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

O objetivo deste capítulo é reescrever, para malhas não-uniformes exemplificadas na Fig. 14.1, as seis aproximações numéricas da Tab. 2.1 apresentadas no Cap. 7. Com este fim, expandindo-se a série de Taylor, Eq. (2.3), para os nós ' $j-1$ ', ' $j+1$ ' e ' $j+2$ ' da malha não-uniforme mostrada na Fig. 14.1, chega-se a

$$\Lambda_{j-1} = \Lambda_j - \Lambda_j^i h_j + \Lambda_j^{ii} \frac{h_j^2}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h_j^3}{6} + \dots \quad (14.1)$$

$$\Lambda_{j+1} = \Lambda_j + \Lambda_j^i h_{j+1} + \Lambda_j^{ii} \frac{h_{j+1}^2}{2} + \Lambda_j^{iii} \frac{h_{j+1}^3}{6} + \dots \quad (14.2)$$

$$\Lambda_{j+2} = \Lambda_j + \Lambda_j^i (h_{j+1} + h_{j+2}) + \Lambda_j^{ii} \frac{(h_{j+1} + h_{j+2})^2}{2} + \Lambda_j^{iii} \frac{(h_{j+1} + h_{j+2})^3}{6} + \dots \quad (14.3)$$

onde j é o nó genérico sobre o qual se realizam as aproximações numéricas; os três pontos indicam uma série infinita; e os tamanhos (h) dos elementos da malha são dados por

$$h_j = x_j - x_{j-1} \quad (14.4)$$

$$h_{j+1} = x_{j+1} - x_j \quad (14.5)$$

$$h_{j+2} = x_{j+2} - x_{j+1} \quad (14.6)$$

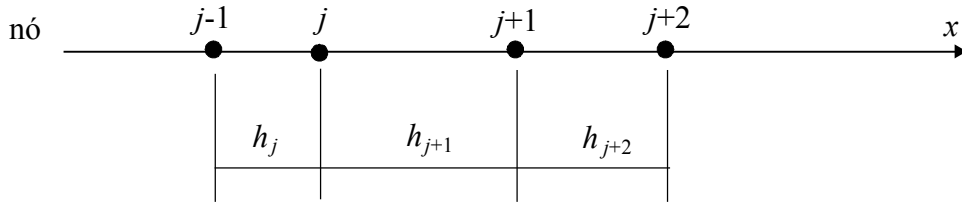


Figura 14.1 Malha unidimensional não-uniforme.

As expressões para as aproximações numéricas da Tab. 2.1, e para seus erros de truncamento (ε) e de poluição (e) são deduzidas nas seções 14.1 a 14.6, a seguir, e aplicadas ao longo dos capítulos que compõem a Parte III deste trabalho.

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

Isolando-se Λ_j^i da Eq. (14.1), obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_j - \Lambda_{j-1})}{h_j} + \Lambda_j^{ii} \frac{h_j}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h_j^2}{6} + \Lambda_j^{iv} \frac{h_j^3}{24} - \dots \quad (14.7)$$

onde Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª, 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j , e h_j é definido na Eq. (14.4). Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.7), obtém-se a Eq. (7.3). A aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a montante resulta em

$$(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{(\lambda_j - \lambda_{j-1})}{h_j} \quad (14.8)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{UDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}h_j - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6}h_j^2 + \frac{\Lambda_j^{iv}}{24}h_j^3 - \dots \quad (14.9)$$

$$e(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{(E_j - E_{j-1})}{h_j} \quad (14.10)$$

onde E_j e E_{j-1} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_j e λ_{j-1} , respectivamente, e o erro de discretização de λ_{UDS}^i é dado pela Eq. (7.7).

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

Embora possa não ser estritamente correto, o termo “diferença central” é empregado aqui e na seção 14.5, mesmo em malhas não-uniformes, porque se usa um nó a montante e outro a jusante na obtenção da aproximação numérica do nó de interesse. Assim, subtraindo-se a Eq. (14.1) de (14.2) e isolando-se Λ_j^i do resultado, obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} + \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (14.11)$$

onde Λ_j^{ii} e Λ_j^{iii} são, respectivamente, as derivadas de 2ª e 3ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j , e h_j e h_{j+1} são definidos nas Eqs. (14.4) e (14.5). Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.11), obtém-se a Eq. (7.9). A aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com diferença central resulta em

$$(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} \quad (14.12)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{CDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{CDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS})_j = \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (14.13)$$

$$e(\lambda_{CDS})_j = \frac{(E_{j+1} - E_{j-1})}{(h_j + h_{j+1})} \quad (14.14)$$

onde E_{j+1} e E_{j-1} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_{j+1} e λ_{j-1} , respectivamente,

Não existe um único parâmetro de h para reduzir a Eq. (14.13) à Eq. (2.2). Mas mesmo assim, observa-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{CDS})$ são $p_V = 1, 2, \text{ etc, e}$, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 1$. Desta forma, **o erro de truncamento da aproximação numérica λ_{CDS}^i é de 1ª ordem**. Esse resultado difere daquele obtido com malhas uniformes, Eq. (7.11), cujo $p_L = 2$. A partir das Eqs. (14.1) e (14.2), mesmo para malhas não-uniformes, é possível obter uma aproximação numérica cujo $p_L = 2$. Mas, neste caso, além de λ_{j+1} e λ_{j-1} , o valor de λ_j também é envolvido na aproximação numérica. Em outras palavras, passa-se a ter uma aproximação numérica de três pontos (Hirsch, 1988) e não de dois, Eq. (14.12), que é o interesse aqui, por ser uma aproximação semelhante àquela usada em malhas uniformes.

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

Isolando-se Λ_j^i da Eq. (14.2), obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^i = \frac{(\Lambda_{j+1} - \Lambda_j)}{h_{j+1}} - \Lambda_j^{ii} \frac{h_{j+1}}{2} - \Lambda_j^{iii} \frac{h_{j+1}^2}{6} - \Lambda_j^{iv} \frac{h_{j+1}^3}{24} - \dots \quad (14.15)$$

onde Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 2ª, 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.15), obtém-se a Eq. (7.15). A aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com um ponto a jusante resulta em

$$(\lambda_{DDS}^i)_j = \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_j)}{h_{j+1}} \quad (14.16)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{DDS}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{DDS}^i)_j = -\frac{\Lambda_j^{ii}}{2}h_{j+1} - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6}h_{j+1}^2 - \frac{\Lambda_j^{iv}}{24}h_{j+1}^3 - \dots \quad (14.17)$$

$$e(\lambda_{DDS}^i)_j = \frac{(E_{j+1} - E_j)}{h_{j+1}} \quad (14.18)$$

onde o erro de discretização de λ_{DDS}^i é dado pela Eq. (7.19).

14.4 DERIVADA DE 1ª ORDEM COM 2 PONTOS A JUSANTE: λ_{DDS-2}^i

A partir das Eqs. (14.2) e (14.3), pode-se deduzir uma expressão analítica exata para a derivada de 1ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\begin{aligned} \Lambda_j^i &= \frac{[(1+r_j)^2\Lambda_{j+1} - (2+r_j)r_j\Lambda_j - \Lambda_{j+2}]}{r_j(1+r_j)h_{j+1}} + \Lambda_j^{iii}\frac{(1+r_j)}{6}h_{j+1}^2 \\ &+ \Lambda_j^{iv}\frac{(1+r_j)(2+r_j)}{24}h_{j+1}^3 + \dots \end{aligned} \quad (14.19)$$

onde

$$r_j = \frac{h_{j+2}}{h_{j+1}} \quad (14.20)$$

e Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j , e h_{j+1} e h_{j+2} são definidos nas Eqs. (14.5) e (14.6). Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.19), obtém-se a Eq. (7.21). A aproximação numérica da derivada de 1ª ordem com dois pontos a jusante resulta em

$$(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \frac{[(1+r_j)^2\lambda_{j+1} - (2+r_j)r_j\lambda_j - \lambda_{j+2}]}{r_j(1+r_j)h_{j+1}} \quad (14.21)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$, e de poluição, $e(\lambda_{DDS-2}^i)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \Lambda_j^{iii} \frac{(1+r_j)}{6} h_{j+1}^2 + \Lambda_j^{iv} \frac{(1+r_j)(2+r_j)}{24} h_{j+1}^3 + \dots \quad (14.22)$$

$$e(\lambda_{DDS-2}^i)_j = \frac{[(1+r_j)^2 E_{j+1} - (2+r_j)r_j E_j - E_{j+2}]}{r_j(1+r_j)h_{j+1}} \quad (14.23)$$

onde E_{j+1} , E_j e E_{j+2} são os erros de discretização das soluções numéricas λ_{j+1} , λ_j e λ_{j+2} , respectivamente, e o erro de discretização de λ_{DDS-2}^i é dado pela Eq. (7.25).

Não existe um único parâmetro de h para reduzir a Eq. (14.22) à Eq. (2.2). Mas, mesmo assim, observa-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{DDS-2}^i)$ são $p_V = 2, 3$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 2$.

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

Com a multiplicação da Eq. (14.1) por h_{j+1} e da Eq. (14.2) por h_j , com a adição dos resultados e o isolamento de Λ_j^{ii} , obtém-se uma expressão analítica exata para a derivada de 2ª ordem da variável dependente (Λ) no nó j , dada por

$$\Lambda_j^{ii} = 2 \frac{[h_{j+1}\Lambda_{j-1} + h_j\Lambda_{j+1} - (h_j + h_{j+1})\Lambda_j]}{(h_j + h_{j+1})h_j h_{j+1}} + \frac{\Lambda_j^{iii}}{3}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (14.24)$$

onde Λ_j^{iii} e Λ_j^{iv} são, respectivamente, as derivadas de 3ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) no nó j . Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.24), obtém-se a Eq. (7.27). A aproximação numérica da derivada de 2ª ordem com diferença central resulta em

$$(\lambda_{CDS}^{ii})_j = 2 \frac{[h_{j+1}\lambda_{j-1} + h_j\lambda_{j+1} - (h_j + h_{j+1})\lambda_j]}{(h_j + h_{j+1})h_j h_{j+1}} \quad (14.25)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})$, e de poluição, $e(\lambda_{CDS}^{ii})$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})_j = \frac{\Lambda_j^{iii}}{3}(h_j - h_{j+1}) - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12} \frac{(h_j^3 + h_{j+1}^3)}{(h_j + h_{j+1})} + \dots \quad (14.26)$$

$$e(\lambda_{CDS}^{ii})_j = 2 \frac{[h_{j+1}E_{j-1} + h_jE_{j+1} - (h_j + h_{j+1})E_j]}{(h_j + h_{j+1})h_jh_{j+1}} \quad (14.27)$$

onde o erro de discretização de λ_{CDS}^{ii} é dado pela Eq. (7.31).

Não existe um único parâmetro de h para reduzir a Eq. (14.26) à Eq. (2.2). Mas mesmo assim, observa-se que as ordens verdadeiras de $\varepsilon(\lambda_{CDS}^{ii})$ são $p_V = 1, 2$, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L = 1$.

14.6 MÉDIA DA VARIÁVEL DEPENDENTE: λ_m

Define-se a solução analítica exata da média da variável dependente (Λ_m) ao longo do domínio de cálculo através da Eq. (2.28). A solução analítica exata da integração numérica da variável dependente (Λ), obtida pela regra do trapézio (Pletcher *et al.*, 1988) ao longo do domínio de cálculo, é dada por

$$\Lambda_m = \frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N h_j (\Lambda_{j-1} + \Lambda_j) - \frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \left(\Lambda_{j-1/2}^{ii} \frac{h_j^3}{12} + \Lambda_{j-1/2}^{iv} \frac{h_j^5}{480} + \dots \right) \quad (14.28)$$

onde $\Lambda_{j-1/2}^{ii}$ e $\Lambda_{j-1/2}^{iv}$ são, respectivamente, as derivadas de 2ª e 4ª ordens da variável dependente (Λ) em ' $j-1/2$ ', isto é, na coordenada média entre os nós ' $j-1$ ' e j ; h_j é definido pela Eq. (14.4); N é o número total de elementos da malha; sendo que o primeiro ($j = 0$) e o último nós ($j = N$) da malha estão sobre os contornos do domínio. Com a substituição da Eq. (7.1) na Eq. (14.28), obtém-se a Eq. (7.32). A aproximação numérica da média da variável dependente resulta em

$$\lambda_m = \frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N h_j (\lambda_{j-1} + \lambda_j) \quad (14.29)$$

Seus erros de truncamento, $\varepsilon(\lambda_m)$, e de poluição, $e(\lambda_m)$, são dados por

$$\varepsilon(\lambda_m) = -\frac{1}{L} \sum_{j=1}^N \left(\Lambda_{j-1/2}^{ii} \frac{h_j^3}{12} + \Lambda_{j-1/2}^{iv} \frac{h_j^5}{480} + \dots \right) \quad (14.30)$$

$$e(\lambda_m) = \frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N h_j (E_{j-1} + E_j) \quad (14.31)$$

onde o erro de discretização da aproximação numérica da média da variável dependente é dado pela Eq. (7.36).

14.7 RESUMO DO CAPÍTULO 14

O caso prático das simulações numéricas, isto é, quando a própria variável dependente armazenada nos nós da malha contém erro de discretização, foi abordado genericamente neste capítulo para malhas não-uniformes. Nesse caso, o erro de discretização de cada aproximação numérica é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição. As expressões das aproximações numéricas (λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m) e de seus erros de truncamento (ε) se reduzem àquelas do Cap. 7 se os tamanhos (h) dos elementos da malha forem constantes, como na Fig. 2.1.

Foram apresentados seis tipos de aproximações numéricas (λ_{UDS}^i , λ_{CDS}^i , λ_{DDS}^i , λ_{DDS-2}^i , λ_{CDS}^{ii} e λ_m) para três variáveis diferentes: as derivadas de primeira e segunda ordem da variável dependente (Λ) nos modelos matemáticos, Λ^i e Λ^{ii} ; e a média da variável dependente ao longo do domínio de cálculo, Λ_m . Também foram apresentadas as expressões genéricas para o erro de truncamento (ε) e o erro de poluição (e) destas seis aproximações numéricas, ou seja, as estimativas de erro *a priori*. Foram definidas e obtidas as ordens assintótica (p_L) e verdadeiras (p_V) dos erros de truncamento, resumidas na Tab. 14.1. As expressões dos erros de truncamento das aproximações numéricas de λ_{CDS}^i , λ_{DDS-2}^i e λ_{CDS}^{ii} não são reduzíveis à equação geral do erro de truncamento, Eq. (2.2).

Tabela 14.1 Valores previstos para as ordens verdadeiras (p_V) e assintótica (p_L) dos erros de truncamento para malhas não-uniformes.

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