXAMINADORA

Orientador: Prof. Dr. Gylles Ricardo Ströher
Universidade Tecnológica Federal do Paraná –
UTFPR

Prof.^a. Dr.^a. Neyva Maria Lopes Romeiro
Universidade Estadual de Londrina – UEL

Prof. Dr. Cosmo Damião Santiago
Universidade Tecnológica Federal do Paraná –
UTFPR

Londrina, 25 de fevereiro de 2026.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus por me conceder força e perseverança para concluir esta jornada. Nos momentos de incerteza, Sua presença foi o amparo necessário para que eu não desistisse, tanto nos estudos quanto na vida pessoal.

À minha família, base fundamental da minha trajetória, meu eterno agradecimento. Aos meus pais, Valdenir e Izabel, por todo o sacrifício, apoio incondicional e por serem meu porto seguro. A minhas irmãs, Camila e Beatriz, pelo companheirismo e pelo incentivo constante.

Um agradecimento especial aos meus avós, Alfredo Pires e Terezinha Alvares, que mesmo não tendo o tempo terreno para me ver concluir mais esta etapa, foram pilares fundamentais e permanecem vivos em minha memória e coração.

Agradeço ainda ao meu melhor amigo e namorado, Arley, por seu apoio incondicional, especialmente durante este último ano tão desafiador. Você me amparou nas crises de ansiedade, quando eu temia que tudo pudesse dar errado, e tem celebrado com genuíno júbilo cada uma das minhas vitórias. Sua presença fez toda a diferença.

Aos colegas e amigos de curso, pelas trocas de conhecimento. Um agradecimento especial às minhas queridas amigas do mestrado, Maria Graziela e Larissa. Obrigada pela parceria desde o início da pós-graduação, por dividirem as angústias e as alegrias desta etapa, e por tornarem o caminho mais leve e divertido. Foi um privilégio trilhar essa estrada ao lado de vocês.

Agradeço de forma especial ao professor Altair, meu orientador na graduação. Seu apoio e incentivo não cessaram com o diploma; foram fundamentais para que eu ingressasse e perseverasse no mestrado. Muito obrigada pela mentoria duradoura.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Gylles, pelos ensinamentos e pelo tempo dedicado. Sua orientação foi fundamental para o desenvolvimento deste trabalho. Agradeço também aos membros da banca examinadora, Prof^{ra}. Dr^a Neyva e Prof. Dr. Cosmo, pelas valiosas contribuições e pelo tempo dedicado à avaliação deste trabalho.

Aos professores do mestrado, pelos conhecimentos compartilhados e pelas contribuições ao meu desenvolvimento acadêmico.

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo indispensável apoio financeiro que viabilizou esta pesquisa.

Por fim, agradeço a todos que, de forma direta ou indireta, torceram por mim e contribuíram para a conclusão deste trabalho.

*“Eu sou mais forte do que eu.
(Clarisse Lispector)”*

ALVARES, N.. **Um método de volumes finitos para EDP elíptica bidimensional com células triangulares e quadrangulares**. 2026. 102f. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2026.

RESUMO

As equações diferenciais parciais elípticas modelam fenômenos de equilíbrio em diversas áreas da ciência e da engenharia, sendo frequentemente resolvidas por métodos numéricos, como o método de volumes finitos. No entanto, as análises de convergência para operadores de difusão no contexto do método de volumes finitos são frequentemente restritas a malhas que satisfazem condições de ortogonalidade, uma exigência raramente atendida por geradores automáticos de malha em geometrias complexas. Diante desse desafio, o presente trabalho propõe o desenvolvimento e a implementação de um código computacional baseado no método de volumes finitos para a solução de equações diferenciais parciais elípticas em malhas não estruturadas bidimensionais, compostas por volumes triangulares e quadrangulares. A formulação apresentada emprega uma estratégia de reconstrução de gradientes nas faces dos volumes de controle, baseada no método de Green-Gauss aplicado sobre regiões delimitadas pelos centroides de dois volumes adjacentes e pelos vértices da face compartilhada. Um dos principais diferenciais deste estudo encontra-se no tratamento das condições de contorno, propondo uma abordagem unificada que generaliza as condições de Dirichlet, Neumann e Robin por meio de uma formulação única, aplicada a um pseudocentroide definido na face de contorno. A verificação do código foi realizada por meio do Método das Soluções Fabricadas, com três casos de teste. Foram utilizadas malhas triangulares, quadrangulares e híbridas, as quais foram sistematicamente degradadas mediante distorções controladas. A qualidade da malha foi quantificada por métricas como qualidade ortogonal, distorção angular e razão de aspecto, permitindo uma análise detalhada do comportamento da convergência em função da degradação geométrica. Os resultados demonstram que a metodologia proposta mantém uma ordem de convergência próxima de dois, mesmo em malhas severamente distorcidas, tanto para meios isotrópicos quanto anisotrópicos, apresentando resultados numericamente mais satisfatórios em comparação com a abordagem tradicional baseada em interpolação geométrica para condições de contorno. A análise comparativa entre malhas triangulares e quadrangulares revelou que, para uma mesma quantidade aproximada de volumes, as malhas quadrangulares proporcionam maior precisão numérica. As malhas híbridas mostraram-se viáveis e estáveis, confirmando a flexibilidade do método. Adicionalmente, foi conduzida uma aplicação prática, simulando a difusão de oxigênio no estroma da córnea humana, ilustrando a capacidade do código em lidar com geometrias não triviais e condições de contorno complexas.

Palavras-chave: Método de Volumes Finitos. Malhas não estruturadas. Equação Diferencial Parcial Elíptica. Reconstrução do Gradiente. Método de Green-Gauss.

ALVARES, N.. **A finite volume method for two-dimensional elliptic PDEs using triangular and quadrilateral cells**. 2026. 102p. Master's Thesis (Master's in Applied and Computational Mathematics) – State University of Londrina, Londrina, 2026.

ABSTRACT

Elliptic partial differential equations model equilibrium phenomena in various fields of science and engineering and are often solved using numerical methods such as the finite volume method. However, convergence analyses for diffusion operators in the context of the finite volume method are often restricted to meshes that satisfy orthogonality conditions, a requirement rarely met by automatic mesh generators in complex geometries. In light of this challenge, this paper proposes the development and implementation of a computational code based on the finite volume method for solving elliptic partial differential equations on two-dimensional unstructured meshes composed of triangular and quadrangular volumes. The formulation presented employs a strategy for reconstructing gradients on the faces of control volumes based on the Green-Gauss method applied to regions bounded by the centroids of two adjacent volumes and the vertices of the shared face. One of the main contributions of this study lies in the treatment of boundary conditions, proposing a unified approach that generalizes the Dirichlet, Neumann, and Robin conditions through a single formulation, applied to a pseudocentroid defined on the boundary face. The code was verified using the Method of Manufactured Solutions, with three test cases. Triangular, quadrangular, and hybrid meshes were used, which were systematically degraded through controlled distortions. Mesh quality was quantified using metrics such as orthogonality, angular distortion, and aspect ratio, allowing for a detailed analysis of convergence behavior as a function of geometric degradation. The results demonstrate that the proposed methodology maintains a convergence order close to two, even in severely distorted meshes, for both isotropic and anisotropic media, yielding numerically more satisfactory results compared to the traditional approach based on geometric interpolation for boundary conditions. A comparative analysis between triangular and quadrangular meshes revealed that, for approximately the same number of volumes, quadrangular meshes provide greater numerical accuracy. Hybrid meshes proved to be viable and stable, confirming the flexibility of the method. Additionally, a practical application was conducted, simulating oxygen diffusion in the human corneal stroma, illustrating the code's ability to handle non-trivial geometries and complex boundary conditions.

Keywords: Finite Volume Method. Unstructured meshes. Elliptic Partial Differential Equation. Gradient Reconstruction. Green-Gauss Method.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Esquema ilustrativo de malhas: (a) estruturada, (b) não estruturada. Fonte: a autora.	22
Figura 2 – Exemplo de alinhamento de malha quadrilátera com as direções de curvatura principal. Fonte: Jacq [1].	24
Figura 3 – Exemplo ilustrativo mostrando a diferença no número de células entre malhas triangulares e quadrangulares para um mesmo nível de precisão. Fonte: Yu <i>et al.</i> [2].	25
Figura 4 – Exemplo de anisotropia controlada em malha quadrangular, com compressão dos volumes em diferentes direções próximas às fronteiras. Fonte: Jacq [1].	25
Figura 5 – Exemplo ilustrativo de compatibilidade da malha quadrangular com geometrias alinhadas a direções preferenciais. Fonte: Juretić e Gosman [3].	25
Figura 6 – Exemplo de interface nítida entre região refinada e não refinada em malha quadrangular, evidenciando a presença de nós não conformes na transição. Fonte: Pan, Zhong e Zhuo [4].	26
Figura 7 – Exemplo de malha triangular adaptada a uma geometria com contorno irregular e furo interno, evidenciando a capacidade de representação de detalhes geométricos. Fonte: Lacassa [5].	27
Figura 8 – Exemplo de refinamento local em malha triangular, evidenciando a redução do tamanho dos volumes na região esquerda sem a criação de interfaces não conformes.. Fonte: Gargalo-Peiró, Avila e Folch [6].	28
Figura 9 – – Propriedade do circuncentro em malhas triangulares: a linha que conecta os circuncentros de volumes adjacentes é perpendicular à face compartilhada. Fonte: adaptado de Fazenda [7].	28
Figura 10 – Exemplo de malha híbrida aplicada a um perfil aerodinâmico, ilustrando: adaptabilidade geométrica (quadriláteros anisotrópicos no contorno curvo, triângulos no interior), refinamento local (volumes refinados no contorno e maiores no campo distante) e camada limite (quadriláteros junto à superfície com transição para triângulos). Fonte: Pan, Zhong e Zhuo [4].	30
Figura 11 – Exemplo de malha híbrida demonstrando: redução do número de volumes (volumes quadrangulares na região inferior, mais regular, diminuem o número total de volumes) e flexibilidade na escolha do elemento dominante (quadriláteros em regiões regulares, triângulos em regiões irregulares). Fonte: Zhang, Nie e Ma [8].	31
Figura 12 – Esquema para as discretizações básicas do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: a autora	34

Figura 13 – Esquema utilizado por Demirdžic [9] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: adaptado de Demirdžic [9]	35
Figura 14 – Esquema utilizado por Kim e Choi [10] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: adaptado de Kim e Choi [10].	36
Figura 15 – Esquema utilizado por Versteeg e Malalasekera [11] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: adaptado de Versteeg e Malalasekera [11].	37
Figura 16 – Esquema de decomposição de S_f utilizando a abordagem de correção ortogonal. Fonte: adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish [12].	37
Figura 17 – Esquema de decomposição de S_f utilizando a abordagem de correção mínima. Fonte: adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish [12].	38
Figura 18 – Esquema de decomposição de S_f utilizando a abordagem de correção ortogonal. Fonte: adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish [12].	38
Figura 19 – Esquema de decomposição de S_f utilizando a abordagem sobre-relaxada. Fonte: adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish [12].	39
Figura 20 – Esquema utilizado por Nishikawa e White [13] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: adaptado de Nishikawa e White [13].	40
Figura 21 – Esquema de volume de controle utilizado para a discretização do termo difusivo apresentado por Assam e Natajaran [14]. Fonte: adaptado de Assam e Natajaran [14].	41
Figura 22 – Volume de controle genérico com quatro vizinhos. Fonte: a autora.	42
Figura 23 – Volume de controle genérico com quatro vizinhos com delimitações da área diamante formada pelos centroides P e F_i e os vértices a_i e b_i . Fonte: a autora.	44
Figura 24 – Avaliação das propriedades do vértice v . Exemplo com 5 vizinhos. Fonte: a autora	46
Figura 25 – Representação de um volume de controle genérico na fronteira do domínio. Fonte: a autora.	47
Figura 26 – Representação de um volume de controle de fronteira segundo a metodologia de Hoffmann e Chiang [15]. Fonte: a autora.	48
Figura 27 – Representação de um volume de controle de fronteira conforme a metodologia proposta no presente trabalho. Fonte: a autora	50
Figura 28 – Esquema da métrica razão de aspecto para volumes triangulares (AR_T). Fonte: adaptado de Ansys [16].	57
Figura 29 – Esquema da métrica razão de aspecto para volumes quadriláteros (AR_Q). Fonte: adaptado de Ansys [16].	57
Figura 30 – Esquema utilizado para o refinamento da malha quadrangular ortogonal. Fonte: a autora.	58

Figura 31 – Esquema utilizado para o refinamento da malha triangular ortogonal. Fonte: a autora.	58
Figura 32 – Esquema ilustrativo do processo de distorção da malha quadrangular conforme realizado por [17]. Fonte: a autora.	59
Figura 33 – Esquema ilustrativo do processo de distorção da malha triangular conforme realizado por Parizoto [18]. Fonte: a autora.	59
Figura 34 – Relação entre convergência e qualidade para o Caso 1 utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] em malhas com 4096 volumes. Fonte: a autora.	63
Figura 35 – Relação entre convergência e qualidade da malha para o Caso 1 utilizando a condição de contorno do presente trabalho em malhas com 4096 volumes. Fonte: a autora.	64
Figura 36 – Comparação entre a ordem de convergência em relação a qualidade da malha para as diferentes metodologias implementadas para o tratamento dos volumes de contorno para o Caso 1 em malhas com 4096 volumes. Fonte: a autora.	65
Figura 37 – Domínio computacional distorcido sob um ângulo θ . Fonte: Traoré, Ahipo e Louste (2009).	65
Figura 38 – Comparação entre a ordem de convergência em relação a qualidade da malha para as diferentes metodologias implementadas para o tratamento dos volumes de contorno para o Caso 2 em malhas com 4096 volumes. Fonte: a autora.	67
Figura 39 – Solução analítica, numérica e erro percentual para $Q = 0.1$ da malha quadrangular para o Caso 2. Fonte: a autora.	68
Figura 40 – Solução analítica, numérica e erro percentual para $Q = 0.1$ da malha triangular para o Caso 2. Fonte: a autora.	68
Figura 41 – Comparação entre a ordem de convergência em relação a qualidade da malha para as diferentes metodologias implementadas para o tratamento dos volumes de contorno para o Caso 3. Fonte: a autora.	69
Figura 42 – Comparação entre a quantidade de ciclos necessários para resolução do sistema linear e tempo computacional nas diferentes metodologias implementadas para o tratamento dos volumes de contorno. Fonte: a autora.	71
Figura 43 – Domínio quadrado aproximado por triângulos equiláteros. Fonte: adaptado de Yu <i>et al.</i> (2012).	72
Figura 44 – Comparação dos resíduos em relação à quantidade de iterações entre as malhas quadrangulares N_Q e triangulares N_T para as qualidades $Q = 1$ para o Caso 2. Fonte: a autora.	73

Figura 45 – Comparação dos resíduos em relação aos ciclos entre as malhas quadrangulares N_Q e triangulares N_T para as qualidades $Q = 1$ para o caso 2 nas diferentes metodologias abordadas. Fonte: a autora.	74
Figura 46 – Malhas híbridas em domínio quadrangular. Fonte: a autora	75
Figura 47 – Solução analítica, numérica e erro percentual para a malha híbrida 46(a). Fonte: a autora.	76
Figura 48 – Solução analítica, numérica e erro percentual para a malha híbrida 46(b). Fonte: a autora.	76
Figura 49 – Esquema utilizado para modelagem das condições de contorno da córnea humana. Fonte: a autora.	79
Figura 50 – Distribuição de P_{O_2} e malha quadrangular inicial utilizada para a simulação da difusão do oxigênio na córnea humana saudável. Fonte: a autora.	80
Figura 51 – Distribuição de P_{O_2} e malha híbrida inicial utilizada para a simulação da difusão do oxigênio na córnea humana com edema, com destaque para a interface de conexão entre as regiões de elementos quadrangulares e triangulares. Fonte: a autora.	81

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Erro máximo e resíduos do Caso 1 para as diferentes qualidades das malhas quadrangulares e triangulares com 4096 volumes. Fonte: a autora.	61
Tabela 2 – Erro máximo e resíduos do Caso 2 para as diferentes qualidades das malhas quadrangulares e triangulares com 4096 volumes. Fonte: a autora.	62
Tabela 3 – Erro máximo e resíduos do Caso 3 para as diferentes qualidades das malhas quadrangulares e triangulares com 4096 volumes. Fonte: a autora.	62
Tabela 4 – Comparação das ordens de convergência obtidas no presente trabalho – utilizando a metodologia proposta – com os resultados de Traoré Ahipo e Louste [17] para o Caso 1 em malhas quadrangulares de 6400 volumes. Fonte: a autora.	66
Tabela 5 – Comparação dos erros entre as malhas triangulares e quadrangulares seguindo a condição de $N_T/N_Q \approx 4/3$. Fonte: a autora.	73
Tabela 6 – Comparação entre os erros para malhas triangulares e quadrangulares em domínio unitário com quantidades de volumes semelhantes. Fonte: a autora.	74
Tabela 7 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho nas malhas híbridas compostas por triângulos e quadriláteros. Fonte: a autora.	76
Tabela 8 – Parâmetros físicos utilizados na simulação de difusão do oxigênio na córnea humana. Fonte: Larrea e Büchler [19].	78
Tabela 9 – Resíduo difusivo obtido na malha da córnea saudável mais refinada. Fonte: a autora.	82
Tabela 10 – Resíduo difusivo obtido na malha da córnea doente mais refinada. Fonte: a autora.	82
Tabela 11 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 1 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	91
Tabela 12 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 1 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	92
Tabela 13 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 1 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	93

Tabela 14 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 1 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	94
Tabela 15 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 2 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	95
Tabela 16 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 2 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	96
Tabela 17 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 2 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	97
Tabela 18 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 2 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	98
Tabela 19 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 3 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	99
Tabela 20 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 3 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	100
Tabela 21 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 3 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	101
Tabela 22 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 3 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.	102

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

EDP	Equação Diferencial Parcial
EDPE	Equação Diferencial Parcial Elíptica
DFC	Dinâmica de Fluidos Computacionais
MVF	Método de Volumes Finitos
MSF	Método das Soluções Fabricadas
MMQ	Método dos Mínimos Quadrados
GRS	<i>Grid Refine Solver</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

ρ	Densidade do fluido
ϕ	Propriedade escalar transportada
t	Tempo
$\mathbf{V}$	Vetor de velocidade
∇	Operador gradiente
$\tilde{\mathbf{I}}$	Tensor de difusão do molecular
S	Termo fonte
P	Volume de controle genérico
V_p	Volume de um volume de controle
A_P	Área de um volume de controle
$S_{médio}$	Termo fonte médio
S_p, S_c	Componentes do termo fonte linearizado
f	Face de um volume de controle
$(\nabla\phi)_f$	Gradiente de ϕ avaliado na face
N	Volume vizinho do volume de controle P
d_{Pf}, d_{Nf}	Distância entre o centroide do volume e sua face f
x, y	Variáveis independentes
w_P, w_N	Fatores de ponderação
$\mathbf{d}_f$	Vetor de distância entre dois centroides vizinhos
$\mathbf{S}_f$	Vetor área da face
$\mathbf{r}_P, \mathbf{r}_f, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}_{P'}, \mathbf{r}_{N'}$	Vetores de posição
δ_P, δ_N	Distâncias às faces dos volumes
$\mathbf{n}, \mathbf{u}$	vetor unitário normal
$\mathbf{e}, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{u}$	vetores unitários

α	Ângulo formado por dois vetores
$\Delta\eta$	distância entre os vértices de uma face
C	Número de nós que circundam um vértice
$\mathbf{d}_P, \mathbf{d}_N$	Vetor de distância entre o centroide e o centro de sua face
P', N'	Nós auxiliares
$\Delta x, \Delta y$	Intervalos espaciais nas direções x e y
ψ	Variável dependente
q	Vetor de fluxo imposto
h_∞	Constante de proporcionalidade
A_i, A_j	componentes do vetor área do segmento de contorno
h	Índice de refinamento da malha
Ω	Área do domínio
N_v	Quantidade de volumes em que a malha foi dividido
$\hat{\phi}_{P_i}^h$	Solução analítica avaliada no P -ésimo volume
$L_1, L_2, L_\infty, L_{RMS}$	Normas discretas
E_Θ^h	Erro baseado em uma norma discreta Θ (com $\Theta = 1, 2, \infty, RMS$) calculado por meio de uma malha com índice de refinamento h
R_i	Resíduo Difusivo
q_Θ	Ordem de convergência calculada para um determinado erro E_Θ^h , com $\Theta = 1, 2, \infty, RMS$
D	Índice de distorção da malha
$\theta_{max}, \theta_{min}$	Maior e menor ângulo interno de determinado volume
θ_c	Ângulo interno de um volume equilátero
AR	Índice da razão de aspecto da malha
R	Raio do maior círculo que circunscreve um triângulo
r	Raio do maior círculo inscrito em um triângulo
m_i	Méida do comprimento entre duas arestas concorrentes ($i = 1, 2$)

Q	Índice de qualidade da malha
θ	Ângulo de inclinação de uma malha em domínio quadrangular
N_T	Quantidade de triângulos de uma malha
N_Q	Quantidade de quadriláteros de uma malha
P_{O_2}	Pressão parcial do oxigênio (O_2)
Q_{O_2}	Consumo de oxigênio
k	Constante de solubilidade de Henry
Q^*	taxa de consumo de oxigênio sob tensão saturada de oxigênio
p^*	Tensão saturada de oxigênio
a	constante que determina a forma da curva Q_{O_2} vs. P_{O_2}

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
2	REFERENCIAL TEÓRICO	22
2.1	Discussão sobre a aplicação de diferentes malhas	23
2.1.1	Malhas formadas exclusivamente por quadriláteros	24
2.1.1.1	Vantagens	24
2.1.1.2	Limitações	26
2.1.2	Malhas formadas exclusivamente por triângulos	27
2.1.2.1	Vantagens	27
2.1.2.2	Limitações	29
2.1.3	Malhas híbridas	29
2.1.3.1	Vantagens	29
2.1.3.2	Limitações	32
2.2	Método de volumes finitos para malhas não estruturadas	32
2.2.1	Aproximação do gradiente na discretização do termo difusivo	34
2.3	Formulação do método de volumes finitos em malhas não estruturadas .	41
2.4	Volumes de fronteira e condições de contorno	46
2.4.1	Condição de Contorno de Dirichlet	48
2.4.2	Condição de Contorno de Neumann	48
2.4.3	Condição de contorno de Robin	49
3	DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO	51
4	VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO, ANÁLISE DE QUALIDADE DA MALHA E ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA	54
4.1	Verificação do código	54
4.2	Análise da ordem de convergência	55
4.3	Qualidade da malha	56
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	60
5.1	Verificação do código pela avaliação dos erros	61
5.2	Análise de convergência e de sensibilidade à qualidade da malha	62
5.3	Análise de esforço computacional	69
5.4	Avaliação da queda dos resíduos	72
5.5	Análise numérica em malhas híbridas	74
5.6	Simulação da difusão de oxigênio no estroma da córnea humana	77

6	CONCLUSÃO	83
	REFERÊNCIAS	84
	APÊNDICES	88
	APÊNDICE A – SOLUÇÕES FABRICADAS	90
	APÊNDICE B – CASO 1	91
	APÊNDICE C – CASO 2	95
	APÊNDICE D – CASO 3	99

1 INTRODUÇÃO

As Equações Diferenciais Parciais Elípticas (EDPEs) constituem uma classe particular das equações diferenciais que surgem naturalmente de problemas da física, matemática e engenharia e são amplamente empregadas na modelagem de problemas de equilíbrio que não dependem do tempo. Entretanto, a obtenção de soluções analíticas para esses problemas não é trivial, o que torna necessária a utilização de técnicas numéricas para sua resolução.

Dentre as técnicas numéricas mais empregadas, destaca-se o Método de Volumes Finitos (MVF), reconhecido por sua aplicabilidade em geometrias complexas e pela relativa simplicidade de implementação, sobretudo em Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) [2]. Sua utilização é favorecida pela possibilidade de utilizar malhas não estruturadas compostas por volumes de diferentes formatos para a discretização do domínio computacional, facilitando o processo de geração de malhas em geometrias complexas [3].

A escolha do tipo de malha, contudo, influencia diretamente na precisão e eficiência computacional das simulações. Malhas estruturadas de volumes quadriláteros tendem a apresentar melhor desempenho em regiões regulares, enquanto sua flexibilidade para representar domínios mais complexos é limitada. Por outro lado, malhas com volumes triangulares oferecem maior adaptabilidade a geometrias irregulares, embora possam demandar um maior esforço computacional na organização dos dados. Nesse cenário, malhas híbridas, compostas por volumes quadriláteros e triangulares, configuram-se como uma alternativa promissora, ao combinarem características favoráveis de ambos os tipos [2, 20].

Ademais, vale destacar que, segundo Bonaventura e Della Rocca [21], as análises de convergência dos esquemas de volumes finitos para operadores de difusão em tipos de malha não estruturadas são geralmente limitadas a malhas que satisfazem uma condição de ortogonalidade. Isso é bastante restritivo na prática, já que nenhum dos geradores de malha robustos normalmente adotados para pré-processamento de configurações industriais é capaz de garantir essa condição. Ou seja, a ortogonalidade das malhas é uma exigência requerida para assegurar a precisão dos cálculos, entretanto, na prática, as malhas geradas automaticamente não satisfazem essa condição, o que pode comprometer a qualidade dos resultados.

Neste contexto, o presente trabalho tem por objetivo o desenvolvimento e implementação de um código computacional baseado no MVF para a discretização de equações elípticas em malhas não estruturadas compostas por volumes triangulares e quadriláteros visando a um estudo sobre o impacto da não ortogonalidade e da distorção da malha na precisão da solução numérica.

Para alcançar tais objetivos, os capítulos seguintes apresentam inicialmente um levantamento das principais características das malhas triangulares, quadrilaterais e híbridas, permi-

tindo uma análise comparativa entre elas. Em seguida, é desenvolvida uma revisão teórica sobre o MVF para o termo difusivo bidimensional, destacando-se diferentes abordagens para a interpolação do gradiente nas faces e a formulação adotada no presente trabalho. A verificação do código e análise da ordem convergência são realizadas com base na metodologia proposta por Jacq [1], utilizando soluções analíticas obtidas pelo Método das Soluções Fabricadas (MSF), para o cálculo dos erros em diferentes normas. É apresentada ainda, uma análise de qualidade e distorção das malhas empregadas, possibilitando avaliar a eficiência do método de discretização da EDPE sob diferentes condições geométricas do domínio computacional.

Por fim, o trabalho apresenta uma aplicação prática em que um fenômeno real foi modelado com o objetivo de ilustrar as possibilidades de uso da implementação desenvolvida.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

As malhas computacionais podem ser classificadas, de modo geral, em estruturadas e não estruturadas, sendo que cada uma delas apresenta características distintas que influenciam diretamente a precisão, complexidade de implementação e custo computacional [12].

As malhas estruturadas caracterizam-se pela regularidade na conectividade entre os volumes, o que facilita a implementação numérica, a ordenação dos volumes e a geração da malha. No entanto, apresentam limitações significativas quando aplicadas a domínios com geometrias complexas, devido à sua baixa adaptabilidade [22].

Em contrapartida, as malhas não estruturadas oferecem maior flexibilidade na discretização do domínio, permitindo variar a concentração e utilizar diferentes formatos de volumes, como triângulos e quadriláteros. Essa característica proporciona uma melhor adaptação a geometrias complexas e maior precisão nos cálculos [2]. Por outro lado, nas malhas não estruturadas, não há um padrão de conectividade, o que torna a ordenação dos volumes mais complexo, dificultando a identificação dos vizinhos de uma célula ou a determinação de quantos volumes compartilham um mesmo vértice. Conforme ilustrado na Figura 1(a), 1(a), qualquer vértice interno da malha estruturada é compartilhado por exatamente quatro volumes, enquanto o mesmo não ocorre na malha não estruturada apresentada na Figura 1(b), em que o vértice numerado como 1 é compartilhado por 7 volumes, ao passo que o vértice identificado por 2 é compartilhado por apenas 4.



Figura 1 – Esquema ilustrativo de malhas: (a) estruturada, (b) não estruturada. Fonte: a autora.

As malhas não estruturadas permitem a combinação de diferentes tipos de volumes em um mesmo domínio. No caso bidimensional, por exemplo, é possível utilizar triângulos e quadriláteros para construir uma malha. A essa combinação dá-se o nome de malha híbrida. Um ponto interessante na utilização de malhas híbridas é que permitem o cálculo de fluxos no interior ou no entorno de características geométricas de complexidade arbitrária, sem a necessidade de grande esforço temporal na geração e mapeamento da malha. A geração de malhas é bastante simples, além de que o refinamento e adaptação da malha são mais fáceis [11].

Diante desse contexto, neste capítulo são apresentados os principais conceitos que fundamentam o presente trabalho. Inicialmente, aborda-se a aplicação do MVF em malhas não estruturadas, tema que tem sido investigado por diversos autores [13, 21, 23]. Em seguida, são discutidas as vantagens e limitações da utilização dos diferentes tipos de malhas: quando formadas por volumes triangulares, por volumes quadrangulares e as malhas híbridas, que combinam os dois formatos. Nessa etapa, busca-se compreender em quais contextos a malha híbrida se mostra mais vantajosa em comparação com as malhas compostas por um único tipo de volume, sejam eles exclusivamente triangulares ou exclusivamente quadriláteros. Além disso, investiga-se de que maneira diferentes pesquisadores tratam a discretização da equação de difusão ao utilizar malhas não estruturadas.

2.1 Discussão sobre a aplicação de diferentes malhas

Mazumder [24] aponta que um determinado domínio computacional pode ser discretizado por volumes com diferentes geometrias, ou seja, pode haver volumes triangulares e quadrangulares, formando o que pode ser denominado malha híbrida. A maioria dos geradores de malha comercialmente disponíveis permite ao usuário selecionar regiões do domínio computacional e associar a elas um tipo de específico de elemento. Essa funcionalidade está presente inclusive em geradores modernos, como *ANSYS Meshing* [25], *Pointwise* [26] e *HyperMesh* [27], que também oferecem a opção de escolher o tipo de célula dominante na malha.

Existem divergências quanto à aplicação do termo híbrido. Alguns autores o utilizam para o caso em que a malha é composta por diferentes tipos de volumes. Outros, por sua vez, empregam a mesma nomenclatura para se referir a malhas que contém regiões estruturadas e não estruturadas. Adicionalmente, há ainda o termo misto, geralmente aplicado às malhas que combinam volumes associados às malhas estruturadas e não estruturadas (presumivelmente armazenadas de forma não estruturada) [4, 12, 28]. Não faz parte do escopo do presente trabalho definir a melhor forma de uso desses termos, de modo que não será feita distinção entre as definições. Assim, ao longo do presente trabalho, será adotado o termo malha híbrida para aquela composta pela mistura de tipos de volumes.

A seguir, serão apresentadas listas com as principais vantagens e desvantagens na comparação entre malhas computacionais para geometrias bidimensionais formadas por volumes quadriláteros, triangulares e pela mistura desses tipos de volumes, configurando uma malha híbrida. Tais listas visam evidenciar, de maneira natural, as malhas híbridas como alternativa atrativa e emergente.

2.1.1 Malhas formadas exclusivamente por quadriláteros

2.1.1.1 Vantagens

1. Maior precisão geométrica: regiões em que a geometria é predominantemente retangular, malhas com volumes quadriláteros representem geometrias de maneira mais precisa do que malhas triangulares. Bommes *et al.* [29] indicam que em regiões semelhantes a cilindros, o alinhamento das arestas com as direções de curvatura principal é vantajoso, pois leva a quadriláteros com formatos mais adequados e melhora a aproximação da geometria da superfície. A Figura 2 ilustra esse alinhamento onde as arestas dos quadriláteros acompanham as curvas geométricas, o que garante volumes de alta qualidade;

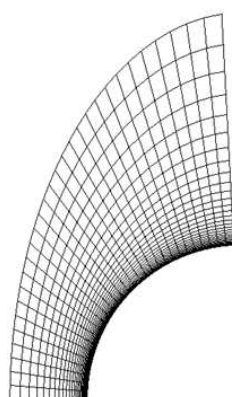


Figura 2 – Exemplo de alinhamento de malha quadrilátera com as direções de curvatura principal. Fonte: Jacq [1].

2. Menor número de volumes: para certas regiões em que a geometria é predominantemente retangular, volumes quadrangulares podem prover soluções de alta qualidade com menor número de volumes e nós do que uma malha de volumes triangulares. Yu *et al.* [2] constataram que, quando o número de volumes triangulares corresponde a $4/3$ dos volumes quadrangulares, obtêm-se os mesmos erros de truncamento. Com isso, conclui-se que malhas compostas por volumes quadrangulares são mais precisas do que malhas triangulares com o mesmo número de células, bem como é concluído por Juretić e Gosman [3]. A Figura 3 apresenta as malhas utilizadas por Yu *et al.* para comprovar suas conclusões, nas quais as malhas triangulares demandam mais volumes que as malhas quadrangulares;
3. Melhor controle da anisotropia: malhas quadrangulares permitem um controle mais direto sobre a anisotropia da malha (variação no tamanho dos volumes), o que pode ser crucial na otimização da resolução em regiões específicas do domínio de simulação. Bommes *et al.* [29] apontam que para uma dada superfície e um número limitado de pontos, a melhor aproximação será obtida com malhas cujos volumes são comprimidos ao longo da direção principal da curvatura. A Figura 4 ilustra a aplicação da anisotropia controlada, em que os volumes quadrangulares estejam comprimidos na direção horizontal próximos à fronteira esquerda e comprimidos horizontalmente próximos à fronteira inferior;

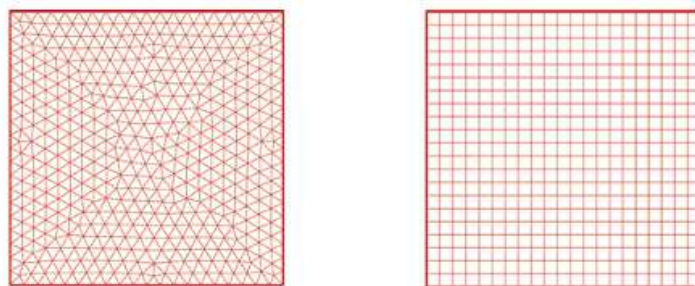


Figura 3 – Exemplo ilustrativo mostrando a diferença no número de células entre malhas triangulares e quadrangulares para um mesmo nível de precisão. Fonte: Yu *et al.* [2].

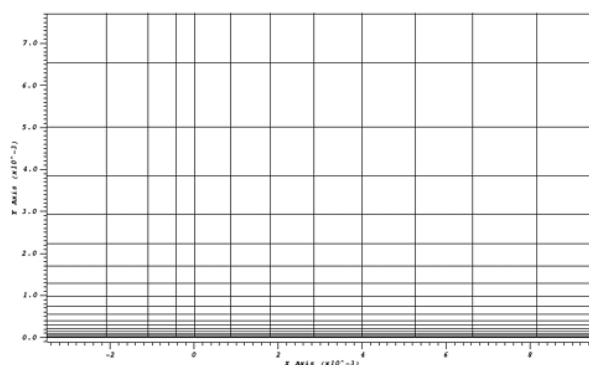


Figura 4 – Exemplo de anisotropia controlada em malha quadrangular, com compressão dos volumes em diferentes direções próximas às fronteiras. Fonte: Jacq [1].

4. Compatibilidade com geometrias alinhadas: se a geometria do problema estiver alinhada com direções preferenciais, malhas quadrangulares podem se alinhar naturalmente com essas direções, proporcionando uma representação mais eficiente. A maior parte das geometrias possui duas direções locais dominantes, normalmente associadas às direções de curvatura principal ou características locais nítidas, às quais os quadrantes podem ser alinhados. O alinhamento dos volumes de uma malha em determinadas direções é crucial para a captura de recursos de forma, bem como para a semântica de objetos modelados [29]. A Figura 5 exemplifica essa situação, em um canal com uma cavidade na parede inferior, em que a malha quadrangular acompanha as direções retilíneas do canal, ajustando-se de forma suave e controlada nas regiões de arredondamentos;

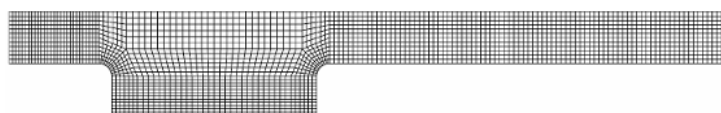


Figura 5 – Exemplo ilustrativo de compatibilidade da malha quadrangular com geometrias alinhadas a direções preferenciais. Fonte: Juretić e Gosman [3].

5. Difusão numérica: apesar de problemas envolvendo advecção não fazerem parte do escopo do presente trabalho, para fins de completude desta listagem, volumes quadrangulares apresentam reduzida difusão numérica quando a malha está alinhada com o escoamento;

mento, com volumes triangulares, o alinhamento ótimo entre a malha e o escoamento é impossível [30];

6. Esquemas de alta ordem: a implementação de esquemas de alta ordem (métodos de aproximação que utilizam polinômios de grau elevado para interpolar variáveis entre os nós da malha, reduzindo o erro de truncamento da solução) em malhas com volumes quadriláteros é menos complexa do que em malhas com volumes triangulares, além de malhas quadrangulares proveem melhor estabilidade, maior acuracidade e melhor convergência [2].

2.1.1.2 Limitações

1. Dificuldade em geometrias complexas: Traoré, Ahipo e Louste [17] afirmam que é impossível que malhas quadrangulares se ajustem a geometrias complexas sem introduzir volumes de controle não ortogonais. Reforçando essa ideia, Yu *et al.* [2] apontam que a geração de malhas quadrilaterais em geometrias complexas exige a divisão manual em blocos grosseiros e malhas mais finas são criadas em cada bloco, aumentando a complexidade;
2. Refinamento local: no refinamento de malhas compostas por volumes quadrangulares, volumes específicos são selecionados para divisão e são subdivididos em quatro volumes menores, adicionando-se um nó no centro de cada volume escolhido e em cada uma das suas faces. Esse processo produz uma interface entre uma região de volumes não refinados e uma região de volumes refinados [20]. A Figura 6 ilustra essa interface de forma nítida, em que as arestas não refinadas no topo se encontram com as arestas dos volumes refinados abaixo, exigindo o uso de nós não conformes nas áreas de transição.

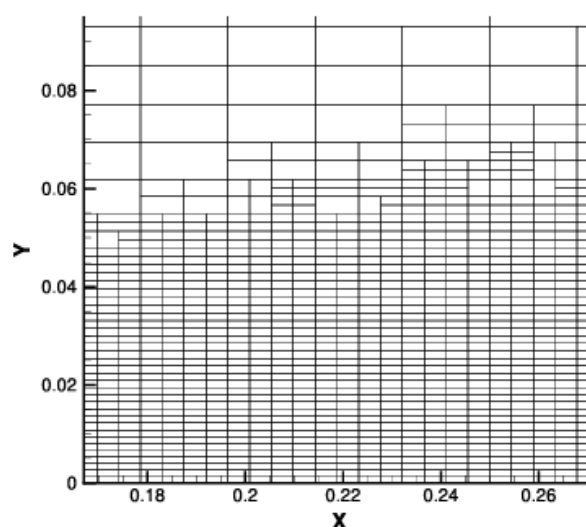


Figura 6 – Exemplo de interface nítida entre região refinada e não refinada em malha quadrangular, evidenciando a presença de nós não conformes na transição. Fonte: Pan, Zhong e Zhuo [4].

2.1.2 Malhas formadas exclusivamente por triângulos

2.1.2.1 Vantagens

1. Adaptabilidade a Geometrias Complexas: malhas triangulares podem se adaptar bem a geometrias complexas e irregulares, permitindo uma representação mais eficiente de superfícies curvas e detalhes, por exemplo, cortes (furos) em geometrias [20]. A Figura 7 é um exemplo ilustrativo dessa capacidade, mostrando como uma malha composta inteiramente por triângulos é capaz de representar tanto o contorno irregular quanto o contorno do furo interno;

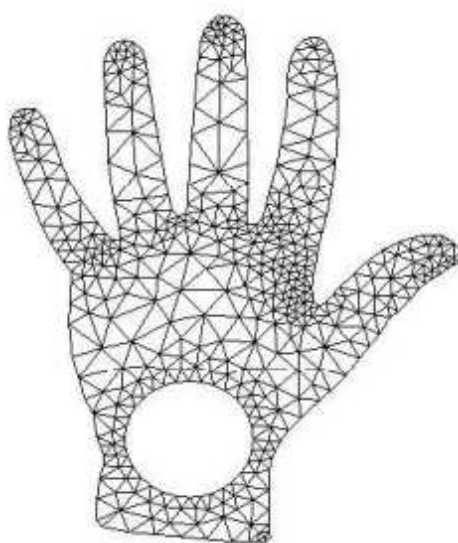


Figura 7 – Exemplo de malha triangular adaptada a uma geometria com contorno irregular e furo interno, evidenciando a capacidade de representação de detalhes geométricos. Fonte: Lacassa [5].

2. Facilidade na geração de malhas: segundo Lindquist [20], as malhas triangulares, devido à sua irregularidade permitem a geração de malhas sobre geometrias complexas. Assim, em algumas situações, a geração de malhas triangulares pode ser mais fácil e rápida do que a geração de malhas quadrangulares, especialmente em geometrias não estruturadas, não sendo necessária a decomposição do domínio em vários blocos;
3. Flexibilidade em refinamentos locais: malhas triangulares oferecem flexibilidade para refinamentos locais, pois permitem maior resolução em regiões específicas do domínio onde são necessários detalhes mais precisos. A irregularidade da malha permite que uma célula seja dividida em células menores sem criar interfaces, ou seja, uma vez que uma célula é dividida, nenhuma informação adicional precise ser armazenada nem sejam necessários casos especiais no solucionador [20]. A Figura 8 representa claramente essa flexibilidade, evidenciando áreas de refinamento localizado, como no lado esquerdo, onde o tamanho dos triângulos é significativamente reduzido, e a malha permanece conforme;

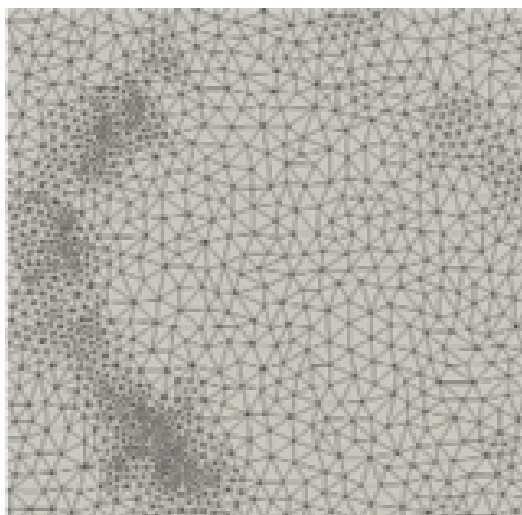


Figura 8 – Exemplo de refinamento local em malha triangular, evidenciando a redução do tamanho dos volumes na região esquerda sem a criação de interfaces não conformes..
Fonte: Gargalo-Peiró, Avila e Folch [6].

4. Circuncentro de geometria triangular: a geometria triangular oferece uma alternativa ao utilizar-se o baricentro como ponto de referência para a localização dos volumes, conforme é comumente empregado em métodos baseados em volumes finitos. Esta abordagem depende da qualidade da malha, e pode amplificar os termos de difusão cruzada devido à não ortogonalidade dos volumes. No entanto, ao se empregar o circuncentro em malhas triangulares bidimensionais, os efeitos da difusão cruzada são mitigados, resultando em termos nulos, pois isso acontece porque o circuncentro é o local de encontro das mediatrizes do triângulo, assim, a linha que conecta os circuncentros de dois volumes que compartilham a mesma face é perpendicular à face em questão (conforme é ilustrado na Figura 9), o que torna o esse esquema adequado para problemas difusivos. Tal procedimento promove uma solução numérica com uma convergência de ordem superior, além de simplificar a implementação do código numérico [31].

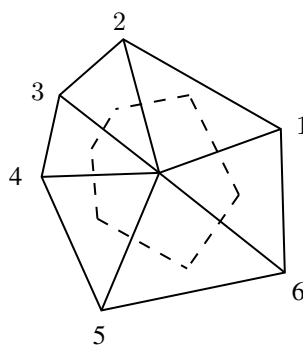


Figura 9 – – Propriedade do circuncentro em malhas triangulares: a linha que conecta os circuncentros de volumes adjacentes é perpendicular à face compartilhada. Fonte: adaptado de Fazenda [7].

2.1.2.2 Limitações

1. Reduzida precisão: em comparação com as malhas compostas por volumes quadriláterais, as malhas triangulares apresentam reduzida precisão numérica, fato esse que foi constatado por diversos autores, como Juretić e Gosman [3], Wirasaet *et al.* [30], Yu *et al.* [2] e Zhang, Nie e Ma [8].
2. Custo computacional: como essas malhas necessitam de uma maior quantidade de volumes comparadas às malhas quadrangulares, conseqüentemente, demandam um custo computacional mais elevado [2, 30];
3. Dificuldade de alinhamento com direções dominantes: a maioria das geometrias tem duas direções locais dominantes, tipicamente associadas a direções de curvatura principal ou características locais nítidas, o uso de malhas triangulares exige a escolha arbitrária de uma terceira direção de aresta [29].

2.1.3 Malhas híbridas

2.1.3.1 Vantagens

Malhas híbridas oferecem um nível superior de flexibilidade em comparação com malhas não estruturadas compostas por um único tipo de volume. Naturalmente, a proposta ao utilizar esse tipo de malha é aproveitar as vantagens específicas de cada tipo de volume em diferentes regiões do domínio computacional [28]. Em geral, em domínios bidimensionais, é mais frequente o uso de volumes quadrangulares, beneficiando-se de uma malha estruturada que permite a obtenção direta da discretização das equações diferenciais e apresenta características geométricas numericamente favoráveis. Entretanto, para geometrias complexas, como em domínios curvos, preenchê-lo exclusivamente com volumes quadrangulares pode tornar-se um desafio. A combinação de volumes quadrangulares e triangulares em domínios bidimensionais emerge como uma alternativa natural e atraente para a discretização de domínios complexos. Geralmente, uma estratégia eficaz na construção de malhas é empregar volumes quadrangulares em regiões cartesianas e volumes triangulares em regiões mais curvas ou que demandem um refinamento especial. A seguir, são destacadas as principais vantagens das malhas híbridas.

1. Adaptabilidade geométrica: malhas híbridas são mais adaptáveis a geometrias complexas e irregulares, permitindo uma representação mais eficiente de detalhes geométricos específicos, sendo assim, é possível adaptar a malha para atingir o tamanho desejado dos volumes na superfície e representar adequadamente a curvatura da geometria [6]. Conforme ilustrado na Figura 10, a malha híbrida adotada combina volumes quadrangulares altamente anisotrópicos nas regiões curvas do contorno, visando à melhor representação das características geométricas, e volumes triangulares no interior do domínio;

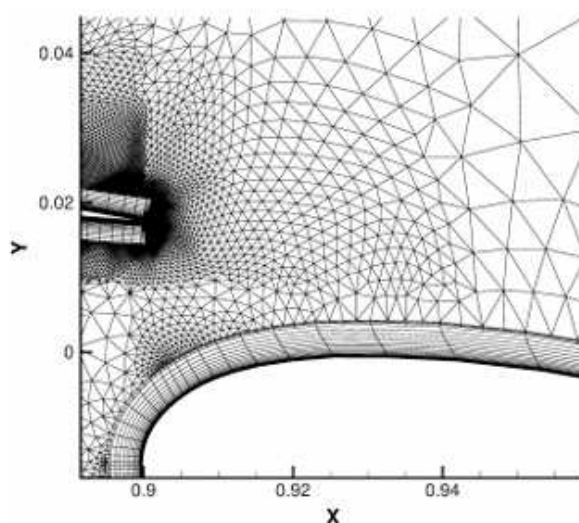


Figura 10 – Exemplo de malha híbrida aplicada a um perfil aerodinâmico, ilustrando: adaptabilidade geométrica (quadriláteros anisotrópicos no contorno curvo, triângulos no interior), refinamento local (volumes refinados no contorno e maiores no campo distante) e camada limite (quadriláteros junto à superfície com transição para triângulos). Fonte: Pan, Zhong e Zhuo [4].

2. Eficiência na geração: a capacidade de utilizar diferentes tipos de volumes permite gerar a malha de maneira mais eficiente, especialmente em regiões onde diferentes tipos de volumes são mais adequados. Juretić e Gosman [3] afirmam que células de topologia arbitrária facilitam o processo de geração de malhas em domínios complexos;
3. Refinamento local: permite a otimização da resolução local, usando volumes mais refinados em regiões críticas onde há mudanças bruscas nas propriedades de interesse. No estudo realizado por Li *et al.* [32], é salientado que as malhas híbridas otimizam a eficiência computacional refinando seletivamente os volumes nas regiões onde informações mais detalhadas são necessárias, enquanto mantêm uma malha menos refinada nas demais regiões. É possível observar, na Figura 10, o uso de volumes mais refinados ao longo do contorno curvo do domínio enquanto no campo de escoamento distante, onde a resolução detalhada não é mais crítica, é adotado o uso de triângulos maiores;
4. Melhor desempenho numérico: há casos em que as malhas híbridas podem melhorar o desempenho numérico, proporcionando uma representação mais precisa do fenômeno físico em malhas totalmente estruturadas ou não estruturadas. Pan *et al.* [4] mostram que, em alguns casos, a malha híbrida apresenta desempenho comparável a uma malha uniforme, porém com número de volumes e tempo computacional reduzido. O mesmo foi constatado por Zhang, Nie e Ma [8], que apontam que a utilização da malha híbrida reduz significativamente o tempo de computação, a necessidade de memória e, ao mesmo tempo, melhora a precisão;

5. Redução do número de volumes: em comparação com malhas não estruturadas, as malhas híbridas podem permitir a redução do número total de volumes necessários para representar efetivamente o domínio, economizando recursos computacionais. Gargallo-Peiró, Avila e Folch [6]] comparam uma malha semiestruturada com outra híbrida gerada exatamente com os mesmos parâmetros da semiestruturada e verificaram que a malha híbrida apresenta metade dos volumes da malha semiestruturada, mantendo-se a resolução necessária em todo o domínio. Observa-se, na Figura 11, a adição de volumes quadrangulares na região inferior do domínio, o que é geometricamente mais regular, o que reduz significativamente a quantidade total de volumes que seriam necessários para discretizar todo o domínio com a mesma precisão;

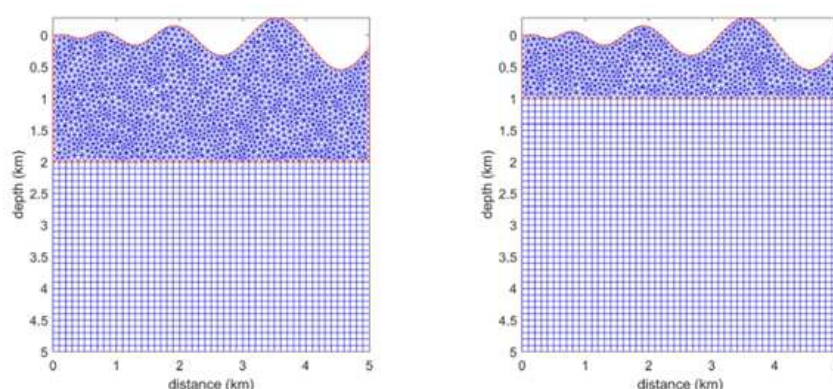


Figura 11 – Exemplo de malha híbrida demonstrando: redução do número de volumes (volumes quadrangulares na região inferior, mais regular, diminuem o número total de volumes) e flexibilidade na escolha do elemento dominante (quadriláteros em regiões regulares, triângulos em regiões irregulares). Fonte: Zhang, Nie e Ma [8].

6. Flexibilidade na escolha do elemento dominante: a capacidade de escolher o tipo dominante de elemento em diferentes regiões proporciona flexibilidade no equilíbrio entre precisão e eficiência computacional. Pode-se usar como exemplo o trabalho realizado por Zhang, Nie e Ma [8], em que a região regular é discretizada utilizando uma malha retangular enquanto a região irregular é discretizada por uma malha triangular irregular. Após alguns experimentos numéricos, concluiu-se que para esse caso, a estratégia ideal é adotar uma malha triangular não estruturada para combinar com as interfaces irregulares e utilizar, sempre que possível, malhas mais retangulares em todo o modelo. Conforme ilustrado na Figura 11, a flexibilidade das malhas híbridas permite que, dependendo das características geométricas e das propriedades físicas analisadas, a proporção entre triângulos e quadriláteros seja ajustada;
7. Camada limite: para fluxos em torno de configurações complexas e realistas, malhas ajustadas ao corpo podem ser utilizadas para resolver a região da camada limite, enquanto a malha não estruturada com uma taxa de crescimento adequada pode ser aplicada para preencher as demais regiões do domínio computacional [4]. Desse modo, para problemas

de camada limite, malhas híbridas contendo volumes quadrangulares e triangulares são mais eficientes e mais precisas. Como já mencionado, problemas advectivos não fazem parte do escopo do presente trabalho, contudo este item foi incluído para fins de completude. A Figura 10 exemplifica uma malha híbrida aplicada a um perfil aerodinâmico, mostrando o uso estratégico de volumes quadrangulares refinados e anisotrópicos junto à superfície curva para capturar a camada limite e a transição para volumes triangulares gradativamente maiores no campo de escoamento distante.

2.1.3.2 Limitações

Como se tratam de malhas não estruturadas, as malhas híbridas apresentam a desvantagem quanto à ordenação dos volumes, vértices, arestas e conectividade, desse modo, é necessária uma estrutura de dados eficiente para reduzir os custos computacionais extras [4].

Na seção seguinte, é apresentada a equação de transporte e como ela pode ser discretizada utilizando o Método de Volumes Finitos. Para tanto, foi realizada uma busca em trabalhos da área para verificar a maneira pela qual diferentes autores realizam a aproximação do gradiente na face f ao discretizar o termo difusivo quando são utilizadas as malhas não estruturadas.

2.2 Método de volumes finitos para malhas não estruturadas

Considere a equação (2.1), denominada equação geral do transporte [12]

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\mathbf{V}\phi)}_{\text{termo advectivo}} = \underbrace{\nabla \cdot (\tilde{\Gamma} \cdot \nabla\phi)}_{\text{termo difusivo}} + \underbrace{S}_{\text{termo fonte}}. \quad (2.1)$$

em que ρ é a densidade do fluido, ϕ é a propriedade escalar transportada, t é o tempo, $\mathbf{V}$ é o vetor de velocidade, ∇ é o operador gradiente, S é o termo fonte e $\tilde{\Gamma}$ é o tensor de difusão molecular, dado por:

$$\tilde{\Gamma} = \begin{bmatrix} \Gamma_{xx} & \Gamma_{xy} \\ \Gamma_{yx} & \Gamma_{yy} \end{bmatrix}.$$

Dependendo dos valores das componentes do tensor, o meio é classificado como anisotrópico, ortotrópico ou isotrópico.

Para o caso em regime permanente, ou seja, invariante no tempo e sem movimento macroscópico do meio ($\mathbf{V} = 0$), a equação (2.1) pode ser reescrita como

$$\nabla \cdot (\tilde{\Gamma} \cdot \nabla\phi) + S = 0. \quad (2.2)$$

Faz-se necessário mencionar que a equação (2.2) é matematicamente classificada como elíptica e também é denominada equação de Poisson ou equação de difusão com termo fonte (S).

Para a resolução numérica da equação (2.2), pode-se aplicar o MVF para o caso bidimensional em coordenadas cartesianas. Para isso, o primeiro passo é integrar a equação sobre o volume de controle genérico P [12]. Assim, para a equação (2.2) tem-se:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\tilde{\Gamma} \cdot \nabla \phi) dV_P + \int_{V_P} S dV_P = 0, \quad (2.3)$$

onde V_P representa o volume ou, para o caso bidimensional, a área do P -ésimo volume.

Para calcular a primeira integral da equação (2.3), pode-se utilizar o Teorema da Divergência de Gauss [12], o qual permite converter uma integral de volume em uma integral de superfície e vice-versa, com enunciado apresentado a seguir:

Teorema 2.1. *(Teorema da Divergência de Gauss) Seja $F(x, y)$ um campo vetorial bidimensional, V_P uma região do plano xy , A_P a fronteira da região V_P . Então o fluxo $\mathbf{F}$ através da curva limite A_P é igual à integral dupla de $\nabla \mathbf{F}$ sobre toda a região de V_P .*

$$\int_{A_P} \mathbf{F} \cdot d\vec{A}_P = \iint_{V_P} \nabla \cdot \mathbf{F} dV_P.$$

Desse modo, ao aplicar o teorema ao primeiro termo da equação (2.3), obtém-se o seguinte resultado:

$$\int_{A_P} (\tilde{\Gamma} \cdot \nabla \phi) \cdot d\vec{A}_P + \int_{V_P} S dV_P = 0. \quad (2.4)$$

Em geral, o termo fonte S é uma função que depende da variável ϕ . Dependendo da forma dessa função, o sistema de equações algébricas resultante pode tornar-se não linear, o que impõe dificuldades à determinação direta de ϕ . Diante disso, para discretizar o segundo termo da equação (2.4), adota-se uma aproximação por meio de um termo fonte médio $S_{\text{médio}}$, que é linearizado por expansão em série de Taylor, conforme realizado nos trabalhos de Versteeg e Malalasekera [11] e Patankar [33]:

$$\int_{V_P} S dV_P \approx S_{\text{médio}} V_P = (S_p \phi_p + S_c) V_P = (S_p \phi_P + S_c) A_P, \quad (2.5)$$

em que S_c e S_p resultam da linearização do termo fonte e A_P é a área do volume de controle. Patankar [33] justifica a linearização do termo fonte baseado em dois aspectos fundamentais: (1) a estrutura nominalmente linear permite apenas uma dependência formalmente linear, e (2) a incorporação de uma dependência linear é mais adequada do que tratar S como uma constante.

Diversos autores realizam a discretização do termo fonte de forma semelhante à apresentada na equação (2.5). Entretanto, a principal distinção na aplicação do MVF reside nas estratégias empregadas para a aproximação do gradiente na face f durante a discretização do termo difusivo, correspondente ao primeiro termo da equação (2.4). Nesse contexto, diferentes formulações têm sido propostas para a reconstrução do gradiente nas faces dos volumes de controle.

2.2.1 Aproximação do gradiente na discretização do termo difusivo

Existem algumas abordagens fundamentais que podem ser utilizadas para reconstruir os gradientes das faces dos volumes de controle. Yan *et al.* [34] afirmam que a forma mais simples de realizar a avaliação dos gradientes na face é utilizando-se a média aritmética simples entre os gradientes nos volumes de controle que compartilham a face em questão. No trabalho de Blazek [35], são encontradas duas outras formulações possíveis utilizando gradientes conhecidos, uma ponderada por propriedades geométricas dos volumes e outra por distâncias. Essas equações podem ser observadas nas equações (2.6) a (2.8), a Figura 12 ilustra a ordenação dos volumes para essas reconstruções.

$$\text{Média simples: } (\nabla\phi)_f = \frac{(\nabla\phi)_P + (\nabla\phi)_N}{2}, \quad (2.6)$$

$$\text{Média ponderada por volumes: } (\nabla\phi)_f = \frac{V_P}{V_P + V_N}(\nabla\phi)_P + \frac{V_N}{V_P + V_N}(\nabla\phi)_N, \quad (2.7)$$

$$\text{Média ponderada por distância: } (\nabla\phi)_f = \frac{d_{Pf}}{d_{Pf} + d_{Nf}}(\nabla\phi)_P + \frac{d_{Nf}}{d_{Pf} + d_{Nf}}(\nabla\phi)_N. \quad (2.8)$$

em que P e N são dois volumes de controle genéricos e vizinhos, V_P e V_N representam seus respectivos volumes (ou áreas, no caso bidimensional), e d_{Pf} e d_{Nf} são as distâncias entre os centroides desses volumes e a face comum a eles.

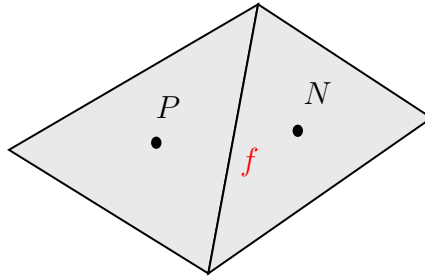


Figura 12 – Esquema para as discretizações básicas do fluxo difusivo entre volumes de controle.
Fonte: a autora

Muzaferija [23] constrói um gradiente modificado para avaliar o gradiente na face, denominado $(\nabla\phi)_f^*$, esse gradiente é construído da seguinte forma:

$$(\nabla\phi)_f^* = (\nabla\phi)_f + \left[\frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}_f|} - \frac{(\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{d}_f}{|\mathbf{d}_f|} \right] \frac{\mathbf{d}_f}{|\mathbf{d}_f|}, \quad (2.9)$$

com o valor do gradiente na face f , $(\nabla\phi)_f$ sendo aproximado por:

$$(\nabla\phi)_f = w_P \nabla\phi_P + w_N \nabla\phi_N, \quad (2.10)$$

em que os coeficientes w_P e w_N são fatores de ponderação, entretanto o autor não detalha como são avaliados esses coeficientes. Na equação (2.9) o termo entre colchetes (denominado termo de correção) representa a diferença entre a aproximação da central da derivada na direção do vetor $\mathbf{d}_f$, que é a distância entre os centroides P e N , e o valor correspondente obtido pela interpolação dos gradientes centrais das células (ver Figura 13). Demirdžic [9] aponta que o termo de correção detecta e suaviza quaisquer oscilações não físicas que possam ocorrer no processo iterativo.

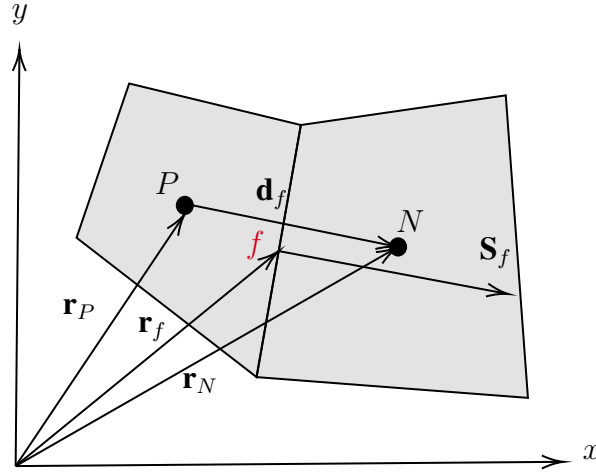


Figura 13 – Esquema utilizado por Demirdžic [9] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: adaptado de Demirdžic [9]

Em outra publicação, Demirdžic e Muzaferija [36] propuseram uma aproximação ajustada da equação (2.9), dada por:

$$(\nabla\phi)_f^* = (\nabla\phi)_f + \left[\frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}_f|} - \frac{\overline{\nabla\phi} \cdot \mathbf{d}_f}{|\mathbf{d}_f|} \right] \frac{\mathbf{S}_f}{|\mathbf{S}_f|}, \quad (2.11)$$

em que a barra superior indica a média aritmética dos gradientes calculados no centroides P e N , $\mathbf{S}_f$ é o vetor área da face da célula e o valor de $(\nabla\phi)_f$ é calculado usando a fórmula de segunda ordem, dada por:

$$(\nabla\phi)_f = \frac{1}{2}(\phi_P + \phi_N) + \frac{1}{2}[(\nabla\phi)_P \cdot (\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_P) + (\nabla\phi)_N(\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_N)] \quad (2.12)$$

em que $\mathbf{r}_P$ é o vetor de posição do centroide P , $\mathbf{r}_f$ é o vetor de posição do centro da face da célula e $\mathbf{r}_N$ é o vetor de posição do centroide da célula vizinha N .

Demirdžic [9] salienta que o uso da média aritmética dos gradientes na equação (2.11), faz com que o termo entre colchetes seja exatamente igual a zero no caso de variação linear ou quadrática de ϕ , mesmo em uma malha não uniforme.

Na Figura 14 é representado o esquema proposto por Kim e Choi [10]; esses autores definem um sistema de coordenadas generalizadas com bases covariantes ($\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$) localmente em cada face do volume, onde $\mathbf{e}_1$ e $\mathbf{e}_2$ são vetores unitários de c (ponto de intersecção dos

vértices a e b com a linha que conecta os centroides P e N) a N e de c a b , respectivamente. Observa-se ainda que c não é o ponto médio da face da célula.

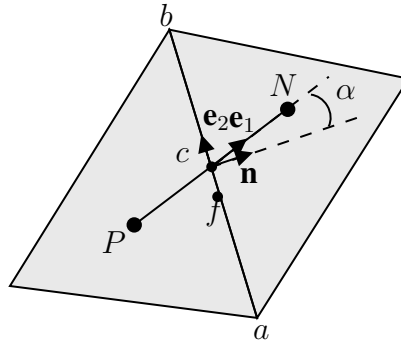


Figura 14 – Esquema utilizado por Kim e Choi [10] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: adaptado de Kim e Choi [10].

Dessa forma, tem-se que a componente normal $(\nabla\phi)_f$ pode ser escrita como

$$(\nabla\phi)_f = \nabla\phi \cdot \mathbf{n} = \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta_P + \delta_N} - \frac{\phi_b - \phi_a}{\Delta\eta} \tan\alpha, \quad (2.13)$$

em que δ_P e δ_N são as distâncias normais às faces das células até os centroides P e N , respectivamente, α é o ângulo formado entre $\mathbf{n}$ e $\mathbf{e}_1$ e $\Delta\eta$ é a distância entre os vértices a e b .

Os autores apontam que esse método de interpolação tem precisão de segunda ordem em malhas triangulares ortogonais e é equivalente ao obtido em malhas retangulares.

Versteeg e Malalasekera [11] apresentam a equação (2.14) para aproximação do gradiente na face f :

$$\mathbf{n} \cdot \nabla\phi \Delta A_f = \frac{\Delta A_f}{\cos\alpha} \frac{\phi_P - \phi_N}{\mathbf{d}_f} + \Delta A_f \tan\alpha \frac{\phi_b - \phi_a}{\Delta\eta}, \quad (2.14)$$

em que $\mathbf{d}_f$ é a distância entre os centroides P e N , $\Delta\eta$ é a distância entre os vértices a e b , $\mathbf{n}$ é o vetor unitário ao longo da direção normal e tangencial e $\mathbf{e}_1$ é o vetor unitário na direção de N , $\mathbf{e}_2$ é o vetor unitário na direção do vértice a e α é o ângulo formado entre os vetores $\mathbf{e}_1$ e $\mathbf{n}$ conforme ilustrado na Figura 15. Para avaliar o termo de difusão cruzada, é necessário avaliar o gradiente ao longo da linha que conecta os vértices a e b . Uma possibilidade para esse cálculo é interpolar valores nodais de ϕ para calcular ϕ_a e ϕ_b e utilizá-los para calcular o gradiente. A média simples dos nós vizinhos é dada pela equação (2.15) a seguir

$$\phi_a = \frac{\phi_P + \phi_N + \phi_A + \dots}{C}, \quad (2.15)$$

em que C é o número de nós que circundam o vértice a .

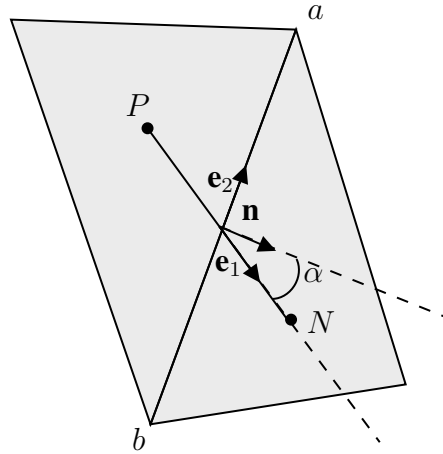


Figura 15 – Esquema utilizado por Versteeg e Malalasekera [11] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: adaptado de Versteeg e Malalasekera [11].

Moukalled, Mangani e Darwish [12], para malhas não-ortogonais, propõe que o vetor área deve ser avaliado por meio da soma de dois vetores $\mathbf{E}_f$ e $\mathbf{T}_f$, conforme mostra a Figura 16, estando $\mathbf{E}_f$ na direção $\mathbf{PN}$ para permitir escrever parte do fluxo de difusão em função dos valores nodais ϕ_N e ϕ_P tais que:

$$\begin{aligned}
 (\nabla \phi)_f \mathbf{S}_f &= \underbrace{(\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{E}_f}_{\text{contribuição ortogonal}} + \underbrace{(\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{T}}_{\text{contribuição não-ortogonal}} \\
 &= E_f \left(\frac{\partial \phi}{\partial e} \right)_f + (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{T}_f \\
 &= E_f \frac{\phi_N - \phi_P}{d_f} + (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{T}_f.
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

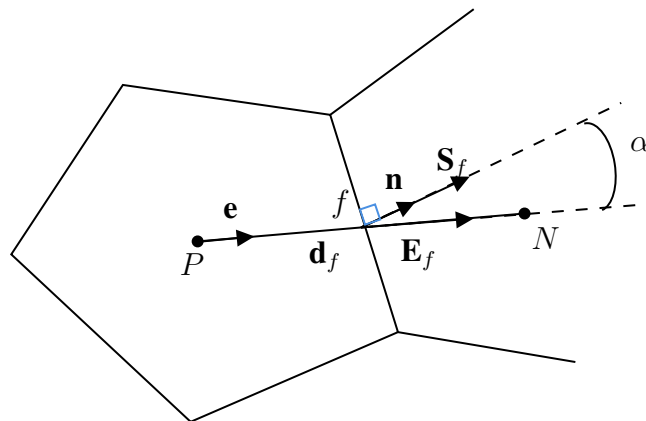


Figura 16 – Esquema de decomposição de $\mathbf{S}_f$ utilizando a abordagem de correção ortogonal. Fonte: adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish [12].

O primeiro termo do lado direito da equação (2.16) representa uma contribuição semelhante à contribuição em malhas ortogonais, ou seja, envolvendo ϕ_P e ϕ_N , enquanto o segundo

termo do lado direito é chamado difusão cruzada ou difusão não ortogonal e é devido a não-ortogonalidade da malha. Os autores realizaram ainda uma discussão sobre diferentes opções para a decomposição de $\mathbf{S}_f$, que serão apresentadas a seguir.

Na abordagem de correção mínima, a decomposição de $\mathbf{S}_f$ é feita de forma a manter a correção não ortogonal na equação (2.16) o menor possível, tornando $\mathbf{E}_f$ e $\mathbf{T}_f$ ortogonais, como mostra a Figura 17. À medida que a não-ortogonalidade aumenta, a contribuição para o fluxo de difusão de ϕ_N e ϕ_P diminui. Neste caso, o vetor $\mathbf{E}_f$ é calculado como

$$\mathbf{E}_f = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{S}_f)\mathbf{e} = (S_f \cos \alpha)\mathbf{e}. \quad (2.17)$$

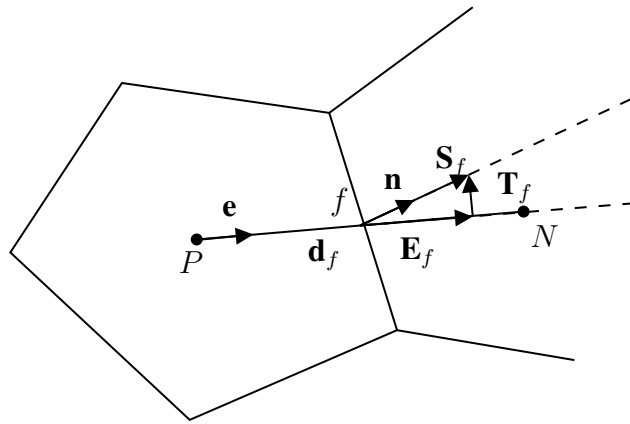


Figura 17 – Esquema de decomposição de $\mathbf{S}_f$ utilizando a abordagem de correção mínima.
Fonte: adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish [12].

Na abordagem de correção ortogonal mantém-se a contribuição do termo envolvendo ϕ_N e ϕ_P como em uma malha ortogonal, independente do grau de não-ortogonalidade da malha (veja a Figura 18). Para conseguir isso, $\mathbf{E}_f$ é definido como

$$\mathbf{E}_f = S_f \mathbf{e}. \quad (2.18)$$

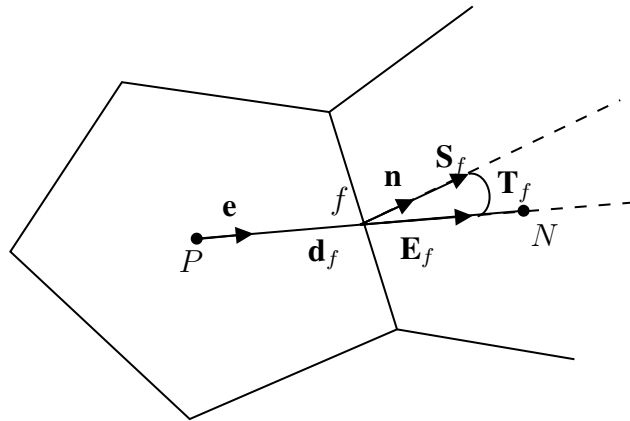


Figura 18 – Esquema de decomposição de $\mathbf{S}_f$ utilizando a abordagem de correção ortogonal.
Fonte: adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish [12].

Na abordagem sobre-relaxada, a importância do termo envolvendo ϕ_N e ϕ_P é aumentar à medida que aumenta a não-ortogonalidade da malha. Isso é obtido selecionando $\mathbf{T}_f$ como normal a $\mathbf{S}_f$, como é mostrado na Figura 19. Desse modo, $\mathbf{E}_f$ é calculado como

$$\mathbf{E}_f = \left(\frac{S_f}{\cos \alpha} \right) \mathbf{e} = \left(\frac{S_f^2}{A_f \cos \alpha} \right) \mathbf{e} = \frac{\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_f}{\mathbf{e} \cdot \mathbf{S}_f} \mathbf{e}. \quad (2.19)$$

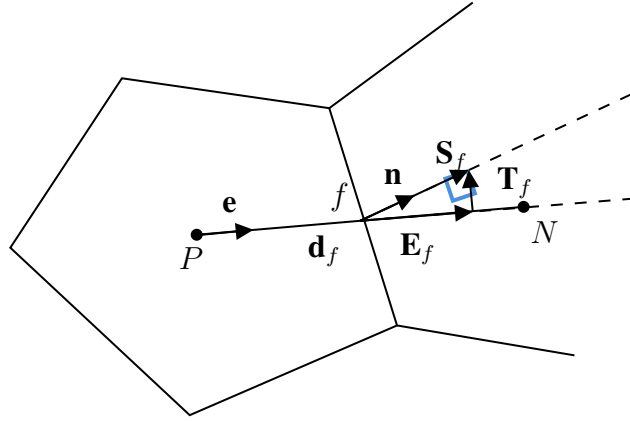


Figura 19 – Esquema de decomposição de $\mathbf{S}_f$ utilizando a abordagem sobre-relaxada. Fonte: adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish [12].

Os autores apontam que a diferença entre os métodos descritos pelas equações (2.17) a (2.19) está na precisão e estabilidade em malhas não ortogonais, sendo que a abordagem sobre-relaxada foi considerada a mais estável.

Nishikawa e White [13] propõem calcular o gradiente da face por meio da média dos gradientes nos nós, ou seja,

$$(\nabla \phi)_f = \frac{\nabla \phi_a + \nabla \phi_b}{2}, \quad (2.20)$$

em que os sobrescritos a e b indicam os nós à direita e à esquerda da face compartilhada pelos volumes P e N , como pode ser observado na Figura 20. Os autores afirmam que há duas razões para esse método ser considerado superior ao convencional de gradiente de célula: primeiro, o número de nós é menor que o número de células em malhas não estruturadas, desse modo exige-se menos memória computacional para armazenar os valores dos gradientes. Se os gradientes nos nós são avaliados, por exemplo, pelo método dos mínimos quadrados (MMQ) o número de coeficientes que precisam ser calculados e armazenados pode ser significativamente menor do que o requerido pelo método convencional MMQ para gradientes nas células; segundo, o gradiente de face envolve um número menor de células do que a média de gradientes de células em uma face.

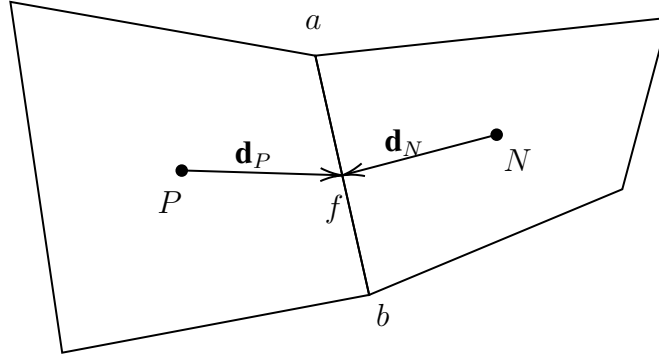


Figura 20 – Esquema utilizado por Nishikawa e White [13] para a discretização do fluxo difusivo entre volumes de controle. Fonte: adaptado de Nishikawa e White [13].

Nishikawa e White [13] ressaltam que o uso do método do gradiente na face tem uma única vantagem na implementação paralela, pois em uma partição de contorno, a comunicação é necessária somente para os valores da solução nas células na fronteira. Os autores concluíram por meio de testes numéricos em malhas triangulares para escoamentos invíscitos e viscosos bidimensionais de baixo e alto número de Mach, que o cálculo do gradiente é quatro vezes mais eficiente em termos de consumo de memória computacional e de tempo de processamento.

Os autores Assam e Natarajan [14] realizam a aproximação do gradiente da seguinte maneira:

$$(\nabla \phi)_f = \frac{\nabla \phi_P |\mathbf{r}_{P'}| + \nabla \phi_N |\mathbf{r}_{N'}|}{|\mathbf{r}|} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{|\mathbf{r}|} (\phi_a - \phi_b), \quad (2.21)$$

em que n é um vetor unitário normal à face, $\mathbf{r}$ representa o vetor de posição dos pontos P' e N' , conforme pode ser observado na Figura 21. Os nós auxiliares P' e N' , escolhidos nessa aproximação são obtidos projetando os centros das colunas no vetor normal da face que passa pela face f , ϕ_a e ϕ_b denotam os valores das soluções nos vértices da face e são calculados como

$$\begin{aligned} \phi_a &= \phi_P + \nabla \phi_P \cdot \mathbf{r}_P \\ \phi_b &= \phi_N + \nabla \phi_N \cdot \mathbf{r}_N. \end{aligned} \quad (2.22)$$

O esquema que utiliza essa abordagem de discretização da derivada normal é referido como AD-G (*Alpha Damping-Gradient*).

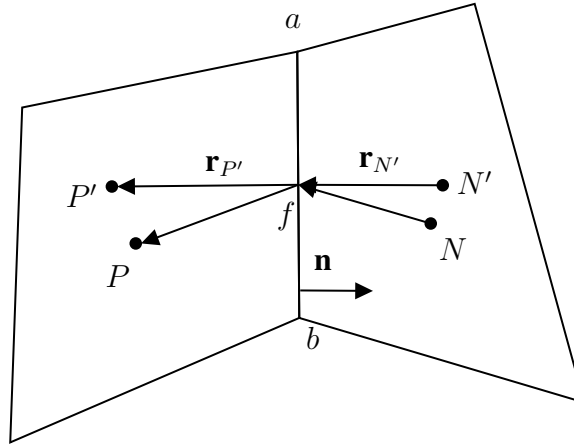


Figura 21 – Esquema de volume de controle utilizado para a discretização do termo difusivo apresentado por Assam e Natajaraan [14]. Fonte: adaptado de Assam e Natajaraan [14].

O esquema de gradiente utilizado emprega o uso de uma abordagem de mínimos quadrados ponderados pela área da face [14]. Os autores apontam que os esquemas de volumes finitos centrados em células propostos utilizando a referida aproximação do gradiente são relativamente simples de implementar em solucionadores existentes, além de calcular a solução e os fluxos para funções lineares e funções lineares por partes, enquanto exibem valores nominais de segunda e primeira ordem de precisão.

A exposição das diferentes abordagens para a solução da equação de difusão em malhas não estruturadas revela estratégias diversas para a aproximação do gradiente nas faces dos volumes de controle, cada uma apresentando vantagens e desafios que impactam diretamente na precisão, estabilidade e eficiência computacional das simulações numéricas. Na seção seguinte, é apresentado o método desenvolvido no presente trabalho, o qual difere das abordagens anteriormente discutidas.

2.3 Formulação do método de volumes finitos em malhas não estruturadas

Nesta seção, será apresentada a metodologia empregada para a discretização da equação de difusão por meio do MVF, que é adotada ao longo do presente trabalho. Tal metodologia é uma extensão do trabalho realizado por Parizoto [18], acrescida do tratamento da malha computacional com volumes quadrangulares e da inclusão do estudo para casos anisotrópicos.

A equação (2.2), para o caso bidimensional em coordenadas cartesianas, pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{xx} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{yy} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{xy} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{yx} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right) + S = 0. \quad (2.23)$$

Definindo $H = \frac{\partial \phi}{\partial x}$ e $G = \frac{\partial \phi}{\partial y}$ a equação (2.23) reduz-se a:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\Gamma_{xx}H) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma_{yy}G) + \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma_{xy}G) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma_{yx}H) + S = 0. \quad (2.24)$$

Considere, neste momento, o volume de controle P , representado na Figura 22, que ilustra as definições de nomenclatura associadas a um volume de controle genérico (tomado aqui como um quadrilátero apenas para fins de exemplificação, embora a metodologia descrita se aplique igualmente a volumes triangulares), incluindo os volumes geométricos e topológicos relevantes para a análise. O volume de controle C possui quatro volumes vizinhos, cujos centroides são denotados por $F1$, $F2$, $F3$ e $F4$.

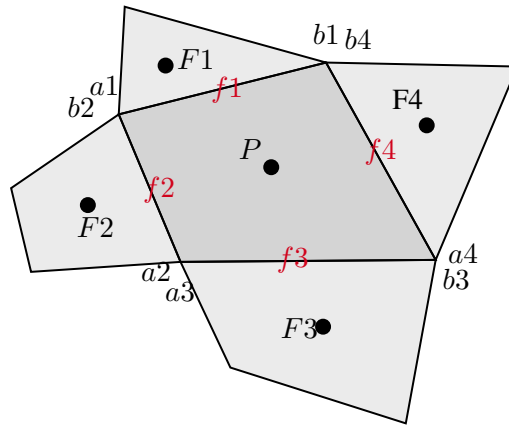


Figura 22 – Volume de controle genérico com quatro vizinhos. Fonte: a autora.

Os pares de vértices $(a1, b1)$, $(a2, b2)$, $(a3, b3)$ e $(a4, b4)$ correspondem as extremidades de cada uma das faces $f1$, $f2$, $f3$ e $f4$, respectivamente, que são compartilhadas com os volumes vizinhos. Para o caso em que o volume de controle seja triangular, ele possuirá apenas três volumes vizinhos, o que reflete a diferença na configuração topológica e na conectividade geométrica.

A nomenclatura apresentada na Figura 22 é essencial para o entendimento das interações entre os volumes de controle e para a formulação do esquema de discretização que será apresentado.

Integrando a equação (2.24) no volume de controle P , tem-se:

$$\iint \left(\frac{\partial}{\partial x}(\Gamma_{xx}H) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma_{yy}G) \right) dxdy + \iint \left(\frac{\partial}{\partial x}(\Gamma_{xy}G) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma_{yx}H) \right) dxdy + \iint S dxdy = 0. \quad (2.25)$$

Nesta etapa, podem-se substituir as integrais duplas sobre a área limitada por uma curva fechada da equação (2.25) por integrais de linha ao longo dessa curva. Para isso, utiliza-se o Teorema de Green [12], que estabelece uma relação direta entre as integrais de linha e área, conforme enunciado a seguir.

Teorema 2.2. (Teorema de Green) *Seja P uma curva simples, fechada e diferenciável, e R a região do plano delimitada por P . Considere G e H como funções reais de variável real, com derivadas parciais contínuas em uma região que contenha R . Nesse contexto a seguinte igualdade se aplica:*

$$\int_P (G dx + H dy) = \iint_R \left(\frac{\partial H}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial y} \right) dxdy \quad (2.26)$$

aplicando o Teorema de Green aos primeiro e segundo termos da equação (2.25), tem-se:

$$\begin{aligned} & \iint \left(\frac{\partial}{\partial x} (\Gamma_{xx} H) + \frac{\partial}{\partial y} (\Gamma_{yy} G) \right) dxdy + \iint \left(\frac{\partial}{\partial x} (\Gamma_{xy} G) + \frac{\partial}{\partial y} (\Gamma_{yx} H) \right) dxdy = \\ &= \int_P (\Gamma_{xx} H dy - \Gamma_{yy} G dx) + \int_P (\Gamma_{xy} G dy - \Gamma_{yx} H dx) \\ &= \sum_{i=1}^n \Gamma_{xx_i} H_i \Delta y_{a_i b_i} - \Gamma_{yy_i} G_i \Delta x_{a_i b_i} + \Gamma_{xy_i} G_i \Delta y_{a_i b_i} - \Gamma_{yx_i} H_i \Delta x_{a_i b_i} \end{aligned} \quad (2.27)$$

sendo n a quantidade de faces da célula. Para o volume genérico com quatro vizinhos, ilustrado na Figura 22, tem-se $n = 4$ no somatório. No caso de volumes triangulares, o somatório tem varia de 1 a 3. A inversão de sinais nos termos multiplicados por dx decorre da aplicação direta da identidade de Green para converter integrais de área de em integrais de linha sobre o contorno do volume de controle.

Falta ainda realizar a avaliação dos gradientes H_i e G_i , anteriormente definidos como segue:

$$H_i = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \quad \text{e} \quad G_i = \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_i. \quad (2.28)$$

A reconstrução dos gradientes é realizada por meio do Método de Green-Gauss que, como descrito em Moukalled, Mangani e Darwish [12], primeiramente, é necessário definir o gradiente médio sobre uma célula P com área A_P . Essa aproximação do valor médio é obtida integrando o gradiente H_i sobre a célula do centroide P , obtendo:

$$H_i \approx H_{i\text{médio}} = \frac{1}{A_P} \int_{A_P} H_i dA_P. \quad (2.29)$$

Em seguida, usando o Teorema de Gauss, a integral de área é transformada em uma integral de linha:

$$H_i = \frac{1}{A_P} \int_{A_P} H_i dxdy = \frac{1}{A_P} \int_{A_P} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i dxdy. \quad (2.30)$$

Por fim, a integral é aproximada utilizando a regra de integração do ponto médio. Deste modo, é possível expressar as variações de ϕ em função dos valores nos vértices da área formada pelos centroides P e F_i e pelos vértices a_i e b_i , conforme indicado pelas linhas tracejadas

da Figura 23. Essas áreas, aqui denominadas como diamante, correspondem às sub-regiões associadas a cada face do volume de controle.

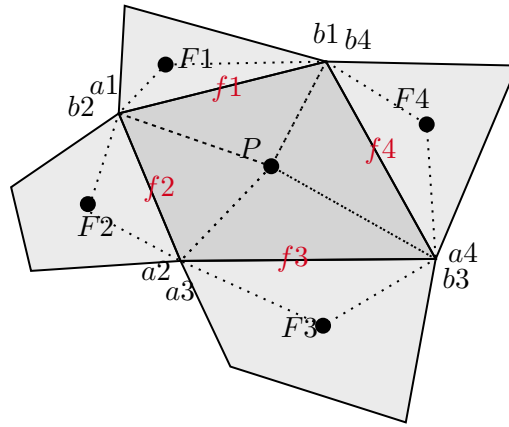


Figura 23 – Volume de controle genérico com quatro vizinhos com delimitações da área diamante formada pelos centroides P e F_i e os vértices a_i e b_i . Fonte: a autora.

Deste modo, sendo A_{f_i} a área delimitada pelo diamante, tem-se que:

$$Hi = \frac{\frac{\phi_{a_i} + \phi_{F_i}}{2} \Delta y_{a_i F_i}}{A_{f_i}} + \frac{\frac{\phi_{F_i} + \phi_{b_i}}{2} \Delta y_{F_i b_i}}{A_{f_i}} + \frac{\frac{\phi_{b_i} + \phi_P}{2} \Delta y_{b_i P}}{A_{f_i}} + \frac{\frac{\phi_P + \phi_{a_i}}{2} \Delta y_{P a_i}}{A_{f_i}}, \quad (2.31)$$

Cada termo da soma representa a contribuição do fluxo entre dois pontos adjacentes, ponderada pela distância entre eles. Moukalled, Mangani e Darwish [12] apontam que a aproximação do valor médio utilizada no Método de Green-Gauss apresenta uma precisão de segunda ordem.

Reagrupando os termos da equação (2.31), é possível obter:

$$Hi = \frac{(\phi_{a_i} + \phi_{F_i}) \Delta y_{a_i F_i} + (\phi_{F_i} + \phi_{b_i}) \Delta y_{F_i b_i} + (\phi_{b_i} + \phi_P) \Delta y_{b_i P} + (\phi_P + \phi_{a_i}) \Delta y_{P a_i}}{2A_{f_i}}. \quad (2.32)$$

De forma análoga, é possível avaliar Gi e obter:

$$Gi = \frac{(\phi_{a_i} + \phi_{F_i}) \Delta x_{a_i F_i} + (\phi_{F_i} + \phi_{b_i}) \Delta x_{F_i b_i} + (\phi_{b_i} + \phi_P) \Delta x_{b_i P} + (\phi_P + \phi_{a_i}) \Delta x_{P a_i}}{2A_{f_i}}. \quad (2.33)$$

em que, considerando o volume de controle genérico da Figura 23, $i = 1, 2, 3$ e 4 .

A avaliação do termo fonte ocorre do mesmo modo como realizado para as malhas não estruturadas, explicitada na equação (2.5).

Substituindo Hi e Gi na equação (2.27) e, de volta a equação (2.23) onde a soma entre

o termo difusivo e o termo fonte resulta em zero, tem-se:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^n \left[\Gamma_{xx_i} \left(\frac{(\phi_{a_i} + \phi_{F_i})\Delta y_{a_i F_i} + (\phi_{F_i} + \phi_{b_i})\Delta y_{F_i b_i} + (\phi_{b_i} + \phi_P)\Delta y_{b_i P} + (\phi_P + \phi_{a_i})\Delta y_{P a_i}}{2A_{f_i}} \right) \Delta y_{a_i b_i} - \right. \\
& - \Gamma_{yy_i} \left(\frac{(\phi_{a_i} + \phi_{F_i})\Delta x_{a_i F_i} + (\phi_{F_i} + \phi_{b_i})\Delta x_{F_i b_i} + (\phi_{b_i} + \phi_P)\Delta x_{b_i P} + (\phi_P + \phi_{a_i})\Delta x_{P a_i}}{2A_{f_i}} \right) \Delta x_{a_i b_i} + \\
& + \Gamma_{xy_i} \left(\frac{(\phi_{a_i} + \phi_{F_i})\Delta x_{a_i F_i} + (\phi_{F_i} + \phi_{b_i})\Delta x_{F_i b_i} + (\phi_{b_i} + \phi_P)\Delta x_{b_i P} + (\phi_P + \phi_{a_i})\Delta x_{P a_i}}{2A_{f_i}} \right) \Delta y_{a_i b_i} - \\
& - \Gamma_{yx_i} \left(\frac{(\phi_{a_i} + \phi_{F_i})\Delta y_{a_i F_i} + (\phi_{F_i} + \phi_{b_i})\Delta y_{F_i b_i} + (\phi_{b_i} + \phi_P)\Delta y_{b_i P} + (\phi_P + \phi_{a_i})\Delta y_{P a_i}}{2A_{f_i}} \right) \Delta x_{a_i b_i} + \left. \right] \\
& + (S_p \phi_P + S_c) A_P = 0.
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Reagrupando os termos de modo a evidenciar ϕ_P , ϕ_{F_i} , ϕ_{a_i} e ϕ_{b_i} , obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^n \frac{1}{2A_{f_i}} (\Gamma_{xx_i}(\Delta y_{b_i P} + \Delta y_{P a_i})\Delta y_{a_i b_i} + \Gamma_{yy_i}(\Delta x_{b_i P} + \Delta x_{P a_i})\Delta x_{a_i b_i} - \\
& - \Gamma_{xy_i}(\Delta x_{b_i P} + \Delta x_{P a_i})\Delta y_{a_i b_i} - \Gamma_{yx_i}(\Delta y_{b_i P} + \Delta y_{P a_i})\Delta x_{a_i b_i} + S_p) \phi_P + \\
& + \sum_{i=1}^n \frac{1}{2A_{f_i}} (\Gamma_{xx_i}(\Delta y_{a_i F_i} + \Delta y_{F_i b_i})\Delta y_{a_i b_i} + \Gamma_{yy_i}(\Delta x_{a_i F_i} + \Delta x_{F_i b_i})\Delta x_{a_i b_i} - \\
& - \Gamma_{xy_i}(\Delta x_{a_i F_i} + \Delta x_{F_i b_i})\Delta y_{a_i b_i} - \Gamma_{yx_i}(\Delta y_{a_i F_i} + \Delta y_{F_i b_i})\Delta x_{a_i b_i}) \phi_{F_i} + \\
& + \sum_{i=1}^n \frac{1}{2A_{f_i}} (\Gamma_{xx_i}(\Delta y_{P a_i} + \Delta y_{a_i F_i})\Delta y_{a_i b_i} + \Gamma_{yy_i}(\Delta x_{P a_i} + \Delta x_{a_i F_i})\Delta x_{a_i b_i} - \\
& - \Gamma_{xy_i}(\Delta x_{P a_i} + \Delta x_{a_i F_i})\Delta y_{a_i b_i} - \Gamma_{yx_i}(\Delta y_{P a_i} + \Delta y_{a_i F_i})\Delta x_{a_i b_i}) \phi_{a_i} + \\
& + \sum_{i=1}^n \frac{1}{2A_{f_i}} (\Gamma_{xx_i}(\Delta y_{b_i P} + \Delta y_{F_i b_i})\Delta y_{a_i b_i} + \Gamma_{yy_i}(\Delta x_{b_i P} + \Delta x_{F_i b_i})\Delta x_{a_i b_i} - \\
& - \Gamma_{xy_i}(\Delta x_{b_i P} + \Delta x_{F_i b_i})\Delta y_{a_i b_i} - \Gamma_{yx_i}(\Delta y_{b_i P} + \Delta y_{F_i b_i})\Delta x_{a_i b_i}) \phi_{b_i} + \\
& + S_c A_P = 0
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Denotando o primeiro somatório da equação (2.35) por a_P , os termos do segundo como a_{F_i} , do terceiro como a_{a_i} , do quarto como a_{b_i} e fazendo ainda $b = S_c A_P$, tem-se a forma geral para o MVF de modo que a soma dos dois primeiros termos (denominados difusão ortogonal) é igual a soma dos terceiro e quarto termos (denominada difusão cruzada) com o termo fonte, ou seja,

$$\underbrace{a_P \phi_P + \sum_{i=1}^n a_{F_i} \phi_{F_i}}_{\text{difusão ortogonal}} = \underbrace{\sum_{i=1}^n a_{a_i} \phi_{a_i} + \sum_{i=1}^n a_{b_i} \phi_{b_i}}_{\text{difusão cruzada}} + \underbrace{b}_{\text{termo fonte}}. \tag{2.36}$$

Os termos oriundos da difusão ortogonal são avaliados implicitamente. Dessa forma os coeficientes a_P e a_{F_i} compõem a matriz dos coeficientes do sistema linear $A \cdot \phi = b$, enquanto os termos de difusão cruzada são avaliados de forma explícita, ou seja, calculados com dados da iteração anterior, da mesma forma que o termo fonte. Na prática, o termo de difusão cruzada

e o termo fonte são tratados como um único termo fonte explícito. É importante ressaltar que, quando os volumes da malha são ortogonais, os termos de difusão cruzada são nulos.

As propriedades localizadas nos vértices são calculadas usando uma interpolação ponderada pelo inverso da distância do vértice v à localização de valores conhecidos nos centroides F_i dos volumes vizinhos ao vértice em questão, conforme equação (2.37):

$$\phi_v = \frac{\frac{\phi_{F_1}}{L_{F_1-v}} + \frac{\phi_{F_2}}{L_{F_2-v}} + \dots + \frac{\phi_{F_i}}{L_{F_i-v}}}{\frac{1}{L_{F_1-v}} + \frac{1}{L_{F_2-v}} + \dots + \frac{1}{L_{F_i-v}}}. \quad (2.37)$$

Na Figura 24, é ilustrado um caso em que o vértice v é compartilhado por 5 volumes, entretanto, o número de volumes podem variar no caso de malhas não estruturadas, inclusive, esta variação é um dos motivos para o uso do termo "não estruturado" para esse tipo de malha.

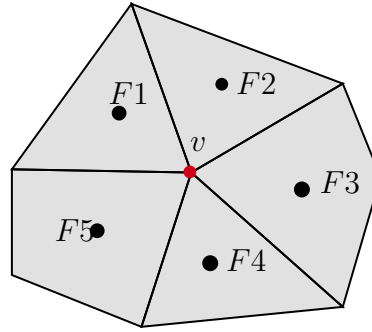


Figura 24 – Avaliação das propriedades do vértice v . Exemplo com 5 vizinhos. Fonte: a autora

De forma geral, pode-se escrever a equação (2.37) como:

$$\phi_v = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{\phi_{F_i}}{L_{F_i-v}}}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{L_{F_i-v}}}, \quad (2.38)$$

com n sendo a quantidade de volumes que compartilham o vértice v .

Vale ressaltar que, embora as Figuras 22 e 23 apresentadas neste capítulo ilustrem um volume de controle quadrangular, as equações apresentadas nesse capítulo foram generalizadas e podem ser utilizadas tanto para volumes quadrangulares quanto para volumes triangulares.

2.4 Volumes de fronteira e condições de contorno

Um volume é classificado como volume de fronteira quando ao menos uma de suas faces está contida no contorno do domínio computacional. Considere o caso ilustrado na Figura 25, a qual mostra um volume de controle genérico contido no contorno do domínio.

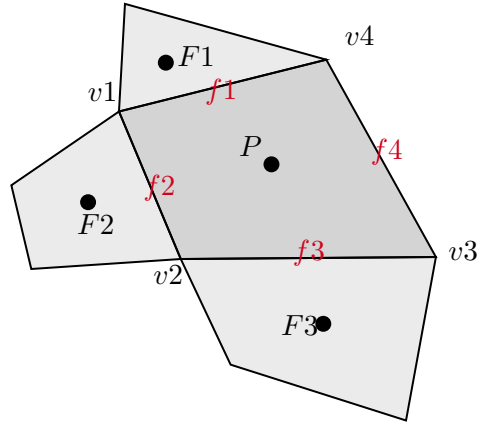


Figura 25 – Representação de um volume de controle genérico na fronteira do domínio. Fonte: a autora.

Note que a face $f4$ do volume de controle P ilustrado na Figura 25 está no contorno do domínio, isto é, não possui o elemento vizinho 4. Em geral, há as seguintes possibilidades: volumes quadriláteros de fronteira podem ter dois ou três vizinhos, e volumes triangulares de fronteira podem ter um ou dois vizinhos.

Para o tratamento dos volumes de fronteira, pode-se adotar a metodologia proposta por Hoffmann e Chiang [15], na qual os valores de ϕ_P são obtidos por meio de uma interpolação ponderada inversamente proporcional à distância entre o centroide P e os vértices, nos quais os valores são conhecidos. Esse procedimento segue o mesmo conceito utilizado na equação (2.38), com a devida adaptação para ϕ_P dos volumes de fronteira, conforme expresso na equação (2.39) e ilustrado na Figura 26:

$$\phi_P = \frac{\frac{\phi_{v1}}{L_{v1}} + \frac{\phi_{v2}}{L_{v2}} + \dots + \frac{\phi_{vn}}{L_{vn}}}{\frac{1}{L_{v1}} + \frac{1}{L_{v2}} + \dots + \frac{1}{L_{vn}}}, \quad (2.39)$$

em que n representa a quantidade de vértices do volume. Assim, para o caso ilustrado na Figura 25, $n = 4$.

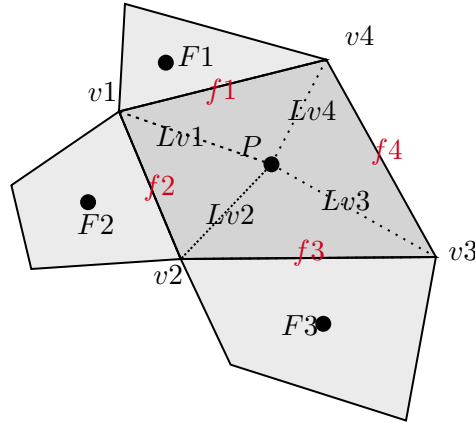


Figura 26 – Representação de um volume de controle de fronteira segundo a metodologia de Hoffmann e Chiang [15]. Fonte: a autora.

A equação 2.39 baseia-se em uma interpolação puramente geométrica, o que torna seu cálculo pouco complexo, mas também faz com que desconsidere o efeito do termo fonte S . Para contornar essa limitação, o presente trabalho propõe uma nova metodologia de tratamento das condições de contorno. Nessa abordagem, considera-se o ponto médio da face de contorno como pseudocentroide e aplica-se a mesma metodologia empregada nos volumes internos. Desse modo, o valor de ϕ na face de contorno é calculado com base nas informações fornecidas pelas condições de contorno. Ambas as metodologias foram implementadas com o objetivo de comparar seus resultados.

No presente trabalho, foram implementados três tipos de condições de contorno: Dirichlet (ou de primeiro tipo, ou prescrita), Neumann (ou de segundo tipo, ou de fluxo prescrito) e Robin (ou terceiro tipo, ou convectiva) [24], que serão detalhados a seguir.

2.4.1 Condição de Contorno de Dirichlet

As condições de contorno de Dirichle, cujo nome é dado em homenagem ao matemático alemão Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805–1855), também conhecidas como condições de contorno do primeiro tipo, são condições em que o valor da variável ϕ é prescrito em determinada parte da fronteira do domínio f e podem ser representadas conforme mostra a equação (2.40):

$$\phi_f = \psi(x), \quad (2.40)$$

em que ϕ_f representa a variável ϕ na fronteira f enquanto $\psi(x)$ é a função que descreve o valor de ϕ em f .

2.4.2 Condição de Contorno de Neumann

Nesse tipo de condição de contorno, não é o valor de ϕ que é fornecido, mas sim a componente normal do fluxo. Essa condição, também conhecida como condição de contorno de

segundo tipo, recebe esse nome em homenagem ao matemático alemão Karl Gottfried Neumann (1832-1925). Essa condição pode ser expressa pela equação (2.41):

$$-\Gamma_f \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} \Big|_f = q, \quad (2.41)$$

em que Γ_f é o tensor de difusão, $\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}}$ é o gradiente normal de ϕ na fronteira e q representa o fluxo imposto na fronteira.

2.4.3 Condição de contorno de Robin

Por fim, é apresentada a condição de contorno de Robin, cujo nome é atribuído em homenagem ao matemático francês Victor Gustave Robin (1855-1897). Também conhecida como condição de contorno de terceiro tipo, consiste, basicamente, em uma relação entre as duas condições anteriores, podendo ser expressa como indicado na equação (2.42):

$$-\Gamma_f \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} \Big|_f = h_\infty (\phi_f - \phi_\infty). \quad (2.42)$$

Aqui, Γ_f , $\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} \Big|_f$ e ϕ_f são definidos como nas condições anteriores, h_∞ representa uma constante de proporcionalidade conhecida e ϕ_∞ representa o valor da variável no meio externo.

Manipulando a equação (2.42), é possível estabelecer uma condição de contorno geral que unifica as três condições anteriores, conforme descrito pela equação 2.43.

$$-\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \hat{\mathbf{n}}} \Big|_f = h_\infty (\phi_f - \phi_\infty) + q \quad (2.43)$$

Note que:

- se $h_\infty \rightarrow \infty$ e $q = 0$, a equação se reduz a $\phi_f = \phi_\infty$, e tem-se a condição de contorno de Dirichlet;
- se $h_\infty = 0$, tem-se a condição de contorno de Neumann;
- se $q = 0$, tem-se a condição de contorno de Robin.

Dessa forma, a equação (2.43) permite trabalhar com qualquer uma das três condições de contorno supracitadas ou mesmo com combinações delas, bastando, para isso, atribuir valores adequados para ϕ_∞ , h_∞ e q

Como já mencionado no exemplo apresentado na Figura 25, não existe elemento vizinho na face de contorno, no entanto, é possível utilizar o ponto médio da face do contorno como pseudocentroide e, aplicando à equação (2.43) à metodologia já exposta, pode-se obter a equação (2.44)

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{L_{Pf}} \frac{A_i A_i \Gamma_{xx} + A_i A_j \Gamma_{xy} + A_j A_i \Gamma_{yx} + A_j A_j \Gamma_{yy}}{A_i u_i + A_j u_j} (\phi_f - \phi_P) \\
& + \frac{A_i \Gamma_{xx} \mathbf{u}_i + A_i \Gamma_{xy} \mathbf{u}_j + A_j \Gamma_{yx} \mathbf{u}_i + A_j \Gamma_{yy} \mathbf{u}_j}{A_i u_i + A_j u_j} (\phi_b - \phi_a) \\
& = A h_\infty (\phi_f - \phi_\infty) + q A,
\end{aligned} \tag{2.44}$$

em que A_i e A_j são as componentes do vetor área do segmento segmento v_3v_4 , A é a área do segmento, u é o vetor unitário entre o centroide P e a face do contorno f e $\mathbf{u}$ é o vetor unitário normal à u , tal como ilustrado na Figura 27.

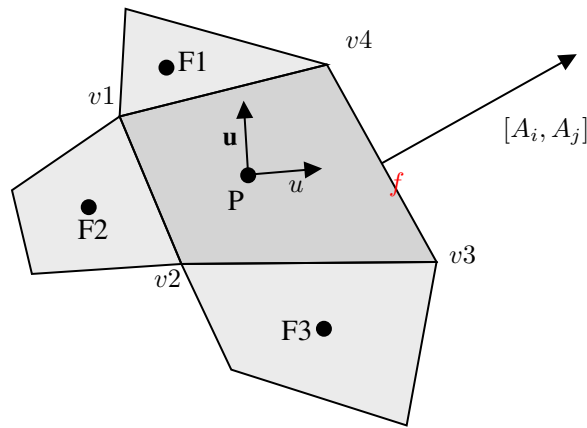


Figura 27 – Representação de um volume de controle de fronteira conforme a metodologia proposta no presente trabalho. Fonte: a autora

3 DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO

Neste capítulo, apresenta-se o desenvolvimento do código computacional que soluciona a EDPE descrita na equação da difusão para o caso bidimensional, conforme a equação (2.23). A implementação foi realizada em ambiente *MATLAB*®, empregando o MVF. Para a resolução do sistema linear resultante da discretização, o código utiliza o método iterativo BiCGSTAB (*Biconjugate Gradient Stabilized Method*) [37]

As simulações foram realizadas em uma estação de trabalho Samsung Galaxy Book2, equipada com um processador Intel Core i5-1235U 1.30 GHz, 16 GB de RAM, SSD de 512 GB, GPU integrada Intel Iris Xe Graphics e sistema operacional Windows 11, versão 25H2.

O código foi estruturado de modo que as funções necessárias à sua execução fossem implementadas separadamente, permitindo que cada rotina fosse executada apenas quando necessário. Dessa forma, o fluxo de execução depende de funções de autoria própria, algumas das quais estão listadas a seguir:

- Cálculo de área: rotinas que determinam a área de triângulos e quadriláteros irregulares;
- Cálculo do centroide dos volumes: localizam o centro geométrico de cada volume;
- Identificação de vértices compartilhados: localiza os volumes que compartilham um mesmo vértice;
- Conectividade geral da malha: identificação de um volume, seus vizinhos ($viz1, viz2, viz3, viz4$) e vértices ($va1, va2, va3, va4, vb1, vb2, vb3, vb4$), tipo do volume (triangular ou quadrilátero, indicado por ET) e se é um volume de fronteira (EF);
- Avaliação dos parâmetros de qualidade: qualidade (Q), razão de aspecto (AR) e distorção (D);

Por fim, embora a estrutura básica e as sub-rotinas sejam idênticas, a implementação final é apresentada em duas variantes: o Algoritmo 1 utiliza a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] para o tratamento dos volumes de contorno, enquanto o Algoritmo 2 detalha o método proposto no presente trabalho para a avaliação desses mesmos volumes.

Algoritmo 1 Algoritmo simplificado baseado na metodologia de Hoffmann e Chiang [15] para a avaliação dos volumes de contorno via MVF

Entrada: máximo de ciclos (*cicloMax*); critério de parada do sistema linear (*tol*); número máximo de iterações (*itemax*); quantidade de níveis de refinamento da malha (*numeroMalhas*); termos de fonte S_c e S_p ; função analítica (*funcaoAnal*); malha inicial (matriz com as coordenadas dos pontos da malha TP e matriz de conectividade dos pontos da malha C_{mesh}); ângulo de distorção (θ); condições de contorno (ϕ_∞, h_∞, q); tensor de difusão ($k_{xx}, k_{yy}, k_{xy}, k_{yx}$)

Saída: resultados; gráficos

- 1: Carregar a malha inicial (TP, C_{mesh})
 - 2: Refinar a malha (*dobraMesh*)
 - 3: Aplicar distorção controlada por um ângulo "theta"(opcional)
 - 4: Calcular centróides dos volumes (*centroids*)
 - 5: Calcular conectividade entre células (*conectividadeGeral*)
 - 6: Inicializar ϕ nos centróides ϕ_P e vértices ϕ_v ▷ Estimativa inicial
 - 7: Calcular áreas dos diamantes ($Ad1, Ad2, Ad3, Ad4$)
 - 8: **for** $ID = 1:nc$ **do**
 - 9: Calcular coeficientes de interface dos centróides ($a_{F1} \dots a_{Fn}$) via esquema de diamante
 - 10: Calcular coeficientes de correção dos vértices ($a_a \dots a_b$) para não-ortogonalidade
 - 11: Determinar a área do elemento (A_P) conforme a geometria (Tri ou Quad)
 - 12: **end for**
 - 13: Montar a matriz esparsa A
 - 14: **for** $ciclo=1:cicloMax$ **do**
 - 15: Calcular ϕ nas faces (ϕ_f) dos volumes de contorno ▷ Condições de contorno
 - 16: Calcular ϕ nos centroides dos volumes de contorno (equação 26)
 - 17: Montar o vetor de b incluindo termos de difusão cruzada e fonte linearizada (S_c, S_p).
 - 18: Calcular o resíduo do sistema linear $R = A \cdot \phi_c - b$
 - 19: Resolver $Ax = b$ utilizando o método BiCGSTAB(*itemax, tol_{lin}*) ▷ $tol_{lin} = 10^{-14}$
 - 20: **if** $residuo < tol$ **then**
 - 21: "Convergência alcançada";
 - 22: Pare;
 - 23: **else**
 - 24: Continue
 - 25: **end if**
 - 26: Atualizar ϕ nos vértices internos (interpolação ponderada equação 2.38)
 - 27: **end for**
 - 28: Calcular solução analítica nos centroides e nos vértices
 - 29: Calcular erros baseados nas normas discretas $L_1, L_2, L_\infty, L_{RMS}$
 - 30: Calcular métricas de qualidade da malha (D, AR, Q)
 - 31: Calcular ordem de convergência observada
 - 32: Gerar gráficos
-

Algoritmo 2 Algoritmo principal simplificado com a metodologia proposta para a avaliação dos volumes de contorno via MVF

Entrada: máximo de ciclos (*cicloMax*); critério de parada do sistema linear (*tol*); número máximo de iterações (*itemax*); quantidade de níveis de refinamento da malha (*numeroMalhas*); termos de fonte S_c e S_p ; função analítica (*funcaoAnal*); malha inicial (matriz com as coordenadas dos pontos da malha TP e matriz de conectividade dos pontos da malha C_{mesh}); ângulo de distorção (θ); condições de contorno (ϕ_∞, h_∞, q); tensor de difusão ($k_{xx}, k_{yy}, k_{xy}, k_{yx}$)

Saída: resultados; gráficos

- 1: Carregar a malha inicial (TP, C_{mesh})
- 2: Refinar a malha (*dobraMesh*)
- 3: Aplicar distorção controlada por um ângulo "theta"(opcional)
- 4: Calcular centróides dos volumes (*centroids*)
- 5: Calcular conectividade entre células (*conectividadeGeral*)
- 6: Inicializar ϕ nos centróides ϕ_P e vértices ϕ_v ▷ Estimativa inicial
- 7: **for** $ID = 1$ *nc* **do**
- 8: **for** cada face f do elemento **do**
- 9: Definir ponto vizinho F (centróide adjacente ou centro da face)
- 10: Calcular métricas geométricas (L_{CF}) e vetores unitários
- 11: Determinar coeficientes de difusão ortogonal (*Dif_CC*) e cruzada (*Cruz_CC*)
- 12: **end for**
- 13: **end for**
- 14: Calcular áreas dos diamantes ($Ad1, Ad2, Ad3, Ad4$)
- 15: **for** $ID = 1$ *nc* **do**
- 16: Calcular coeficientes de interface dos centróides ($a_{F1} \dots a_{Fn}$) via esquema de diamante
- 17: Calcular coeficientes de correção dos vértices ($a_a \dots a_b$) para não-ortogonalidade
- 18: Determinar a área do elemento (A_P) conforme a geometria (Tri ou Quad)
- 19: **end for**
- 20: Calcular a distância entre um vértice interno e os volumes que compartilham esse vértice
- 21: Montar a matriz esparsa A
- 22: **for** $ciclo=1:cicloMax$ **do**
- 23: Calcular ϕ nas faces (ϕ_f) dos volumes de contorno ▷ Condições de contorno
- 24: Atualizar ϕ nos vértices dos volumes de fronteira (média de ϕ das faces)
- 25: Atualizar ϕ nos vértices internos (interpolação ponderada equação 2.38)
- 26: Montar o vetor de b incluindo termos de difusão cruzada e fonte linearizada (S_c, S_p).
- 27: Calcular o resíduo do sistema linear $R = A \cdot \phi_c - b$
- 28: Resolver $Ax = b$ utilizando o método BiCGSTAB(*itemax, tol_{lin}*) ▷ $tol_{lin} = 10^{-14}$
- 29: **if** $residuo < tol$ **then**
- 30: "Convergência alcançada";
- 31: Pare;
- 32: **else**
- 33: Continue
- 34: **end if**
- 35: Atualizar ϕ nos vértices internos (interpolação ponderada equação 2.38)
- 36: **end for**
- 37: Calcular solução analítica nos centroides e nos vértices
- 38: Calcular erros baseados nas normas discretas $L_1, L_2, L_\infty, L_{RMS}$
- 39: Calcular métricas de qualidade da malha (D, AR, Q)
- 40: Calcular ordem de convergência observada
- 41: Gerar gráficos

4 VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO, ANÁLISE DE QUALIDADE DA MALHA E ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA

4.1 Verificação do código

Roache [38] descreve que a verificação consiste em resolver corretamente as equações, isto é, o autor define quais EDPs e condições de contorno estão sendo resolvidas e demonstra que o método utilizado está resolvendo-as corretamente.

Para a verificação do código, empregou-se o método das soluções fabricadas (MSF), que, conforme descrito por Salari e Knupp [39], consiste na construção de uma solução exata obtida por meio da formulação inversa do problema, ou seja, escolhe-se uma função adequada para verificar a eficiência do método e aplicam-se sobre ela os operadores da equação governante. Os autores listam sete critérios a serem seguidos na construção de uma solução fabricada a fim de garantir a eficiência da mesma, a saber:

- 1º As soluções fabricadas devem ser compostas por funções analíticas suaves, como polinômios, funções trigonométricas ou exponenciais, para que a solução possa ser calculada facilmente;
- 2º A solução deve ser suficientemente geral para exercitar todos os termos da equação governante;
- 3º A solução deve ter um número suficiente de derivadas não triviais;
- 4º As derivadas da solução devem ser limitadas por uma constante pequena. Isso garante que a solução não seja uma função fortemente variável no espaço e/ou no tempo;
- 5º A solução fabricada não deve impedir a execução bem-sucedida do código durante os testes. Problemas de robustez não fazem parte da verificação do código.
- 6º A solução deve ser definida em um subconjunto conexo do espaço bidimensional ou tridimensional.
- 7º A solução deve ser construída de forma que os operadores diferenciais da EDP façam sentido.

Fortuna (2000) aponta que os erros relacionados à solução numérica das equações diferenciais são diversos e ressalta a importância do conhecimento desses erros para que seja possível a realização de uma avaliação de qualidade da solução numérica. Versteeg e Malalasekera (2007) indicam que os erros numéricos consistem em erros de arredondamento, de convergência iterativa e de discretização.

Ao se avaliar a ordem de convergência, os erros de arredondamento e iterativo podem afetar negativamente os resultados. Deste modo, para garantir que essas fontes de erro não tenham relevância, Veluri, Roy e Luke [40] afirmam que tanto o erro de arredondamento quanto

o erro de convergência iterativa devem ser ao menos 100 vezes menor que a norma associada ao erro de discretização da malha mais refinada.

4.2 Análise da ordem de convergência

Para avaliar a evolução do erro de discretização no refinamento da malha, é necessário realizar testes de convergência. Assim, pode-se dizer que uma solução é considerada convergente quando o erro associado diminui à medida que a malha é refinada [28]. Moukalled, Mangani e Darwish [12] acrescentam ainda que uma solução é dita convergente quando permanece inalterada mesmo após a realização de refinamentos adicionais da malha.

Para a análise da ordem de convergência do esquema de discretização proposto, será utilizado como base o processo descrito por LeVeque [41] e Jacq [1], no qual primeiramente se define o índice de refinamento h da malha como:

$$h = \left(\frac{|\Omega|}{N_v} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.1)$$

em que $|\Omega|$ é a área do domínio e N_v representa a quantidade de volumes em que a malha foi dividida. Seja $\hat{\phi}_{P_i}^h$ a solução analítica avaliada sobre o volume P_i (de área $|P_i|$) de uma malha com índice de refinamento h , e $\phi_{P_i}^h$ a solução numérica correspondente, é possível calcular os seguintes erros, definidos a partir das normas discretas L_1 , L_2 , L_∞ e L_{RMS} :

$$E_1^h = \sum_{i=1}^N |\phi_{P_i}^h - \hat{\phi}_{P_i}^h| |P_i|, \quad (4.2)$$

$$E_2^h = \sqrt{\sum_{i=1}^N (\phi_{P_i}^h - \hat{\phi}_{P_i}^h)^2 |P_i|}, \quad (4.3)$$

$$E_\infty^h = \max_{1 \leq i \leq N} |\phi_{P_i}^h - \hat{\phi}_{P_i}^h|, \quad (4.4)$$

$$E_{RMS}^h = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\phi_{P_i}^h - \hat{\phi}_{P_i}^h)^2}{\sum_{i=1}^N |P_i|}}. \quad (4.5)$$

Além da análise dos erros numéricos, conforme as equações (4.2) a (4.5), determinou-se o resíduo difusivo, conceito central do MVF por representar, de forma discreta, o princípio de conservação em cada volume de controle. Em essência, o resíduo difusivo mede o desbalanceamento da equação governante na solução numérica e é calculado com base no balanço entre os fluxos que entram e saem do volume de controle, acrescido do respectivo termo-fonte, isto é,

$$R_i = \sum_{f \in \text{faces}(i)} (\tilde{\Gamma} \cdot \nabla \phi)_f + S. \quad (4.6)$$

Deste modo, dadas duas malhas com índice de refinamento h_1 e h_2 em que $h_1 > h_2$, uma estimativa para a ordem de convergência q_Θ em relação à norma Θ é definida por Sterza

[42] como "a inclinação local da curva do erro de discretização da solução numérica versus o tamanho h dos volumes num gráfico em escala logarítmica" sendo expressa da seguinte forma:

$$q_{\Theta} = \frac{\log E_{\Theta}^{h_2} - \log E_{\Theta}^{h_1}}{\log h_2 - \log h_1} \quad (4.7)$$

A estimativa da ordem de convergência q_{Θ} é aplicada genericamente a qualquer uma das métricas de erro ou resíduo difusivo apresentadas nas equações (4.2) a (4.6), onde Θ representa a norma discreta ou o balanço de fluxos selecionado para a análise.

Existem diversas denominações para q_{Θ} adotadas por diferentes autores. No trabalho de Jacq [1], q_{Θ} é denominado como ordem do erro de truncamento. Salari e Knupp [39] e Zhang *et al.* [43] se referem a q_{Θ} como ordem de acurácia observada, Breil e Maire [44] utilizam o termo ordem de convergência. Nos estudos de Gao e Wu [45] e Chang e Yuan [46], a mesma razão é chamada de taxa de convergência. Por fim, Marchi *et al.* [47] utilizam o termo ordem efetiva. No presente trabalho, optou-se pela nomenclatura "ordem de convergência".

4.3 Qualidade da malha

A avaliação da qualidade da malha é realizada por meio da análise individual de cada um de seus volumes. Assim, a métrica global da malha é definida como a média aritmética das qualidades calculadas para cada volume de controle separadamente.

Cabe ressaltar que, em malhas ortogonais, todos os volumes possuem propriedades geométricas idênticas, resultando na mesma qualidade individual. Nesse caso, a qualidade de um único volume representa a qualidade geral da malha. Por outro lado, para malhas não estruturadas, o cálculo individual é indispensável.

Assim, para avaliar a qualidade dos volumes de uma malha, pode-se utilizar algumas métricas como as propostas em Ansys [16]. Uma dessas métricas é baseada na inclinação angular e pode ser expressa por:

$$D = \max \left[\frac{\theta_{\max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{\min}}{\theta_e} \right], \quad (4.8)$$

em que D representa a distorção da malha, $\theta_{\max}$ e $\theta_{\min}$ são o maior e o menor ângulo interno (em graus) de determinado volume, respectivamente, e θ_e é o ângulo de um volume equilátero, isto é, para um volume triangular $\theta_e = 60^\circ$ e para um volume quadrilátero $\theta_e = 90^\circ$. A distorção calculada varia de 0 a 1, onde 0 é ideal (equilátero) e 1 indica um volume com grande índice de distorção.

A métrica seguinte, denominada razão de aspecto (AR) é definida de forma diferente para cada tipo de volume.

- Para triângulos, tem-se:

$$AR_T = \frac{R}{2r}, \quad (4.9)$$

em que R e r são, respectivamente, os raios dos círculos inscritos e circunscritos ao volume, como pode-se observar na Figura 28.

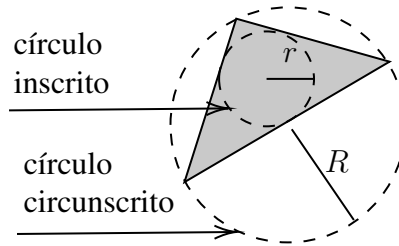


Figura 28 – Esquema da métrica razão de aspecto para volumes triangulares (AR_T). Fonte: adaptado de Ansys [16].

- Para quadriláteros, tem-se:

$$AR_Q = \frac{\max[m_1, m_2]}{\min[m_1, m_2]}, \quad (4.10)$$

sendo m_i é a média do comprimento entre duas arestas concorrentes a, b e c, d (Figura 29), ou seja, $e_1 = \frac{a+b}{2}$ e $e_2 = \frac{c+d}{2}$.

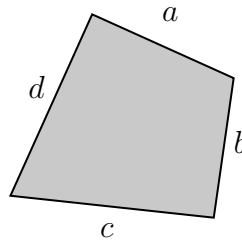


Figura 29 – Esquema da métrica razão de aspecto para volumes quadriláteros (AR_Q). Fonte: adaptado de Ansys [16].

Portanto, valores de AR próximos de 1 indicam aproximação do formato ótimo, enquanto quanto mais afastado de 1, maior é a distorção do volume.

Outra métrica utilizada para verificar a qualidade de um volume, denominada por qualidade ortogonal (Q), é baseada na proporção entre a sua área A_P para a soma do comprimento de suas arestas. Para volumes triangulares, essa métrica pode ser expressa como:

$$Q_T = \frac{4\sqrt{3} \cdot A_P}{\sum(\text{comprimento da aresta})^2}, \quad (4.11)$$

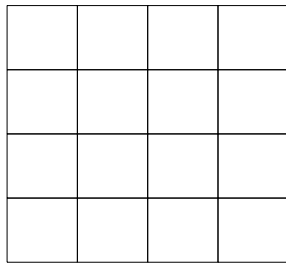
e para volumes quadrangulares, tem-se:

$$Q_Q = \frac{4 \cdot A_P}{\sum(\text{comprimento da aresta})^2}, \quad (4.12)$$

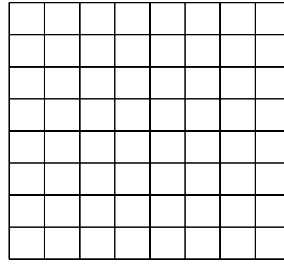
em que, $Q = 1$ indica um volume ideal e, quanto mais próximo de 0 mais deformado é o volumeo.

A fim de verificar a ordem de convergência do método apresentado no presente trabalho, foi realizado o refinamento de duas malhas ortogonais, uma em domínio quadrangular unitário

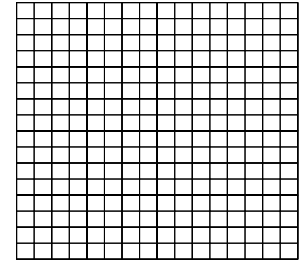
composta por quadriláteros e outra cujo domínio é um triângulo equilátero definido no intervalo $x \in [0, 1]$ composto por triângulos, obtendo-se assim malhas com 256, 1024 e 4096 volumes, como é ilustrado pelas Figuras 30 e 31.



Malha inicial

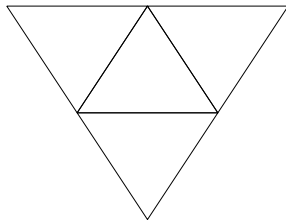


Após 1 ciclo de refinamento

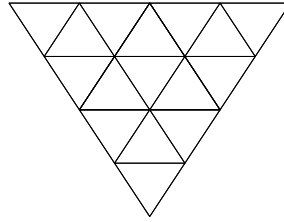


Após 2 ciclos de refinamento

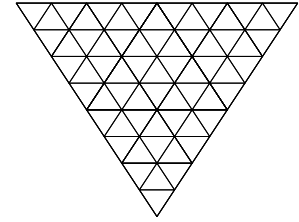
Figura 30 – Esquema utilizado para o refinamento da malha quadrangular ortogonal. Fonte: a autora.



Malha inicial



Após 1 ciclo de refinamento



Após 2 ciclos de refinamento

Figura 31 – Esquema utilizado para o refinamento da malha triangular ortogonal. Fonte: a autora.

As malhas foram submetidas a distorções sucessivas, variando sua qualidade em intervalos de 0.2 além do caso cuja qualidade é 0.1. Foram empregadas duas abordagens para a distorção das malhas quadrangulares e triangulares. Na abordagem utilizada para distorcer as malhas quadrangulares, as deformações foram realizadas segundo um ângulo θ de modo que todos os volumes sofressem a mesma distorção, como realizado por Traoré, Ahipo e Louste [17] (veja a Figura 32). Para as malhas triangulares, a metodologia foi aplicada de forma análoga à do trabalho realizado por Parizoto [18], ou seja, alterando a posição do vértice mais ao sul da malha original, de modo que todos os demais pontos sejam alterados, mantendo-se a mesma qualidade entre os volumes (como ilustrado na Figura 33)

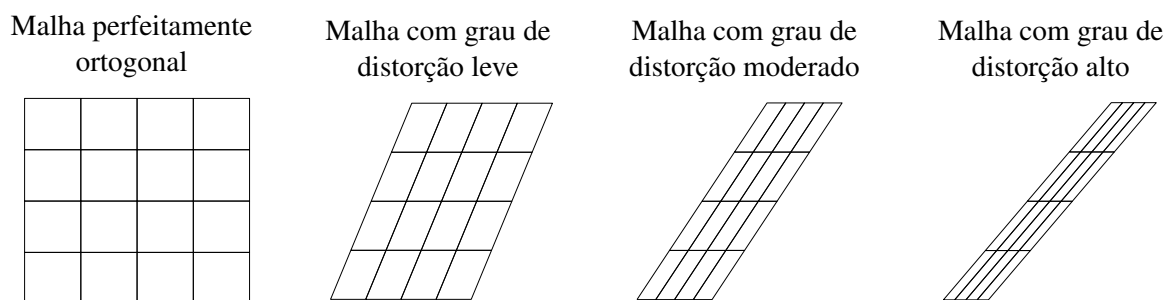


Figura 32 – Esquema ilustrativo do processo de distorção da malha quadrangular conforme realizado por [17]. Fonte: a autora.

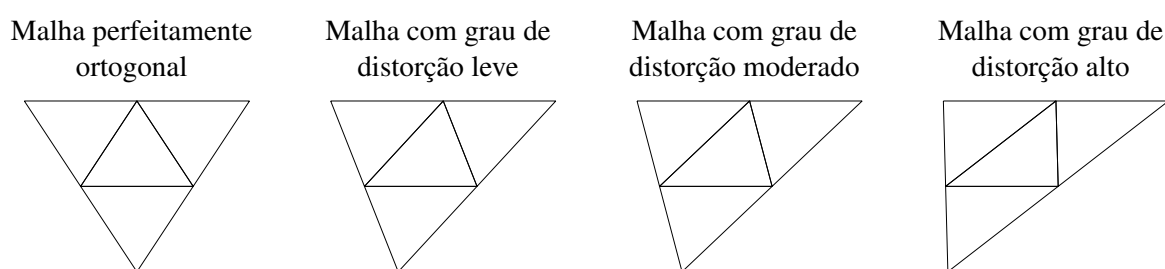


Figura 33 – Esquema ilustrativo do processo de distorção da malha triangular conforme realizado por Parizoto [18]. Fonte: a autora.

Para expandir o estudo, foram geradas mais quatro malhas com o auxílio do *software* GRS (*Grid Refine Solver*) [48]. Desse total, duas são malhas híbridas aleatórias em um domínio quadrangular unitário, enquanto as outras duas foram construídas em um domínio não trivial, utilizado para realizar um estudo de caso aplicado ao método desenvolvido no presente trabalho.

O GRS é uma ferramenta gratuita e versátil para a geração de malhas computacionais bidimensionais, incluindo malhas estruturadas, não estruturadas e híbridas. Desenvolvido na UTFPR, campus Apucarana, o *software* destaca-se por sua interface intuitiva e por seus recursos avançados de refinamento e interpolação de bordas.

Para garantir flexibilidade, o GRS integra múltiplos métodos de geração: um baseado em EDPEs, que produz malhas estruturadas suaves e de alta qualidade, e outro baseado na triangulação de Delaunay, ideal para a criação de malhas não estruturadas. Essa combinação permite a construção de malhas híbridas adaptadas a geometrias complexas.

A ferramenta agiliza o fluxo de trabalho ao permitir a criação rápida de geometrias a partir de imagens e a definição precisa de contornos com interpolação linear ou splines cúbicas. O GRS oferece exportação em múltiplos formatos (.simple, .cmesh e .msh), garantindo compatibilidade com *softwares* comerciais como *Ansys Fluent*. Adicionalmente, inclui diversas métricas para avaliação da qualidade e controles detalhados sobre a resolução numérica, auxiliando em estudos de convergência e independência de malha.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados e discutidos os resultados das estimativas da ordem de convergência, dos erros e da eficiência computacional, obtidos em testes numéricos realizados com as diferentes malhas apresentadas no capítulo anterior, considerando-se três casos distintos. Os resultados obtidos com as malhas ortogonais, isto é, aquelas cuja qualidade Q dos volumes é igual a 1, foram tomados como referência, pois representam o cenário teórico ótimo.

As tabelas contendo os resultados das simulações numéricas foram omitidas do corpo do texto devido à sua extensão, entretanto, estão disponíveis nos apêndices do presente trabalho. Nessas tabelas, são apresentados os resultados obtidos nos testes numéricos, incluindo a quantidade de volumes em cada malha, o índice de refinamento h , o número de ciclos, as iterações necessárias para atingir o critério de parada, o tempo computacional, o resíduo difusivo e a convergência do resíduo difusivo, considerando as diferentes qualidades de malhas analisadas em cada caso.

Entre os três casos descritos a seguir, o primeiro é o mesmo apresentado por Troré, Ahipo e Louste [17], selecionado intencionalmente para fins de comparação com a literatura. Os outros dois casos, por sua vez, foram obtidos pela autora do presente trabalho utilizando o MSF. Os procedimentos de cálculo necessários para obter essas soluções estão detalhados no Apêndice A.

- **Caso 1:**

Sendo S o termo fonte, para o caso 1, utilizou-se a solução analítica ϕ apresentada por Traoré, Ahipo e Louste [17]:

$$\begin{aligned} S &= 6x + 2 \\ \phi(x, y) &= x^3 + y^2 + xy \end{aligned} \tag{5.1}$$

- **Caso 2:**

O segundo caso foi obtido por meio do MSF e é dado por:

$$\begin{aligned} S &= 2 \sin(\pi x) \pi^2 \sin(\pi y) \\ \phi(x, y) &= \sin(\pi x) \sin(\pi y) \end{aligned} \tag{5.2}$$

- **Caso 3:**

Para o caso 3, foi adicionada a equação (5.2) um tensor de difusividade $\tilde{\Gamma}$ de modo a descrever um meio anisotrópico. A escolha desse tensor é arbitrária, ou seja, não há uma razão física ou matemática específica para sua definição, ele foi apenas tomado como um tensor genérico e não nulo, de modo a introduzir artificialmente o efeito da anisotropia na

solução manufaturada. Com isso, um novo termo fonte é obtido, como pode ser verificado na equação (5.3) a seguir:

$$\begin{aligned} S &= -10 \sin(\pi x) \pi^2 2 \sin(\pi y) + 4 \cos(\pi x) \pi^2 \cos(\pi y) \\ \phi(x, y) &= \sin(\pi x) \sin(\pi y) \\ \tilde{\Gamma} &= \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 7 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.3)$$

O objetivo da implementação dessa última equação consiste em verificar o comportamento convergente do método quando o tensor de difusividade representa um meio anisotrópico.

5.1 Verificação do código pela avaliação dos erros

Como já mencionado, Veluri, Roy e Luke [40] apontam que o erro de arredondamento e o erro iterativo podem interferir na ordem de convergência. Para garantir que esses erros não estejam gerando interferências, o erro iterativo deve ser, ao menos, 100 vezes menor que a norma do erro de discretização da malha mais refinada.

O mesmo critério vale para o erro de arredondamento. Para evitar que esse tipo de erro comprometa os resultados, o *MATLAB*® utiliza, por padrão, dupla precisão em todos os cálculos numéricos.

Nas Tabelas 1, 2 e 3 são apresentados os resultados da norma E_∞ e dos resíduos computados para cada malha. A escolha da norma do máximo (E_∞) justifica-se por considerar o maior erro absoluto entre todos os pontos da malha, sua verificação garante automaticamente que os demais casos sejam verificados, uma vez que, se o erro máximo é aceitável, os erros de menor magnitude também o serão.

Tabela 1 – Erro máximo e resíduos do Caso 1 para as diferentes qualidades das malhas quadrangulares e triangulares com 4096 volumes. Fonte: a autora.

Q	Quadrangular		Triangular	
	E_∞	Resíduo	E_∞	Resíduo
1.0	1,8102e-04	3,3751e-14	3,9168e-05	3,9166e-14
0.8	1,5153e-02	9,6492e-13	1,6598e-03	4,2508e-13
0.6	3,3497e-02	9,6575e-13	2,0291e-03	5,6488e-13
0.4	6,5163e-02	7,6739e-13	2,1829e-03	4,9089e-13
0.2	1,4676e-01	4,0927e-12*	2,2167e-03	6,9473e-13
0.1	2,9237e-01	1,1413e-11*	2,1998e-03	1,3103e-12*

* Valores referentes ao resíduo após o limite máximo de ciclos iterativos, sem convergência

Tabela 2 – Erro máximo e resíduos do Caso 2 para as diferentes qualidades das malhas quadrangulares e triangulares com 4096 volumes. Fonte: a autora.

Q	Quadrangular		Triangular	
	E_{∞}	Resíduo	E_{∞}	Resíduo
1.0	2,0070e-04	1,373e-15	1,0294e-04	1,6409e-14
0.8	2,0544e-03	5,6506e-13	3,1896e-04	3,8506e-13
0.6	1,8966e-03	7,3354e-13	1,1592e-03	9,6013e-13
0.4	2,4847e-03	9,8216e-13	1,3084e-03	7,4392e-13
0.2	4,5806e-03	9,5479e-13	8,5306e-04	9,7245e-13
0.1	1,1813e-02	9,7067e-13	4,6168e-04	9,8415e-13

Tabela 3 – Erro máximo e resíduos do Caso 3 para as diferentes qualidades das malhas quadrangulares e triangulares com 4096 volumes. Fonte: a autora.

Q	Quadrangular		Triangular	
	E_{∞}	Resíduo	E_{∞}	Resíduo
1.0	1,7713e-04	5,9139e-13	2,1070e-03	7,8448e-13
0.8	1,9946e-03	6,1708e-13	5,5711e-04	9,0181e-13
0.6	2,3089e-03	8,7701e-13	1,4911e-03	9,9198e-13
0.4	2,9861e-03	9,1963e-13	1,4616e-03	8,7691e-13
0.2	5,3341e-03	9,7083e-13	8,7905e-04	9,8349e-13
0.1	1,2998e-02	1,1875e-12*	4,6560e-04	9,7333e-13

* Valores referentes ao resíduo após o limite máximo de ciclos iterativos, sem convergência

Como evidenciam os resultados, todas as malhas analisadas satisfazem o critério segundo qual o resíduo deve ser inferior a $\frac{1}{100} \cdot E_{\infty}$. E, uma vez que, no caso em que o resíduo e o erro estão mais próximos, observa-se ainda uma diferença de nove ordens de grandeza (10^9), garantindo, assim, uma margem de segurança ampla para a verificação numérica.

5.2 Análise de convergência e de sensibilidade à qualidade da malha

Nesta seção, são apresentados os resultados da ordem de convergência para as malhas mais refinadas, considerando os três casos já descritos. As figuras expostas nesta seção são um resumo das Tabelas 11 à 22 presentes nos Apêndices B, C e D e ilustram uma comparação entre as metodologias empregadas na avaliação dos volumes de controle quanto à ordem de convergência, calculada para malhas triangulares e quadrangulares mais refinadas. Para cada qualidade de malha analisada, estabelece-se uma relação entre as ordens de convergência, calculadas a partir das normas definidas nas equações (4.2) a (4.5) e o parâmetro de qualidade Q , descrito nas equações (4.11) e (4.12).

Conforme já mencionado, para o Caso 1 adotou-se uma solução analítica polinomial de terceira ordem, originalmente proposta por Traoré, Ahipo e Louste [17]. Na primeira análise realizada, foi utilizada a metodologia proposta por Hoffmann e Chiang [15] para o tratamento dos volumes de contorno, equação (2.39).

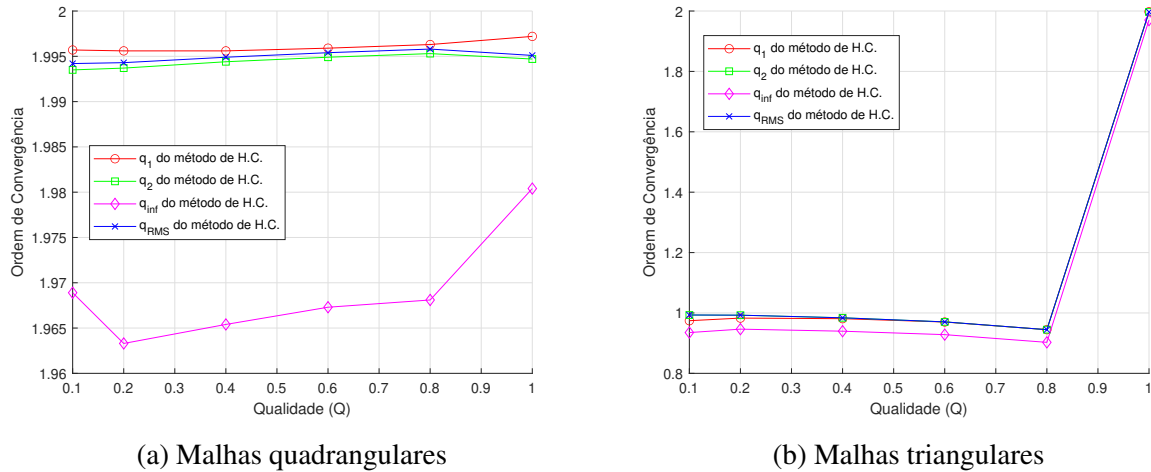


Figura 34 – Relação entre convergência e qualidade para o Caso 1 utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] em malhas com 4096 volumes. Fonte: a autora.

Nas malhas mais refinadas, a ordem de convergência para o caso ortogonal, tanto para as malhas com células triangulares quanto para as quadrangulares, é próxima de 2, como é possível observar na Figura 34 e nas Tabelas 11 e 12 contidas nos Apêndices do presente trabalho.

Para as malhas quadrangulares, observa-se um comportamento estável da convergência mesmo com a redução da qualidade da malha. Enquanto, para as malhas triangulares, a convergência cai bruscamente para valores menores que 1, na menor distorção da malha.

Contudo, como exposto na Seção 2.4, o tratamento dos volumes de contorno foi aprimorado por meio da implementação de uma nova metodologia de tratamento para as condições de contorno, dada pela equação (2.44). Diante dessa melhoria metodológica, novos testes foram realizados para avaliar o desempenho da nova abordagem e os resultados obtidos podem ser observados na Figura 35 e nas Tabelas 13 e 14.

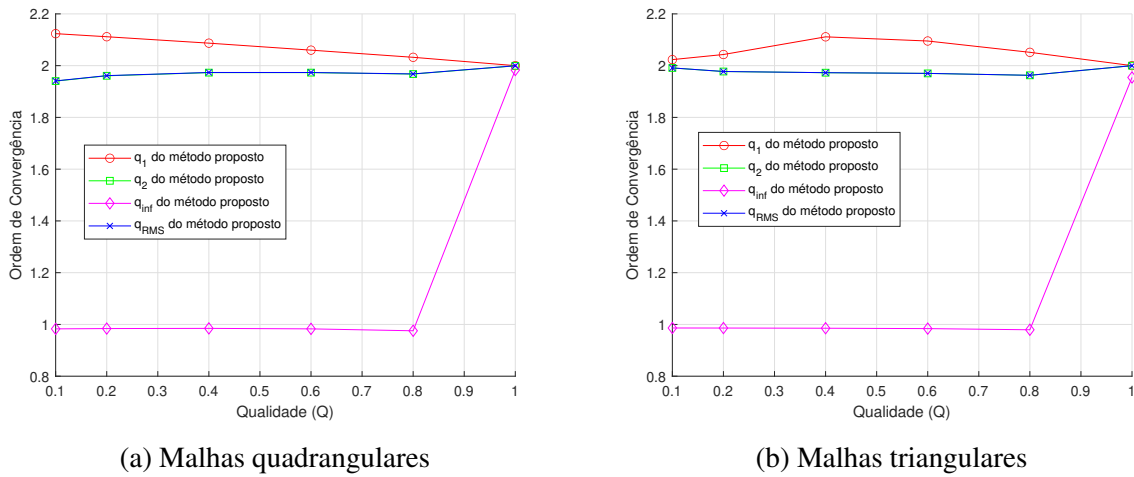


Figura 35 – Relação entre convergência e qualidade da malha para o Caso 1 utilizando a condição de contorno do presente trabalho em malhas com 4096 volumes. Fonte: a autora.

Pode-se observar que o comportamento da ordem de convergência é similar entre malhas triangulares e quadrangulares para as diferentes normas analisadas. Com exceção da métrica q_∞ que sofre uma redução drástica na ordem de convergência (de 2.0 para aproximadamente 1.0) quando a qualidade diminui de 1.0 para 0.8, as demais métricas se mantêm muito próximas de 2.0, mesmo com a degradação das malhas. Um comportamento interessante é observado na métrica q_1 , onde a ordem de convergência apresenta uma ligeira variação positiva com a redução da qualidade da malha. Por outro lado, as métricas q_2 e q_{RMS} , apresentam comportamento similar e estável ao longo de toda a faixa de qualidade analisada.

Essas diferenças podem ser atribuídas as características de cada norma de erro: a norma utilizada para o cálculo de q_1 é menos sensível a picos locais de erro, pois é calculada utilizando a soma dos erros absolutos. Em contrapartida, a norma utilizada para q_∞ é altamente sensível, já que considera apenas o pior caso. As demais normas, utilizadas em q_2 e q_{RMS} , representam um meio-termo entre os dois anteriores, os erros têm peso maior por serem elevados ao quadrado, o que os posiciona abaixo da q_1 , mas não são tão afetadas por *outliers* quanto a q_∞ , pois ainda possuem a contribuição de todos os pontos da malha.

Quanto ao resíduo difusivo, para a malha de melhor qualidade, os resultados obtidos foram próximos à zero, na ordem de 10^{-15} nas malhas quadrangulares e 10^{-12} nas triangulares, o que causou interferência no cálculo da convergência do resíduo difusivo. Para as demais qualidades, a convergência do resíduo se manteve próxima de 1, conforme se pode verificar nas Tabelas 13 e 14, presentes no Apêndice B.

A Figura 36 apresenta uma comparação visual entre as duas metodologias de tratamento de volumes de contorno discutidas anteriormente no presente trabalho, permitindo a análise comparativa direta dos desempenhos obtidos.

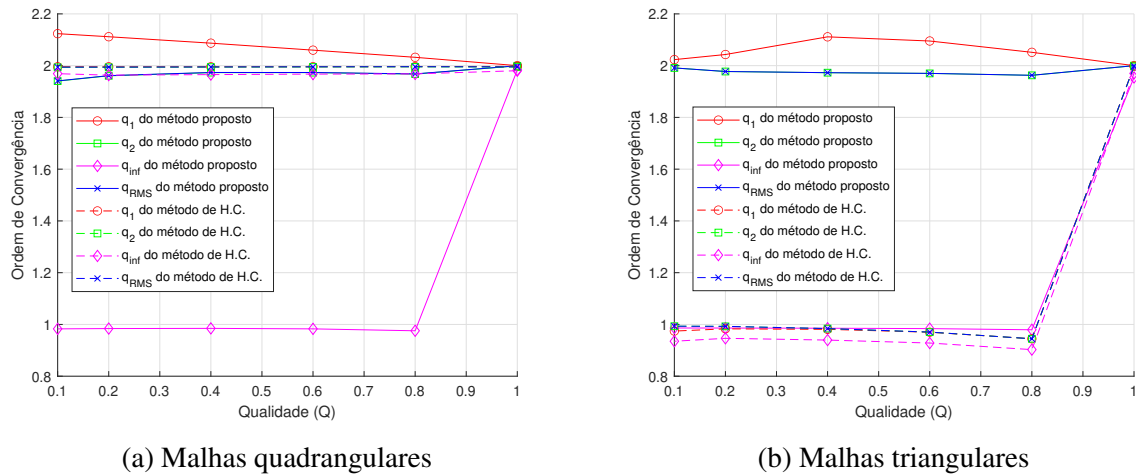


Figura 36 – Comparação entre a ordem de convergência em relação a qualidade da malha para as diferentes metodologias implementadas para o tratamento dos volumes de contorno para o Caso 1 em malhas com 4096 volumes. Fonte: a autora.

No estudo conduzido por Traoré, Ahipo e Louste [17], foi analisada a evolução da ordem de convergência em relação ao ângulo de distorção para o Caso 1. Neste estudo, é empregado o esquema de Volumes Finitos de Correção Diferida Melhorada (*Improved Deferred Correction - IDC*), uma modificação do método de Correção Diferida Padrão (SDC) para a discretização do fluxo difusivo em malhas fortemente inclinadas. A fim de realizar uma análise comparativa dos resultados, a metodologia apresentada pelos autores foi aplicada no presente trabalho às malhas quadrangulares, nas quais o domínio foi distorcido sob um ângulo θ , como é representado na Figura 37, garantindo que todos os volumes sofressem a mesma distorção e mantivessem a mesma qualidade.

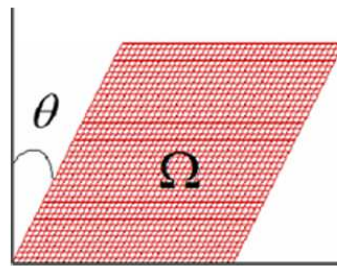


Figura 37 – Domínio computacional distorcido sob um ângulo θ . Fonte: Traoré, Ahipo e Louste (2009).

Para avaliar a convergência, foram analisadas malhas com discretizações de 40x40 e 80x80 volumes, utilizando a norma descrita na equação (4.3). Na Tabela 4 são apresentados os resultados obtidos por Traoré, Ahipo e Louste [17] e os resultados do presente trabalho com a utilização da metodologia proposta.

Tabela 4 – Comparação das ordens de convergência obtidas no presente trabalho – utilizando a metodologia proposta – com os resultados de Traoré Ahipo e Louste [17] para o Caso 1 em malhas quadrangulares de 6400 volumes. Fonte: a autora.

θ	20°	30°	38°	50°	60°	70°	75°
Q	0,9379	0,8571	0,7662	0,5847	0,4000	0,2095	0,1256
Traoré, Ahipo e Louste [17]	1,988	1,991	1,991	2,006	1,994	1,994	1,994
Presente trabalho	1,972	1,973	1,975	1,979	1,979	1,969	1,955

Os resultados indicam que ambos os métodos apresentam uma ordem de convergência próxima de 2, mesmo em malhas altamente distorcidas, confirmando a precisão de soluções em cada caso. No entanto, observa-se que nos resultados obtidos por Traoré, Ahipo e Louste [17], a convergência calculada apresenta um aumento discreto após a distorção de 38°, aproximando-se ainda mais do valor de 2. Já para o método do presente trabalho, esse aumento ocorre sutilmente até a distorção de 50° e, após esse ponto, passa a reduzir.

Contudo, como apontam Salari e Knupp [39], para que uma solução fabricada seja adequada, ela mesma deve ser criada de modo que as segundas derivadas não sejam constantes, o que não ocorre na solução analítica do Caso 1, pois a segunda derivada em y resulta em uma constante (equação (5.1)). Além disso, o domínio é alterado a medida em que a malha é distorcida. Esses dois fatores que podem justificar o fato dos bons resultados obtidos com as malhas quadrangulares.

Diante dos resultados apresentados, para os casos subsequentes, foram utilizadas soluções fabricadas que respeitam os critérios apresentados por Salari e Knupp [39] além de serem soluções simétricas, o que permite a verificação visual da implementação, visto que qualquer assimetria nos resultados numéricos indicaria a existência de problemas na implementação do código. Ademais, a suavidade de tais funções garante que a ordem de convergência seja um reflexo fiel da precisão do método.

O Caso 2, desenvolvido mediante MSF. A solução adotada (equação (5.2)) foi escolhida por suas características de simetria e regularidade. Os resultados obtidos com os testes de convergência para as variações de qualidade das malhas triangulares e quadrilaterais podem ser observados na Figura 38.

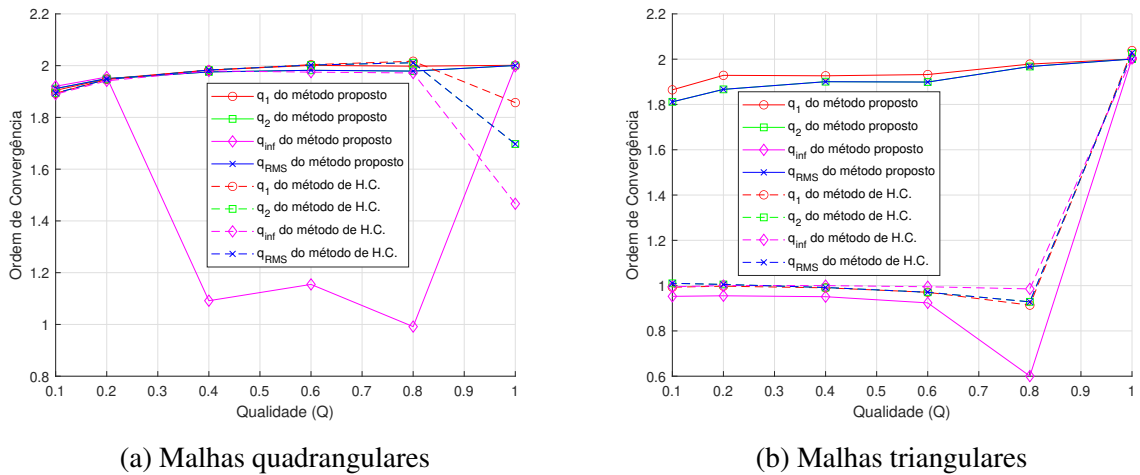


Figura 38 – Comparação entre a ordem de convergência em relação a qualidade da malha para as diferentes metodologias implementadas para o tratamento dos volumes de contorno para o Caso 2 em malhas com 4096 volumes. Fonte: a autora.

Pode-se observar que, no ponto de maior qualidade $Q = 1$, a ordem de convergência atinge o valor esperado de 2.0.. Para as malhas quadrangulares, no entanto, esse mesmo valor não é observado. Isso não indica perda de precisão do método, mas sim que o erro absoluto já é muito baixo (da ordem de 10^{-2}) no refinamento com 2048 volumes, reduzindo muito pouco no refinamento seguinte (4096 volumes). Consequentemente, a ordem de convergência calculada apresenta uma variação que poderia sugerir um comportamento inferior, embora na prática os erros já sejam bastante reduzidos.

Contudo, quando as malhas são deterioradas, é possível notar diferenças no comportamento de cada métrica. Para as malhas quadrangulares, quando a qualidade atinge $Q = 0.4$, quase todas as métricas utilizadas sofrem uma redução na ordem de convergência, com exceção de q_∞ , que já vinha decaindo. Em contrapartida, para as malhas triangulares, a queda da convergência em função da diminuição na qualidade da malha começa a acontecer de forma mais significativa após a qualidade $Q = 0.8$. Contudo, de modo geral, a ordem de convergência mantém-se acima de 1.8 para ambos os tipos de malhas, mesmo na pior qualidade analisada.

Em comparação com a metodologia de Hoffmann e Chiang [15], a metodologia proposta no presente trabalho apresenta resultados superiores quanto ao comportamento da ordem de convergência também para este caso. Enquanto a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] apresenta bons resultados apenas para as malhas quadrangulares, a ordem de convergência do presente trabalho se mantém próxima a 2 para ambos os tipos de malha mesmo nos casos com maior degradação, como é possível observar na Figura 38.

No Caso 2, o resíduo difusivo e sua convergência apresentaram um comportamento similar ao caso anterior: muito próximos de zero mesmo nas malhas menos refinadas e de melhor qualidade e, para as demais qualidades, a convergência manteve-se próxima de 1. Contudo, nesse caso, o resíduo difusivo manteve-se ao menos na ordem de 10^{-1} mesmo nas piores qua-

lidades para as malhas mais refinadas, comportamento que não havia sido observado no caso anterior (Tabelas 17 e 18 - Caso 2).

As Figuras 39 e 40 ilustram a comparação entre as soluções analítica e numérica, bem como o erro percentual entre elas nas malhas triangulares e quadrangulares de menor qualidade ($Q = 0.1$). Observa-se que, mesmo nessas condições de baixa qualidade, o erro percentual, em seus valores mais críticos, está na ordem de 10^{-3} no caso da malha quadrangular e atinge a ordem de 10^{-4} no caso da malha triangular, o que indica boa precisão do método, mesmo em malhas altamente distorcidas.

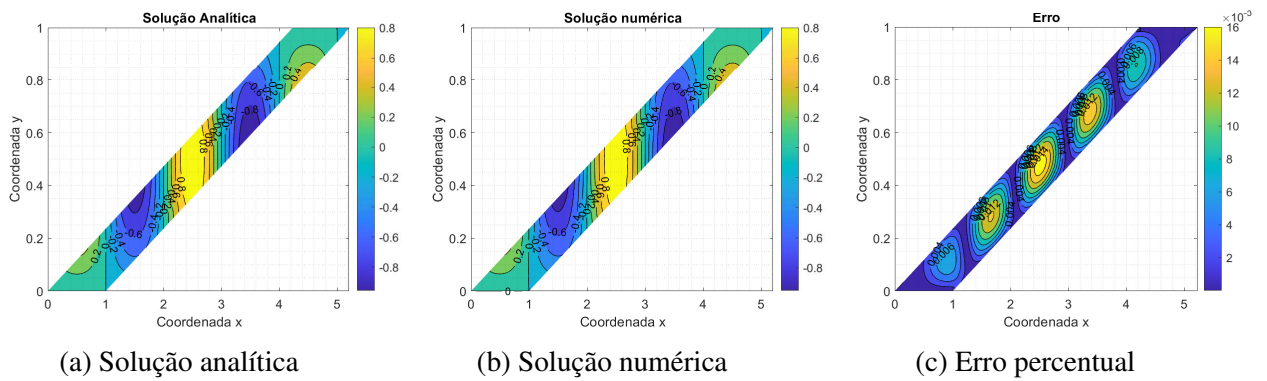


Figura 39 – Solução analítica, numérica e erro percentual para $Q = 0.1$ da malha quadrangular para o Caso 2. Fonte: a autora.

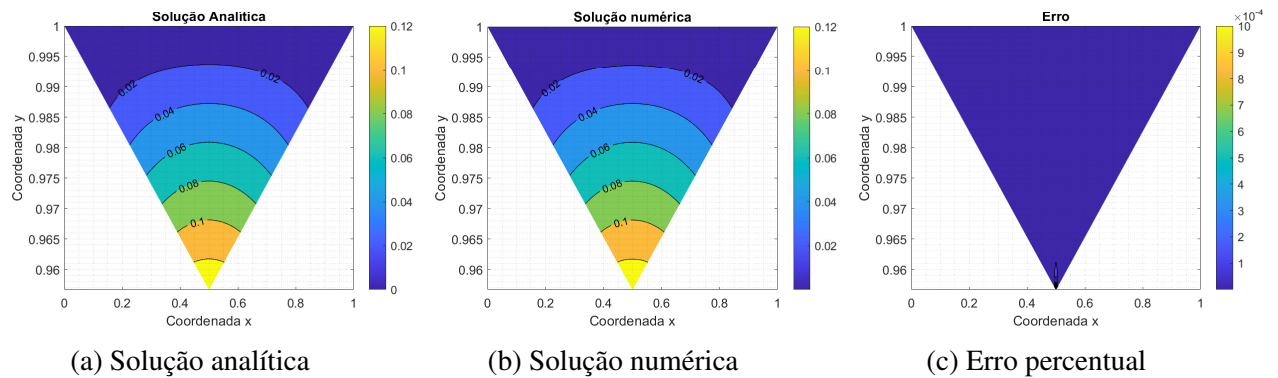


Figura 40 – Solução analítica, numérica e erro percentual para $Q = 0.1$ da malha triangular para o Caso 2. Fonte: a autora.

O Caso 3 diferencia-se dos demais por conter um tensor de difusividade anisotrópico. Os resultados quanto à ordem de convergência para as duas metodologias de tratamento dos volumes de contorno são apresentados na Figura 41.

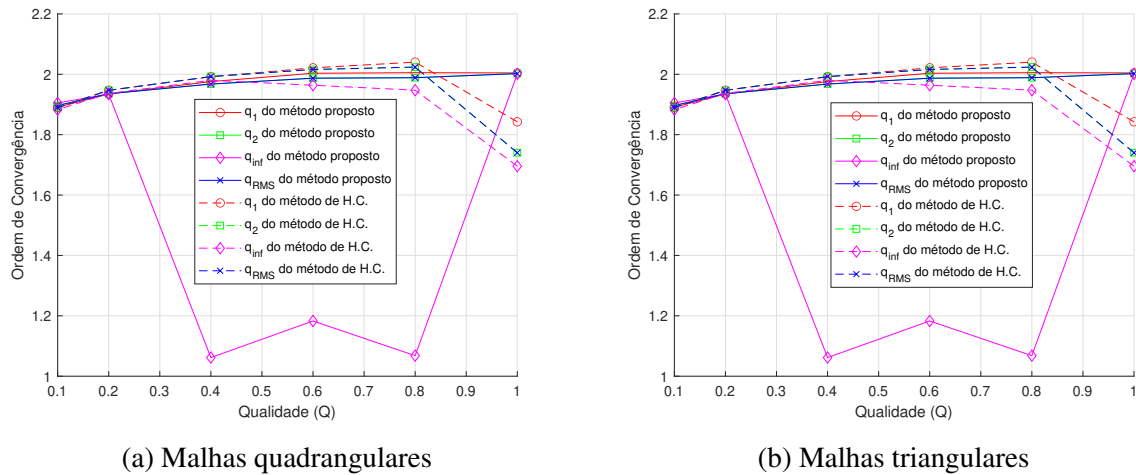


Figura 41 – Comparação entre a ordem de convergência em relação a qualidade da malha para as diferentes metodologias implementadas para o tratamento dos volumes de contorno para o Caso 3. Fonte: a autora.

Observa-se que o comportamento da ordem de convergência no Caso 3 é semelhante ao do Caso 2, embora apresente algumas particularidades. As normas q_1 , q_2 e q_{RMS} demonstram maior estabilidade, mantendo-se próximas ao valor teórico 2.0. Por outro lado, a norma q_∞ é a mais afetada pela degradação da malha, especialmente nas malhas triangulares, que, mesmo na melhor qualidade, obtiveram uma ordem de convergência próxima a 1.0.

Mais uma vez, em comparação com a metodologia proposta por Hoffmann e Chiang [15], verifica-se que o método aqui apresentado apresenta convergência numericamente mais satisfatória, mantendo-se próxima da ordem 2 mesmo em cenários complexos.

Neste caso específico, por se tratar de um cenário anisotrópico (onde a difusividade varia com a direção), os termos da matriz de difusividade introduzem acoplamentos. O fato de a convergência do resíduo difusivo manter-se próximo de 1 (conforme pode ser verificado nas Tabelas 21 e 22, presentes no Apêndice D) indica que o método numérico tratou corretamente esses acoplamentos anisotrópicos, sem introduzir erros que degradassem a ordem de convergência esperada.

5.3 Análise de esforço computacional

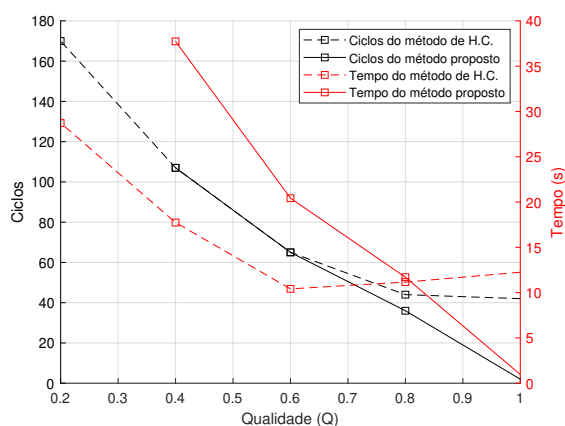
A Figura 42 consolida a análise de esforço computacional para os três casos, relacionando número de ciclos iterativos e tempo de processamento com a qualidade da malha, traçando um comparativo entre as duas metodologias de tratamento dos volumes de contorno abordadas no presente trabalho.

Observa-se que, para ambos os tipos de malhas e nos três casos testados, a quantidade de ciclos iterativos necessários apresenta valores semelhantes em ambas as metodologias analisadas. Para algumas qualidades de malha, a abordagem proposta no presente trabalho demanda

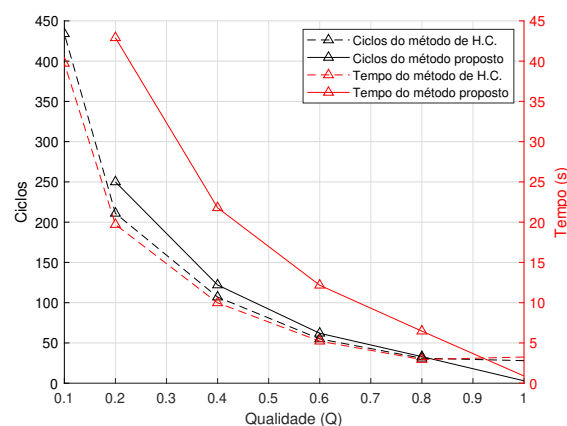
um número ligeiramente superior de ciclos em comparação com a metodologia de Hoffmann e Chiang [15], nas malhas triangulares, por exemplo, esse aumento ocorre a partir da qualidade 0.6.

Em contrapartida, verifica-se uma divergência mais significativa no tempo computacional. A formulação proposta no presente trabalho requer um tempo de processamento maior. Essa diferença decorre do fato de que a formulação do presente trabalho resolve fisicamente os fluxos nas fronteiras por meio dos termos de difusão cruzada, o que requer maior quantidade de cálculos por iteração para garantir a precisão em malhas distorcidas. Em contraste, a abordagem de Hoffmann e Chiang [15] utiliza uma aproximação geométrica mais simples, computacionalmente mais econômica.

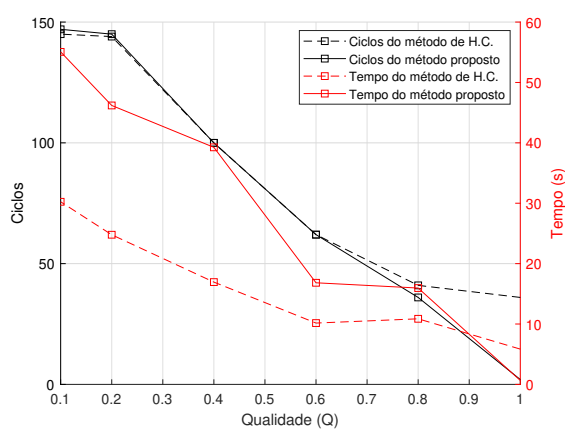
Os três casos apresentam comportamento semelhante quanto ao número de ciclos e tempo de processamento. No entanto, verifica-se que a carga computacional é diretamente influenciada pela complexidade do problema, requerendo mais recursos à medida que sua complexidade aumenta.



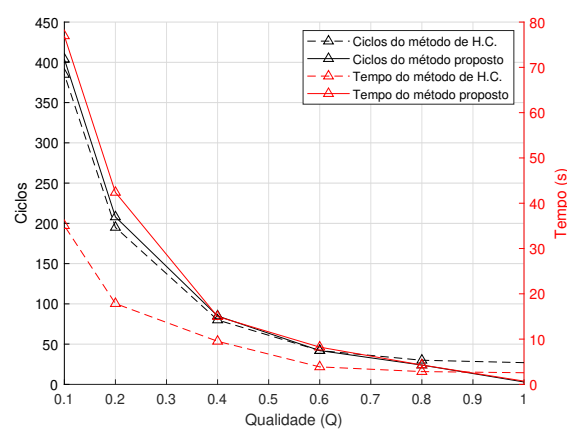
(a) Caso 1: malhas quadrangulares



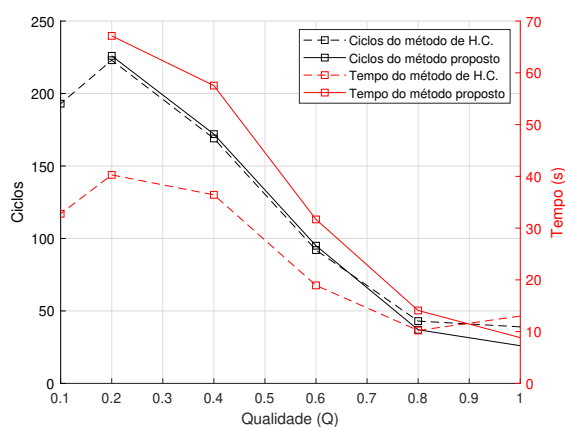
(b) Caso 1: malhas triangulares



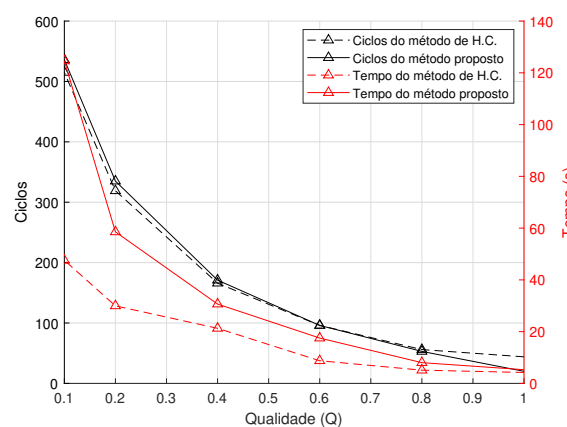
(c) Caso 2: malhas quadrangulares



(d) Caso 2: malhas triangulares



(e) Caso 3: malhas quadrangulares



(f) Caso 3: malhas triangulares

Figura 42 – Comparação entre a quantidade de ciclos necessários para resolução do sistema linear e tempo computacional nas diferentes metodologias implementadas para o tratamento dos volumes de contorno. Fonte: a autora.

5.4 Avaliação da queda dos resíduos

A redução do resíduo do sistema linear oriundo da discretização é influenciada por múltiplos fatores. Nesta seção, a análise se concentra no impacto causado pela escolha da metodologia utilizada para o tratamento dos volumes de fronteira e pelo tipo de malha utilizada.

Para garantir que as comparações entre os tipos de volumes sejam justas, é essencial manter constantes todas as condições envolvidas. Isso inclui a discretização das equações governantes, o algoritmo de resolução, o método iterativo aplicado às equações algébricas e o critério de convergência adotado.

Com o objetivo de avaliar mais precisamente o desempenho numérico entre malhas triangulares e quadrilaterais, o Caso 2 foi aplicado, seguindo a metodologia proposta por Yu *et al.* [2]. Um domínio quadrado foi representado por células quadrilaterais perfeitamente ortogonais. Paralelamente, o mesmo domínio pôde ser aproximado por uma malha composta por volumes triangulares equiláteros, conforme ilustrado na Figura 43. Quando a independência de malha é alcançada, os resultados obtidos apresentam uma boa correspondência com a solução de referência, o que atesta a verificação da precisão do método.

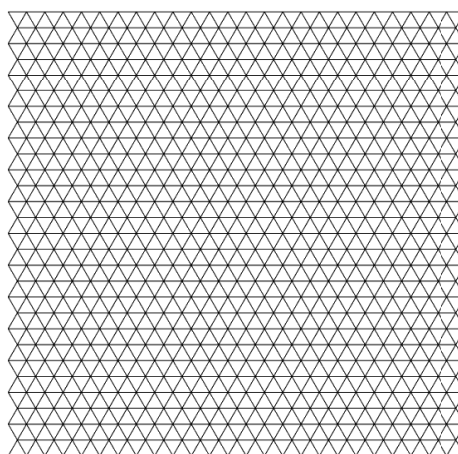


Figura 43 – Domínio quadrado aproximado por triângulos equiláteros. Fonte: adaptado de Yu *et al.* (2012).

Ademais, vale destacar que, para essa avaliação específica, optou-se pela utilização do método de Gauss-Seidel em vez do método BiCGSTAB (empregado nas demais simulações do presente trabalho), o mesmo método utilizado por [2]. Além disso, os autores supracitados não contemplam casos anisotrópicos em sua análise, o que justifica a escolha do Caso 2 para permitir uma comparação válida entre os resultados.

A precisão numérica para os dois tipos de malha foi comparada sob a condição em que $N_T/N_Q \approx 4/3$. Segundo Yu *et al.* [2], essa razão garante que a precisão da solução numérica seja equivalente para volumes ortogonais. Assim, o domínio discretizado por triângulos continha

5432 volumes, enquanto o mesmo domínio discretizado por quadrados continha 4096.

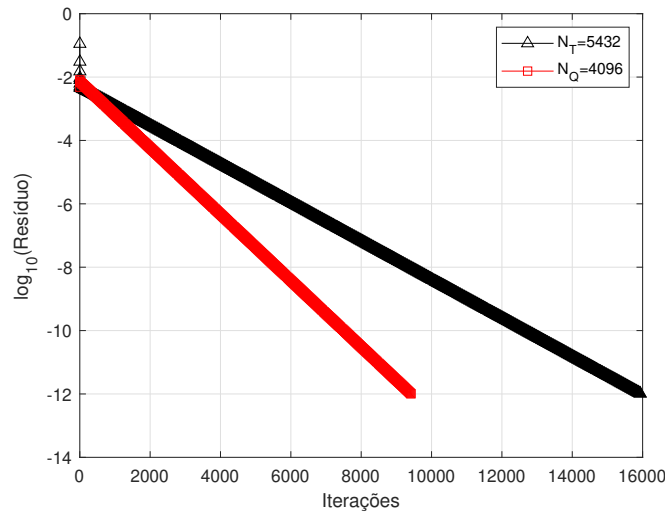


Figura 44 – Comparação dos resíduos em relação à quantidade de iterações entre as malhas quadrangulares N_Q e triangulares N_T para as qualidades $Q = 1$ para o Caso 2. Fonte: a autora.

É possível observar que, assim como constatado por Yu *et al.* [2] o resíduo da malha quadrangular diminui mais rapidamente em relação à malha composta por triângulos. Contudo, o autor afirma que para a condição dada, as células quadrilaterais e triangulares têm precisão semelhante, o que não foi confirmado pelos testes numéricos realizados no presente trabalho.

Na Tabela 5 observa-se que, embora os erros sejam pequenos, a precisão da malha quadrangular é melhor quando comparada à triangular, mesmo com menos elementos, isto é, para atingir uma precisão semelhante, seriam necessários ainda mais triângulos.

Tabela 5 – Comparação dos erros entre as malhas triangulares e quadrangulares seguindo a condição de $N_T/N_Q \approx 4/3$. Fonte: a autora.

	E_1	E_2	E_∞	E_{RMS}
Malha triangular	1,6188e-04	4,1078e-04	4,6248e-03	8,2157e-04
Malha quadrangular	7,7404e-05	9,5639e-05	1,7713e-04	1,9128e-04

Os resultados obtidos corroboram com as conclusões de Juretić e Gosman [3] que demonstram que, para malhas com quantidades de volumes similares, o erro é menor em malhas compostas por volumes quadriláteros em comparação com malhas triangulares com quantidade semelhante de volumes. De acordo com os autores, isso ocorre, pois os quadriláteros possuem pares de lados opostos e de mesma magnitude, fazendo com que o erro de truncamento gerado em uma face do par seja cancelado pelo erro de truncamento gerado na face oposta, devido à geometria das malhas triangulares, o cancelamento dos erros que ocorre nas malhas quadrangulares não acontece nas triangulares [3]. No presente trabalho, este comportamento foi confirmado, visto que, mesmo com uma quantidade superior de volumes nas malhas triangulares, as

malhas quadrangulares apresentaram maior precisão numérica. Para ilustrar esta comparação, a Tabela 6 apresenta os erros obtidos para uma malha quadrangular ortogonal com 4096 volumes, semelhante à apresentada na Figura 30, e uma malha triangular ortogonal com 4165 volumes, como aquela apresentada na Figura 43.

Tabela 6 – Comparação entre os erros para malhas triangulares e quadrangulares em domínio unitário com quantidades de volumes semelhantes. Fonte: a autora.

	E_1	E_2	E_∞	E_{RMS}
Malha triangular	2,0959e-04	5,0232e-04	5,2613e-03	1,0046e-03
Malha quadrangular	7,7404e-05	9,5639e-05	1,7713e-04	1,9128e-04

A Figura 45 compara a redução do resíduo entre a metodologia proposta no presente trabalho e a de Hoffmann e Chiang [15]. Os resultados demonstram que a metodologia do presente trabalho converge de forma significativamente mais rápida, exigindo um número consideravelmente menor de ciclos iterativos, apenas três para a malha quadrangular e quatro para a triangular. Ademais, enquanto o método proposto apresenta uma quantidade de ciclos similar para malhas com número aproximado de volumes (triangulares e quadriláteros), a metodologia [15] exige um número significativamente maior de ciclos para malhas triangulares.

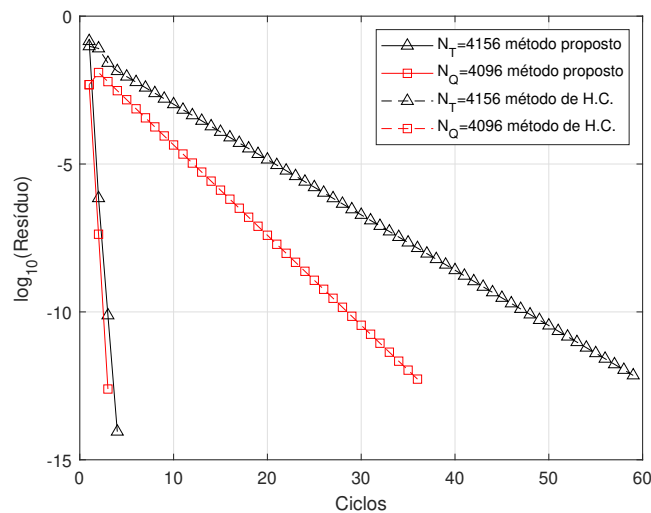


Figura 45 – Comparação dos resíduos em relação aos ciclos entre as malhas quadrangulares N_Q e triangulares N_T para as qualidades $Q = 1$ para o caso 2 nas diferentes metodologias abordadas. Fonte: a autora.

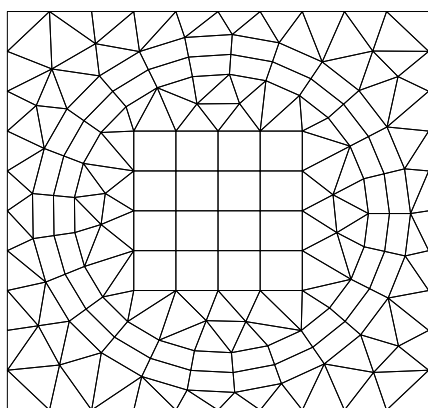
5.5 Análise numérica em malhas híbridas

Tendo sido verificada a eficiência do código em testes anteriores, com malhas homogêneas compostas exclusivamente por triângulos ou por quadriláteros, nas quais se variou a qualidade da malha torna-se necessário agora avaliar o desempenho do código em malhas híbridas. Para isso, como mencionado, foram geradas duas malhas em um domínio quadrangular

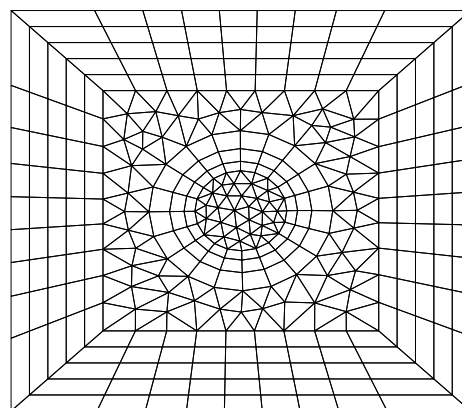
com auxílio do GRS, utilizando triângulos e quadriláteros. A primeira composta inicialmente 206 volumes, e a segunda por 454 volumes, como mostra a Figura 46.

Realizaram-se dois refinamentos sucessivos na malha 46(a), resultando em malhas com 206, 804 e 3296 volumes. Para a malha 46(b), por já apresentar uma quantidade inicial elevada de volumes, realizou-se apenas um refinamento, obtendo-se malhas com 454 e 1816 volumes. O objetivo foi verificar a ordem de convergência de ambas. Adicionalmente, optou-se por utilizar a equação (5.3), por representar um caso mais complexo, uma vez que ela caracteriza um domínio anisotrópico.

Além disso, por se tratarem de malhas composta por elementos triangulares e quadrangulares, não é possível garantir que todos os elementos tenham a mesma qualidade. Dessa forma, adotou-se uma qualidade média para caracterizar cada malha, calculada pela média ponderada da qualidade pela área de todos os seus elementos. A malha da Figura 46(a) apresenta qualidade média $Q = 0.9$, enquanto a malha da Figura 46(b) possui $Q = 0.8$.



(a) Malha híbrida com 206 volumes e qualidade média $Q = 0,9$.



(b) Malha híbrida com 454 volumes e qualidade média $Q = 0,8$.

Figura 46 – Malhas híbridas em domínio quadrangular. Fonte: a autora

Com base na metodologia descrita anteriormente, os valores numéricos da ordem de convergência e do esforço computacional são apresentados na Tabela 7, enquanto que as Figuras 47 e 48 apresentam a solução analítica, a solução numérica e o erro percentual de cada malha com 3296 e 1816 volumes, respectivamente.

Tabela 7 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho nas malhas híbridas compostas por triângulos e quadriláteros. Fonte: a autora.

Malha híbrida 46(a) - $Q = 0,9$; $D = 0,16$; $AR = 1,08$.										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResíduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
206	1199	26	0,0697	**	**	**	**	**	5,4753e-01	0,19149
824	2776	31	0,0348	1,7220	1,7700	1,6707	1,6264	0,9253	2,8831e-01	0,56457
3296	7152	40	0,0174	1,2433	1,1556	0,6838	1,0813	0,9543	1,4880e-01	3,0093
Malha híbrida 46(b) - $Q = 0,8$; $D = 0,21$; $AR = 1,05$.										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResíduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
454	2873	33	0,0469	**	**	**	**	**	4,5333e-01	0,35062
1816	8141	45	0,0235	0,7657	0,7846	0,5054	0,7846	1,0151	2,2430e-01	2,9111

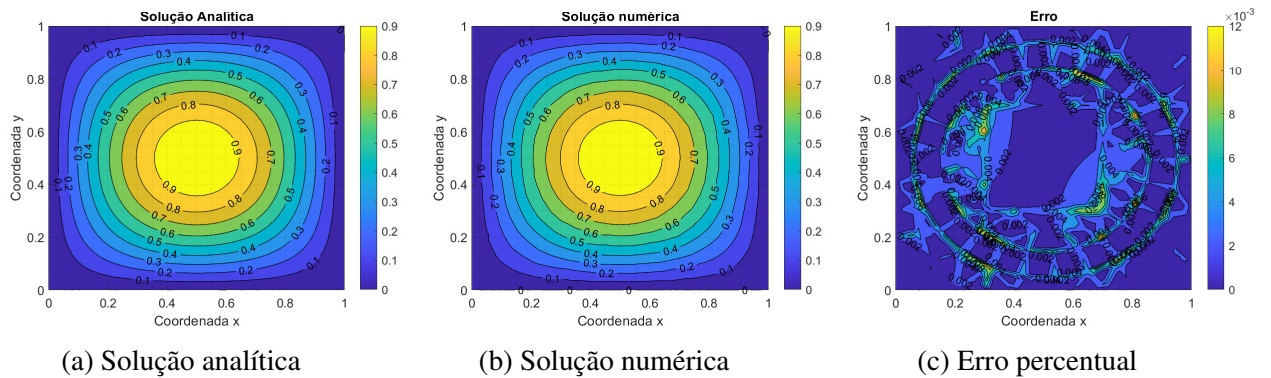


Figura 47 – Solução analítica, numérica e erro percentual para a malha híbrida 46(a). Fonte: a autora.

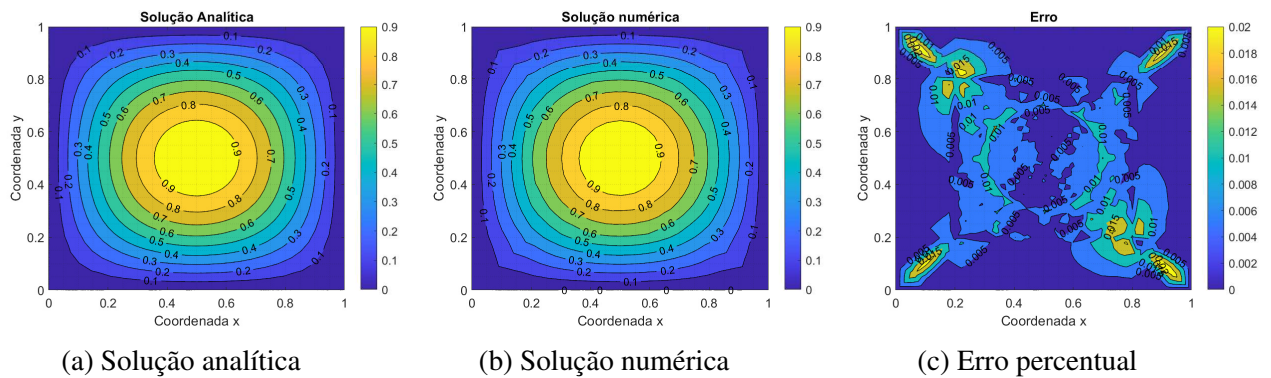


Figura 48 – Solução analítica, numérica e erro percentual para a malha híbrida 46(b). Fonte: a autora.

Conforme a Tabela 7, a ordem de convergência obtida mostrou-se abaixo do esperado, situando-se próxima de 1 para a maioria das métricas da primeira malha, o que indica uma redução linear do erro e, portanto, indica uma convergência mais lenta. No entanto, a análise das Figuras 47 e 48 revela que a solução numérica se aproxima de forma satisfatória da solução

analítica, com erros percentuais da ordem de 10^{-3} para a malha quadrangular e 10^{-2} para a malha triangular.

O resíduo difusivo para ambas as malhas permaneceu na ordem de 10^{-1} e a ordem de convergência do resíduo difusivo próximo a 1, assim como nas demais malhas estudadas para o caso-teste utilizado.

Sob ponto de vista computacional, os resultados indicam que, embora as malhas híbridas demandem um maior número de ciclos iterativos em comparação às malhas homogêneas, os tempos de execução apresentaram relativa regularidade, sugerindo um comportamento computacional estável mesmo diante do aumento da complexidade do problema.

5.6 Simulação da difusão de oxigênio no estroma da córnea humana

A fim de apresentar uma possível aplicação prática do código desenvolvido, foi realizado um estudo sobre a difusão do oxigênio na córnea humana [19]. A escolha desse problema justifica-se pelo desafio computacional da sua geometria não trivial, sobretudo no estudo de uma córnea com edema. Diferente de domínios cartesianos simples, a curvatura e a espessura da córnea exigem uma malha mais complexa, servindo como verificação da capacidade do método em lidar com geometrias irregulares.

Cabe destacar que o problema, conforme foi modelado, não representa integralmente um caso real. Diversas simplificações foram necessárias para adequá-lo aos objetivos do presente trabalho, voltado ao estudo das simulações computacionais.

O modelo utilizado para as simulações é uma combinação da lei de Fick com a conservação de massa modificada de acordo com a lei de Henry, resultando na seguinte equação, tal como apresentada por Larrea e Büchler [19], devidamente adaptada para o cenário bidimensional:

$$\nabla \cdot (\tilde{\Gamma} \cdot \nabla P_{O_2}) - \frac{Q_{O_2}}{k} = \frac{\partial P_{O_2}}{\partial t} \quad (5.4)$$

com

$$Q_{O_2} = \beta \times Q^*; \quad \beta = \frac{P_{O_2}(a + p^*)}{p^*(a + P_{O_2})} \quad (5.5)$$

onde Γ , P_{O_2} , Q_{O_2} , k , Q^* , p^* e a denotam, respectivamente, o coeficiente de difusão do tecido, a pressão parcial do oxigênio, consumo de oxigênio, constante de solubilidade de Henry, taxa de consumo de oxigênio sob tensão saturada de oxigênio, tensão saturada de oxigênio e constante que determina a forma da curva Q_{O_2} vs. P_{O_2} .

Dada a equação do modelo, vale destacar que será considerado apenas o caso da equação (5.4) em regime permanente, ou seja, com o termo temporal do lado direito da equação sendo igual a zero.

No estudo realizado por Larrea e Büchler [19] quanto à difusividade e ao consumo do oxigênio na córnea humana, foram determinados os valores dos parâmetros do modelo de difusão e consumo de oxigênio. Os parâmetros utilizados são apresentados na Tabela 8.

Tabela 8 – Parâmetros físicos utilizados na simulação de difusão do oxigênio na córnea humana. Fonte: Larrea e Büchler [19].

Parâmetro	valor
$\Gamma \text{ (mm}^2/\text{s)}$	$2,81 \times 10^{-3}$
$\frac{Q^*}{k} \text{ (mmHg/s)}$	1,87
$p^* \text{ (mm Hg)}$	155

Como é possível observar, o tensor de difusividade utilizado por Larrea e Büchler [19] é uma constante. Contudo, estudos apontam que, devido à organização fibrilar do tecido corneal, o meio é anisotrópico [49, 50]. Desse modo, a determinação do tensor de difusão anisotrópico foi realizada com base no estudo de Hepfer *et. al* [50], que aponta que a anisotrópica da difusão na córnea decorre de uma difusão mais rápida ao longo das fibras de colágeno (direção inferossuperior) e da difusão mais lenta através delas (direção externo-interna).

Todavia, embora o estudo de Hepfer *et. al* [50] consista em um experimento *in vivo* realizado com suínos e não investigue a difusão do oxigênio, mas sim de outra molécula, de maior dimensão. As informações e os parâmetros fornecidos pelos autores permitem a adaptação do tensor de difusão ao caso humano.

Portanto, o tensor de difusividade utilizado para esse estudo é dado por:

$$\tilde{\Gamma} = \begin{bmatrix} 2,52 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 3,13 \times 10^{-3} \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

A córnea humana é composta por três partes: epitélio (parte anterior), estroma (porção central) e endotélio (parte interna). Contudo, como cada parte apresenta características distintas quanto à difusividade do oxigênio, optou-se por realizar a simulação apenas no estroma. Deste modo, foi necessário utilizar três condições de contorno. Na parte do domínio que se encontra em contato com o ambiente externo, a condição de contorno imposta foi a de Dirichlet com $P_{O_2} = 155 \text{ mm Hg}$, e na parte interna que fica em contato com o humor aquoso, utilizou-se também Dirichlet mas com $P_{O_2} = 55 \text{ mm Hg}$ [19, 51]. Já na parte interna da córnea, que fica em contato com a esclera, a condição de contorno utilizada foi a de Neumann, com $\frac{\partial P_{O_2}}{\partial n} = 0$. A condição de contorno de Neumann foi adotada devido à falta de informações sobre como ocorre a difusão nesses contornos.

Ademais, a geometria utilizada para a discretização do domínio foi a de uma semiesfera, por representar a aproximação mais fiel à realidade com base nos parâmetros obtidos na

literatura [52] (Figura 49). Cabe ressaltar que, para condições não saudáveis, não foram encontrados na literatura parâmetros geométricos padronizados, como topografia e espessura. Dessa forma, a simulação apresentada emprega uma geometria hipotética, destinada a fornecer uma representação possível da condição, sem, contudo, a pretensão de representar um caso clínico ou teórico específico.

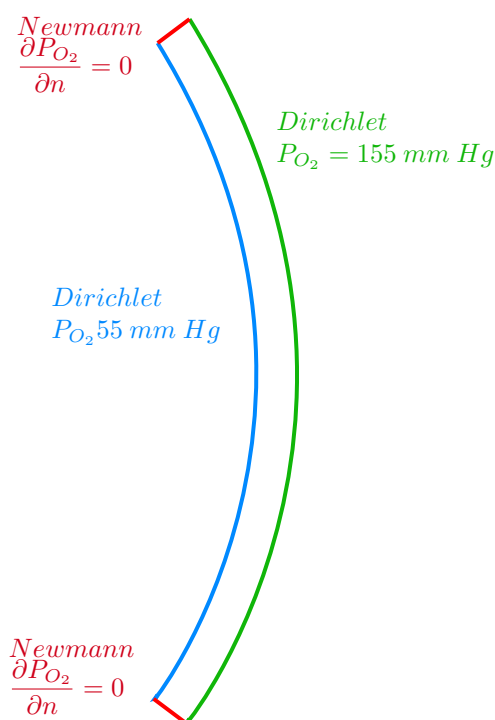
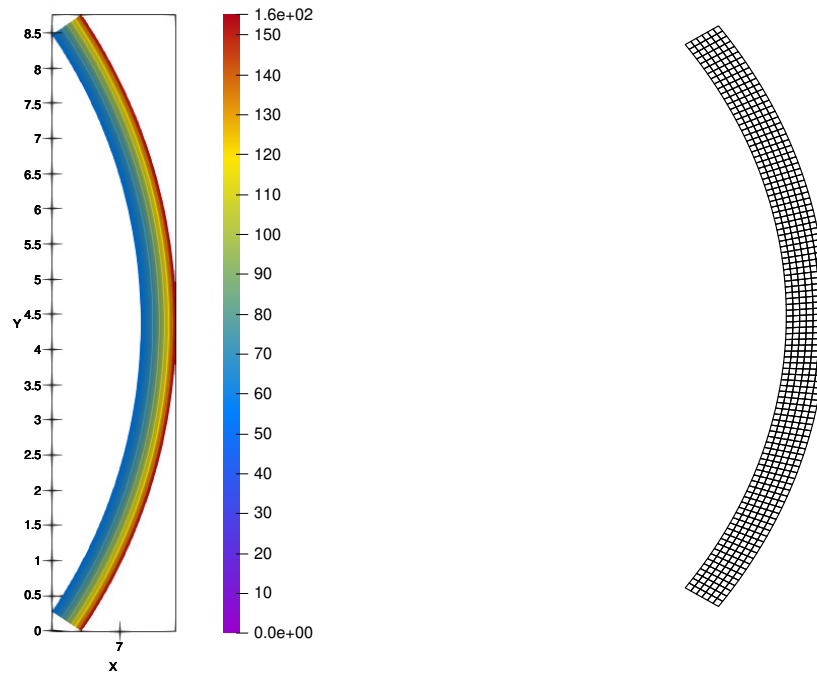


Figura 49 – Esquema utilizado para modelagem das condições de contorno da córnea humana.
Fonte: a autora.

Para as simulações foram utilizadas duas malhas, uma para discretizar o domínio da córnea saudável, composta exclusivamente por quadriláteros e outra híbrida para discretizar o domínio de uma córnea com edema. As Figuras 50(a) e 51(a) exibem o resultado obtido para as malhas mais refinadas, enquanto as Figuras 50(b) e 51(b) mostram as malhas menos refinadas, apenas para permitir a visualização da discretização do domínio de forma nítida.

(a) Distribuição de P_{O_2} .

(b) número de volumes = 600.

Figura 50 – Distribuição de P_{O_2} e malha quadrangular inicial utilizada para a simulação da difusão do oxigênio na córnea humana saudável. Fonte: a autora.

Ao observar a Figura 50(a), é possível verificar o perfil de difusão do oxigênio na córnea saudável. Conforme esperado das condições de contorno de Dirichlet, a concentração de P_{O_2} é fixa nas fronteiras correspondentes. Observa-se, ainda, que, nas fronteiras submetidas à condição de contorno de Neumann, a concentração de oxigênio respeita a variação gradativa do restante do domínio. Esse comportamento pode ser atribuído ao fato de a condição de contorno da região simula uma fronteira impermeável, onde não há troca de oxigênio com o exterior, o que, provavelmente, faz com que o fluxo de oxigênio se adapte de maneira contínua ao longo dessa região.

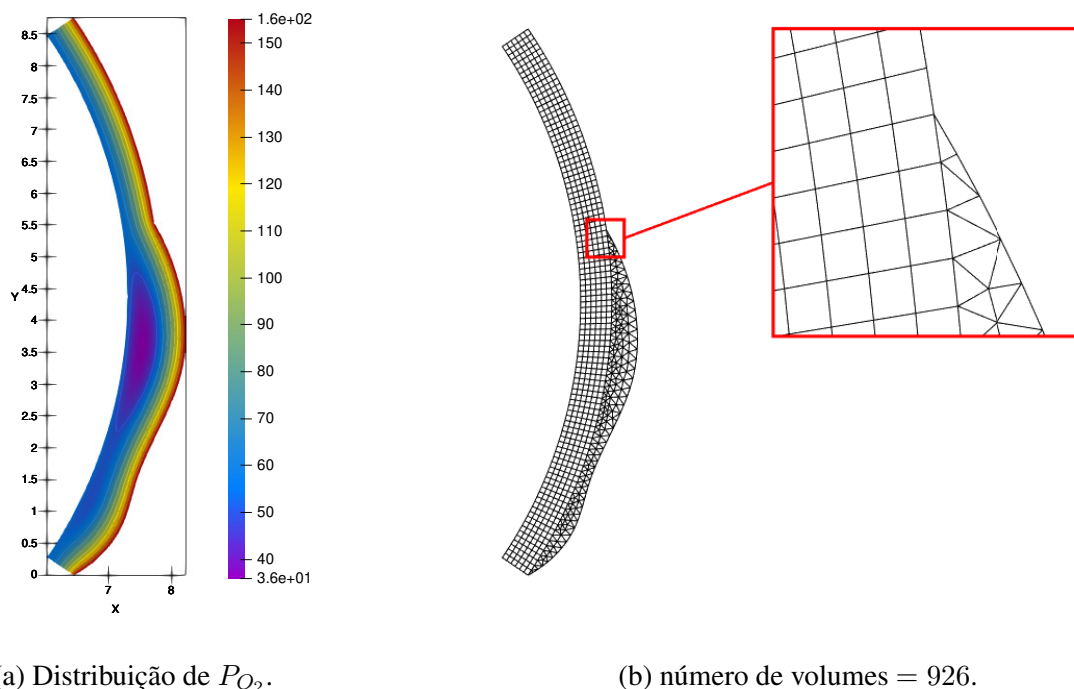


Figura 51 – Distribuição de P_{O_2} e malha híbrida inicial utilizada para a simulação da difusão do oxigênio na córnea humana com edema, com destaque para a interface de conexão entre as regiões de elementos quadrangulares e triangulares. Fonte: a autora.

Com relação a Figura 51(a), a mesma distribuição gradativa é observada; contudo, na região central, onde o estroma é mais espesso no modelo de edema, é possível verificar que a concentração de oxigênio torna-se inferior à registrada na fronteira interna. Uma possível interpretação para esse comportamento é a combinação entre o aumento da espessura do tecido e o consumo de oxigênio pelo estroma. Nesse cenário, o oxigênio percorreria uma distância maior para se difundir a partir das fronteiras. Paralelamente, o tecido corneal continua consumindo oxigênio, atuando como um sumidouro distribuído ao longo de todo o domínio. A combinação desses fatores resulta em uma redução significativa da concentração de oxigênio (O_2) na região mais espessa, fazendo com que a concentração nas fronteiras não varie de maneira estritamente crescente nem decrescente.

Como, nesse caso de estudo, não há solução analítica, os dados obtidos foram verificados por meio do resíduo difusivo.

Os resultados obtidos para a ordem de convergência do resíduo difusivo para ambas as malhas utilizadas na discretização do domínio da córnea, podem ser consultados nas Tabelas 9 e 10.

Tabela 9 – Resíduo difusivo obtido na malha da córnea saudável mais refinada. Fonte: a autora.

Número de volumes	Resíduo difusivo	<i>q_{Residuo Difusivo}</i>
600	0,0066	**
2400	0,0033	0,9916
9600	0,0017	0,9950

Tabela 10 – Resíduo difusivo obtido na malha da córnea doente mais refinada. Fonte: a autora.

Número de volumes	Resíduo difusivo	<i>q_{Residuo Difusivo}</i>
926	0,0079	**
3704	0,0044	0,8548

A análise da ordem do resíduo difusivo verifica a natureza conservativa do método numérico implementado. Os valores obtidos para a ordem de convergência do resíduo difusivo são próximos de 1 em todas as malhas analisadas, o que indica a discretização adequada dos termos difusivos e a preservação do balanço global da massa.

6 CONCLUSÃO

O presente trabalho teve como objetivo principal o desenvolvimento e a implementação de um código computacional aplicando o MVF para a resolução numérica de EDPEs em malhas não estruturadas compostas por volumes triangulares e quadrangulares. A análise dos resultados obtidos possibilitou a comparação entre os tipos de malhas utilizadas em diferentes aspectos, tais como qualidade, ordem de convergência calculada e erros numéricos.

Inicialmente, com a metodologia de Hoffmann e Chiang [15], observou-se que a ordem de convergência calculada para malhas ortogonais aproximou-se de 2.0 em ambos os tipos de malha. No entanto, com a diminuição da qualidade da malha, as malhas quadrangulares mantiveram um bom comportamento da convergência, enquanto as triangulares apresentaram uma queda drástica na convergência. Após a implementação da metodologia de condição de contorno proposta no presente trabalho, o comportamento da ordem de convergência tornou-se similar para ambos os tipos de malha nos três casos analisados, mantendo-se próxima de 2.0 na maioria das normas mesmo com a degradação da malha.

Em contrapartida, essa maior eficiência numérica implica um custo computacional adicional em termos de tempo de processamento. Embora ambas as metodologias apresentem quantidades muito próximas de ciclos iterativos necessários para a convergência, o tempo de processamento demandado pela metodologia proposta mostrou-se superior ao exigido pela abordagem de Hoffmann e Chiang [15].

Ademais, quando realizada uma comparação entre malhas ortogonais compostas exclusivamente por triângulos ou por quadriláteros em um mesmo domínio computacional, com quantidades de volumes aproximadamente equivalentes, observa-se que as malhas quadrangulares apresentam maior precisão numérica do que as malhas triangulares, ou seja, para se obter uma precisão numérica próxima à de uma malha quadrangular ortogonal com índice de refinamento menor, é necessário utilizar um número significativamente maior de triângulos.

Com relação ao resíduo difusivo, apesar de, em grande parte dos casos estudados, obter-se ordem de 10^{-1} na norma do resíduo difusivo, a convergência manteve-se consistentemente próxima de 1, 0.

REFERÊNCIAS

- [1] JACQ, P. *Finite volume methods on unstructured grids for solving anisotropic heat transfer and compressible Navier-Stokes equations*. Tese (Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique) — L'Université de Bordeaux, 2014.
- [2] YU, G. et al. Comparative study on triangular and quadrilateral meshes by a finite-volume method with a central difference scheme. *Numerical Heat Transfer*, n. n. 62, p. p. 243–263, 2012. DOI: 10.1080/10407790.2012.709416.
- [3] JURETIĆ, F.; GOSMAN, A. D. Error analysis of the finite-volume method with respect to mesh tipe. *Numerical Heat Transfer: Part B*, v. 57, p. 414–439, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1080/10407791003685155>.
- [4] PAN, D.; ZHONG, C.; ZHUO, C. An implicit gas-kinetic scheme for turbulent flow on unstructured hybrid mesh. *Computers and Mathematics Applications*, v. 75, p. 3825–3848, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2018.02.032>.
- [5] LACASSA, A. *Refinamento de malhas isotrópicas e anisotrópicas e simplificação de malhas isotrópicas*. Dissertação (Mestrado em Ciências de Computação e Matemática Computacional) — Universidade de São Paulo, 2007.
- [6] GARGALLO-PEIRÓ, A.; AVILA, M.; FOLCH, A. A hybrid meshing framework adapted to the topography to simulate atmospheric boundary layer flows. *Computer-Aided Design*, v. 144, p. 103168, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cad.2021.103168>.
- [7] FAZENDA, A. L. *Modelagem bidimensional de escoamentos viscosos incompressíveis com malhas não estruturadas utilizando a abordagem baseada no circuncentro*. Tese (Doutorado em Computação Aplicada) — Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 2002.
- [8] ZHANG, Q.; NIE, Y.; MA, X. An efficient hybrid mesh method for seismic traveltime computation with irregular surfaces. *Journal of Applied Geophysics*, v. 209, p. 104905, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jappgeo.2022.104905>.
- [9] DEMIRDŽIĆ, I. On the discretization of the diffusion term in finite-volume continuum mechanics. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, v. 68, n. 1, p. 1–10, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1080/10407790.2014.985992>.
- [10] KIM, D.; CHOI, H. A second-order time-accurate finite volume method for unsteady incompressible flow on hybrid unstructured grids. *Journal of computational physics*, v. 162, n. 2, p. 411–428, 2000. DOI: <https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6546>.
- [11] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. 2. ed. Harlow: Pearson Education Limited, 2007. 503 p.
- [12] MOUKALLED, F.; MANGANI, L.; DARWISH, M. *The finite volume method in computational fluid dynamics: an advanced introduction with OpenFOAM and Matlab*. Switzerland: Fluid Mechanics and Its Applications, 2016. 791 p. DOI: 10.1007/978-3-319-16874-6.

- [13] NISHIKAWA, H.; A., W. J. Face-averaged nodal-gradient approach to cell-centered finite-volume method on triangular grids. In: *AIAA Aviation 2019 Forum*. Dallas: AIAA, 2019. p. 1–18. DOI: 10.2514/6.2019-3636.
- [14] ASSAM, A.; NATARAJAN, G. A novel least squares finite volume scheme for discontinuous diffusion on unstructured meshes. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 96, p. 120 – 130, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2021.05.013>.
- [15] HOFFMANN, K. A.; CHIANG, S. T. *Computacional Fluid Dynamics*. 4. ed. [S.l.]: Engineering Education System, 2000. v. 2. 486 p.
- [16] ANSYS® Fluent User's Guide. 2008. Release 12.1 ed.
- [17] TRAORÉ, P.; AHIPO, Y. M.; 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*, v. 228, p. 5148–5159, 2009. DOI: 10.1016/j.jcp.2009.04.007.
- [18] PARIZOTO, G. H. S. *Resolução de EDPs elípticas por meio do método dos volumes finitos em malhas não estruturadas triangulares*. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) — Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2023.
- [19] LARREA, X.; BÜCHLER, P. A transient diffusion model of the cornea for the assessment of oxygen diffusivity and consumption. *Investigative Ophthalmology Visual Science*, v. 50, n. 3, p. 1076–1080, march 2009. DOI: <https://doi.org/10.1167/iovs.08-2479>.
- [20] LINDQUIST, D. R. *A comparison of numerical schemes on triangular and quadrilateral meshes*. Dissertação (Master of Science in Aeronautics and Astronautics) — Massachusetts Institute of Technology, 1988.
- [21] BONAVENTURA, L.; ROCCA, A. D. Convergence analysis of a cell centered finite volume diffusion operator on non-orthogonal polyhedral meshes. *MOX-Report*, n. n. 37/2018, 2018. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1806.09180>.
- [22] MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2004.
- [23] MUZAFERIJA, S. *Adaptive finite volume method for flow prediction using unstructured meshes and multigrid approach*. Tese (Doctor of Philosophy) — University of London, 1994.
- [24] MAZUMDER, S. *Numerical methods for partial differential equations: finite difference and finite volume methods*. 1. ed. [S.l.]: Academic Press, 2015.
- [25] ANSYS Inc. *ANSYS Meshing*. 2021. Disponível em: <<https://www.ansys.com/products/meshing>>. Acesso em: 03 abr. 2025.
- [26] Cadence. *Pointwise*. 2023. Disponível em: <https://www.cadence.com/en_US/home/tools/system-analysis/pointwise.html>. Acesso em: 03 abr. 2025.
- [27] Altair Engineering. *HyperMesh*. 2023. Disponível em: <<https://altair.com/hypermesh>>. Acesso em: 03 abr. 2025.

- [28] HURTADO, F. S. V. *Formulação tridimensional de volumes finitos para simulação de reservatórios de petróleo com malhas não-estruturadas híbridas*. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2011.
- [29] BOMMES, D. et al. State of the Art in Quad Meshing. In: *Eurographics - 33rd Annual Conference of the European Association for Computer Graphics - 2012*. Cagliari, Italy: [s.n.], 2012.
- [30] WIRASAET, D. et al. A performance comparison of nodal discontinuous galerkin methods on triangles and quadrilaterals. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 64, n. 10-12, p. 1336–1362, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1002/fld.2376>.
- [31] TRAVELHO, J. S.; FAZENDA, A. L.; ENARI, E. H. Abordagem pelo circuncentro para malhas não estruturadas em transferência de calor. In: *XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*. [S.l.: s.n.], 1999. p. 22–26.
- [32] LI, R. et al. An adaptive hybrid grids finite-element approach for plane wave three-dimensional eletromagnetic modeling. *Computers and Geosciences*, v. 180, p. 105437, 2023. DOI: 10.1016/j.cageo.2023.105437.
- [33] PATANKAR, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. 197 p.
- [34] YAN, G. et al. Truncation and discretization error for diffusion schemes on unstructured meshes. In: *52nd Aerospace Sciences Meeting*. National Harbor. Maryland: [s.n.], 2014. p. 0478.
- [35] BLAZEK, J. *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*. 3. ed. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2015.
- [36] DEMIRDŽIĆ, I.; MUZAFERIJA, S. Numerical method for coupled fluid flow, heat transfer and stress analysis using unstructured moving meshes with cells of arbitrary topology. *Comput. Methods Appl. Mesh. Engrg.*, n. 125, p. 235–255, 1995. DOI: 10.1016/0045-7825(95)00800-G.
- [37] VORST, H. A. V. D. Bi-cgstab: a fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, n. n. 2, p. p. 631–644, march, 1992.
- [38] ROACHE, P. J. *Fundamentals of verification and validation*. United States of American: Hermosa Publishers, 1998. 476 p.
- [39] SALARI, K.; KNUPP, P. Code verification by the method of manufactured solutions. *Sandia National Laboratories*, June 2000. (SANDIA REPORT SAND2000-1444).
- [40] VELURI, S. P.; ROY, C. J.; LUKE, E. A. Comprehensive code verification techniques for finite volume cfd codes. *Computer Fluids*, v. 70, p. 59–72, 2012. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.04.028>.
- [41] LEVEQUE, R. J. *Finite difference methods dor ordinary and partial differential equations: stead-state and time-dependenr problems*. Philadelphia: SIAM, 2007. (Classics in Applied Mathematics).

- [42] STERZA, R. L. et al. Análise da ordem de acurácia do erro em soluções numéricas da equação de poisson. *Revista Eletrônica Paulista de Matemática*, v. 10, dez. 2017.
- [43] ZHANG, W. et al. An unstructured finite volume method based on the projection method combined momentum interpolation with a central scheme for three-dimensional nonhydrostatic flows. *European Journal of Mechanics / B Fluids*, v. 84, p. 164–185, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2020.06.006>.
- [44] BREIL, J.; H., M. P. A cell-centered diffusion scheme on two-dimensional unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, v. 224, p. 785–823, 2007. DOI: 10.1016/j.jcp.2006.10.025.
- [45] GAO, Z.; WU, J. A linearity preserving cell-centered scheme for the heterogeneous and anisotropic diffusion equations on general meshes. *International Journal For Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 67, n. 12, p. 2157–2183, 2011. DOI: 10.1002/flid.2496.
- [46] CHANG, L.; YUAN, G. An efficient and accurate reconstruction algorithm for the formulation of cell-centered diffusion schemes. *Journal of Computational Physics*, v. 231, p. 6935–6952, 2012. DOI: 10.1016/j.jcp.2012.06.019.
- [47] MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Unidimensional numerical solution error simulation for convergent apparent order. *Numerical Heat Transfer; Part B.*, v. 42, n. 2, p. 167–188, 2002. DOI: <https://doi.org/10.1080/10407790190053888>.
- [48] STROHER, G. R.; CARDOSO, L. D. P. *Grid Refine Solver: Registro de programa de computador n. BR512025003508-0*. Instituto Nacional da Propriedade Industrial (INPI), 2025. Disponível em: <<https://gyllesrs.github.io/GRID-REFINE-SOLVER/>>.
- [49] MEEK, K. M. et al. The organisation of collagen fibrils in the human corneal stroma: a synchrotron x-ray diffraction study. *Current Eye Research*, v. 6, n. 7, p. 841–846, 1987. DOI 10.3109/02713688709034853.
- [50] HEPFER, R. G. et al. Depth- and direction-dependent changes in solute transport following cross-linking with riboflavin and uva light in ex vivo porcine cornea. *Experimental Eye Research*, v. 205, p. 1–8, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.exer.2021.108498>.
- [51] KWAN, M.; NIINIKOSKI, J.; HUNT, T. K. In vivo measurements of oxygen tension in the cornea, aqueous humor, and anterior lens of the open eye. *Investigative Ophthalmology Visual Science*, v. 11, n. 2, p. 108–114, 1972.
- [52] SOBOTTA, J. *Atlas de anatomia humana: cabeça, pescoço e extremidade superior*. 21. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 2000. 425 p. p.

Apêndices

Os Apêndices de B a D a seguir, apresentam as tabelas completas com os resultados numéricos para cada um dos cinco casos analisados no Capítulo 4. As tabelas 11 a 22 detalham a ordem de convergência q obtida em todas as normas de erro consideradas, além dos valores calculados para as métricas de qualidade de malha: distorção (D), razão de aspecto (AR) e qualidade (Q). Complementando essas informações, cada tabela inclui ainda dados sobre a discretização utilizada, como número de volumes e índice de refinamento da malha (h), bem como parâmetros computacionais, incluindo o número de iterações realizadas, ciclos completados, tempo total de processamento, resíduo difusivo e ordem de convergência do mesmo.

APÊNDICE A – SOLUÇÕES FABRICADAS

Nesse apêndice encontram-se os cálculos que forneceram as soluções fabricadas para os casos 2 e 3. As soluções foram obtidas com auxílio do software *Maple*. De forma geral, primeiro é definida a solução analítica $\phi(x, y)$, em seguida, a solução é substituída na equação da difusão para o caso bidimensional em coordenadas cartesianas (equação (2.23)). Por fim, os valores do tensor de difusão Γ é substituído para que o termo fonte seja obtido.

Procedimento computacional 1 Solução fabricada para o caso 2 utilizando o *software Maple*

```
> phi := sin(pi*x)*sin(pi*y);
    phi := sin(pi*x) sin(pi*y);

> fonte := kxx*diff(diff(phi,x),x) + kyy*diff(diff(phi,y),y) +
    kxy*diff(diff(phi,y),x) + kyx*diff(diff(phi,x),y);

    fonte := -kxx sin(pi*x) pi^2 sin(pi*y) - kyy sin(pi*x) pi^2 sin(pi*y)
    + kxy cos(pi*x) pi^2 cos(pi*y) + kyx cos(pi*x) pi^2 cos(pi*y)

> subs(kxx=1, kyy=1, kxy=0, kyx=0, fonte);

    -2 sin(pi*x) pi^2 sin(pi*y)
```

Procedimento computacional 2 Solução fabricada para o caso 3 utilizando o *software Maple*

```
> phi := sin(pi*x)*sin(pi*y);
    phi := sin(pi*x) sin(pi*y);

> fonte := kxx*diff(diff(phi,x),x) + kyy*diff(diff(phi,y),y) +
    kxy*diff(diff(phi,y),x) + kyx*diff(diff(phi,x),y);

    fonte := -kxx sin(pi*x) pi^2 sin(pi*y) - kyy sin(pi*x) pi^2 sin(pi*y)
    + kxy cos(pi*x) pi^2 cos(pi*y) + kyx cos(pi*x) pi^2 cos(pi*y)

> subs(kxx=3, kyy=7, kxy=2, kyx=2, fonte);

    -10 sin(pi*x) pi^2 sin(pi*y) + 4 cos(pi*x) pi^2 cos(pi*y)
```

APÊNDICE B – CASO 1

Tabela 11 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 1 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1237	41	0,0625	**	**	**	**	0,29563
1024	2573	41	0,0312	1,9900	1,9851	1,9610	1,9869	1,4268
4096	5123	42	0,0156	1,9972	1,9947	1,9804	1,9951	12,252
$Q = 0,8; D = 0,3911; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1467	42	0,0625	**	**	**	**	0,27491
1024	2954	44	0,0312	1,9889	1,9870	1,9340	1,9889	1,0819
4096	5893	44	0,0156	1,9963	1,9953	1,9681	1,9958	11,162
$Q = 0,6; D = 0,5456; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1846	55	0,0625	**	**	**	**	0,37259
1024	4053	63	0,0312	1,9884	1,9866	1,9324	1,9887	1,9787
4096	8039	65	0,0156	1,9959	1,9949	1,9673	1,9954	10,414
$Q = 0,4; D = 0,6667; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2377	73	0,0625	**	**	**	**	0,44543
1024	5935	92	0,0312	1,9882	1,9856	1,9281	1,9879	2,6361
4096	12578	107	0,0156	1,9956	1,9944	1,9654	1,9949	17,735
$Q = 0,2; D = 0,7833; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2804	75	0,0625	**	**	**	**	0,45745
1024	7783	115	0,0313	1,9883	1,9841	1,9283	1,9867	2,2689
4096	19490	170	0,0156	1,9956	1,9937	1,9633	1,9943	28,726
$Q = 0,1; D = 0,8522; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	-	-	0,0625	**	**	**	**	-
1024	-	-	0,0313	1,9886	1,9833	1,9394	1,9862	-
4096	-	-	0,0156	1,9957	1,9935	1,9689	1,9942	-

Tabela 12 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 1 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	702	23	0,0823	**	**	**	**	0,15109
1024	1447	24	0,0411	1,9906	1,9894	1,9533	1,9902	0,63678
4096	2763	24	0,0206	1,9976	1,9968	1,9701	1,9970	4,4767
$Q = 0,8; D = 0,3185; AR = 1,3550.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1072	28	0,0291	**	**	**	**	0,17354
1024	2347	30	0,0145	0,8797	0,8802	0,7962	0,8806	0,54794
4096	4686	31	0,0073	0,9447	0,9446	0,9027	0,9447	2,9396
$Q = 0,6; D = 0,5; AR = 2,1544.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1472	36	0,0237	**	**	**	**	0,20545
1024	3708	48	0,0119	0,9350	0,9361	0,8537	0,9364	1,2048
4096	8387	55	0,0059	0,9700	0,9704	0,9282	0,9705	5,2207
$Q = 0,4; D = 0,6688; AR = 4,4652.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2151	55	0,0188	**	**	**	**	0,32467
1024	6408	79	0,0094	0,9585	0,9634	0,8785	0,9637	1,5882
4096	16430	107	0,0047	0,9811	0,9840	0,9396	0,9840	9,9789
$Q = 0,2; D = 0,8346; AR = 16,9544.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	3527	96	0,0131	**	**	**	**	0,52361
1024	10368	143	0,0065	0,9633	0,9789	0,8929	0,9792	1,7883
4096	32498	211	0,0033	0,9830	0,9926	0,9464	0,9927	19,708
$Q = 0,1; D = 0,9173; AR = 66,9894.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	4329	133	0,0092	**	**	**	**	0,32938
1024	13094	213	0,0046	0,9472	0,9770	0,8864	0,9773	4,4741
4096	36702	318	0,0023	0,9744	0,9932	0,9351	0,9933	44,748

Tabela 13 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 1 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	49	2	0,0625	**	**	**	**	**	1,0537e-14	0,19687
1024	105	2	0,0312	2,0000	1,9973	1,9654	1,9991	0,6406	6,7589e-15	0,11184
4096	196	2	0,0156	2,0000	1,9992	1,9832	1,9996	0,9255	3,5585e-15	0,96053
$Q = 0, 8; D = 0, 3911; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	1170	34	0,0625	**	**	**	**	**	3,4976e-01	0,17356
1024	2301	36	0,0312	2,0212	1,9330	0,9505	1,9349	0,9919	1,7587e-01	0,9925
4096	4449	36	0,0156	2,0322	1,9675	0,9755	1,9680	0,9963	8,8159e-02	11,703
$Q = 0, 6; D = 0, 5456; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	1739	52	0,0625	**	**	**	**	**	1,0322	0,21718
1024	3610	60	0,0312	2,0610	1,9434	0,9657	1,9455	0,9804	5,2316e-01	1,6279
4096	7524	65	0,0156	2,0599	1,9730	0,9829	1,9735	0,9905	2,6332e-01	20,425
$Q = 0, 4; D = 0, 6667; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2171	70	0,0625	**	**	**	**	**	3,0532	0,33235
1024	5499	91	0,0312	2,0942	1,9426	0,9696	1,9449	0,9717	1,5568	2,3685
4096	12142	107	0,0156	2,0869	1,9730	0,9848	1,9736	0,9861	7,8596e-01	37,739
$Q = 0, 2; D = 0, 7833; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	-	-	0,0625	**	**	**	**	**	13,984	-
1024	-	-	0,0313	2,1129	1,9209	0,9684	1,9236	0,9639	7,1693	-
4096	-	-	0,0156	2,1117	1,9607	0,9841	1,9614	0,9822	3,6291	-
$Q = 0.1; D = 0.8522; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	-	-	0,0625	**	**	**	**	**	56,300	-
1024	-	-	0,0313	2,0948	1,8757	0,9664	1,8786	0,9597	28,947	-
4096	-	-	0,0156	2,1236	1,9403	0,9829	1,9410	0,9802	14,673	-

Tabela 14 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 1 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	65	3	0,0823	**	**	**	**	**	3,3766e-12	0,086215
1024	130	3	0,0411	2,0000	1,9995	1,9356	2,0003	0,7335	2,0308e-12	0,096837
4096	248	3	0,0206	2,0000	1,9998	1,9544	2,0000	0,0423	1,9722e-12	0,89266
$Q = 0, 8; D = 0, 3185; AR = 1, 3550.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	1034	28	0,0291	**	**	**	**	**	8,4498e-02	0,23119
1024	2285	31	0,0145	2,0743	1,9311	0,9589	1,9315	1,0298	4,1386e-02	0,83032
4096	4671	33	0,0073	2,0515	1,9626	0,9794	1,9627	1,0158	2,0467e-02	6,4666
$Q = 0, 6; D = 0, 5; AR = 2, 1544.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	1630	44	0,0237	**	**	**	**	**	1,2133e-01	0,22506
1024	4208	55	0,0119	2,1842	1,9489	0,9681	1,9492	1,0143	6,0067e-02	0,88631
4096	8999	62	0,0059	2,0952	1,9700	0,9839	1,9701	1,0080	2,9868e-02	12,167
$Q = 0, 4; D = 0, 6688; AR = 4, 4652.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2364	63	0,0188	**	**	**	**	**	1,8482e-01	0,23462
1024	7314	95	0,0094	2,1521	1,9556	0,9711	1,9559	0,9974	9,2575e-02	1,5003
4096	17762	122	0,0047	2,1113	1,9727	0,9854	1,9728	0,9982	4,6345e-02	21,79
$Q = 0, 2; D = 0, 8346; AR = 16, 9544.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	3483	104	0,0131	**	**	**	**	**	3,5073e-01	0,34038
1024	11532	167	0,0065	2,0737	1,9878	0,9724	0,9681	0,9759	1,7833e-01	3,4155
4096	37142	250	0,0033	2,0430	1,9773	0,9861	0,9774	0,9859	9,0038e-02	42,904
$Q = 0, 1; D = 0, 9173; AR = 66, 9894.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	16182	299	0,0092	**	**	**	**	**	6,6798e-01	3,8787
1024	51372	485	0,0046	2,0610	1,9898	0,9728	1,9901	0,9629	3,4268e-01	61,103
4096	-	-	0,0023	2,0233	1,9911	0,9863	1,9912	0,9788	1,7388e-01	-

APÊNDICE C – CASO 2

Tabela 15 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 2 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	717	38	0,0625	**	**	**	**	0,31534
1024	1592	37	0,0312	3,0192	2,9923	2,9485	2,9923	1,6181
4096	3115	36	0,0156	1,8572	1,6972	1,4663	1,6972	5,8417
$Q = 0,8; D = 0,3911; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1410	41	0,0625	**	**	**	**	0,21629
1024	2854	41	0,0312	2,0220	2,0214	1,9366	2,0124	0,87024
4096	5692	41	0,0156	2,0170	2,0112	1,9718	2,0112	10,862
$Q = 0,6; D = 0,5456; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2013	56	0,0625	**	**	**	**	0,30509
1024	4356	61	0,0312	1,9809	1,9797	1,9385	1,9797	2,0557
4096	8789	62	0,0156	2,0038	2,0024	1,9749	2,0024	10,157
$Q = 0,4; D = 0,6667; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2901	74	0,0625	**	**	**	**	0,53057
1024	6842	88	0,0312	1,9202	1,9217	1,9164	1,9217	1,8141
4096	14714	100	0,0156	1,9825	1,9831	1,9797	1,9831	16,942
$Q = 0,2; D = 0,7833; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	3276	74	0,0625	**	**	**	**	0,62734
1024	8874	105	0,0313	1,8022	1,8032	1,7958	1,8032	2,8476
4096	23163	144	0,0156	1,9464	1,9467	1,9413	1,9467	24,782
$Q = 0,1; D = 0,8522; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2918	63	0,0625	**	**	**	**	0,49256
1024	8928	94	0,0313	1,6405	1,6431	1,6385	1,6431	2,7545
4096	25472	145	0,0156	1,8933	1,8937	1,8897	1,8937	30,328

Tabela 16 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 2 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	935	27	0,0823	**	**	**	**	0,14319
1024	1853	27	0,0411	2,0671	2,0496	2,0127	2,0488	0,70749
4096	3599	27	0,0206	2,0379	2,0278	2,0063	2,0276	2,5736
$Q = 0,8; D = 0,3185; AR = 1,3550.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1011	29	0,0291	**	**	**	**	0,12471
1024	2267	30	0,0145	0,8180	0,8678	0,9552	0,8674	0,54124
4096	4468	30	0,0073	0,9138	0,9284	0,9855	0,9283	2,8278
$Q = 0,6; D = 0,5; AR = 2,1544.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1162	33	0,0237	**	**	**	**	0,20316
1024	2853	38	0,0119	0,9435	0,9472	0,9811	0,9469	1,0272
4096	5721	42	0,0059	0,9706	0,9708	0,9950	0,9707	3,8671
$Q = 0,4; D = 0,6688; AR = 4,4652.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1859	53	0,0188	**	**	**	**	0,34223
1024	5015	68	0,0094	0,9828	0,9870	0,9944	0,9868	1,0125
4096	11343	80	0,0047	0,9903	0,9917	1,0001	0,9917	9,5159
$Q = 0,2; D = 0,8346; AR = 16,9544.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	3384	95	0,0131	**	**	**	**	0,41357
1024	10750	146	0,0065	0,9960	0,9968	1,0116	1,0124	2,753
4096	26712	195	0,0033	0,9975	1,0002	1,0053	1,0057	17,842
$Q = 0,1; D = 0,9173; AR = 66,9894.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	5417	152	0,0092	**	**	**	**	0,65277
1024	17471	250	0,0046	0,9867	1,0195	0,9868	1,0193	3,8423
4096	49980	385	0,0023	0,9931	1,0102	0,9949	1,0102	35,043

Tabela 17 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 2 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2	2	0,0625	**	**	**	**	**	2,0218e-16	0,083253
1024	5	2	0,0312	2,0056	2,0021	1,9916	2,0021	1,1087	9,3891e-17	0,13051
4096	6	2	0,0156	2,0014	2,0005	1,9979	2,0005	-0,0880	9,9797e-17	0,65641
$Q = 0, 8; D = 0, 3911; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	1333	35	0,0625	**	**	**	**	**	1,8023e-01	0,29676
1024	2613	36	0,0312	1,9769	1,9409	1,0257	1,9409	0,9866	9,0955e-02	1,759
4096	4891	36	0,0156	1,9979	1,9789	0,9916	1,9789	0,9962	4,5599e-02	15,957
$Q = 0, 6; D = 0, 5456; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2103	56	0,0625	**	**	**	**	**	3,2667e-01	0,33523
1024	4208	61	0,0312	1,9744	1,9354	1,1661	1,9354	0,9868	1,6483e-01	1,9222
4096	8297	62	0,0156	2,0010	1,9820	1,1547	1,9820	0,9978	8,2544e-02	16,826
$Q = 0, 4; D = 0, 6667; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2659	73	0,0625	**	**	**	**	**	5,8461e-01	0,43438
1024	6434	88	0,0312	1,9359	1,9233	1,9240	1,9233	0,9498	3,0265e-01	2,4445
4096	13000	100	0,0156	1,9829	1,9757	1,0917	1,9757	0,9855	1,5285e-01	39,257
$Q = 0, 2; D = 0, 7833; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	3095	74	0,0625	**	**	**	**	**	1,2512	0,50133
1024	7866	106	0,0313	1,8280	1,8445	1,8385	1,8445	0,8626	6,8812e-01	4,1757
4096	19122	145	0,0156	1,9448	1,9499	1,9559	1,9499	0,9594	3,5387e-01	46,193
$Q = 0, 1; D = 0, 8522; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2795	61	0,0625	**	**	**	**	**	2,2794	0,33998
1024	7697	95	0,0313	1,7232	1,7395	1,7543	1,7395	0,7081	1,3953	2,7933
4096	20012	147	0,0156	1,9045	1,9114	1,9203	1,9114	0,9139	7,4051e-01	55,065

Tabela 18 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 2 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	70	3	0,0823	**	**	**	**	**	2,7003e-12	0,091974
1024	139	3	0,0411	2,0037	2,0027	2,0060	2,0019	0,9006	1,4465e-12	0,10214
4096	259	3	0,0206	2,0009	2,0006	2,0031	2,0004	0,4105	1,0883e-12	0,73107
$Q = 0, 8; D = 0, 3185; AR = 1, 3550.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	793	22	0,0291	**	**	**	**	**	7,7434e-02	0,14359
1024	1686	23	0,0145	1,9483	1,9435	1,1868	1,9431	1,0242	3,8072e-02	0,83846
4096	3201	24	0,0073	1,9783	1,9670	0,6006	1,9675	1,0126	1,8870e-02	4,2827
$Q = 0, 6; D = 0, 5; AR = 2, 1544.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	1281	35	0,0237	**	**	**	**	**	1,0216e-01	0,17969
1024	2982	41	0,0119	1,8909	1,8335	0,8509	1,8333	1,0284	5,0086e-02	0,83593
4096	5855	42	0,0059	1,9321	1,8990	0,9238	1,8989	1,0150	2,4783e-02	8,2263
$Q = 0, 4; D = 0, 6688; AR = 4, 4652.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2060	56	0,0188	**	**	**	**	**	1,1568e-01	0,29758
1024	5326	73	0,0094	1,9146	1,8533	0,9119	1,8531	1,0302	5,6642e-02	2,2004
4096	11348	85	0,0047	1,9266	1,9006	0,9511	1,9005	1,0162	2,8006e-02	14,976
$Q = 0, 2; D = 0, 8346; AR = 16, 9544.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	3608	98	0,0131	**	**	**	**	**	1,2273e-01	0,45372
1024	10902	153	0,0065	1,8739	1,8247	0,9213	1,8245	1,0311	6,0056e-02	4,0422
4096	26742	208	0,0033	1,9286	1,8667	0,9551	1,8666	1,0167	2,9682e-02	42,392
$Q = 0, 1; D = 0, 9173; AR = 66, 9894.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	5370	149	0,0092	**	**	**	**	**	1,2440e-01	0,5771
1024	17439	258	0,0046	1,8014	1,7728	0,9168	1,7726	1,0313	6,0862e-02	5,9535
4096	48582	404	0,0023	1,8646	1,8116	0,9527	1,8116	1,0168	3,0078e-02	76,956

APÊNDICE D – CASO 3

Tabela 19 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 3 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1124	40	0,0625	**	**	**	**	0,28666
1024	2325	40	0,0312	3,0584	3,0398	2,9668	3,0398	1,6471
4096	4732	39	0,0156	1,8425	1,7401	1,6956	1,7401	13,012
$Q = 0,8; D = 0,3911; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1537	42	0,0625	**	**	**	**	0,34499
1024	3214	43	0,0312	2,0798	2,0499	1,9073	2,0499	1,5009
4096	6208	43	0,0156	2,0402	2,0238	1,9473	2,0238	10,225
$Q = 0,6; D = 0,5456; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2586	75	0,0625	**	**	**	**	0,55817
1024	6097	88	0,0312	2,0212	2,0119	1,9178	2,0119	1,7933
4096	12387	92	0,0156	2,0213	2,0158	1,9637	2,0158	18,932
$Q = 0,4; D = 0,6667; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	3729	106	0,0625	**	**	**	**	0,55431
1024	10464	147	0,0312	1,9406	1,9424	1,9239	1,9424	4,3294
4096	23820	169	0,0156	1,9917	1,9923	1,9799	1,9923	36,432
$Q = 0,2; D = 0,7833; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	3276	74	0,0625	**	**	**	**	0,62734
1024	8874	105	0,0313	1,8022	1,8032	1,7958	1,8032	2,8476
4096	23163	144	0,0156	1,9464	1,9467	1,9413	1,9467	24,782
$Q = 0,1; D = 0,8522; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2918	63	0,0625	**	**	**	**	0,49256
1024	8928	94	0,0313	1,6405	1,6431	1,6385	1,6431	2,7545
4096	25472	145	0,0156	1,8933	1,8937	1,8897	1,8937	30,328

Tabela 20 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a metodologia de Hoffmann e Chiang [15] com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 3 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1572	28	0,0823	**	**	**	**	0,23169
1024	3324	41	0,0411	2,0504	2,0309	1,9294	2,0301	0,80767
4096	6847	44	0,0206	2,0260	2,0138	1,9562	2,0136	4,2253
$Q = 0,8; D = 0,3185; AR = 1,3550.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	1675	40	0,0291	**	**	**	**	0,23228
1024	4321	50	0,0145	0,7913	0,8485	0,9625	0,8481	0,84871
4096	9029	56	0,0073	0,8998	0,9139	0,9893	0,9138	5,1122
$Q = 0,6; D = 0,5; AR = 2,1544.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2209	55	0,0237	**	**	**	**	0,35253
1024	6619	78	0,0119	0,9408	0,9434	0,9860	0,9432	1,0286
4096	14670	96	0,0059	0,9684	0,9678	0,9974	0,9677	8,751
$Q = 0,4; D = 0,6688; AR = 4,4652.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	2928	75	0,0188	**	**	**	**	0,37813
1024	9408	119	0,0094	0,9831	0,9873	0,9972	0,9871	2,6363
4096	23980	166	0,0047	0,9902	0,9916	1,0014	0,9915	21,281
$Q = 0,2; D = 0,8346; AR = 16,9544.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	4546	116	0,0131	**	**	**	**	0,6254
1024	15308	200	0,0065	0,9964	1,0126	0,9982	1,0124	3,7412
4096	42920	319	0,0033	0,9977	1,0058	1,0008	1,0057	29,967
$Q = 0,1; D = 0,9173; AR = 66,9894.$								
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	Tempo (s)
256	6522	174	0,0092	**	**	**	**	0,78498
1024	21571	303	0,0046	0,9868	1,0200	0,9877	1,0198	5,2667
4096	65448	515	0,0023	0,9931	1,0105	0,9953	1,0105	47,561

Tabela 21 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas quadrangulares em domínio quadrangular para o Caso 3 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	815	26	0,0625	**	**	**	**	**	4,9664e-01	0,31028
1024	1703	26	0,0312	2,0166	2,0086	2,0054	2,0086	0,9927	2,4958e-01	1,3775
4096	3383	26	0,0156	2,0044	2,0022	2,0014	2,0022	0,9982	1,2495e-01	8,8376
$Q = 0, 8; D = 0, 3911; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	1394	36	0,0625	**	**	**	**	**	7,5126e-01	0,26866
1024	2662	37	0,0312	1,9865	1,9654	1,0810	1,9654	0,9876	3,7888e-01	1,2537
4096	4913	37	0,0156	2,0052	1,9886	1,0681	1,9886	0,9964	1,8992e-01	14,086
$Q = 0, 6; D = 0, 5456; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2715	77	0,0625	**	**	**	**	**	1,7242	0,4637
1024	5822	91	0,0312	1,9827	1,9525	1,2333	1,9525	0,9890	8,6871e-01	4,1088
4096	11260	95	0,0156	2,0033	1,9870	1,1829	1,9870	0,9983	4,3486e-01	31,678
$Q = 0, 4; D = 0, 6667; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	3792	108	0,0625	**	**	**	**	**	3,4169	0,67284
1024	9104	149	0,0312	1,9267	1,9120	1,8900	1,9120	0,9498	1,7689	5,7937
4096	19962	172	0,0156	1,9757	1,9676	1,0617	1,9676	0,9854	8,9344e-01	57,539
$Q = 0, 2; D = 0, 7833; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	3691	97	0,0625	**	**	**	**	**	7,8377	0,51675
1024	10190	148	0,0313	1,8076	1,8107	1,7911	1,8107	0,8583	4,3233	4,2369
4096	26066	226	0,0156	1,9346	1,9355	1,9343	1,9355	0,9580	2,2256	67,141
$Q = 0, 1; D = 0, 8522; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	8712	124	0,0625	**	**	**	**	**	1,4776e-01	3,1585
1024	23846	215	0,0313	1,6935	1,7069	1,7163	1,7069	-0,8200	9,0843	70,239
4096	-	-	0,0156	1,8908	1,8965	1,9051	1,8965	-0,9473	4,8300	-

Tabela 22 – Dados obtidos pelas simulações utilizando a condição de contorno do presente trabalho com diferentes refinamentos das malhas triangulares em domínio triangular para o Caso 3 com a qualidade da malha variando em intervalos de 0, 2. Fonte: a autora.

$Q = 1; D = 0; AR = 1.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	721	18	0,0823	**	**	**	**	**	4,9664e-01	0,20645
1024	1527	20	0,0411	2,0552	2,0402	1,0825	2,0394	0,9845	2,4958e-01	0,64884
4096	2915	20	0,0206	2,0327	2,0204	1,0353	2,0202	0,9958	1,2495e-01	5,2946
$Q = 0, 8; D = 0, 3185; AR = 1, 3550.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	1502	39	0,0237	**	**	**	**	**	7,5126e-01	0,24647
1024	3678	48	0,0119	1,9241	1,8960	0,4996	1,8956	1,0160	3,7888e-01	0,94055
4096	7511	53	0,0059	1,9574	1,9383	0,7907	1,9382	1,0078	1,8992e-01	8,0188
$Q = 0, 6; D = 0, 5; AR = 2, 1544.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	2230	56	0,0237	**	**	**	**	**	1,7242	0,3013
1024	5801	79	0,0119	1,9230	1,8511	0,8911	1,8509	1,0237	8,6871e-01	2,2492
4096	13010	96	0,0059	1,9330	1,9016	0,9415	1,9016	1,0127	4,3486e-01	17,517
$Q = 0, 4; D = 0, 6688; AR = 4, 4652.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	3214	79	0,0188	**	**	**	**	**	3,4169	0,4105
1024	9229	124	0,0094	1,9357	1,8524	0,9217	1,8522	1,0275	1,7689	3,2092
4096	21966	171	0,0047	1,9498	1,8901	0,9557	1,8901	1,0150	8,9344e-01	30,656
$Q = 0, 2; D = 0, 8346; AR = 16, 9544.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	4694	119	0,0131	**	**	**	**	**	7,8377	0,52881
1024	14942	209	0,0065	1,8355	1,8063	0,9228	1,8062	1,0298	4,3233	3,4614
4096	40527	335	0,0033	1,8751	1,8372	0,9558	1,8372	1,0162	2,2256	58,551
$Q = 0, 1; D = 0, 9173; AR = 66, 9894.$										
Nº de volumes	Iterações	ciclos	h	q_1	q_2	q_∞	q_{RMS}	$q_{ResiduoDifusivo}$	Resíduo Difusivo	Tempo (s)
256	6395	170	0,0092	**	**	**	**	**	14,776	0,50266
1024	21090	310	0,0046	1,7813	1,7609	0,9169	1,7608	1,0307	9,0843	4,5458
4096	60129	536	0,0023	1,8328	1,7901	0,9527	1,7901	1,0165	4,8300	124,59