



**Universidade
Federal de Itajubá**

TESE DE DOUTORADO

Esquemas sem Malha Baseados no Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial para Solução Numérica das Equações de Navier-Stokes

Autor

Luís Guilherme Cunha Santos

INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Itajubá, outubro de 2016
Minas Gerais - Brasil

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO

Esquemas sem Malha Baseados no Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial para Solução Numérica das Equações de Navier-Stokes

Autor: **Luís Guilherme Cunha Santos**

Orientador: **Nelson Manzanares Filho**

Co-orientador: **Genésio José Menon**

Curso: **Doutorado em Engenharia Mecânica**

Área de Concentração: **Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica como parte dos requisitos para obtenção do Título de Doutor em Ciências em Engenharia Mecânica.

Itajubá, outubro de 2016

Minas Gerais - Brasil

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

TESE DE DOUTORADO

Esquemas sem Malha Baseados no Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial para Solução Numérica das Equações de Navier-Stokes

Autor:

Luís Guilherme Cunha Santos

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Eduardo Cardoso de Abreu	IMECC/UNICAMP
Prof. Dr. Márcio Teixeira de Mendonça	IAE/CTA
Prof. Dr. Luiz Antônio Alcântara Pereira	IEM/UNIFEI
Prof. Dr. Ramiro Gustavo Ramires Camacho	IEM/UNIFEI
Prof. Dr. Genésio José Menon	IEM/UNIFEI
Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho	IEM/UNIFEI

Dedicatória

*Aos meus pais, Augusto e Regina,
aos meus irmãos, Túlio e Aline,
e à minha namorada, Larissa ...*

Agradecimentos

Aos meus pais e irmãos pela infatigável confiança despendida a mim. Pelos conselhos, palavras de incentivo e força.

A minha namorada Larissa por estar sempre presente, me apoiando, incentivando e me ajudando nesse árduo caminho.

Agradeço ao meu orientador, Nelson, que além do profissionalismo, conhecimentos técnicos e filosóficos, teve grande paciência comigo. Mas agradeço-o principalmente pela amizade e confiança.

Ao meu co-orientador, Genésio, pelos conselhos e a relevante ajuda que me foi fornecida.

Aos funcionários do Instituto de Engenharia Mecânica, sempre muito educados e prestativos, por transformarem nosso ambiente de trabalho e estudo mais afável e acolhedor.

Ao professor Ramiro por facultar-me um espaço no Laboratório de Hidrodinâmica Virtual (LHV), e aos amigos que lá encontrei.

A todas as secretárias da pró-reitoria de pós-graduação que sempre foram muito prestativas e atenciosas comigo.

A todos os professores que passaram pelo meu caminho, do fundamental ao ensino médio, em especial à professora Conceição, pelas aulas de português, e ao professor Gilson, pelos conhecimentos em matemática. A todos os professores do Instituto de Física e Química e do Instituto de Matemática e Computação da Unifei que foram responsáveis pela minha formação acadêmica e científica, bem como aos professores do Instituto de Engenharia Mecânica.

Ao professor Eduardo por me receber em seu grupo de pesquisa no Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica (IMECC) na Unicamp durante meu doutorado sanduíche.

A Capes e ao CNPq pelo apoio financeiro.

A persistência é o caminho do êxito.

Charles Chaplin.

Resumo

Neste trabalho é apresentado o Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial (MQDL-FBR) em um contexto de nuvens estruturadas e não-estruturadas, sem a utilização de pontos estruturados próximos a fronteira ou a utilização de pontos fantasmas, como vem sendo abordado na literatura, juntamente com duas alternativas para tratar o mal-condicionamento dos sistemas de equações lineares locais para o cálculo dos coeficientes de ponderação: o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, que propõe a formação de novas funções de base a partir das funções de base radial Gaussiana (GA), e o MQDL-FBR(PHS), que utiliza funções da base radial Poliharmônica Spline (PHS) juntamente com bases polinomiais suplementares.

Discute-se, através de experimentos numéricos na equação de Poisson, os parâmetros que influenciam nas soluções obtidas pelo MQDL-FBR e suas variantes, como: parâmetro de forma, refinamento de nuvens, número de pontos do suporte local, grau do polinômio suplementar, os métodos de relaxações sucessivas e o de decomposição LU para solução numérica do sistema de equações lineares global, dentre outros e estima-se, a *posteriori*, a ordem de precisão do MQDL-FBR. Comparações entre o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) são feitas e calculam-se os erros absolutos nas primeiras e segundas derivadas em todo o domínio através de uma função de teste. Resultados mostram que o MQDL-FBR(GA) Estabilizado ainda não é robusto o suficiente para o cálculo dos pesos para todos os tipos de suportes locais.

Duas aplicações são estudadas através da solução numérica das equações de Navier-Stokes usando o MQDL-FBR. Primeiro em um problema de convecção natural em uma cavidade quadrada onde são feitas comparações entre o MQDL-FBR(Mq) com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado mostrando a existência de oscilações nos resultados causados pelo uso do método iterativo de relaxações sucessivas para solução do sistema de equações lineares global resultante da equação da função-corrente (equação de Poisson) em nuvens não-estruturadas, e depois resultados estáveis substituindo o método iterativo pelo método direto de decomposição LU. Resultados satisfatórios também são obtidos pelo MQDL-FBR(PHS). O segundo problema abordado foi o da cavidade quadrada com tampa móvel que foi resolvido pelo MQDL-FBR(PHS) para diversos números de Reynolds. Resultados são comparados aos da literatura e discutidos.

Palavras-chave: Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial, Funções de Base Radial, Nuvens de Pontos Estruturadas, Nuvens de Pontos Não-Estruturadas, Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor.

Abstract

This work presents the Differential Quadrature Method with Radial Basis Function (RBF-DQ) in the context of structured and unstructured clouds, without the use of structured points near the boundary or the use of ghosts points, as has been addressed in the literature, along with two alternatives to treat the ill-conditioning of local systems of linear equations for the calculation the weighting coefficients: the RBF(GA)-DQ Stabilized, which proposes the formation of new basis functions from the Gaussian (GA) radial basis functions, and RBF(PHS)-DQ, which uses Polyharmonic Spline (PHS) radial basis functions together with supplementary polynomial basis.

We discussed through numerical experiments on the Poisson equation, the parameters that influence the solutions obtained by RBF-DQ and its variants, such as: shape parameter, cloud refinement, number of points of local support, the supplementary polynomial degree, the successive relaxation method and the LU decomposition for numerical solution of the global linear equations, among others, and it is estimated, *a posteriori*, the order of accuracy of the MQDL-FBR. Comparisons between RBF(GA)-DQ Stabilized and RBF(PHS)-DQ are made and absolute errors are calculated in the first and second derivatives in all points of the domain through a test function. Results show that the RBF(GA)-DQ Stable is still not robust enough for calculation of weights for all types of local supports.

Two applications for the numerical solution of the Navier-Stokes equations using MQDL-FBR are made. First in a natural convection problem in a square cavity where comparisons are made between the RBF(Mq)-DQ with RBF(GA)-DQ Stabilized showing the existence of fluctuations in results caused by using the successive relaxation iterative method for solution of the global linear equations system resulting from the equation of the stream-function (Poisson equation) in unstructured clouds, and then stable results replacing the iterative method by the direct method of LU decomposition. Satisfactory results are also obtained by RBF(PHS)-DQ. The second problem addressed was the driven flow in a square cavity that was solved by RBF(PHS)-DQ for different Reynolds numbers. Results are compared with the literature and discussed.

Keywords: Differential Quadrature Method with Radial Basis Function, Radial Basis Function, Structured Clouds, Unstructured Clouds, Fluid Dynamics and Heat Transfer.

Sumário

Lista de Figuras	iv
Lista de Tabelas	x
Lista de Símbolos	xiii
Lista de Abreviaturas	xvii
1 Introdução	1
1.1 Justificativa	1
1.2 Revisão Bibliográfica	3
1.3 Objetivos	13
1.4 Delineamento do Trabalho	14
2 Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial - MQDL-FBR	17
2.1 Função de Base Radial (FBR)	17
2.2 Formulação do MQDL-FBR	19
2.3 Cálculo dos Coeficientes de Ponderação de Forma Analítica	24
2.3.1 Suportes Locais Unidimensionais	24
2.3.2 Suporte Local Bidimensional	30
2.4 Abordagens Numéricas para Tratar o Mal Condicionamento dos Sistemas Lineares Locais	31
2.4.1 MQDL-FBR(GA) Estabilizado - Mudança de Base	32
2.4.2 MQDL-FBR(PHS) com Polinômios Suplementares	38
3 Testes com a Equação de Poisson	41
3.1 Discretização da Equação de Poisson com o MQDL-FBR	42
3.2 Testes em Nuvens Estruturadas - Suporte Fixo e Centrado	44
3.3 Testes em Nuvens Estruturadas e Não-Estruturadas - Cálculo dos Pesos em Precisão Dupla e Quádrupla	48
3.4 Testes com MQDL-FBR(GA) Estabilizado e MQDL-FBR(PHS) em Nuvens Estruturadas e Não-Estruturadas	51

3.4.1	Variação do Erro Relativo com relação ao parâmetro de forma ϵ no MQDL-FBR(GA) Estabilizado	54
3.4.2	Variação do Erro Relativo com relação ao número de pontos do suporte local n_s	55
3.4.3	Variação do Erro Relativo com relação ao espaçamento médio entre os pontos (refinamento de nuvens)	59
3.4.4	Erros Absolutos nas Primeiras e Segundas Derivadas	64
4	Aplicações do MQDL-FBR em Simulações de Problemas Físicos Envolvendo as Equações de Navier-Stokes	71
4.1	Convecção Natural em uma Cavidade Quadrada	72
4.1.1	Formulação do Problema Físico e Discretização das Equações	72
4.1.2	Resultados com MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado - Método Iterativo de Relaxações Sucessivas	75
4.1.3	Resultados com MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado - Método de Decomposição LU	81
4.1.4	Resultados com o MQDL-FBR(PHS) - Método de Decomposição LU .	83
4.2	Cavidade Quadrada com Tampa Móvel	84
4.2.1	Formulação do Problema Físico e Discretização das Equações	85
4.2.2	Resultados	89
5	Conclusões e Sugestões de Trabalhos Futuros	95
5.1	Conclusões	95
5.2	Propostas para Trabalhos Futuros	97
A	Uma Interpretação do MQDL-FBR - Interpolação e Cálculo dos Pesos	100
B	Cálculo dos Coeficientes de Ponderação Analíticos com MQDL-FBR(GA)	103
C	Função Gamma Incompleta	108
D	Fluxograma do MQDL-FBR(GA) Estabilizado	110
E	Pesos para um suporte defeituoso - Matlab vs Fortran	113
F	Problema de Convecção Natural em uma Cavidade Quadrada	116
G	Parâmetros das Simulações - Problema de Convecção Natural	120
G.1	Parâmetros e Resultados para $Ra = 10^4$	120
G.1.1	Referentes à Tabela 4.1	120
G.1.2	Referentes à Tabela 4.2	121

G.1.3 Referentes à Tabela 4.3	122
G.2 Parâmetros e Resultados para $Ra = 10^6$	123
G.2.1 Referentes à Tabela 4.5	123
G.2.2 Referentes à Tabela 4.6	124
G.2.3 Referentes à Tabela 4.7	125
H Problema Hidrodinâmico - Cavidade Quadrada com Tampa Móvel	126
Referências Bibliográficas	129

Lista de Figuras

1.1	Nuvem de pontos utilizada por Shu <i>et al.</i> (2003). (Retirada de Shu <i>et al.</i> (2003)).	5
1.2	Nuvem de pontos abordada por Ding <i>et al.</i> (2004). (Retirada de Ding <i>et al.</i> (2004)).	5
1.3	Nuvem estruturada adotada por Shu <i>et al.</i> (2005a). (Retirada de Shu <i>et al.</i> (2005a)).	6
1.4	Nuvem não-estruturada usada por Shu <i>et al.</i> (2005a). (Retirada de Shu <i>et al.</i> (2005a)).	6
1.5	Formação dos suportes locais com o escoamento ao longo do eixo horizontal. (Retirada de Chan <i>et al.</i> (2014)).	7
1.6	Formação dos suportes locais com o escoamento formando um ângulo de $\alpha = 18^\circ$ com a horizontal. (Retirada de Chan <i>et al.</i> (2014)).	7
1.7	Geometrias, condições de contorno e discretizações dos problemas abordados por Bararnia <i>et al.</i> (2010). (Retirada de Bararnia <i>et al.</i> (2010)).	8
1.8	Geometrias e condições de contorno impostas nas fronteiras abordadas por Qajarjazi <i>et al.</i> (2010) em suas pesquisas com MQDL-FBR. (Retirada de Qajarjazi <i>et al.</i> (2010)).	9
1.9	Geometrias e condições de contorno de temperatura impostas nas fronteiras abordadas por Soleimani <i>et al.</i> (2010). (Retirada de Soleimani <i>et al.</i> (2010)).	10
2.1	Gráfico da FBR Mq para alguns valores de ϵ	19
2.2	Gráfico da FBR GA para alguns valores de ϵ	19
2.3	Gráfico da FBR MqI para alguns valores de ϵ	19
2.4	Gráfico da FBR QI para alguns valores de ϵ	19
2.5	Gráfico da FBR PHS ₁ para alguns valores de p	20
2.6	Gráfico da FBR PHS ₂ para alguns valores de p	20
2.7	Suporte local em torno de um ponto de referência no interior do domínio	21
2.8	Suporte local em torno de um ponto de referência na fronteira do domínio	22
2.9	Suporte local unidimensional centrado	24
2.10	Suporte local unidimensional descentrado	27
2.11	Suporte local em torno de um ponto de referência	30

2.12	Erros relativos nos coeficientes de ponderação de primeiras derivadas unidimensionais para vários n_s variando-se ϵ	36
2.13	Erros relativos nos coeficientes de ponderação de segundas derivadas unidimensionais para vários n_s variando-se ϵ	36
2.14	a) Suporte local oriundo de uma NPNE ($n_s = 15$), b) Suporte local oriundo de uma NPNE ($n_s = 36$) e c) Suporte local oriundo de uma NPE uniforme ($n_s = 21$)	37
2.15	Comparação entre os pesos de primeiras e segundas derivadas calculados no Matlab® e no Fortran para o suporte da Figura 2.14a)	38
2.16	Comparação entre os pesos de primeiras e segundas derivadas calculados no Matlab® e no Fortran para o suporte da Figura 2.14b)	38
2.17	Comparação entre os pesos de primeiras e segundas derivadas calculados no Matlab® e no Fortran para o suporte da Figura 2.14c)	38
3.1	Gráfico da função u_1	43
3.2	Gráfico da função u_2	43
3.3	Gráfico da função u_3	43
3.4	Gráfico da função u_4	43
3.5	Suportes locais fixos utilizados nos testes numéricos	44
3.6	Erro relativo em função de ϵ com o MQDL-FBR(Mq) para os estêncéis de teste	46
3.7	Erro relativo em função de ϵ com o MQDL-FBR(GA) para os estêncéis de teste	46
3.8	Erro relativo em função de ϵ com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado para os estêncéis de teste	46
3.9	Variação do erro relativo com o refinamento de nuvem estruturada, h , para os estêncéis 1, 2 e 3	47
3.10	Nuvem de pontos estruturada (NPE): $61 \times 61 = 3721$ pontos	48
3.11	Nuvem de pontos não-estruturada (NPNE): 3738 pontos	48
3.12	Formação da NPNE a partir de uma malha não-estruturada triangular	49
3.13	Erro relativo obtido variando o parâmetro de forma c para diversas nuvens de pontos - Solução analítica u_1 - Precisão dupla	50
3.14	Erro relativo obtido variando o parâmetro de forma c para diversas nuvens de pontos - Solução analítica u_3 - Precisão dupla	50
3.15	Erro relativo obtido variando o parâmetro de forma c para diversas nuvens de pontos - Solução analítica u_1 - Precisão quádrupla	51
3.16	Erro relativo obtido variando o parâmetro de forma c para diversas nuvens de pontos - Solução analítica u_3 - Precisão quádrupla	51
3.17	Erro relativo em função do parâmetro de forma ϵ para NEs e NNEs - Solução analítica u_1 - MQDL-FBR(GA) Estabilizado	52
3.18	Erro relativo em função do parâmetro de forma ϵ para NEs e NNEs - Solução analítica u_3 - MQDL-FBR(GA) Estabilizado	52

3.19 Exemplo de matriz global $[W]$ gerada para uma NPE de 65×65 pontos e $n_s = 17$	53
3.20 Exemplo de matriz global $[W]$ gerada para uma NPNE de 7284 pontos e $n_s = 17$	53
3.21 Armazenamento de $[W]$ para a NPE de 65×65 pontos e $n_s = 17$	54
3.22 Armazenamento de $[W]$ para a NPNE de 7284 pontos e $n_s = 17$	54
3.23 Variação do Erro Relativo com relação a ϵ para a NPE de 85×85 pontos e $n_s = 17$	54
3.24 Variação do Erro Relativo com relação a ϵ para a NPNE de 7284 pontos e $n_s = 17$	54
3.25 Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_1	56
3.26 Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2, u_3 e u_4 para NPE 65×65 pontos - MQDL-FBR(GA) Estabilizado	57
3.27 Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2, u_3 e u_4 para NPNE 4230 pontos - MQDL-FBR(GA) Estabilizado	57
3.28 Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2, u_3 e u_4 para NPE 65×65 pontos - $\varphi(r) = r^3$	58
3.29 Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2, u_3 e u_4 para NPNE 4230 pontos - $\varphi(r) = r^3$	58
3.30 Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2, u_3 e u_4 para NPE 65×65 pontos - $\varphi(r) = r^7$	58
3.31 Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2, u_3 e u_4 para NPNE 4230 pontos - $\varphi(r) = r^7$	58
3.32 Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPE para diversos n_s - MQDL-FBR(GA) Estabilizado	60
3.33 Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPNE para diversos n_s - MQDL-FBR(GA) Estabilizado	60
3.34 Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPE para diversos n_s	61
3.35 Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPNE para diversos n_s	61
3.36 Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPE para diversos n_s	62
3.37 Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPNE para diversos n_s	62
3.38 Relação entre o tempo de Processamento Total no MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) em NPE	64
3.39 Relação entre o tempo de Processamento Total no MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) em NPNE	64
3.40 Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial x$ para NPE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado	65
3.41 Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial x^2$ para NPNE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado	65
3.42 Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial y$ para NPNE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado	66
3.43 Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial y^2$ para NPNE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado	66

3.44	Suporte defeituoso encontrado em NPE 45×45 pontos e $n_s = 9$	66
3.45	Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial x$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado	67
3.46	Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial x^2$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado	67
3.47	Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial y$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado	68
3.48	Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial y^2$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado	68
3.49	Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial x$ para NPE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando MQDL-FBR(PHS)	69
3.50	Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial x^2$ para NPE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(PHS)	69
3.51	Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial y$ para NPE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(PHS)	69
3.52	Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial y^2$ para NPNE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(PHS)	69
3.53	Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial x$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(PHS)	70
3.54	Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial x^2$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(PHS)	70
3.55	Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial y$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(PHS)	70
3.56	Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial y^2$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(PHS)	70
4.1	Geometria e condições de contorno para o problema de convecção natural.	73
4.2	Fluxograma utilizado para obter as soluções do problema de convecção natural	76
4.3	Linhas de corrente para a NPNE de 13931 pontos e $n_s = 49$ - $Ra = 10^4$	78
4.4	Isotérmicas para a NPNE de 13931 pontos e $n_s = 49$ - $Ra = 10^4$	78
4.5	Comparação na evolução temporal do número de Nusselt Médio, Nu , para o MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE e MQDL-FBR(Mq) em NPNE com $n_s = 17$ e $Ra = 10^4$	79
4.6	Comparação na evolução temporal do número de Nusselt Médio, Nu , para o MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE e MQDL-FBR(Mq) em NPNE - $Ra = 10^6$	80
4.7	Variação do número de Nusselt Médio em função do tempo com o MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $tol = 10^{-6}, 10^{-5}$ e 10^{-7}	81
4.8	Linhas de corrente para a NPE de 93×93 pontos e $n_s = 21$ - $Ra = 10^6$	81
4.9	Isotérmicas para a NPE de 93×93 pontos e $n_s = 21$ - $Ra = 10^6$	81

4.10	Comparação na evolução temporal do número de Nusselt Médio, Nu , para o MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE e MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $Ra = 10^6$ - Decomposição LU	82
4.11	Linhas de Corrente ψ - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 a).	85
4.12	Isotérmicas θ - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 b).	85
4.13	Curvas de nível para velocidade U - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 c). .	85
4.14	Curvas de nível para velocidade V - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 d). .	85
4.15	Curvas de nível para vorticidade ω - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 e). .	86
4.16	Nuvem de Pontos de Não-Estruturada de 15739 pontos	86
4.17	Resultados de Davis (1983) para $Ra = 10^6$: a) linhas de corrente; b) isotérmicas; c) curvas de nível U ; d) curvas de nível V , e) curvas de nível da vorticidade. (Adaptada de Davis (1983))	87
4.18	Geometria e condições de contorno para o problema hidrodinâmico da cavidade quadrada com tampa móvel	88
4.19	Fluxograma utilizado para obter as soluções do problema da cavidade quadrada com tampa móvel	90
4.20	Perfis de velocidade U na linha central vertical da cavidade - NPE	91
4.21	Perfis de velocidade V na linha central horizontal da cavidade - NPE	91
4.22	Perfis de velocidade U na linha central vertical da cavidade - NPNE	92
4.23	Perfis de velocidade V na linha central horizontal da cavidade - NPNE	92
4.24	Linhas de Corrente - $Re = 400$	92
4.25	Linhas de Corrente para $Re = 1000$	92
4.26	Linhas de Corrente para $Re = 3200$	92
4.27	Curvas de nível para Vorticidade - $Re = 400$	93
4.28	Curvas de nível para Vorticidade - $Re = 1000$	93
4.29	Curvas de nível para Vorticidade - $Re = 3200$	93
4.30	Curvas de nível para Velocidade U - $Re = 400$	93
4.31	Curvas de nível para Velocidade U - $Re = 1000$	93
4.32	Curvas de nível para Velocidade U - $Re = 3200$	93
4.33	Curvas de nível para Velocidade V - $Re = 400$	93
4.34	Curvas de nível para Velocidade V - $Re = 1000$	93
4.35	Curvas de nível para Velocidade V - $Re = 3200$	93
4.36	Linhas de Corrente obtidas por Ghia <i>et al.</i> (1982). a) $Re = 400$, b) $Re = 1000$ e c) $Re = 3200$ (adaptadas de Ghia <i>et al.</i> (1982))	94
4.37	Curvas de nível para vorticidade obtidas por Ghia <i>et al.</i> (1982). a) $Re = 400$, b) $Re = 1000$ e c) $Re = 3200$ (adaptadas de Ghia <i>et al.</i> (1982))	94
B.1	Suporte local em torno de um nó de referência	103

D.1	Fluxograma do MQDL-FBR(GA) Estabilizado	112
E.1	Coeficientes de ponderação calculados com o programa em Matlab® (Lehto, 2014) para um suporte defeituoso - etapas naturais do algoritmo	114
E.2	Coeficientes de ponderação calculados com o programa em Matlab® (Lehto, 2014) para um suporte defeituoso - etapas diferentes das naturais	115

Lista de Tabelas

2.1	Algumas escolhas comuns para as FBR - $\varphi(r) = \varphi(\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_k\ _2)$	18
2.2	Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 0,50$	28
2.3	Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 1$	29
2.4	Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 10$	29
2.5	Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 100$	29
2.6	Coeficientes de ponderação obtidos para vários n_s e $c \rightarrow \infty$ para a primeira derivada ($w_{c \rightarrow \infty}^{1x}$)	30
2.7	Coeficientes de ponderação obtidos para vários n_s e $c \rightarrow \infty$ para a segunda derivada ($w_{c \rightarrow \infty}^{2x}$)	30
2.8	Polinômios suplementares em 2-d	40
3.1	Ordem de precisão obtidas para os estêncis 1, 2 e 3	47
3.2	Maior grau permissível q do polinômio suplementar por faixas de n_s	57
3.3	Nuvens de Pontos Estruturadas e Não-Estruturadas	59
3.4	Ordem de Precisão do MQDL-FBR(GA) Estabilizado para vários n_s em NPEs	60
3.5	Ordem de Precisão do MQDL-FBR(GA) Estabilizado para vários n_s em NPNEs	61
3.6	Ordem de Precisão do MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^3$ para vários n_s em NPE	62
3.7	Ordem de Precisão do MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^3$ para vários n_s em NPNE	62
3.8	Ordem de Precisão do MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^7$ para vários n_s em NPE	63
3.9	Ordem de Precisão do MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^7$ para vários n_s em NPNE	63
3.10	Tempo de processamento total T_{GA} e T_{PHS} , em segundos (s), para alguns n_s em NEs e NNEs	63
3.11	Coordenadas do suporte deficiente da Figura 3.44	66
4.1	Resultados com o MQDL-FBR(Mq) em NPEs para $Ra = 10^4$	77

4.2	Resultados com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE para $Ra = 10^4$	77
4.3	Resultados com o MQDL-FBR(Mq) em NPNEs para $Ra = 10^4$	78
4.4	Parâmetros e resultados obtidos para as simulações para $Ra = 10^6$ - SoR/SuR	80
4.5	Resultados obtidos para as simulações para $Ra = 10^6$ - Decomposição LU	82
4.6	Resultados para o número de Nusselt Médio para diversas NPE e vários n_s	83
4.7	Resultados para o número de Nusselt Médio para diversas NPNE e vários n_s	84
4.8	Parâmetros relacionados com as nuvens de pontos e cálculo dos pesos	90
4.9	Parâmetros e Resultados obtidos em cada experimentos numérico	91
B.1	Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 0,50$	106
B.2	Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 1$	106
B.3	Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 10$	107
B.4	Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 100$	107
E.1	Coordenadas do suporte deficiente da Figura 3.44	114
G.1	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPE para $n_s = 9$ e $n_s = 12$	120
G.2	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPE para $n_s = 17$ e $n_s = 21$	121
G.3	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPE para $n_s = 25$ e $n_s = 49$	121
G.4	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE para $n_s = 12$ e $n_s = 17$	121
G.5	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE para $n_s = 21$ e $n_s = 25$	122
G.6	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE para $n_s = 49$	122
G.7	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $n_s = 9$ e $n_s = 17$	122
G.8	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $n_s = 21$ e $n_s = 25$	123
G.9	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $n_s = 49$	123
G.10	Parâmetros para as simulações com $Ra = 10^6$ - Decomposição LU	123
G.11	Maior grau dos polinômios suplementares em NPE	124
G.12	Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(PHS) em NPE	124

G.13 Maior grau dos polinômios suplementares em NPNE	125
G.14 Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(PHS) em NPNE	125

Lista de Símbolos

Símbolos Latinos

$[A]$	Matriz das FBRs (Local)
$[B]$	Matriz que contem um conjunto de vetores do espaço nulo
$\{b\}$	Vetor segundo membro do sistema de equações lineares local
c	Parâmetro de forma das FBRs
c_p	Calor específico do fluido a pressão constante
f	Função
f_r	Parâmetro de relaxação
$\{F\}$	Vetor segundo membro global
g	Aceleração da gravidade
Gr	Número de Grashof
h	Distância entre pontos (igualmente espaçados)
h_{medio}	Distância média entre os pontos da discretização
H	Comprimento de referência
$itermax$	Número máximo de iterações
\mathcal{K}	Número de condição de uma matriz
k_u	Quantidade de diagonais superiores da matriz
k_l	Quantidade de diagonais inferiores da matriz
L	Operador diferencial
$[L]$	Matriz triangular inferior com valores da diagonal principal unitários
l	Ordem de precisão
lb	Largura de banda da matriz global
$\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$	Espaço das matrizes reais $n \times n$
n_s	Número de pontos do suporte local
\mathbb{N}	Conjunto dos números naturais
\mathbb{N}_0	Conjunto dos números naturais incluindo zero
N	Número total de pontos da discretização
N_{int}	Número de pontos internos da discretização
N_x	Número de pontos na direção x

N_y	Numero de pontos na direção y
Nu	Número de Nusselt Médio
$média \ Nu$	Média do número de Nusselt Médio
Nu_L	Número de Nusselt Local
p	Pressão
p_c	Polinômio característico
P	Pressão adimensional
$[P]$	Matriz polinomial
$[P_p]$	Matriz permutação
Pr	Número de Prandtl
pol	um certo polinômio ou bases polinomiais suplementares
r	Norma euclidiana entre dois pontos
\mathbb{R}	Conjunto dos números reais
R^2	Coeficiente de determinação do ajuste de curvas
Ra	Número de Rayleigh
Re	Número de Reynolds
$s(\mathbf{x})$	Interpolante com FBRs
t	Tempo dimensional
T_0	Temperatura de referência
T_h	Temperatura da parede quente
T_c	Temperatura da parede fria
TP	Tempo de processamento total
T_{GA}	Tempo de processamento total do MQDL-FBR(GA) Estabilizado
T_{PHS}	Tempo de processamento total do MQDL-FBR(PHS)
tol	Tolerância do Método de Relaxações Sucessivas
u	Solução analítica da Eq. de Poisson e velocidade dimensional na direção x
u_1	Solução analítica da Eq. de Poisson
u_2	Solução analítica da Eq. de Poisson
u_3	Solução analítica da Eq. de Poisson
u_4	Solução analítica da Eq. de Poisson
U	Velocidade adimensional - direção x
U_0	Velocidade de referência
$\{u\}$	Vetor solução numérica
$[U]$	Matriz triangular superior
v	Velocidade dimensional - direção y
V	Velocidade adimensional na direção y

x	Coordenada espacial
X	Coordenada espacial adimensional na direção x
\mathbf{x}	Vetor do espaço vetorial \mathbb{R}^d
y	Coordenada espacial
Y	Coordenada espacial adimensional na direção y
w	Coeficiente de ponderação (pesos)
$\{w\}$	Vetor dos coeficientes de ponderação
$[W]$	Matriz global

Símbolos Gregos

α	Coeficiente de difusão térmica
β	Coeficiente de expansão volumétrica do fluido
$\ \varepsilon\ $	Erro relativo
ε_a	Erro absoluto
$\ \delta\ $	Diferença relativa
$\delta\tau$	Incremento de tempo
θ	Temperatura adimensional
ϵ	Parâmetro de forma da FBR
κ	Condutividade térmica
λ	Autovalores
μ	Viscosidade dinâmica do fluido
ρ	Massa específica do fluido
τ	Tempo adimensional
v	Viscosidade cinemática do fluido
φ	Função básica e Função de Base Radial
Φ	Função de Base Radial
ψ	Função Corrente
ω	Vorticidade
γ	Função especial Gamma Incompleta
Γ	Função especial Gamma

Subscritos/Sobrescritos

d	Dimensão do espaço vetorial
i	Indexação global
n	Representa uma iteração
j, k	Indexação local
m	Grau da derivada
q	Grau do polinômio suplementar
q_i	Grau do polinômio suplementar (pontos internos)
q_f	Grau do polinômio suplementar (pontos de fronteira)
p	Grau da FBR (suaves por partes)

Lista de Abreviaturas

BE	<i>FBR Bessel</i>
Cb	<i>FBR Cúbica</i>
DF	<i>Diferenças Finitas</i>
EDP	<i>Equação Diferencial Parcial</i>
FBR	<i>Função de Base Radial</i>
GA	<i>FBR Gaussiana</i>
MDF	<i>Método de Diferenças Finitas</i>
MEF	<i>Método de Elementos Finitos</i>
MKL	<i>Mathematical Kernel Library</i>
Mq	<i>FBR Multiquádrica</i>
MqI	<i>FBR Multiquádrica Inversa</i>
MQD	<i>Método de Quadratura Diferencial</i>
MQDL-FBR	<i>Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial</i>
MVF	<i>Método de Volumes Finitos</i>
NE	<i>Nuvem Estruturada</i>
NPE	<i>Nuvem de Pontos Estruturada</i>
NNE	<i>Nuvem Não-Estruturada</i>
NPNE	<i>Nuvem de Pontos Não-Estruturada</i>
PHS	<i>FBR Poliharmônica Spline</i>
QI	<i>FBR Quádrica Inversa</i>
RCM	<i>Reverse Cuthill-Mckee</i>
SC	<i>FBR Suporte Compacto</i>
SELG	<i>Sistema de Equações Lineares Global</i>
SELL	<i>Sistema de Equações Lineares Local</i>
SoR	<i>Método Iterativo de Sobre-Relaxações Sucessivas</i>
SuR	<i>Método Iterativo de Sub-Relaxações Sucessivas</i>
SVD	<i>Decomposição em Valores Singulares</i>
TPS	<i>FBR Thin-Plate Spline</i>

Capítulo 1

Introdução

1.1 Justificativa

O surgimento de computadores com cada vez mais poder de processamento e armazenamento de dados possibilitou, dentre muitos usos e aplicações importantes, tratar problemas complexos no âmbito da engenharia, física e matemática. Problemas cujas soluções analíticas não são conhecidas puderam ser investigados numericamente por meio de uma quantidade considerável de cálculos e operações. Dessa maneira a simulação numérica de modelos matemáticos constitui uma ferramenta relevante para progressos em ciência pura e em aplicações no setor produtivo (acadêmico e industrial).

Existem várias formas de se abordar um determinado modelo físico: experimentalmente em laboratório, com equipamentos adequados e que sejam os mais fidedignos possíveis nas captações das grandezas envolvidas; de forma analítica, ou seja, encontrar uma solução em uma forma matemática que represente todo o problema; utilizando métodos numéricos com que se aproximem suas soluções, com a melhor precisão possível, das verdadeiras.

Simulações feitas em laboratórios são mais fiéis a modelos físicos reais, porém tal metodologia possui alto custo financeiro e, em alguns casos, não podem ser realizadas devido a dificuldades de implementações. A abordagem analítica restringe-se a problemas mais simples e que poucas vezes tem representatividade física real. Maliska (2010) afirma que "*as soluções analíticas não devem ser descartadas, e uma das suas importantes aplicações é, exatamente, para validar casos limites de modelos numéricos e auxiliar no desenvolvimento de métodos numéricos mais robustos*".

Já os métodos numéricos apresentam uma grande vantagem frente aos experimentais e analíticos, pois uma gama enorme de aplicações podem ser feitas, a baixo custo, para vários tipos de geometrias, condições de contorno, tipos de equações e sistemas de equações, dentre outros. Cuidados importantes devem ser tomados para que se obtenha uma boa aproximação das

soluções, como: a discretização do domínio (geração de malha ou nuvens de pontos), escolha dos métodos numéricos de aproximação das equações, abordagem das condições de contorno, escolha dos métodos numéricos de avanço temporal, ordem de precisão, refinamento de malha, métodos numéricos para soluções de sistemas algébricos e, em essencial, conhecimento físico e domínio da formulação matemática do problema.

No âmbito das Equações Diferenciais Parciais (EDPs), em problema de valor inicial e/ou de contorno, existem diversos tipos de métodos numéricos de aproximação dos quais os mais tradicionais são o Método de Diferenças Finitas (MDF), o Método de Elementos Finitos (MEF) e o Método de Volumes Finitos (MVF), que são métodos eulerianos. Segundo Maliska (2010), na engenharia mecânica, especificamente na área de fluidos, o método mais utilizado é o MDF, que frequentemente está vinculado a um sistema de coordenadas ortogonais. Já o MEF inicialmente foi empregado na área estrutural em problemas de elasticidade. Sua abordagem permite discretizar o domínio em malhas estruturadas, com elementos de barra, triangulares, quadrilaterais, tetraédricos ou hexaédricos ou mesmo em malhas não-estruturadas de elementos, fato que permite o tratamento de geometrias complexas. No MVF existem duas maneiras de se obter as equações aproximadas. A primeira é a realizar balanços das propriedades físicas em questão nos volumes elementares, ou volumes finitos, e a segunda é integrar sobre o volume elementar as equações na forma conservativa, no espaço e no tempo (Maliska (2010)). Existem ainda outros métodos de aproximação que também são empregados em problemas da engenharia mecânica, dentre eles, o Método de Vórtices, que é um método lagrangiano, e também o Método de Elementos de Contorno.

Nessa mesma vertente, o Método de Quadratura Diferencial (MQD) surgiu como uma alternativa para aproximar EDPs. Pelo MQD um operador diferencial é aproximado por uma soma de funções com seus respectivos coeficientes de ponderação, idéias que se baseiam na quadratura integral. Inicialmente, o MQD tinha caráter global e os coeficientes de ponderação eram calculados com funções polinomiais ou trigonométricas. Esse fato restringiu o uso do método para um número relativamente baixo de pontos da discretização do domínio. Uma classe de funções de interpolação, conhecidas como Funções de Base Radial (FBRs) ou Funções Radiais de Base, também foram empregadas para se obter soluções de EDPs. Entretanto, também era um método global e restrito a discretizações com algumas centenas de pontos. A integração entre o MQD e as FBR resultou em um método de colocação de caráter local denominado por Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial (MQDL-FBR) (Shu *et al.*, 2003). Vários autores também o denominam por Método de Diferenças Finitas gerado pelas Funções de Base Radial (em inglês Radial basis function-generated finite difference - RBF-FD) (Wright e Fornberg, 2006; Bayona *et al.*, 2010; Flyer *et al.*, 2016a,b).

O MQDL-FBR é flexível, versátil e relativamente de fácil implementação computacional e vem se mostrando adequado para o tratamento de diversos problemas físicos na engenharia. Uma vantagem do MQDL-FBR é que os pontos do domínio podem ser distribuídos de modo

estruturado (malhas estruturadas), não-estruturado (malhas não-estruturadas) ou até mesmo de forma aleatória, e, por ter uma abordagem local, permite discretizar o domínio com uma quantidade de pontos equivalente a dos métodos tradicionais (MDF, MEF, MVF). Esse fato o classifica como método sem malha, pois basta uma nuvem de pontos de discretização para que o MQDL-FBR possa ser aplicado. Outra vantagem é que com a mesma formulação podem-se calcular operadores e derivadas parciais de altas ordens e para diversas dimensões espaciais. Essas utilidades o fazem bastante atrativo, porém ele ainda carece de estudos para torná-lo mais robusto e aplicável em diversas situações.

Dessa forma, tendo em vista as potenciais vantagens do MQDL-FBR listadas anteriormente, pretende-se, neste trabalho, estudar no contexto de Nuvens de Pontos Estruturadas (NPEs), ou somente Nuvens Estruturadas (NEs), e Nuvens de Pontos Não-Estruturadas (NP-NEs) ou Nuvens Não-Estruturadas (NNEs), características do método que influenciam os resultados numéricos como: abordagens para o cálculo dos coeficientes de ponderação, aumento de pontos da discretização do domínio (refinamento de nuvem) e aumento do número de pontos de suporte local, dentre outros; e, logo em seguida, aplicá-lo em problemas básicos que envolvam dinâmica dos fluidos e transferência de calor.

1.2 Revisão Bibliográfica

As FBRs, em especial a Multiquádrica (Mq), foram aplicadas primeiramente por Hardy (1971) para interpolação de superfícies topográficas. Franke (1982), em um estudo detalhado, mostrou que essas funções apresentam, para interpolação de dados dispersos, melhor precisão, estabilidade, eficiência, memória requerida e simplicidade de implementação frente a outros métodos testados, e que a Mq se destaca das demais FBR. Posteriormente, esses tipos de funções se tornaram também uma eficiente ferramenta para a solução de EDPs.

O uso de FBRs para solução de EDPs emergiu como uma ferramenta importante nas últimas décadas. A principal razão é sua potencial capacidade de lidar com qualquer tipo de discretização. Kansa (1990a,b) foi o primeiro a utilizá-las. O método de colocação de Kansa (1990b) é um verdadeiro esquema sem malha (*meshfree*), mas de abordagem global. De acordo com o autor, a Mq, por ser continuamente diferenciável e integrável, e ainda capaz de representar funções com alta precisão, foi escolhida e aplicada em esquemas para a aproximação espacial em EDPs elípticas, parabólicas e hiperbólicas. Seus testes foram em equações de advecção-difusão linear, equação de von Neumann unidimensional de onda de choque e equação de Poisson bidimensional. Seus resultados mostraram que esses esquemas são muito precisos e que podem ser mais eficientes que os de diferenças finitas com um número menor de operações para alcançar o mesmo grau de precisão. Porém, o método desenvolvido por Kansa (1990b) está limitado a um número relativamente baixo de pontos da discretização (algumas centenas), pois resulta em

sistemas de equações globais de baixa esparcidez e extremamente mal-condicionado.

O MQD foi proposto por Bellman *et al.* (1972) e aproxima derivadas parciais e operadores diferenciais de funções suaves. Consiste em aproximar uma derivada de uma função em um ponto, chamado de referência, por um somatório ponderado de valores da função em um grupo de pontos vizinhos, incluindo o próprio ponto de referência. Os coeficientes de ponderação são calculados, de acordo com Shu (2000), com funções de base polinomiais ou trigonométricas. Porém, essa abordagem também tem caráter global, com o sistema de equações resultante de baixa esparcidez e mal-condicionado e, portanto, fica restrita a uma quantidade relativamente pequena de pontos de discretização.

Abordagens globais têm sido aplicadas com sucesso, mas elas restringem-se a uma quantidade pequena pontos. Versões locais têm sido desenvolvidas para superar estes inconvenientes. O Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial (MQDL-FBR) foi proposto há alguns anos e parece ser muito promissor para o tratamento de problemas com discretizações complexas (milhares de pontos). Segundo Bayona *et al.* (2010) a idéia do método foi concebida independentemente por Shu *et al.* (2003), Wright (2003) e Cecil *et al.* (2004).

Em seu primeiro trabalho nessa linha, Shu *et al.* (2003) aplicaram o MQDL-FBR para aproximar as derivadas espaciais das equações que governam o movimento de um fluido dentro de uma cavidade, equação da continuidade, equação de Navier-Stokes e da energia na formulação vorticidade, função corrente e temperatura, em um problema de convecção natural bidimensional. Esse é um problema teste clássico na engenharia mecânica. O parâmetro de forma da FBR Multiquádrática era variável e seu valor proporcional ao diâmetro do suporte local. A discretização do domínio foi feito como na Figura 1.1, e uma estrutura organizada de pontos próximos ao contorno foi usada para garantir a ordem de aproximação (diferenças finitas para frente de segunda ordem) no cálculo da vorticidade e da temperatura (paredes adiabáticas) nas fronteiras (Condição de Neumann). A obtenção da solução numérica das equações foi obtida via método de Relaxações Sucessivas (em inglês Successive Over-Relaxation - SOR). Os resultados obtidos pelos autores encontraram-se próximos aos de Davis (1983), que empregou o MDF de segunda ordem centrado.

Ding *et al.* (2004) aplicaram um esquema híbrido de Diferenças Finitas (DF) e MQDL-FBR para simular o escoamento viscoso em torno de um cilindro circular com base na formulação vorticidade e função corrente das equações de conservação da massa e da quantidade de movimento. O MQDL-FBR foi aplicado na região em que os fenômenos mais importantes ocorrem (pontos mais próximos ao cilindro), enquanto o MDF nos outros pontos do domínio. Foram adotadas dois tipos de discretizações, como pode ser visto na Figura 1.2. Os valores do número de Reynolds testados foram 10, 20 e 40, no qual vórtices estacionários se formam ao redor do cilindro, e Reynolds 100 e 200, em que ocorre geração e desprendimento de vórtices laminares no escoamento (esteira de von Kármán), encontrando-se resultados satisfatórios comparados com a literatura.

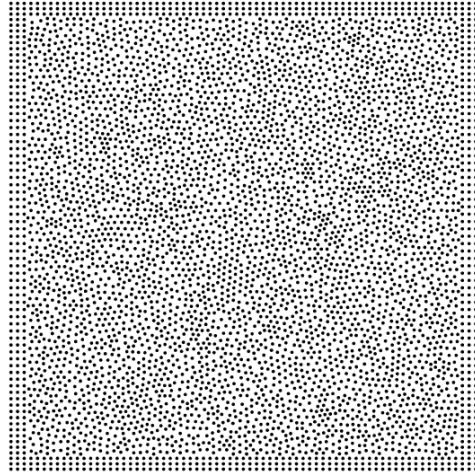


Figura 1.1: Nuvem de pontos utilizada por Shu *et al.* (2003). (Retirada de Shu *et al.* (2003)).

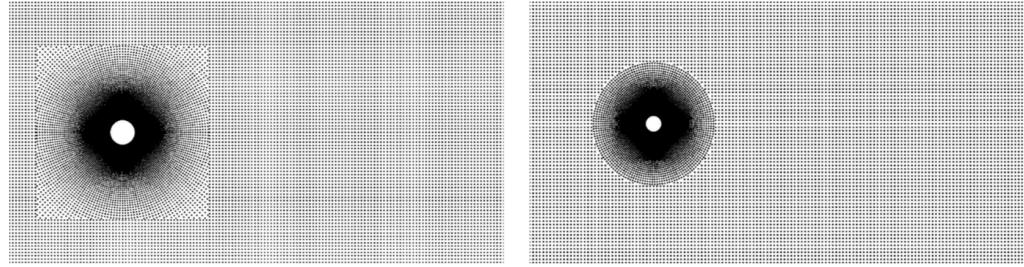


Figura 1.2: Nuvem de pontos abordada por Ding *et al.* (2004). (Retirada de Ding *et al.* (2004)).

Em experimentos numéricos, Ding *et al.* (2005) fizeram estimativas de erros (*a posteriori*) para o MQDL-FBR através da equação de Poisson, em um domínio bidimensional quadrado e a discretização feita por uma malha equidistante. Concluíram que o erro estimado dependia de três parâmetros: refinamento da malha (h), número de pontos do suporte local (n_s) e do parâmetro de forma da FBR (c), no caso a Mq. Quatro soluções analíticas foram usadas como referência. Para estimar a relação entre o erro relativo e os três parâmetros, fixava-se um e variavam-se os restantes. No entanto, os autores restringiram muito o intervalo de variação do parâmetro de forma, que teve como intuito evitar Sistemas de Equações Lineares Locais (SELLs) para o cálculo dos coeficientes de ponderação mal-condicionados, e isso impossibilitou a identificação de fenômenos importantes, tais como a possível existência de valores ótimos de c independentes do refinamento de malha h , que foi observado posteriormente por Bayona *et al.* (2010).

Shu *et al.* (2005b) resolveram problemas de escoamentos incompressíveis, permanentes e não-permanentes com o MQDL-FBR. Os três casos testes (*benchmarks*) bidimensionais testados foram: cavidade quadrada com velocidade constante na tampa superior, escoamento em torno de um cilindro circular único com números de Reynolds 100 e 200 e o escoamento entre

dois cilindros circulares desalinhados.

Um esquema que visa capturar as influências do escoamento a *montante*, ignorando os efeitos a *jusante*, (em inglês *upwind*) para o MQDL-FBR foi explorado por Shu *et al.* (2005a) para simular um escoamento bidimensional supersônico compressível com ondas de choque em um canal simétrico com contração, em que a discretização do domínio foi feita com uma nuvem de pontos estruturada (malha uniforme, Figura 1.3), e em um problema de tubo de choque em que uma nuvem de pontos não-estruturada foi gerada (Figura 1.4). Os autores concluíram que nessas abordagens foi possível capturar os fenômenos físicos do escoamento compressível de forma qualitativa e quantitativa.

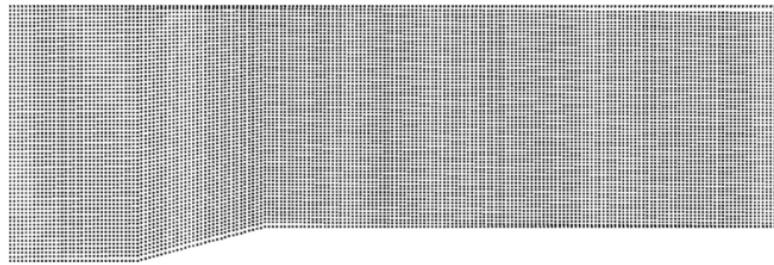


Figura 1.3: Nuvem estruturada adotada por Shu *et al.* (2005a). (Retirada de Shu *et al.* (2005a)).

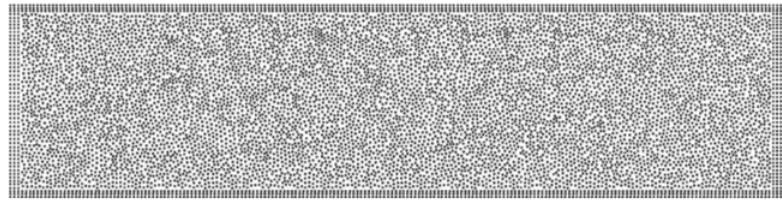


Figura 1.4: Nuvem não-estruturada usada por Shu *et al.* (2005a). (Retirada de Shu *et al.* (2005a)).

Outros trabalhos também abordaram esquemas do tipo *upwind* para o MQDL-FBR. Shen (2010) comparou o MQDL-FBR com o método de colocação global com FBRs (método de Kansa (1990a,b)) e o MDF em problemas unidimensionais dos quais soluções exatas eram conhecidas, sendo testados suportes centrados e do tipo *upwind*. O autor destacou que, embora o método global tenha sido mais preciso que os outros dois, o MQDL-FBR torna-se mais estável que o método de colocação com FBRs global quando o parâmetro de forma da M_q diminui, tornando-o mais atraente em problemas mais complexos e com uma grande quantidade de pontos.

Chan *et al.* (2014) propuseram um esquema *upwind* do MQDL-FBR para solução de escoamento bidimensional com o termo convectivo dominante. Os suportes locais foram formados

a partir da função de distância euclidiana modificada de acordo com a direção do escoamento e com um parâmetro que controla o efeito convectivo. Os demais pontos do suporte local são deslocados a montante do ponto de referência tornando-o parecido com cometas, conforme as Figuras 1.5 e 1.6. Assim sendo, o efeito de capturar as influências do escoamento a montante é naturalmente incorporado no cálculo dos coeficientes de ponderação obtidos através do MQDL-FBR. Dois problemas foram tratados pelos autores: equação convecção-difusão bidimensional com vários números de Peclet e o problema de magnetohidrodinâmica com números de Hartmann elevados. Os resultados com esquemas *upwind* para a equação de convecção-difusão mostraram-se melhores que os esquemas de suportes centrados, especialmente para elevados números de Peclet. No problema de magnetohidrodinâmica, precisão semelhante foi alcançada para baixo número de Hartmann, e melhores resultados foram obtidos para elevados números de Hartmann.

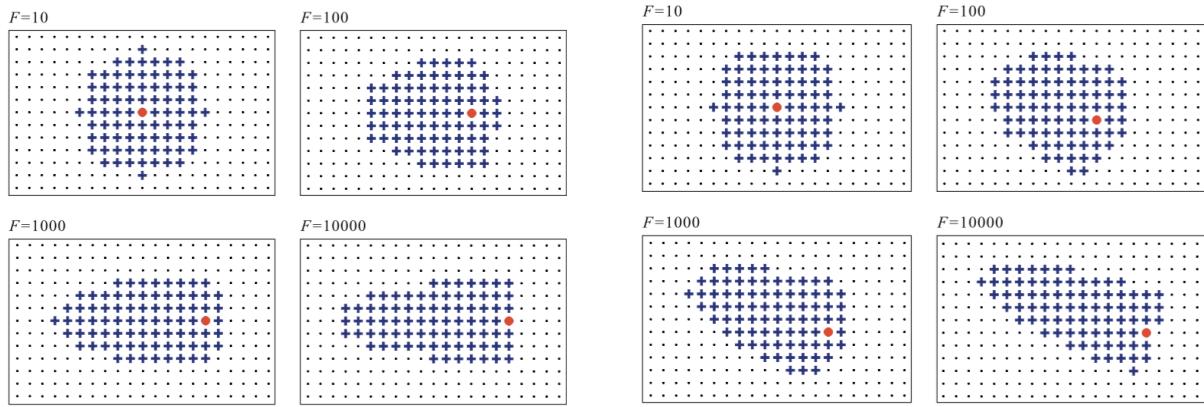


Figura 1.5: Formação dos suportes locais com o escoamento ao longo do eixo horizontal. (Retirada de Chan *et al.* (2014)).

Figura 1.6: Formação dos suportes locais com o escoamento formando um ângulo de $\alpha = 18^\circ$ com a horizontal. (Retirada de Chan *et al.* (2014)).

Ding *et al.* (2006) estenderam o MQDL-FBR para problemas de escoamento incompressível tridimensional. Testes foram realizados no caso do escoamento em uma cavidade cúbica (cubo) onde ocorre a translação da tampa superior com velocidade constante. Também foi usada uma malha estruturada equidistante próxima à fronteira para o cálculo das derivadas normais das velocidades (condição de não-porosidade das paredes) - condições de contorno do tipo Neumann. As equações da Continuidade e de Navier-Stokes não-permanente e adimensionalizadas foram resolvidas com variáveis primitivas, e um esquema de passo fracionado foi usado para o avanço no tempo.

O MQDL-FBR vem sendo aplicado em outras áreas da engenharia mecânica como, por exemplo, para analisar vibrações em membranas (Wu *et al.* (2007)). A equação de Helmholtz, que governa a vibração da membrana, foi discretizada e as frequências naturais e modos de vibração foram calculados com a solução do sistema de equações lineares resultante.

Outros estudos recentes em áreas da engenharia mecânica e correlatas foram desenvolvidos. Bararnia *et al.* (2010) aplicaram o MQDL-FBR em nuvens não-estruturadas para calcular o potencial elétrico e a temperatura, por efeito Joule, para duas geometrias distintas. A Figura 1.7 ilustra as geometrias, condições de contorno e as discretizações dos domínios, no qual pontos organizados próximos às fronteiras foram colocados para garantir precisão no cálculo das condições de contorno. Os resultados foram comparados com a solução via MEF com geração de malha não-estruturada concluindo que o MQDL-FBR é bastante atraente quanto a precisão, capacidade e flexibilidade na programação frente ao custo computacional de geração de malha.

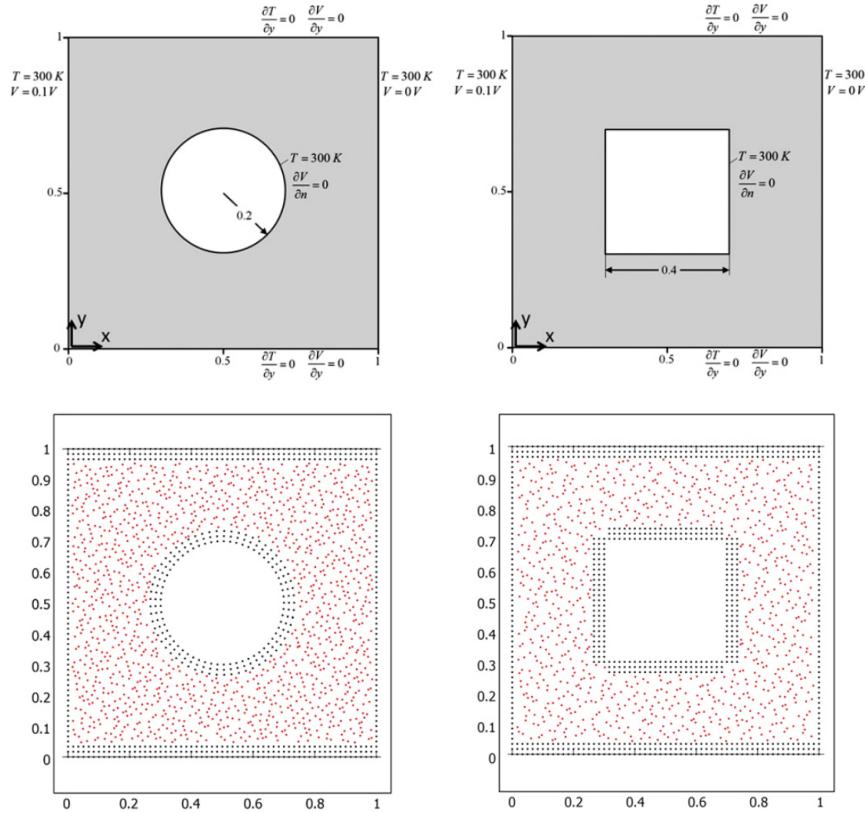


Figura 1.7: Geometrias, condições de contorno e discretizações dos problemas abordados por Bararnia *et al.* (2010). (Retirada de Bararnia *et al.* (2010)).

Qajarjazi *et al.* (2010) empregaram o método para resolver dois problemas bidimensionais em que as equações de Navier-Stokes foram abordadas com as variáveis em sua forma primitiva (Figura 1.8). O primeiro caso referia-se a um problema de convecção natural em uma cavidade quadrada sujeita a uma diferença de temperatura em suas paredes verticais e as paredes horizontais adiabáticas. No segundo caso, diferenças de temperaturas foram colocadas nas regiões centrais das arestas e o restante da fronteira foi considerada adiabática. As isotérmicas e a geração de entropia devido a transferência de calor e ao atrito com o fluido foram obtidas

para regime laminar. A discretização do domínio foi feita com uma malha uniforme (nuvem estruturada). Para as condições de contorno de Neumann os autores usaram o MDF.

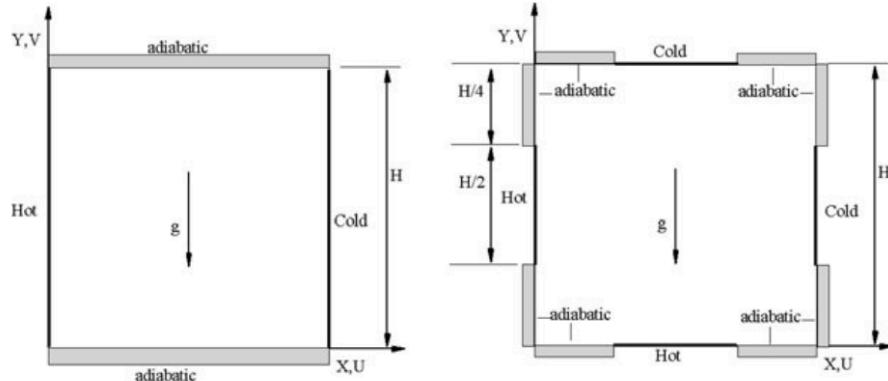


Figura 1.8: Geometrias e condições de contorno impostas nas fronteiras abordadas por Qajarjazi *et al.* (2010) em suas pesquisas com MQDL-FBR. (Retirada de Qajarjazi *et al.* (2010)).

Soleimani *et al.* (2010) aplicaram o MQDL-FBR em problemas de condução de calor transientes bidimensionais em quatro tipos diferentes de geometrias que podem ser vistas na Figura 1.9 juntamente com suas respectivas condições de contorno impostas para a temperatura na fronteira. Todos os domínios foram discretizados por nuvens estruturadas e os resultados numéricos obtidos foram comparados aos encontrados pelo MEF com malha não-estruturada, evidenciando o potencial do método em geometrias irregulares.

Em uma vertente matemática, Fornberg e Driscoll (2002) estudaram, no contexto de interpolação com FBR (Mq e Gaussiana (GA)), a influência do parâmetro de forma tendendo a infinito ($c \rightarrow \infty$) ou a zero ($\epsilon \rightarrow 0$) (são equivalentes, ou seja, $\epsilon = 1/c$). É sabido que, conforme o parâmetro de forma c cresce, essas FBRs tornam-se cada vez mais achatadas, o que gera sistemas lineares muito mal-condicionados. Em uma dimensão, as FBRs convergem para bases polinomiais da interpolação Lagrangiana conforme c cresce. No contexto do MQDL-FBR, Fornberg *et al.* (2004) mostraram que o método acaba sendo equivalente ao MDF tradicional no limite de $c \rightarrow \infty$.

Em fórmulas de DF compactas para nós equidistantes, é possível, devido às simetrias, obter estêncis mais precisos com relativamente poucos pontos enquanto que com pontos dispersos tais simetrias não estão disponíveis. Pensando nisso, Wright e Fornberg (2006) propuseram uma abordagem hermitiana no contexto do MQDL-FBR, incluindo também as derivadas em alguns pontos do suporte local, para obter fórmulas de aproximação de ordem mais alta sem aumentar consideravelmente a quantidade de pontos do suporte. Casos unidimensionais simples e com a equação de Poisson bidimensional foram estudados, com ênfase nos comportamentos do parâmetro de forma da FBR, ϵ , tendendo a zero, usando o algoritmo Contour-Padé criado por Fornberg e Wright (2004). Foi possível aumentar a precisão do método com essa abordagem e

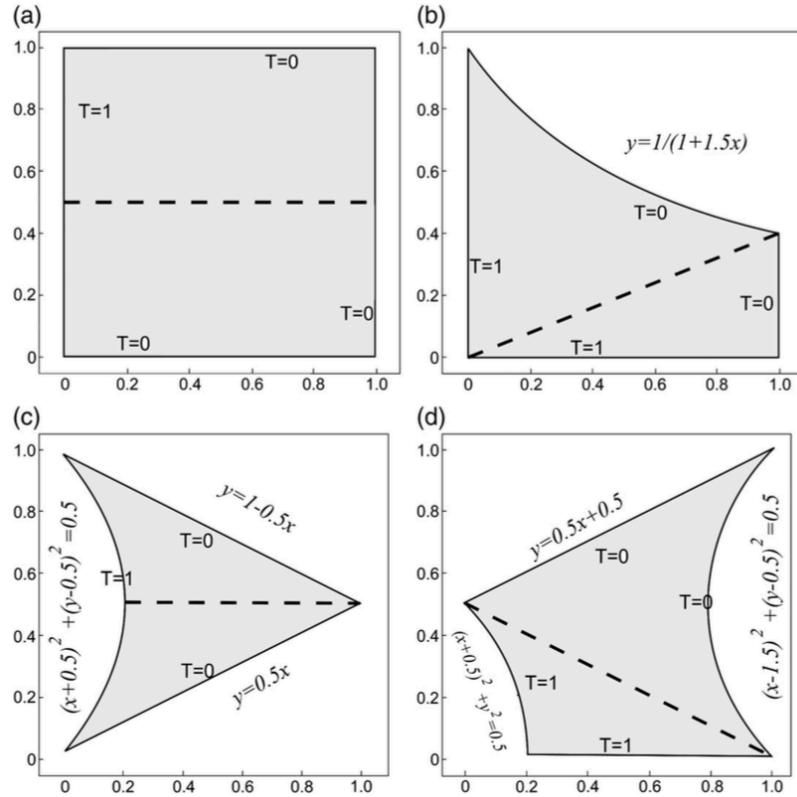


Figura 1.9: Geometrias e condições de contorno de temperatura impostas nas fronteiras abordadas por Soleimani *et al.* (2010). (Retirada de Soleimani *et al.* (2010)).

mostrar que, no limite do parâmetro de forma ϵ tendendo a zero, as fórmulas compactas de DF e do MQDL-FBR hermitiana tornam-se equivalentes.

Bayona *et al.* (2010) fizeram uma análise teórica do MQDL-FBR estudando analiticamente o comportamento da convergência em função do número de pontos do suporte local, n_s , da distância dos nós de suporte, h , e do parâmetro de forma da FBR Mq , c . Calcularam-se os coeficientes de ponderação de forma exata, resolvendo o SELL por software de computação simbólica, para a primeira e segunda derivadas unidimensionais e para o Laplaciano em duas dimensões. Análise do erro de truncamento local realizado através da expansão em série de Taylor mostrou a precisão do método para os suportes analisados. Experimentos numéricos corroboraram os resultados teóricos concluindo-se que: os coeficientes de ponderação do MQDL-FBR tendem aos coeficientes tradicionais do MDF conforme o parâmetro de forma c da Mq aumenta; que, para algumas soluções analíticas estudadas, existe uma faixa de valores de parâmetro de forma em que o MQDL-FBR produz resultados significativamente mais precisos que as fórmulas do MDF tradicional equivalentes; e que para cada fórmula do MQDL-FBR há um valor ótimo de c para o qual o erro é mínimo e, ainda, que esse valor é independente de h e depende somente dos valores da função e de suas derivadas.

A abordagem com linguagem de computação simbólica permite investigar matematica-

mente fatores importantes que influenciam no comportamento do MQDL-FBR. Entretanto, essa metodologia está hoje restrita a um número muito pequeno de pontos do suporte local.

Bayona *et al.* (2012a) realizaram estudos parecidos com o anterior, mas usando a FBR Gaussiana e também o MQDL-FBR com a formulação Hermitiana proposta por Wright e Fornberg (2006).

Bayona *et al.* (2011) propuseram um algoritmo para encontrar o parâmetro de forma constante que minimiza o erro de aproximação no MQDL-FBR. Bayona *et al.* (2012b) propuseram também um algoritmo no qual os valores do parâmetro de forma fossem variáveis e escolhidos de modo a anular os erros de aproximação locais das fórmulas do MQDL-FBR para certas equações.

Bayona (2013) abordou todas as metodologias dos artigos anteriores com vários exemplos e, ainda, aplicou o método estudado para: (i) obter soluções de problemas de elastostática bidimensional e compará-las com o MEF; (ii) encontrar soluções um problema de propagação de chamas laminares pré-misturadas em dutos estreitos abertos tridimensionais; (iii) analisar um motor micro-rotativo idealizado.

No trabalho feito por Santos (2012), condições de determinação foram desenvolvidas acerca das FBRs para que os coeficientes de ponderação fossem obtidos corretamente. A Multiquádrica (Mq) foi escolhida para o desenvolvimento dos testes numéricos devido à sua representação muito precisa em comparação com outros tipos de FBR, e por satisfazer as condições de determinação. Testes numéricos foram desenvolvidos para se estudar a influência dos parâmetros relevantes na aplicação do MQDL-FBR na solução de equações diferenciais parciais (EDPs). Os erros numéricos e a convergência foram testados para a solução da equação de Poisson em um domínio quadrado unitário usando-se malhas estruturadas. Vários parâmetros foram testados, como a variação do parâmetro de forma, c , da Mq, a variação do tamanho da malha, h , bem como a estrutura do suporte local (quantidade e distribuição dos pontos). Testou-se também a influência no erro numérico adicionando um termo não-linear de primeiras derivadas na Equação de Poisson. Vários resultados relevantes foram ressaltados, como, por exemplo, a independência do parâmetro de forma, c , com o refinamento da malha, h , conforme havia sido demonstrado em pesquisas recentes. Outro resultado importante foi a existência de valores ótimos de c para uma determinada função solução. Entretanto, devido ao mal-condicionamento do sistemas de equações lineares local, utilizado para a obtenção dos coeficientes de ponderação, não foi possível estender o intervalo de variação de c para valores muito grandes. Duas aplicações em problemas testes (*benchmarks*) foram feitas: a primeira em um problema de convecção forçada em uma cavidade quadrada também chamado informalmente de problema da caixa de sapato. A segunda, em um problema clássico de convecção natural em uma cavidade quadrada. Em ambos os casos, foram utilizados somente suportes centrados e pontos fora do domínio para o cálculo e atualização de valores de algumas grandezas. Aproximações inadequadas para os valores de temperatura nos pontos exteriores ao domínio (pontos fantasmas)

acabaram por prejudicar o maior potencial de precisão de suportes locais de ordens mais altas. O autor concluiu que o método é promissor para solução de EDPs como a equação do Poisson (EDP elíptica) e equações de Navier-Stokes e da Energia (convecção-difusão). Tratava-se de uma implementação relativamente simples, podendo ser aplicada em esquemas com malha estruturada. Entretanto, outros estudos se faziam necessários para que o método atingisse melhores resultados, como: procedimentos para calcular os coeficientes de ponderação para valores arbitrariamente grandes do parâmetro de forma c , o que tornaria possível determinar sistematicamente valores ótimos de c para qualquer tipo de suporte local; esquemas para superar as dificuldades relacionadas às fronteiras, como, por exemplo, evitar o uso de pontos externos ao domínio admitindo suportes locais descentrados, ou ainda, utilizar esquemas de diferenças finitas tradicionais para abordagem dos pontos próximos a fronteira; ou, por outro lado, desenvolver técnicas fisicamente consistentes para o tratamento dos pontos fora do domínio, mas que garantissem máxima precisão dos resultados.

Usando a equação de Poisson bidimensional num domínio quadrado, Santos *et al.* (2014) e Silva (2014) mostraram que é possível obter resultados satisfatórios para nuvens não-estruturadas sem empregar uma malha estruturada próxima ao contorno e também sem a abordagem de pontos fora do domínio para o cálculo de grandezas nas fronteiras. Silva (2014) mostrou ainda que utilizar o parâmetro de forma c variável, proporcional ao diâmetro do suporte local (conforme proposto por Shu *et al.* (2003)), é uma vantagem para a adaptatividade, mas que esse tipo de abordagem prejudica os resultados quando se analisa o refinamento da nuvem de pontos. Conforme se aumenta a quantidade de pontos da nuvem, o suporte local torna-se cada vez menor, e consequentemente, o diâmetro do suporte também diminui fazendo com que o parâmetro de forma da Mq fique também menor piorando a precisão e, eventualmente, tornando o refinamento inconsistente. Foi proposto então um procedimento para fazer um refinamento consistente de nuvens utilizando o parâmetro de forma variável, partindo de uma nuvem, de uma quantidade de pontos do suporte e de um parâmetro de forma de referência. Silva (2014) também aplica o MQDL-FBR com nuvens não-estruturadas nos mesmos problemas abordados por Santos (2012).

Vários autores como Fornberg e Wright (2004), Fornberg e Piret (2008), Fornberg *et al.* (2011), Fornberg *et al.* (2013) e Gonzalez-Rodriguez *et al.* (2015) vêm propondo algoritmos para estender o intervalo do parâmetro de forma da FBR, evitando o mal-condicionamento dos SELL e tornando o MQDL-FBR cada vez mais robusto. Quase todos eles apresentam restrições em seus usos. A aparente exceção talvez seja o trabalho de Fornberg *et al.* (2013), que propuseram um algoritmo capaz de lidar com a extensão do parâmetro de forma $\epsilon \rightarrow 0$ da FBR Gaussiana, para pontos suportes locais estruturados, não-estruturados e aleatórios. Essa metodologia, chamada nesse texto de MQDL-FBR(GA) Estabilizado, será abordada no próximo capítulo.

Recentemente surgiu uma alternativa aparentemente eficiente para o cálculo dos coe-

ficientes de ponderação no âmbito do MQDL-FBR nos trabalhos de Flyer *et al.* (2016a) e Flyer *et al.* (2016b). Os pesos são calculados usando como funções de base as Splines Poliharmônicas (em inglês Polyharmonic Splines - PHS) juntamente com bases polinomiais suplementares. Essas FBRs tem a vantagem de não possuir um parâmetro de forma e, ainda, adicionando polinômios suplementares, podem garantir que o sistema de equações lineares local tenha solução única quando se utiliza FBR condicionalmente positivas-definidas (que é o caso das PHS). Flyer *et al.* (2016b) verificaram a eficiência dessa abordagem frente ao MQDL-FBR usando FBR Gaussiana no contexto de interpolação e aproximação de operadores.

Flyer *et al.* (2016a) utilizaram o MQDL-FBR com PHS e polinômios suplementares para resolver problemas que envolvem as Equações de Navier-Stokes compressível bidimensional com baixos número de Mach, que são relevantes no contexto de escoamentos atmosféricos. Para comparação, eles utilizaram discretizações em malha cartesiana, hexagonal e quase-uniforme para alguns suportes fixos e usaram a estratégia de pontos fantasmais fora do domínio. As principais conclusões dos autores foram que essa abordagem captura a física básica do problema surpreendentemente bem, mesmo para discretizações grosseiras de pontos, com grande ordem de precisão, mesmo sem a necessidade de ajustar um parâmetro de forma e que a inclusão de polinômios suplementares elimina possíveis erros de estagnação.

Tendo em vista as vantagens do MQDL-FBR(PHS) com polinômios suplementares, essa metodologia também será abordada no próximo capítulo e comparações com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado serão feitas no capítulo 3.

1.3 Objetivos

O Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial vem se mostrando adequado para o tratamento de diversos problemas na física e na engenharia, motivando estudos recentes de forma intensa. O MQDL-FBR pode ser implementado em nuvens estruturadas e não-estruturadas. Também se adapta bem a problemas com geometrias irregulares. Pela estrutura do método, pode-se abordar derivadas de altas ordens e domínios de dimensões arbitrárias. Todas essas potencialidades tornam o método uma alternativa interessante. Entretanto, ele ainda carece de mais estudos para que possa se tornar uma ferramenta competitiva na solução de equações diferenciais parciais, particularmente em problemas envolvendo o escoamento de fluidos.

A presente tese de doutorado baseou-se nas propostas de trabalhos futuros do mestrado de Santos (2012). O intuito principal é contribuir de forma relevante para o aprimoramento do MQDL-FBR com ferramentas que permitam sua utilização geral com maior precisão e também aplicações específicas em diversos problemas que envolvam dinâmica dos fluidos e transferência de calor. Assim sendo, os principais objetivos do trabalho são:

- Implementar o MDQL-FBR em uma abordagem de nuvens estruturadas e nuvens não-estruturadas.
- Implementar o Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial Gaussiana Estabilizado (MQDL-FBR(GA) Estabilizado), que faz uma mudança de bases e torna o sistema de equações lineares local para o cálculo dos coeficientes de ponderação bem condicionado, resultando na extensão do intervalo do parâmetro de forma da FBR.
- Implementar o Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial Poliharmônica Spline que adiciona bases polinomiais suplementares (MQDL-FBR(PHS)) para o cálculo dos coeficientes de ponderação. Nessa abordagem a FBR PHS não possui um parâmetro de forma sendo necessário a escolha do grau dos polinômios suplementares.
- Calcular valores nas fronteiras (condições de contorno do tipo Neumann) no contexto de nuvens estruturadas e não-estruturadas utilizando suportes locais descentrados ao invés de calcular usando o MDF ou com pontos fantasmas, como vem sendo utilizado na literatura.
- Verificar a influência dos parâmetros relevantes do MQDL-FBR como o parâmetro de forma, número de pontos do suporte local, refinamento de nuvens, grau dos polinômios suplementares, dentre outros.
- Destacar a influência do Método Iterativo de Relaxações Sucessivas e do Método de Decomposição LU na solução do sistema de equações lineares global resultante da equação de Poisson e da equação da função-corrente no contexto de nuvens de pontos.
- Comparar as soluções numéricas com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS), e verificar os erros absolutos nas primeiras e segundas derivadas em todos os pontos do domínio com uma função de teste.
- Aplicar o MQDL-FBR para solução numérica de problemas que envolvem as equações de Navier-Stokes no contexto bidimensional usando a formulação vorticidade e função-corrente (e temperatura caso haja transferência de calor).

1.4 Delineamento do Trabalho

O capítulo 2 tem como objetivo definir matematicamente uma Função de Base Radial (FBR) e destacar as principais FBRs utilizadas na literatura. Definir, de modo sucinto, o Método de Quadratura Diferencial Local com Função de Base Radial (MQDL-FBR) em sua forma generalizada. Calcular de forma analítica os coeficiente de ponderação do MQDL-FBR através

de um software de computação simbólica e abordar metodologias para o cálculo dos coeficientes de ponderação numericamente como o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS).

No capítulo 3 são apresentadas e discutidas avaliações numéricas de aspectos importantes do MQDL-FBR(Mq), MQDL-FBR(GA) Estabilizado e MQDL-FBR(PHS) para a aproximação de operadores diferenciais na solução de EDPs. Para isso, o método foi aplicado na solução da equação de Poisson em um domínio bidimensional, quadrado e unitário. Diversos testes foram feitos para avaliar a influência de diversos parâmetros importantes: parâmetro de forma, ϵ , quantidade de pontos do suporte local, n_s , quantidade de pontos da discretização do domínio (refinamento de nuvem), N , maior grau permissível dos polinômios suplementares, q , com diversas funções de teste (soluções analíticas da equação de Poisson). Por fim, erros absolutos nas primeiras e segundas derivadas de uma função de teste foram avaliadas em todos os pontos da discretização do domínio usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS).

O capítulo 4 tem como tema a aplicação do MQDL-FBR na solução de problemas de dinâmica dos fluidos e transferência de calor. Problemas clássicos que envolvem a solução das equações de Navier-Stokes como a convecção natural em uma cavidade quadrada e o problema da cavidade com a tampa superior móvel foram resolvidas pelo MQDL-FBR no contexto de nuvem de pontos estruturadas e não-estruturadas. Os resultados para ambas aplicações são comparados com resultados já existentes na literatura.

No capítulo 5 são apresentadas as principais conclusões, realçando os pontos positivos e potenciais dificuldades encontradas com as aplicações do MQDL-FBR. São apresentadas por fim sugestões para trabalhos futuros.

No Apêndice A faz-se uma interpretação do MQDL-FBR no contexto de interpolação e no cálculo dos coeficientes de ponderação para aproximação de operadores diferenciais quando se utilizam bases polinomiais suplementares.

No Apêndice B são obtidos os coeficientes de ponderação através do MQDL-FBR com a FBR Gaussiana usando um software de computação simbólica para comparação com os coeficientes de ponderação obtidos analiticamente na seção 2.3, capítulo 2, com a FBR Multiquádrica.

No Apêndice C são apresentados os passos para a representação do resto da expansão em série de Taylor do fator multiplicativo da FBR Gaussiana com respeito à função especial Gamma Incompleta do processo de obtenção de novas bases do MQDL-FBR(GA) Estabilizado. Também são apresentadas algumas propriedades importantes da função Gamma Incompleta.

O fluxograma da implementação do MQDL-FBR(GA) Estabilizado é apresentado e explicado no Apêndice D.

No Apêndice E são mostrados os coeficientes de ponderação, de primeiras e segundas derivadas com respeito a x e y , para um suporte local defeituoso obtidos pelo MQDL-FBR(GA) Estabilizado através do programa original de Lehto (2014), em linguagem Matlab[®], e com o programa implementado neste trabalho em linguagem Fortran.

As hipóteses simplificadoras e a adimensionalização das leis de conservação da massa, quantidade de movimento (Navier-Stokes) e energia para a obtenção das equações na formulação vorticidade e função-corrente para o problema de convecção natural em uma cavidade quadrada são apresentadas no Apêndice F.

No Apêndice G contém os parâmetros usados para a obtenção dos resultados com o MQDL-FBR do problema de convecção natural em uma cavidade quadrada das seções 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4, do capítulo 4.

No Apêndice H são apresentadas as hipóteses simplificadoras e a adimensionalização das leis de conservação da massa e quantidade de movimento (Navier-Stokes) para a obtenção das equações na formulação vorticidade e função-corrente para o problema da cavidade quadrada com tampa móvel.

Capítulo 2

Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial - MQDL-FBR

2.1 Função de Base Radial (FBR)

Desde que Hardy (1971) introduziu seus estudos com Funções de Base Radial em interpolação de dados dispersos, muitos outros trabalhos também desempenharam um papel importante para o desenvolvimento da história das FBRs (Micchelli (1986), Powell (1992) e colaboradores). Em 1990, Kansa (1990a) e (Kansa, 1990b) introduziram a aproximação de derivadas usando interpolação com FBR e desde então muitos artigos, monografias e livros (Buhmann (2003), Iske e Arnold (2004), Wendland (2004), Fasshauer (2007), dentre outros) ampliaram os estudos e a gama de utilização das FBRs.

De acordo com Fasshauer (2007), para definir Funções de Base Radial toma-se uma função *multivariada* centrada em \mathbf{x}_k do \mathbb{R}^d de tal forma que

$$\Phi_k(\mathbf{x}) = \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|) \quad (2.1)$$

sendo $\|\cdot\|$ alguma norma em \mathbb{R}^d .

Mais precisamente, a definição de FBR é:

Definição 1 Uma função $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada radial desde que exista uma função univariada $\varphi[0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$\Phi_k(\mathbf{x}) = \varphi(r), \text{ sendo } r = \|\mathbf{x}\|.$$

Usualmente emprega-se a norma Euclidiana.

Fasshauer (2007) ainda afirma que, da definição 1, faz sentido chamar φ uma função básica e $\Phi_k(\mathbf{x})$ a função de base radial, centrada em \mathbf{x}_k , conforme (2.1). Assim, uma simples função básica pode gerar um conjunto de n funções de base, cada uma centrada em um ponto \mathbf{x}_k diferente dos demais, $k = 1, \dots, n$.

Decorre da definição 1 a seguinte propriedade da função radial Φ (Ling, 2003):

$$\|\mathbf{x}_1\| = \|\mathbf{x}_2\| \Rightarrow \Phi(\mathbf{x}_1) = \Phi(\mathbf{x}_2), \quad \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^d \quad (2.2)$$

De outra maneira, o valor de Φ a uma certa distância fixa da origem (ou qualquer outro centro fixo) é constante.

Por um abuso de notação, nesse trabalho usa-se φ para denotar a função básica e também as funções de base radial e, portanto, pode-se dizer que as Funções de Base Radial são aquelas cujos valores dependem somente da distância a partir de uma origem $\varphi(\mathbf{x}) = \varphi(\|\mathbf{x}\|)$, ou da distância a partir de algum centro \mathbf{x}_k de tal forma que $\varphi_k(\mathbf{x}) = \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|)$.

Diversas Funções de Base Radial tem sido utilizadas. As mais comuns, de acordo com Flyer *et al.* (2016a), são descritas na Tabela 2.1, sendo r a distância euclidiana entre um ponto central (centro) \mathbf{x}_k e um ponto \mathbf{x} qualquer do domínio, ou seja, $r = r_k(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2$, e c o parâmetro de forma da FBR ($c > 0$). Alguns autores adotam o parâmetro de forma como sendo ϵ , que tem o comportamento inverso do parâmetro de forma c , ou seja, a FBR terá o mesmo comportamento quando $c \rightarrow \infty$ e $\epsilon \rightarrow 0$. Existem também FBRs que não dependem de parâmetro de forma.

Tabela 2.1: Algumas escolhas comuns para as FBR - $\varphi(r) = \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2)$

FBR - Infinitamente Suave					
Gaussiana	GA	$\varphi(r) = e^{-\frac{r^2}{c^2}}$		ou	$\varphi(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$
Multiquádrica	Mq	$\varphi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$		ou	$\varphi(r) = \sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
Multiquádrica Inversa	MqI	$\varphi(r) = 1/\sqrt{r^2 + c^2}$		ou	$\varphi(r) = 1/\sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
Quádrica Inversa	QI	$\varphi(r) = 1/(r^2 + c^2)$		ou	$\varphi(r) = 1/(1 + (\epsilon r)^2)$
FBR - Suave por Partes					
Spline Poliharmônica	PHS ₁	$\varphi(r) = r^{2p-1}, p \in \mathbb{N}$			
	PHS ₂	$\varphi(r) = r^{2p} \log(r), p \in \mathbb{N}_0$			
Cúbica	Cb	$\varphi(r) = r^3$			
Thin-Plate Spline	TPS	$\varphi(r) = r^2 \log(r)$			
Bessel	BE	$\varphi(r) = \frac{2^{1-p}}{\Gamma(p)} r^p K_p(\epsilon r), p > 0$		Matérn (1960)	
		Função K de Bessel			
Suporte Compacto	SC	$\varphi(r) = (1 - \epsilon r)_+^p \text{pol}(\epsilon r)$		Wendland (1995)	
		pol um certo polinômio, $p \in \mathbb{N}$			

As Figuras 2.1, 2.2, 2.3 e 2.4 mostram os gráficos das FBRs infinitamente suaves Mq, GA, MqI e QI, respectivamente, para alguns valores de ϵ . Note que conforme ϵ diminui, as

funções tornam-se cada vez mais planas (achatadas). As Figuras 2.5 e 2.6 mostram os gráficos das FBRs PHS, parcialmente suaves, para alguns valores de p .

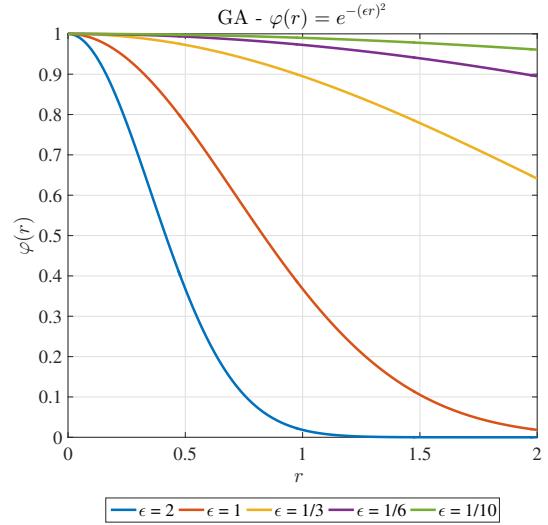
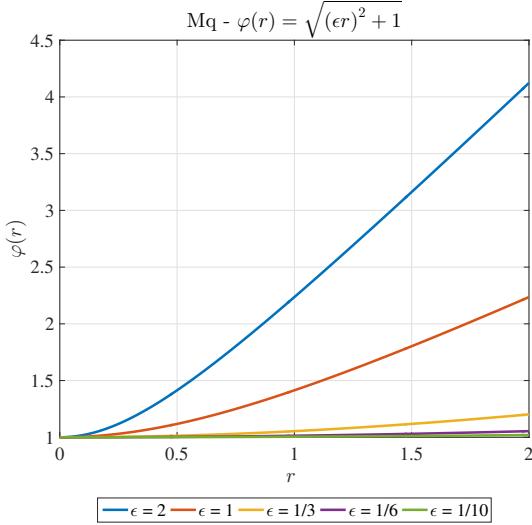


Figura 2.1: Gráfico da FBR Mq para alguns valores de ϵ

Figura 2.2: Gráfico da FBR GA para alguns valores de ϵ

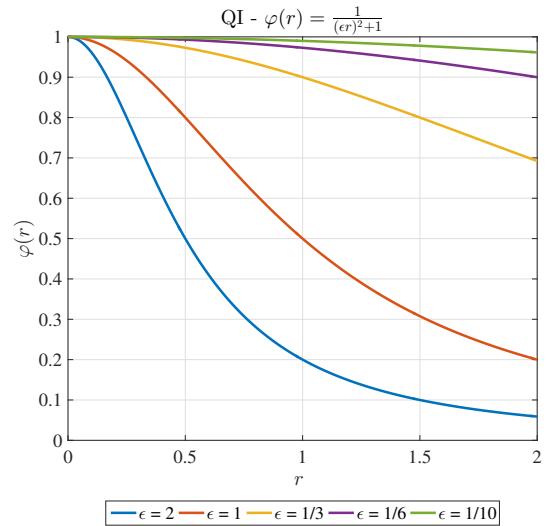
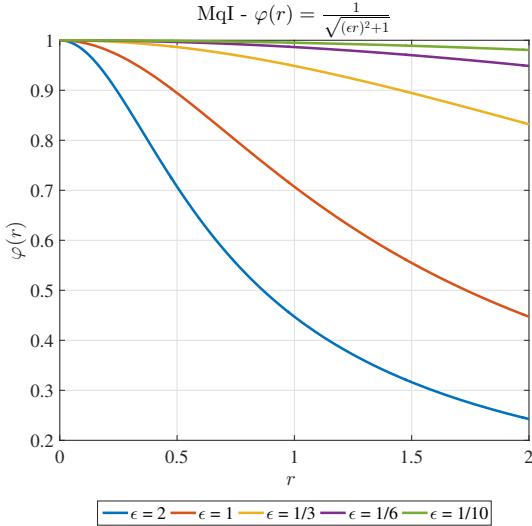


Figura 2.3: Gráfico da FBR MqI para alguns valores de ϵ

Figura 2.4: Gráfico da FBR QI para alguns valores de ϵ

2.2 Formulação do MQDL-FBR

Inicialmente, autores como Shu *et al.* (2003) denominaram esse método de aproximação de operadores diferenciais como Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial (MQDL-FBR). Atualmente, esse vem sendo chamado de Método de Diferenças

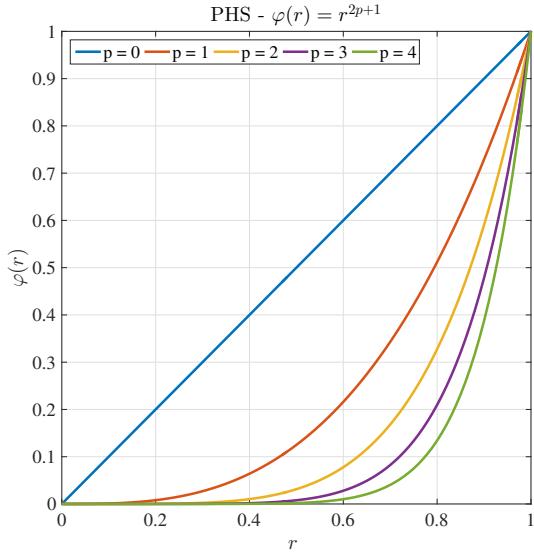


Figura 2.5: Gráfico da FBR PHS₁ para alguns valores de p

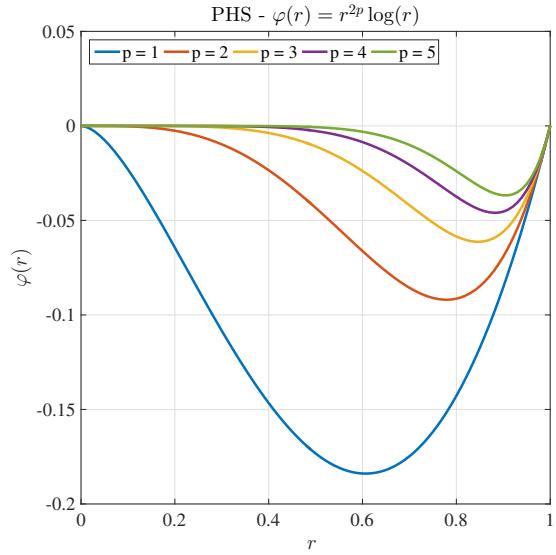


Figura 2.6: Gráfico da FBR PHS₂ para alguns valores de p

Finitas gerado por Funções de Base Radial (em inglês Radial Basis Function-generated Finite Difference - (RBF-FD)).

Através do Método de Quadratura Diferencial Local, um operador diferencial parcial de qualquer ordem, de uma função em \mathbb{R}^d , é aproximado por uma soma ponderada de valores funcionais em pontos discretos vizinhos do ponto de referência \mathbf{x} , incluindo ele próprio (pontos de suporte de \mathbf{x}). Como exemplo, a aproximação para a m -ésima derivada em relação a x_1 de uma função $f(\mathbf{x})$ em um ponto \mathbf{x}_i do \mathbb{R}^d , sendo $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$, é expressa por:

$$\frac{\partial^m f(\mathbf{x}_i)}{\partial x_1^m} \cong \sum_{j=1}^{n_s} w_{i,j}^{mx_1} f(\mathbf{x}_j), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.3)$$

sendo \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, n_s$, os pontos de suporte de \mathbf{x}_i e $w_{i,j}^{mx_1}$ os respectivos coeficientes de ponderação ou pesos.

Na equação (2.3), o índice i indica um ponto de referência de uma discretização global de N pontos, enquanto j indica o índice local para os respectivos pontos de suporte. Naturalmente essa abordagem pode ser empregada para qualquer dimensão. A Figura 2.7 ilustra um conjunto disperso de pontos com um suporte local, seus pontos de suporte local e o ponto de referência onde será aproximada a EDP.

Neste trabalho, o termo "nuvem" será empregado para designar qualquer conjunto de pontos distintos utilizados para se discretizar um domínio. Quando esses pontos estiverem dispersos como no caso da Figura 2.7, diremos se tratar de uma "nuvem não-estruturada"(NNE). Caso contrário, se os pontos estiverem organizados em um reticulado regular ("grid"), diremos se tratar de uma "nuvem estruturada"(NE) (a título de exemplo, ver Figuras 3.10 e 3.11, página

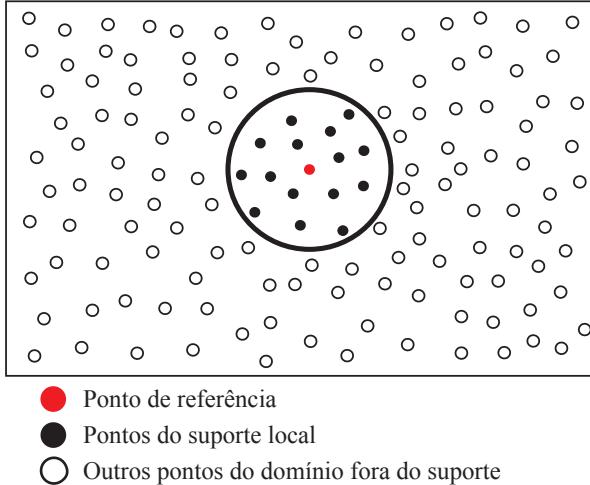


Figura 2.7: Suporte local em torno de um ponto de referência no interior do domínio

48).

Vários critérios para a escolha dos pontos do suporte local podem ser formulados. Por exemplo, o mais simples (adoptado neste trabalho) consiste em escolher os n_s pontos mais próximos ao ponto de referência. Uma outra regra de formação possível é considerar os pontos que se encontram dentro de uma circunferência (caso 2-d) de raio pré-determinado (como aquela ilustrada na Figura 2.7). Com essa escolha cada suporte pode ter uma quantidade diferente de pontos, isto é, n_s variável. Pode-se ainda pensar em outros critérios para criação de suportes locais, e isso traz muita flexibilidade ao método.

Para aproximação de derivadas na fronteira do domínio, por exemplo na aproximação das derivadas relacionadas com a condição de contorno de Neumann, Shu *et al.* (2003) utilizaram uma malha estruturada próxima a fronteira e aproximaram a derivada de interesse pelo método de diferenças finitas de segunda ordem (para frente e para trás). Uma outra opção é escolher suportes locais descentrados a partir de um ponto de referência na fronteira, Figura 2.8. Vários critérios também podem ser usados, como escolher os n_s pontos mais próximo do ponto de referência na fronteira. "A verificação dessa abordagem é uma das contribuições dessa tese".

A determinação dos coeficientes de ponderação, $w_{i,j}$, é a chave do Método de Quadratura Diferencial, e deve ser feita para aproximar qualquer derivada ou operador diferencial linear que se deseje no ponto de referência i . Para isso, um conjunto de funções de base é requerido. No âmbito do MQDL-FBR normalmente é escolhido um único tipo de FBR (Mq, Gaussiana, etc., ver Tabela 2.1), $\varphi_k(\mathbf{x}) = \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2)$, sendo $\|\cdot\|$ a distância Euclidiana entre o ponto de aproximação \mathbf{x} e o centro da FBR \mathbf{x}_k . Substituindo o conjunto de funções de base com centros nos próprios pontos de suporte local j ($\varphi_k(\mathbf{x}_j) = \varphi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k\|_2)$, $k = 1, \dots, n_s$) na equação (2.3), obtém-se o seguinte SELL ($[A]\{w\} = \{b\}$) para os coeficientes de ponderação (Ding

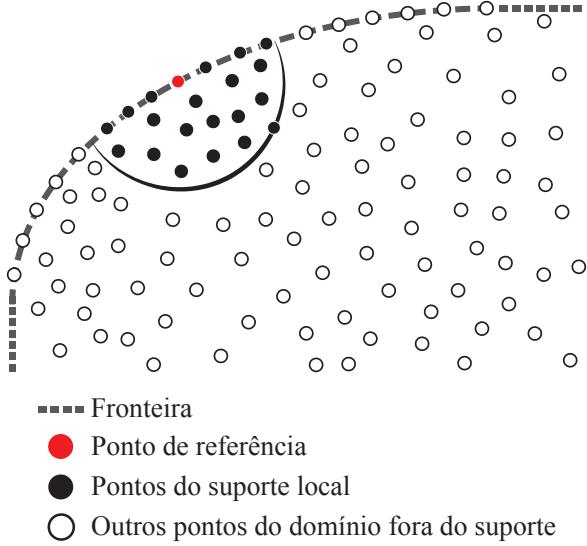


Figura 2.8: Suporte local em torno de um ponto de referência na fronteira do domínio

et al., 2005):

$$\frac{\partial^m \varphi_k(\mathbf{x}_i)}{\partial x_1^m} = \sum_{j=1}^{n_s} w_{i,j}^{m,x_1} \varphi_k(\mathbf{x}_j), \quad k = 1, 2, \dots, n_s \quad (2.4)$$

Em forma matricial, o vetor de coeficientes de ponderação $\{w\}_i$ pode ser obtido por

$$\left\{ \frac{\partial^m \varphi_k(\mathbf{x}_i)}{\partial x_1^m} \right\} = [A]_i \{w\}_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.5)$$

De forma explícita, para a primeira derivada em relação a coordenada x ($m = 1$ e $x_1 = x$), tem-se

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \\ \frac{\partial \varphi_2(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial \varphi_{n_s}(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \end{bmatrix}}_{\{b\}_i}_{n_s \times 1} = \underbrace{\begin{bmatrix} \varphi_1(\mathbf{x}_1) & \varphi_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & \varphi_1(\mathbf{x}_{n_s}) \\ \varphi_2(\mathbf{x}_1) & \varphi_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & \varphi_2(\mathbf{x}_{n_s}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{n_s}(\mathbf{x}_1) & \varphi_{n_s}(\mathbf{x}_2) & \cdots & \varphi_{n_s}(\mathbf{x}_{n_s}) \end{bmatrix}}_{[A]_i}_{n_s \times n_s} \underbrace{\begin{bmatrix} w_{i,1}^{1x} \\ w_{i,2}^{1x} \\ \vdots \\ w_{i,n_s}^{1x} \end{bmatrix}}_{\{w\}_i}_{n_s \times 1} \quad (2.6)$$

Atente-se ao fato das matrizes $[A]_i$ serem simétricas e existirem N (número total de pontos da discretização) sistemas de equações lineares locais para serem resolvidos. Os coeficientes de ponderação calculados para cada ponto de referência e para cada derivada requerida devem ser armazenados assim como a conectividade entre os pontos criada pelo critério de formação do suporte local.

Existem diversas funções de base que podem ser escolhidas, além das FBRs. De acordo

com Fornberg *et al.* (2013) adotando um conjunto de funções de base, também chamadas funções de teste, em 1-D monomiais, $\varphi_k(x) = x^{k-1}$, o sistema (2.5) torna-se o Sistema de Vandermonde. Ainda, de acordo com os autores, uma variação comumente usada do sistema (2.6) é incluir algumas bases polinomiais de baixa ordem e adicionar restrições sobre os correspondentes coeficientes da expansão associadas as FBRs. Por exemplo, incluindo 1, x e y em 2-D, (2.6) torna-se

$$\left[\begin{array}{c} \frac{\partial \varphi_1(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial \varphi_{n_s}(\mathbf{x}_i)}{\partial x} \\ \hline \frac{\partial}{\partial x} 1|_{\mathbf{x}_i} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} x|_{\mathbf{x}_i} = 1 \\ \frac{\partial}{\partial x} y|_{\mathbf{x}_i} = 0 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \varphi_1(\mathbf{x}_1) & \dots & \varphi_1(\mathbf{x}_{n_s}) & | & 1 & x_1 & y_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & | & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{n_s}(\mathbf{x}_1) & \dots & \varphi_{n_s}(\mathbf{x}_{n_s}) & | & 1 & x_{n_s} & y_{n_s} \\ \hline 1 & \dots & 1 & | & 0 & 0 & 0 \\ x_1 & \dots & x_{n_s} & | & 0 & 0 & 0 \\ y_1 & \dots & y_{n_s} & | & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} w_{i,1}^{1x} \\ \vdots \\ w_{i,n_s}^{1x} \\ \hline w_{i,n_s+1}^{1x} \\ w_{i,n_s+2}^{1x} \\ w_{i,n_s+3}^{1x} \end{array} \right] \quad (2.7)$$

sendo os coeficientes de ponderação maiores que n_s ignorados. Para valores de c pequenos e médios (ou ϵ grandes e médios) o sistema (2.7), em particular incluindo uma constante, é usualmente vantajoso, de acordo com Fornberg *et al.* (2013). Um melhor entendimento sobre a inclusão de bases polinomiais e as restrições impostas podem ser vistas no Apêndice A, onde se faz uma interpretação do MQDL-FBR no contexto de interpolação de dados dispersos e também para o cálculo de coeficientes de ponderação de operadores.

Neste trabalho, os sistemas de equações lineares locais (2.6) ou (2.7) foram resolvidos numericamente pela subrotina *dgesv* da biblioteca Lapack, disponível na *Mathematical Kernel Library* (MKL) no compilador Intel Visual Fortran 11, que faz uso da decomposição LU com pivoteamento e trocas parciais de linhas. A matriz [A] é decomposta em $[A] = [P_p] [L] [U]$, onde $[P_p]$ é uma matriz de permutação, $[L]$ é uma matriz triangular inferior com os valores da diagonal principal unitários e $[U]$ uma matriz triangular superior.

O Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial, equação (2.3), quando os coeficientes de ponderação forem calculados por (2.5), escolhendo-se uma FBR da Tabela 2.1, será denotado por MQDL-FBR(), onde a sigla da FBR escolhida é especificada dentro do (). Assim, por exemplo, se a FBR Mq for escolhida como função de base tem-se MQDL-FBR(Mq).

2.3 Cálculo dos Coeficientes de Ponderação de Forma Analítica

O objetivo dessa seção é estudar o comportamento dos coeficientes de ponderação calculados pelo MQDL-FBR(Mq) quando o parâmetro de forma c tende a infinito. Para isso, a solução do sistema de equações lineares local (2.6) foi obtida de forma analítica utilizando um software de computação simbólica para alguns suportes locais específicos unidimensionais e um suporte bidimensional. O software de computação simbólica adotado foi o Maple16®.

2.3.1 Suportes Locais Unidimensionais

Um suporte local unidimensional com 3 pontos equidistantes ($n_s = 3$), como ilustrado na Figura 2.9, foi escolhido para esse experimento. O ponto em vermelho é o ponto de referência, que também faz parte do suporte local, e os pontos em preto completam o suporte com uma distância h ($h > 0$) do ponto de referência.

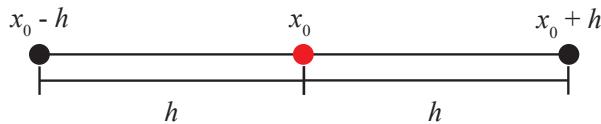


Figura 2.9: Suporte local unidimensional centrado

A FBR inicialmente escolhida foi a Multiquádrica (Mq), e assim a matriz $[A]$ do SELL é dada por:

$$[A] = \begin{bmatrix} c & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{4h^2 + c^2} \\ \sqrt{h^2 + c^2} & c & \sqrt{h^2 + c^2} \\ \sqrt{4h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} & c \end{bmatrix}_{3 \times 3} \quad (2.8)$$

Para o cálculo dos coeficientes de ponderação para a aproximação da primeira derivada em relação a x , o vetor segundo membro, $\{b\}$, deve ser calculado. Assim, o sistema que será resolvido analiticamente pelo software de computação simbólica é:

$$\begin{bmatrix} c & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{4h^2 + c^2} \\ \sqrt{h^2 + c^2} & c & \sqrt{h^2 + c^2} \\ \sqrt{4h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{x_0-h}^{1x} \\ w_{x_0}^{1x} \\ w_{x_0+h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{h}{\sqrt{h^2+c^2}} \\ 0 \\ -\frac{h}{\sqrt{h^2+c^2}} \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

A solução analítica para o sistema (2.9) é, portanto, dada por:

$$\begin{bmatrix} w_{x_0-h}^{1x} \\ w_{x_0}^{1x} \\ w_{x_0+h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \frac{h(c\sqrt{4h^2+c^2}-2h^2-c^2)}{\sqrt{h^2+c^2}(\sqrt{4h^2+c^2}(h^2+c^2)-3ch^2-c^3)} \\ 0 \\ -\frac{1}{2} \frac{h(c\sqrt{4h^2+c^2}-2h^2-c^2)}{\sqrt{h^2+c^2}(\sqrt{4h^2+c^2}(h^2+c^2)-3ch^2-c^3)} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

Tem-se, assim, os coeficientes de ponderação para a aproximação da primeira derivada em relação a x . Os valores dos coeficientes dependem da distância entre os pontos e do parâmetro de forma c . Sabe-se de Fornberg *et al.* (2013), que conforme o parâmetro de forma da FBR vai aumentando, a FBR vai tornando-se cada vez mais achada (em inglês *flat*) e mesmo que formem uma base linearmente independente (analiticamente), numericamente a base vai tornando-se cada vez mais dependente devido à aritmética de ponto flutuante. De acordo com Fornberg e Wright (2004), conforme o parâmetro de forma da FBR aumenta, melhores valores numéricos para os coeficientes de ponderação podem ser obtidos. Assim sendo, pode-se tomar o limite de $c \rightarrow \infty$ para a obtenção dos coeficientes dependentes apenas da distância entre os pontos. Dessa maneira, tem-se:

$$\begin{bmatrix} \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0-h}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0+h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2h} \\ 0 \\ \frac{1}{2h} \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

Os resultados da equação (2.11) mostam que os coeficientes de ponderação são os mesmos coeficientes de diferenças finitas (centrada) de segunda ordem, quando tomado o limite do parâmetro de forma tendendo a ∞ . Esse fato corrobora resultados obtidos por Fornberg e Wright (2004) e Bayona *et al.* (2010).

De forma análoga ao procedimento anterior, os coeficientes de ponderação para aproximação da segunda derivada com relação a x do suporte da Figura 2.9 pode ser obtido resolvendo

o seguinte sistema linear local:

$$\begin{bmatrix} c & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{4h^2 + c^2} \\ \sqrt{h^2 + c^2} & c & \sqrt{h^2 + c^2} \\ \sqrt{4h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{x_0-h}^{2x} \\ w_{x_0}^{2x} \\ w_{x_0+h}^{2x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{c^2}{(h^2 + c^2)^{\frac{3}{2}}} \\ \frac{1}{c} \\ \frac{c^2}{(h^2 + c^2)^{\frac{3}{2}}} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

A solução analítica para o sistema (2.12) é, portanto, dada por:

$$\begin{bmatrix} w_{x_0-h}^{2x} \\ w_{x_0}^{2x} \\ w_{x_0+h}^{2x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \frac{h^2 (\sqrt{4h^2 + c^2}(2c^2 + h^2) - ch^2 - 2c^3)}{c(h^2 + c^2)^{\frac{3}{2}} (\sqrt{4h^2 + c^2}(c^2 + h^2) - 3ch^2 - c^3)} \\ \frac{-c^4 + c^3 \sqrt{4h^2 + c^2} - 2h^4 - 2h^2c^2}{c(h^2 + c^2) (\sqrt{4h^2 + c^2}(c^2 + h^2) - 3ch^2 - c^3)} \\ \frac{1}{2} \frac{h^2 (\sqrt{4h^2 + c^2}(2c^2 + h^2) - ch^2 - 2c^3)}{c(h^2 + c^2)^{\frac{3}{2}} (\sqrt{4h^2 + c^2}(c^2 + h^2) - 3ch^2 - c^3)} \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

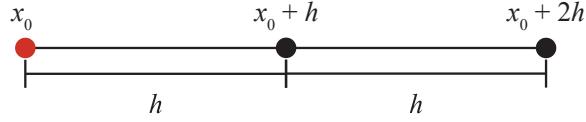
Novamente, tomando o limite do parâmetro de forma tendendo a ∞ , tem-se:

$$\begin{bmatrix} \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0-h}^{2x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0}^{2x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0+h}^{2x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{h^2} \\ -\frac{2}{h^2} \\ \frac{1}{h^2} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

Os resultados dos coeficientes de ponderação em (2.14) são os mesmos obtidos no método de diferenças finitas centradas de segunda ordem.

Para suportes locais "descentrados", como ilustrado na Figura 2.10, o ponto de referência foi tomado como sendo o ponto da extremidade esquerda (vermelho). O cálculo dos coeficientes de ponderação são análogo aos anteriores. A matriz $[A]$ é a mesma mostrada em (2.8), pois depende somente das distâncias entre os pontos, que são as mesmas.

O cálculo dos coeficientes de ponderação para a primeira derivada com relação a x para

**Figura 2.10:** Suporte local unidimensional descentrado

o suporte anterior será dado pela solução analítica do seguinte SELL:

$$\begin{bmatrix} c & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{4h^2 + c^2} \\ \sqrt{h^2 + c^2} & c & \sqrt{h^2 + c^2} \\ \sqrt{4h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{x_0}^{1x} \\ w_{x_0+h}^{1x} \\ w_{x_0+2h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{h}{\sqrt{h^2 + c^2}} \\ -\frac{2h}{\sqrt{4h^2 + c^2}} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

A solução analítica é dada por:

$$\begin{bmatrix} w_{x_0}^{1x} \\ w_{x_0+h}^{1x} \\ w_{x_0+2h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{3}{2} \frac{h(c\sqrt{4h^2 + c^2} - 2h^2 - c^2)}{\sqrt{4h^2 + c^2}(\sqrt{4h^2 + c^2}(h^2 + c^2) - 3ch^2 - c^3)} \\ -\frac{h(\sqrt{4h^2 + c^2}(c^2 - h^2) - ch^2 - c^3)}{\sqrt{4h^2 + c^2}\sqrt{h^2 + c^2}(\sqrt{4h^2 + c^2}(h^2 + c^2) - 3ch^2 - c^3)} \\ \frac{1}{2} \frac{h(c\sqrt{4h^2 + c^2} - 2h^2 - c^2)}{\sqrt{4h^2 + c^2}(\sqrt{4h^2 + c^2}(h^2 + c^2) - 3ch^2 - c^3)} \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

No limite de $c \rightarrow \infty$, tem-se:

$$\begin{bmatrix} \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0+h}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0+2h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{3}{2h} \\ \frac{2}{h} \\ -\frac{1}{2h} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

que corresponde a aproximação de diferenças finitas para a frente, de segunda ordem.

Interessante notar que a matriz $[A]$ é a mesma para os três casos estudados anteriormente, e portanto, algumas informações a seu respeito merecem ser consideradas. Os autovalores da

matriz $[A]$ são encontrados através do seguinte polinômio característico:

$$p(\lambda) = -\lambda^3 + 3c\lambda^2 + 6h^2\lambda - 6ch^2 - 2c^3 + 2\sqrt{4h^2 + c^2}(h^2 + c^2) = 0 \quad (2.18)$$

O número de condição de uma matriz é definido pelo seguinte Teorema:

Teorema 1 Seja $[A] \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, onde $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ denota o espaço das matrizes reais $n \times n$, uma matriz simétrica e inversível. Então,

$$\mathcal{K}_2([A]) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}} \quad (2.19)$$

sendo $\lambda_{min} = \min\{|\lambda_j|, j = 1, \dots, n\}$ e $\lambda_{max} = \max\{|\lambda_j|, j = 1, \dots, n\}$ com $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ os autovalores da matriz $[A]$.

O subscrito 2 indica a Norma Matricial correspondente ao seguinte teorema:

Teorema 2 Seja $[A] \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ uma matriz simétrica. Então,

$$\|[A]\|_2 = \lambda_{max} = \max\{|\lambda_j|, j = 1, \dots, n\} \quad (2.20)$$

onde $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ são os autovalores da matriz $[A]$.

Para alguns valores de h e c , foram montadas as Tabelas 2.2, 2.3, 2.4 e 2.5 para os autovalores da matriz e também do respectivo número de condição $\mathcal{K}_2([A])$.

Tabela 2.2: Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 0,50$

	$c = 0,50$			
	λ_1	λ_2	λ_3	$\mathcal{K}_2([A])$
$h = 10^{-1}$	$1,54 \times 10^0$	$-4,82 \times 10^{-4}$	$-3,85 \times 10^{-2}$	$4,00 \times 10^1$
$h = 10^{-2}$	$1,50 \times 10^0$	$-5,33 \times 10^{-8}$	$-4,00 \times 10^{-4}$	$3,75 \times 10^3$
$h = 10^{-3}$	$1,50 \times 10^0$	$-5,33 \times 10^{-12}$	$-4,00 \times 10^{-6}$	$3,75 \times 10^5$
$h = 10^{-4}$	$1,50 \times 10^0$	$-5,33 \times 10^{-16}$	$-4,00 \times 10^{-8}$	$3,75 \times 10^7$
$h = 10^{-5}$	$1,50 \times 10^0$	$-5,33 \times 10^{-20}$	$-4,00 \times 10^{-10}$	$3,75 \times 10^9$
$h = 10^{-6}$	$1,50 \times 10^0$	$-5,33 \times 10^{-24}$	$-4,00 \times 10^{-12}$	$3,75 \times 10^{11}$

Observa-se nessas Tabelas que aparece um autovalor positivo e dois autovalores negativos. O maior autovalor, λ_{max} , será o positivo que aumenta seu valor conforme o parâmetro c aumenta, não dependendo de h . Por outro lado, o menor autorvalor, λ_{min} , será um dos dois autovalores negativos, que diminui seu valor conforme c aumenta e h diminui. Assim sendo, para $\lambda_{min} \rightarrow 0$, pela definição do número de condição, $\mathcal{K}_2(A) \rightarrow \infty$. Ou seja, o mal-condicionamento da

Tabela 2.3: Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 1$

	$c = 1$			
	λ_1	λ_2	λ_3	$\mathcal{K}_2(A)$
$h = 10^{-1}$	$3,02 \times 10^0$	$-6,49 \times 10^{-5}$	$-1,98 \times 10^{-2}$	$1,52 \times 10^2$
$h = 10^{-2}$	$3,00 \times 10^0$	$-6,66 \times 10^{-9}$	$-2,00 \times 10^{-4}$	$1,50 \times 10^4$
$h = 10^{-3}$	$3,00 \times 10^0$	$-6,67 \times 10^{-13}$	$-2,00 \times 10^{-6}$	$1,50 \times 10^6$
$h = 10^{-4}$	$3,00 \times 10^0$	$-6,67 \times 10^{-15}$	$-2,00 \times 10^{-8}$	$1,50 \times 10^8$
$h = 10^{-5}$	$3,00 \times 10^0$	$-6,67 \times 10^{-21}$	$-2,00 \times 10^{-10}$	$1,50 \times 10^{10}$
$h = 10^{-6}$	$3,00 \times 10^0$	$-6,67 \times 10^{-25}$	$-2,00 \times 10^{-12}$	$1,50 \times 10^{12}$

Tabela 2.4: Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 10$

	$c = 10$			
	λ_1	λ_2	λ_3	$\mathcal{K}_2(A)$
$h = 10^{-1}$	$3,00 \times 10^1$	$-6,66 \times 10^{-8}$	$-2,00 \times 10^{-3}$	$1,50 \times 10^4$
$h = 10^{-2}$	$3,00 \times 10^1$	$-6,67 \times 10^{-12}$	$-2,00 \times 10^{-5}$	$1,50 \times 10^6$
$h = 10^{-3}$	$3,00 \times 10^1$	$-6,67 \times 10^{-16}$	$-2,00 \times 10^{-7}$	$1,50 \times 10^8$
$h = 10^{-4}$	$3,00 \times 10^1$	$-6,67 \times 10^{-20}$	$-2,00 \times 10^{-9}$	$1,50 \times 10^{10}$
$h = 10^{-5}$	$3,00 \times 10^1$	$-6,67 \times 10^{-24}$	$-2,00 \times 10^{-11}$	$1,50 \times 10^{12}$
$h = 10^{-6}$	$3,00 \times 10^1$	$-6,67 \times 10^{-28}$	$-2,00 \times 10^{-13}$	$1,50 \times 10^{14}$

Tabela 2.5: Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 100$

	$c = 100$			
	λ_1	λ_2	λ_3	$\mathcal{K}_2(A)$
$h = 10^{-1}$	$3,00 \times 10^2$	$-6,67 \times 10^{-11}$	$-2,00 \times 10^{-4}$	$1,50 \times 10^6$
$h = 10^{-2}$	$3,00 \times 10^2$	$-6,67 \times 10^{-15}$	$-2,00 \times 10^{-6}$	$1,50 \times 10^8$
$h = 10^{-3}$	$3,00 \times 10^2$	$-6,67 \times 10^{-19}$	$-2,00 \times 10^{-8}$	$1,50 \times 10^{10}$
$h = 10^{-4}$	$3,00 \times 10^2$	$-6,67 \times 10^{-23}$	$-2,00 \times 10^{-10}$	$1,50 \times 10^{12}$
$h = 10^{-5}$	$3,00 \times 10^2$	$-6,67 \times 10^{-27}$	$-2,00 \times 10^{-12}$	$1,50 \times 10^{14}$
$h = 10^{-6}$	$3,00 \times 10^2$	$-6,67 \times 10^{-31}$	$-2,00 \times 10^{-14}$	$1,50 \times 10^{16}$

matriz $[A]$ resultará em SELL para o cálculo dos coeficientes de ponderação cada vez mais mal-condicionados à medida que $c/h \rightarrow \infty$. Esse mal-condicionamento é inerente às mais diversas FBRs. Comportamentos análogos podem ser observados com a FBR Gaussiana (Apêndice B).

A Tabela 2.6 mostra os resultados analíticos para os coeficientes de ponderação de primeira derivada em 1-D quando $c \rightarrow \infty$, ($w_{c \rightarrow \infty}^{1x}$), adicionando-se pontos à direita e à esquerda do ponto de referência do suporte local.

De forma análoga, os coeficientes de ponderação para a segunda derivada, ($w_{c \rightarrow \infty}^{2x}$), em 1-D, quando $c \rightarrow \infty$, estão na Tabela 2.7.

Tabela 2.6: Coeficientes de ponderação obtidos para vários n_s e $c \rightarrow \infty$ para a primeira derivada ($w_{c \rightarrow \infty}^{1x}$)

n_s	$x_0 - 3h$	$x_0 - 2h$	$x_0 - h$	x_0	$x_0 + h$	$x_0 + 2h$	$x_0 + 3h$
3			$-1/2h$	0	$1/2h$		
4			$-1/3h$	$-1/2h$	$1/h$	$-1/6h$	
5			$1/12h$	$-2/3h$	0	$2/3h$	$-1/12h$
6			$1/20h$	$-1/2h$	$-1/3h$	$1/h$	$-1/4h$
							$1/30h$

Tabela 2.7: Coeficientes de ponderação obtidos para vários n_s e $c \rightarrow \infty$ para a segunda derivada ($w_{c \rightarrow \infty}^{2x}$)

n_s	$x_0 - 3h$	$x_0 - 2h$	$x_0 - h$	x_0	$x_0 + h$	$x_0 + 2h$	$x_0 + 3h$
3			$1/h^2$	$-2/h^2$	$1/h^2$		
4			$1/h^2$	$-2/h^2$	$1/h^2$	0	
5			$-1/12h^2$	$4/3h^2$	$-5/2h^2$	$4/3h^2$	$-1/12h^2$
6			$-1/12h^2$	$4/3h^2$	$-5/2h^2$	$4/3h^2$	$-1/12h^2$
							0

2.3.2 Suporte Local Bidimensional

O procedimento para o cálculo dos coeficientes de ponderação é análogo para dimensões maiores que $d = 1$. Para o suporte local bidimensional equidistante da Figura 2.11, o SELL que será resolvido simbolicamente para a primeira derivada com relação a x é:

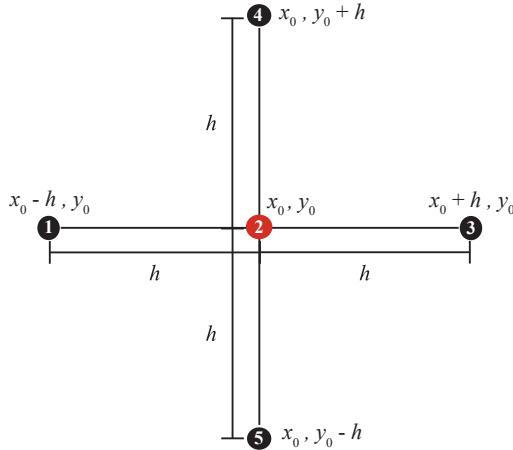


Figura 2.11: Suporte local em torno de um ponto de referência

$$\begin{bmatrix} c & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{4h^2 + c^2} & \sqrt{2h^2 + c^2} & \sqrt{2h^2 + c^2} \\ \sqrt{h^2 + c^2} & c & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} \\ \sqrt{4h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} & c & \sqrt{2h^2 + c^2} & \sqrt{2h^2 + c^2} \\ \sqrt{2h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{2h^2 + c^2} & c & \sqrt{4h^2 + c^2} \\ \sqrt{2h^2 + c^2} & \sqrt{h^2 + c^2} & \sqrt{2h^2 + c^2} & \sqrt{4h^2 + c^2} & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{x_0-h,y_0}^{1x} \\ w_{x_0,y_0}^{1x} \\ w_{x_0+h,y_0}^{1x} \\ w_{x_0,y_0+h}^{1x} \\ w_{x_0,y_0-h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{h}{\sqrt{h^2+c^2}} \\ 0 \\ -\frac{h}{\sqrt{h^2+c^2}} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

A solução analítica do sistema (2.21) é muito grande para escrevê-la aqui. Tomando o limite de $c \rightarrow \infty$, tem-se:

$$\begin{bmatrix} \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0-h, y_0}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0, y_0}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0+h, y_0}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0, y_0+h}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0, y_0-h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2h} \\ 0 \\ \frac{1}{2h} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

Esses coeficientes de ponderação correspondem aos de diferenças finitas centradas de segunda ordem para a primeira derivada com relação a x . Resultados análogos para os pesos podem ser obtidos para a primeira derivada com relação a y . O cálculo dos coeficientes de ponderação para as segundas derivadas também são análogo aos anteriores.

2.4 Abordagens Numéricas para Tratar o Mal Condicionamento dos Sistemas Lineares Locais

Encontrar os coeficientes de ponderação através da solução analítica do SELL (2.5) com um software de linguagem simbólica é uma abordagem interessante que permite obter os valores exatos dos coeficientes para qualquer valor possível de c e h . Entretanto, esse método além de custoso computacionalmente também está restrito a um número muito pequeno de pontos do suporte local. Nesse trabalho, não foi possível obter os pesos para $n_s \geq 7$ por limitações do software de computação simbólica.

Uma outra forma para se obter os coeficientes de ponderação é resolver (2.5) ou (2.7) numericamente. Entretanto, o mal-condicionamento da matriz $[A]$ é inerente às funções de base radial adotadas nos sistemas anteriores, o que impossibilita encontrar coeficientes de ponderação satisfatórios para a aproximação de uma determinada derivada para quaisquer valores do parâmetro de forma. Fornberg *et al.* (2013) cita que existem formas para melhorar o condicionamento da matriz $[A]$, e por conseguinte, obter coeficientes de ponderação mais bem calculados. Pode-se tentar regularizar a matriz $[A]$, como é o caso dos métodos Contour-Padé (Fornberg e Wright, 2004; Sarra e Kansa, 2009), RBF-QR em 2D (Fornberg *et al.*, 2011), RBF-QR na Esfera (Fornberg e Piret, 2008), ou aumentar a precisão aritmética em ponto flutuante nos cálculos da solução dos SELLS (Cheng, 2012). Esse último procedimento, que será abordado no Capítulo 3, é muito mais simples em termos de implementação em compiladores com precisão quádrupla, porém pode se tornar demasiadamente custoso computacionalmente caso seja necessário empregar um software de precisão arbitrária. Torna-se desejável, portanto, explorar um algoritmo capaz de calcular satisfatoriamente os coeficientes de ponderação para suportes

com dezenas de pontos mantida a precisão dupla usual.

2.4.1 MQDL-FBR(GA) Estabilizado - Mudança de Base

Com o inevitável mal-condicionamento dos sistemas de equações lineares locais resultante para o cálculo dos coeficientes de ponderação (pesos) pelo MQDL-FBR, vários pesquisadores iniciaram pesquisas buscando encontrar sistemas mais bem condicionados e estendendo, portanto, o intervalo do parâmetro de forma da FBR, resultando em pesos mais bem calculados.

Inicialmente, Fornberg e Zuev (2007), estudando o fenômeno de Runge para interpolação de funções com FBRs mostraram que a matriz de interpolação (mesma matriz $[A]$) gerada pelas funções de base radial Gaussiana e Multiquádrica em 2-D ($d = 2$), possuem autovalores agrupados e de magnitude como segue:

$$\begin{aligned} & \{O(\epsilon^0)\}, \{O(\epsilon^2)\}, \{O(\epsilon^2)\}, \{O(\epsilon^4)\}, \{O(\epsilon^4)\}, \{O(\epsilon^4)\}, \{O(\epsilon^6)\}, \{O(\epsilon^6)\}, \\ & \{O(\epsilon^6)\}, \{O(\epsilon^6)\}, \{O(\epsilon^8)\}, \{O(\epsilon^8)\}, \{O(\epsilon^8)\}, \{O(\epsilon^8)\}, \dots \end{aligned}$$

ou seja, existem 1 autovalor de ordem ϵ^0 , 2 autovalores de ordem ϵ^2 , 3 autovalores de ordem ϵ^4 , e assim por diante. Isso também ocorre para as FBRs MqI e BE ($p = 3, 4, 5, \dots$) (Fornberg *et al.* (2011)). Fornberg *et al.* (2013) mostraram que para essa sequência o número de condição da matriz $[A]$ cresce muito rapidamente para infinito conforme ϵ tende a zero, da seguinte forma:

$$\mathcal{K}_2([A])_{\epsilon \text{ constante}} = O\left(\epsilon^{-2\lfloor \frac{\sqrt{8n_s-7}-1}{2} \rfloor}\right) \quad (2.23)$$

em que $\lfloor \cdot \rfloor$ denota a parte inteira. Pode-se notar dessa expressão que conforme ϵ diminui e n_s aumenta, o número de condição de $[A]$ cresce ainda mais rapidamente.

Fornberg e Piret (2008) desenvolveram um método estabilizado utilizando a FBR GA e expansões em harmônicos esféricos para obter novas bases, mais bem condicionadas, para a obtenção de coeficientes de ponderação em pontos distribuídos sobre a superfície de uma esfera. Baseados nesse trabalho, Fornberg *et al.* (2011) desenvolveram um método 2-D que utiliza as expansões em harmônicos esféricos das funções de base radial Gaussiana e, em seguida, as substituem por polinômios de Chebyshev visando obter bases mais bem condicionadas. De acordo com os autores, tomando a FBR GA centrada em um ponto (x_i, y_i) , e expandindo em série de Taylor o fator que contém x, y, x_i, y_i (ver equações (2.27) e (2.28)), resulta que o agrupamento das funções polinomiais é dado da seguinte forma:

$$e^{-\epsilon^2(x^2+y^2)} \{ \{1\}, \{x, y\}, \{x^2, xy, y^2\}, \{x^3, x^2y, xy^2, y^3\}, \dots \} \quad (2.24)$$

o qual mostra que para cada potência de ϵ existe um determinado número de funções polinomi-

ais associadas como

Potência de ϵ	0	2	4	6	8	...
Número de funções	1	2	3	4	5	...

que concorda perfeitamente com a ordem e quantidade de autovalores associados a matriz $[A]$ da FBR GA. Essa conformidade não ocorre para as outras FBRs (exceto para algumas BE).

Baseado nos trabalhos anteriores, Fornberg *et al.* (2013) propuseram então um algoritmo que visa tornar o MQDL-FBR mais estabilizado para valores de ϵ arbitrariamente pequenos. Em linhas gerais, consiste em se construir combinações lineares adequadas das FBR GA para criar novas bases funcionais. Essas novas bases, que pertencem ao mesmo espaço das FBR GA, são contudo mais "linearmente independentes" em termos numéricos (ou "mais ortogonais" entre si) e propiciam assim coeficientes de ponderação mais bem calculados para aproximações de operadores. Neste trabalho, esse algoritmo será chamado de MQDL-FBR(GA) Estabilizado.

O algoritmo em 2-D elaborado por Fornberg *et al.* (2013) foi estruturado como segue: dado uma FBR GA, $\varphi(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$, centrada em um ponto $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i)$, $i = 1, 2, \dots, n_s$, as bases diretas, aqui chamadas de $\varphi_i^{(1)}$, são:

$$\begin{aligned} \varphi_i^{(1)}(\mathbf{x}) &= e^{-\epsilon^2((x-x_i)^2+(y-y_i)^2)} \\ &= e^{-\epsilon^2(x_i^2+y_i^2)} e^{-\epsilon^2(x^2+y^2)} e^{2\epsilon^2(xx_i+yy_i)} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Sem perda de generalidade, o termo $e^{-\epsilon^2(x_i^2+y_i^2)}$ é um multiplicador escalar e pode ser ignorado. Assim, pode-se formar um segundo conjunto de bases, no mesmo espaço das bases anteriores (diretas), da seguinte maneira:

$$\varphi_i^{(2)}(\mathbf{x}) = e^{-\epsilon^2(x^2+y^2)} e^{2\epsilon^2(xx_i+yy_i)} \quad (2.27)$$

Fazendo a expansão em série de Taylor do segundo fator exponencial, tem-se:

$$\begin{aligned} \varphi_i^{(2)}(\mathbf{x}) &= e^{-\epsilon^2(x^2+y^2)} \left\{ 1 + \frac{1}{1!}[2\epsilon^2(xx_i+yy_i)]^1 + \frac{1}{2!}[2\epsilon^2(xx_i+yy_i)]^2 + \dots \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(k-1)!}[2\epsilon^2(xx_i+yy_i)]^{k-1} + G_k(z) \right\} \end{aligned} \quad (2.28)$$

sendo $z = 2\epsilon^2(xx_i+yy_i) = 2\epsilon^2\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_i$ e o resto, $G_k(z)$, dado por:

$$G_k(z) = e^z - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{z^j}{j!} \quad (2.29)$$

Seguindo-se os passos do Apêndice C, a função $G_k(z)$ torna-se

$$G_k(z) = \frac{e^z}{(k-1)!} \gamma(k, z) = \frac{e^z}{(k-1)!} \int_0^z t^{k-1} e^{-t} dt \quad (2.30)$$

sendo $\gamma(k, z)$ a função especial Gamma Incompleta.

Os termos sucessivos da expansão em série de Taylor, equação (2.28), diminuem rapidamente de tamanho conforme ϵ decresce. A dificuldade aparente é que os termos que dominam na expansão apresentam grande dependência linear entre os i -valores. Para lidar com essa situação, Fornberg *et al.* (2013) propuseram montar um terceiro conjunto de bases, $\varphi_i^{(3)}$, formado por combinações lineares adequadas das $\varphi_i^{(2)}$ permanecendo ainda no mesmo espaço das FBR GA. A idéia dos autores foi fazer com que coeficientes de (2.28) fossem cancelados analiticamente em vez de cancelados numericamente. Para isso, vetores do espaço nulo ($[P]\vec{v} = \vec{0}$) de uma determinada matriz polinomial, $[P]$, devem ser encontrados, e assim, pode-se, da seguinte maneira, obter o terceiro conjunto de bases:

$$\begin{bmatrix} \varphi_1^{(3)}(\mathbf{x}) \\ \varphi_2^{(3)}(\mathbf{x}) \\ \varphi_3^{(3)}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = e^{-\epsilon^2(x^2+y^2)} \frac{1}{\epsilon^0} [B_0] [G_0(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_1)] \quad (2.31)$$

sendo $[B_0] = 1$.

$$\begin{bmatrix} \varphi_2^{(3)}(\mathbf{x}) \\ \varphi_3^{(3)}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = e^{-\epsilon^2(x^2+y^2)} \frac{1}{\epsilon^2} \underbrace{\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}}_{B_1}_{2 \times 3} \begin{bmatrix} G_1(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_1) \\ G_1(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_2) \\ G_1(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_3) \end{bmatrix}_{3 \times 1} \quad (2.32)$$

sendo $[B_1] = [\mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \right)]^T$, em que $\mathcal{N}([P])$ representa um conjunto de bases para o espaço nulo de uma matriz polinomial $[P]$.

$$\begin{bmatrix} \varphi_4^{(3)}(\mathbf{x}) \\ \varphi_5^{(3)}(\mathbf{x}) \\ \varphi_6^{(3)}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = e^{-\epsilon^2(x^2+y^2)} \frac{1}{\epsilon^4} \underbrace{\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}}_{B_2}_{3 \times 6} \begin{bmatrix} G_2(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_1) \\ G_2(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_2) \\ G_2(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_3) \\ G_2(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_4) \\ G_2(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_5) \\ G_2(2\epsilon^2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_6) \end{bmatrix}_{6 \times 1} \quad (2.33)$$

$$\text{sendo } [B_2] = \left[\mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 & y_5 & y_6 \end{bmatrix} \right) \right]^T$$

Note que a matriz polinomial, $[P]$, utilizada para encontrar os vetores do espaço nulo para

o próximo conjunto de bases $\varphi_7^{(3)} \dots \varphi_{10}^{(3)}$ é da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 & x_7 & x_8 & x_9 & x_{10} \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 & y_5 & y_6 & y_7 & y_8 & y_9 & y_{10} \\ x_1^2 & x_2^2 & x_3^2 & x_4^2 & x_5^2 & x_6^2 & x_7^2 & x_8^2 & x_9^2 & x_{10}^2 \\ x_1y_1 & x_2y_2 & x_3y_3 & x_4y_4 & x_5y_5 & x_6y_6 & x_7y_7 & x_8y_8 & x_9y_9 & x_{10}y_{10} \\ y_1^2 & y_2^2 & y_3^2 & y_4^2 & y_5^2 & y_6^2 & y_7^2 & y_8^2 & y_9^2 & y_{10}^2 \end{bmatrix}_{6 \times 10}$$

que resultará em uma matriz $[B_3]$ de dimensão 4×10 .

A utilização dos vetores do espaço nulo faz com que os termos da expansão em série de Taylor, (2.28), sejam cancelados analiticamente.

O processo para obtenção das novas bases, $\varphi_i^{(3)}$, segue esse algoritmo para os n_s pontos do suporte local. O algoritmo computacional fornecido por Lehto (2014) para o cálculo dos coeficientes de ponderação obtidos com essa nova base, escrito em linguagem Matlab®, utiliza a fatoração QR para encontrar os vetores do espaço nulo da matriz polinomial. Neste trabalho, todo algoritmo computacional para o cálculo dos pesos foi baseado no de Lehto (2014), mas foi feito em linguagem Fortran com certas adaptações. Optou-se, por exemplo, em encontrar os vetores do espaço nulo pela Decomposição em Valores Singulares (em inglês Singular Values Decomposition - SVD). O fluxograma da implementação pode ser visto no Apêndice D.

Fornberg *et al.* (2013) ressalvam que uma modificação no programa foi necessária para quando o suporte local vier de uma nuvem estruturada de pontos. Neste caso, alguns termos polinomiais não ocorrem na expansão e neste caso não devem ser cancelados. Ocorre que, dependendo da numeração local dos pontos do suporte, a matriz polinomial, $[P]$, pode ter *rank* deficiente, ou seja, possuir um número de vetores linearmente independente menor que o número de pontos do suporte local. Na modificação do programa, uma reordenação dos pontos do suporte é feita de modo a garantir que a matriz $[P]$ tenha *rank* completo, isto é, o número de vetores linearmente independentes seja n_s .

Com as novas bases devidamente calculadas, os coeficientes de ponderação serão obtidos resolvendo o sistema análogo a (2.5) e, portanto, deve-se calcular derivadas parciais necessárias das novas bases (lado direito do sistema). As avaliações das derivadas parciais de $e^{-\epsilon^2(x^2+y^2)}G_k(z)$ (2-D) são fornecidas por Fornberg *et al.* (2013).

Com a construção do algoritmo dessa forma, a função de base $\varphi_1^{(3)}$ se aproximará da constante 1; $\varphi_2^{(3)}$ e $\varphi_3^{(3)}$ de combinações lineares de x e y ; $\varphi_4^{(3)}$, $\varphi_5^{(3)}$ e $\varphi_6^{(3)}$ de combinações lineares de x^2 , xy e y^2 , e assim por diante, quando $\epsilon \rightarrow 0$. As novas funções de base pertencem ainda ao mesmo espaço das FBR GA originais e esse fato acarreta variações entre as funções de base $\varphi_k^{(3)}$ e as funções polinomiais exatas, para $\epsilon \neq 0$.

Para averiguar a eficiência do MQDL-FBR(GA) Estabilizado, alguns suportes locais fo-

ram testados. Inicialmente, os coeficientes de ponderação de primeiras e segunda derivadas para suportes unidimensionais ($h = 1$) calculados pelo MQDL-FBR(GA) Estabilizado foram comparados com os pesos analíticos $w_{c \rightarrow \infty}^{1x}$ e $w_{c \rightarrow \infty}^{2x}$ da Seção 2.3 (Tabelas 2.6 e 2.7) através do erro relativo, como segue:

$$\|\varepsilon\| = \frac{\left(\sum_{i=1}^{n_s} (w_{num} - w_{c \rightarrow \infty})_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\sum_{i=1}^{n_s} (w_{c \rightarrow \infty})_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (2.34)$$

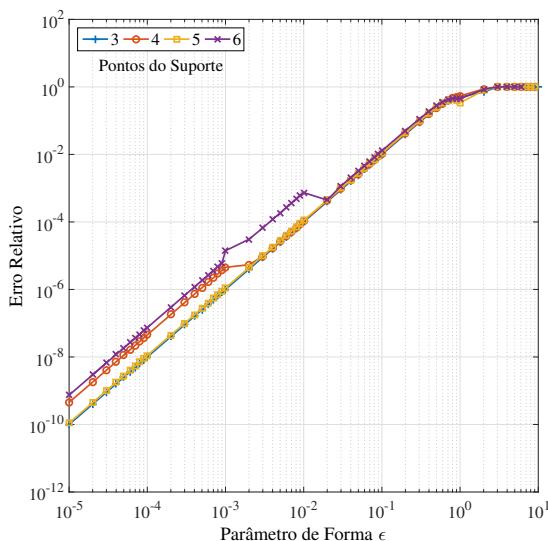


Figura 2.12: Erros relativos nos coeficientes de ponderação de primeiras derivadas unidimensionais para vários n_s variando-se ϵ

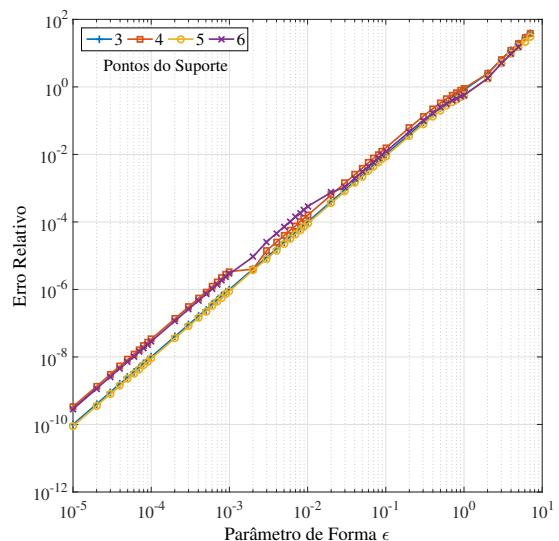


Figura 2.13: Erros relativos nos coeficientes de ponderação de segundas derivadas unidimensionais para vários n_s variando-se ϵ

Nas Figuras 2.12 e 2.13, conforme ϵ diminui, os erros relativos também diminuem e, portanto, os coeficientes de ponderação numéricos estão se aproximando dos respectivos valores analíticos das Tabelas 2.6 e 2.7. Também nota-se uma variação nos erros relativos para os suportes de $n_s = 4$ e $n_s = 6$, que são suportes descentrados.

Alguns testes também foram feitos para suportes locais bidimensionais. Os suportes locais das Figuras 2.14a) e 2.14b) vieram de uma nuvem não-estruturada enquanto o da Figura 2.14c) veio de uma nuvem estruturada uniforme. Como os coeficientes de ponderação exatos não são conhecidos nesses casos, as comparações entre os pesos calculados em Fortran foram feitas com o programa em Matlab® fornecido por Lehto (2014). Assim sendo, a diferença

relativa utilizada foi definida como

$$\|\delta\| = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_s} (w_{\text{Fortran}} - w_{\text{Matlab}})_i^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_s} (w_{\text{Matlab}})_i^2}} \quad (2.35)$$

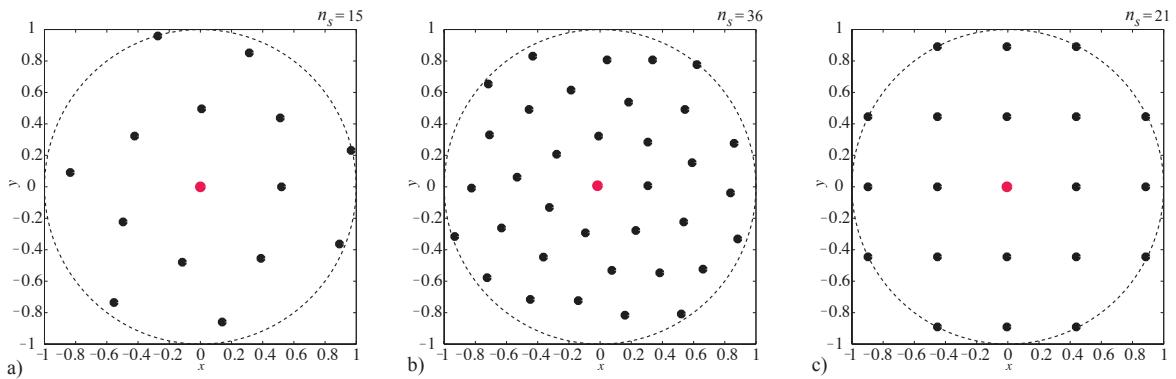


Figura 2.14: a) Suporte local oriundo de uma NPNE ($n_s = 15$), b) Suporte local oriundo de uma NPNE ($n_s = 36$) e c) Suporte local oriundo de uma NPE uniforme ($n_s = 21$)

Os resultados da diferença relativa em função do parâmetro de forma ϵ das primeiras derivadas com relação a x e y e do Laplaciano para os suportes das Figuras 2.14a), 2.14b) e 2.14c) são mostrados, respectivamente, nas Figuras 2.15, 2.16 e 2.17. Para os suportes não-estruturados existe um intervalo em que a diferença relativa aumenta significativamente e em seguida diminui quase exponencialmente conforme ϵ decresce. Para o suporte estruturado esse intervalo ocorre para valores um pouco menores em comparação com os suportes anteriores. Essa diferença entre as duas implementações, em Matlab® e em Fortran, pode ser justificada pela implementação da Função Gamma Incompleta. Fornberg *et al.* (2013) comentam que os termos restantes da função $G_k(z)$, a partir da função *gammainc* do Matlab®, são obtidos sem perda de dígitos significativos mesmo com ϵ bastante pequeno. Já a função correspondente implementada no Fortran baseou-se em uma fórmula recursiva (de recorrência), (C.11), e seus valores especiais (C.12) e (C.13) (ver Apêndice C). Assim, pode ocorrer uma perda de precisão devido ao acúmulo de erro de arredondamento causado pela recursividade. Essa perda de precisão, contudo, tende a desaparecer à medida que $\epsilon \rightarrow 0$, sugerindo que nesse limite os resultados das implementações em Matlab® e Fortran são virtualmente equivalentes.

Quando os coeficientes de ponderação forem calculados através do procedimento de cálculo de novas bases proposto por Fornberg *et al.* (2013), o método será denotado por MQDL-FBR(GA) Estabilizado.

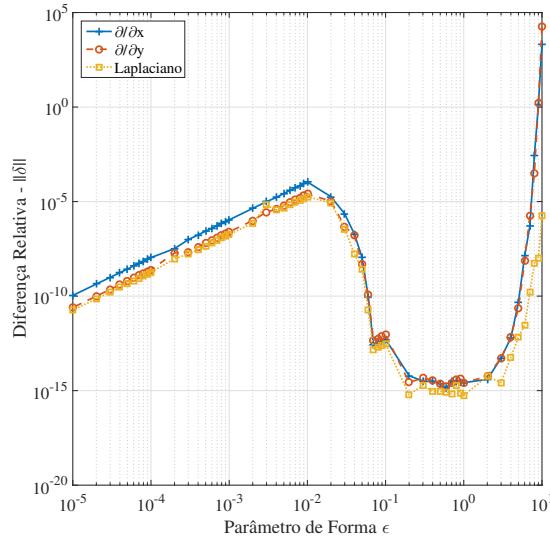


Figura 2.15: Comparação entre os pesos de primeiras e segundas derivadas calculados no Matlab® e no Fortran para o suporte da Figura 2.14a)

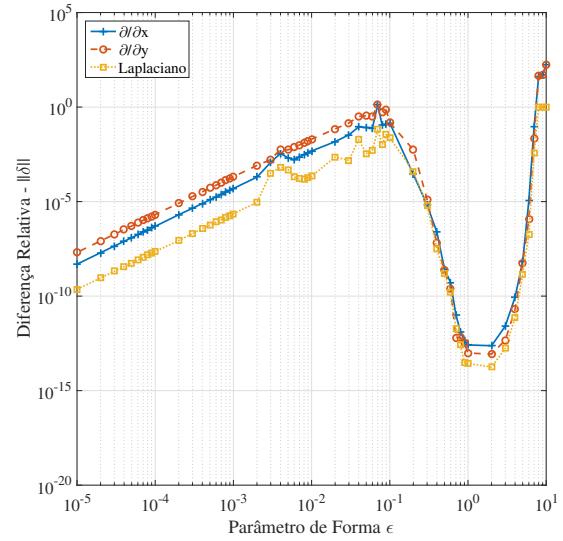


Figura 2.16: Comparação entre os pesos de primeiras e segundas derivadas calculados no Matlab® e no Fortran para o suporte da Figura 2.14b)

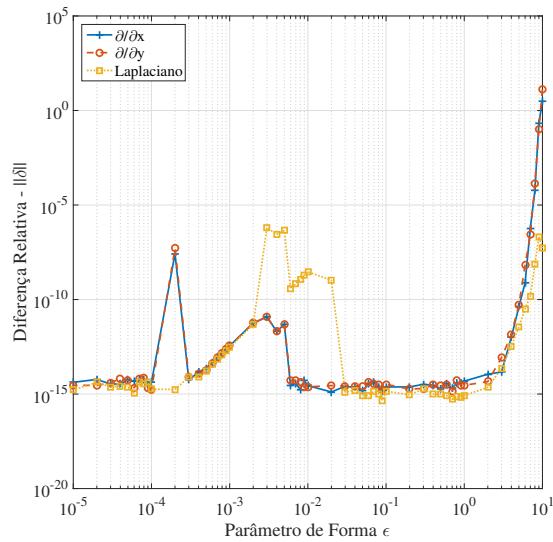


Figura 2.17: Comparação entre os pesos de primeiras e segundas derivadas calculados no Matlab® e no Fortran para o suporte da Figura 2.14c)

2.4.2 MQDL-FBR(PHS) com Polinômios Suplementares

De acordo com Flyer *et al.* (2016a,b) para se obter os coeficiente de ponderação força-se que a combinação linear dos valores da função, equação (2.3), seja exata para o interpolante

$s(\mathbf{x})$, definido da seguinte forma:

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{n_s} \lambda_k \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|) + \sum_{k=1}^{\binom{q+d}{q}} \gamma_k \text{pol}_k(\mathbf{x}) \quad (2.36)$$

com as seguintes restrições

$$\sum_{k=1}^{n_s} \lambda_k \text{pol}_j(\mathbf{x}_k) = 0, \quad j = 1, \dots, \binom{q+d}{q} \quad (2.37)$$

no qual $\text{pol}(\mathbf{x})$ são todos os polinômios multivariados até o grau q . Essas restrições são adicionadas para garantir solução única de um sistema de equações lineares e tornar a matriz do sistema quadrada.

Dessa forma, o cálculo dos coeficientes de ponderação resulta em um sistema de equações lineares com um conjunto de polinômios suplementares. Portanto, tomando uma FBR (PHS) parcialmente suave, como por exemplo $\varphi(r) = r^{2p-1}$, a primeira derivada com relação a x , a exemplo do sistema (2.7), e com 1, x , e y como polinômios suplementares, é:

$$\left[\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial x} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1\|_2^{2p-1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{n_s}\|_2^{2p-1} \\ \hline \frac{\partial}{\partial x} 1|_{\mathbf{x}_i} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} x|_{\mathbf{x}_i} = 1 \\ \frac{\partial}{\partial x} y|_{\mathbf{x}_i} = 0 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{ccccc|ccc} \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|_2^{2p-1} & \dots & \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_{n_s}\|_2^{2p-1} & | & 1 & x_1 & y_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & | & \vdots & \vdots & \vdots \\ \|\mathbf{x}_{n_s} - \mathbf{x}_1\|_2^{2p-1} & \dots & \|\mathbf{x}_{n_s} - \mathbf{x}_{n_s}\|_2^{2p-1} & | & 1 & x_1 & y_1 \\ \hline 1 & \dots & 1 & | & 0 & 0 & 0 \\ x_1 & \dots & x_{n_s} & | & 0 & 0 & 0 \\ y_1 & \dots & y_{n_s} & | & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} w_{i,1}^{1x} \\ \vdots \\ w_{i,n_s}^{1x} \\ \hline w_{i,n_s+1}^{1x} \\ w_{i,n_s+2}^{1x} \\ w_{i,n_s+3}^{1x} \end{array} \right] \quad (2.38)$$

Os coeficientes de ponderação w_{i,n_s+1}^{1x} , w_{i,n_s+2}^{1x} e w_{i,n_s+3}^{1x} , após a solução do sistema, são ignorados. A quantidade de polinômios suplementares podem ser escolhidos de acordo com o maior grau do polinômio. Assim, a Tabela 2.8 mostra a sequência de polinômios que podem ser usados na extensão o sistema linear para o cálculo dos coeficientes de ponderação. De acordo com essa sequência, no sistema estendido (2.38), $q = 1$ e, portanto, o número total de polinômios foi 3, ou seja, 1, x e y .

Assim, caso o grau do polinômio escolhido seja $q = 2$, por exemplo, as bases polinomiais usadas na extensão do sistema linear (2.38) deverão ser 6: 1, x , y , x^2 , xy e y^2 .

No Apêndice A apresentam-se mais detalhes sobre o MQDL-FBR no contexto de interpolação de dados dispersos e no cálculo de operadores utilizando uma interpretação de interpolante juntamente com polinômios suplementares.

Tabela 2.8: Polinômios suplementares em 2-d

Bases polinomiais	Grau do Polinômio (q)	Número Total de Polinômios
1	0	1
$x y$	1	3
$x^2 xy y^2$	2	6
$x^3 x^2 y xy^2 y^3$	3	10
\vdots	\vdots	\vdots
$x^q x^{q-1} y \dots xy^{q-1} y^q$	q	$\frac{(q+2)!}{q!2!}$

As vantagens desse tipo de abordagem, de acordo com Flyer *et al.* (2016a), são que: i) escolhendo a PHS não há necessidade de se preocupar com a escolha de um parâmetro de forma, que é um número real (ver Tabela 2.1); ii) o uso de polinômios suplementares de um certo grau mínimo garante solução única quando se escolhe FBR condicionalmente positiva definida; iii) incluir polinômios de baixa ordem pode melhorar a precisão das aproximações nas fronteiras do domínio (Fornberg *et al.*, 2002); iv) a ordem de precisão da aproximação do método está ligada ao maior grau do polinômio suplementar, que é um número inteiro. Desse modo, é possível controlar de certa forma a ordem de precisão desejada com a escolha do grau do polinômio, cujo máximo permitível depende do número de pontos do suporte local (n_s). Esse aspecto será discutido no próximo capítulo.

Quando os pesos de (2.3) forem calculados com as PHS usando polinômios suplementares através de (2.38), por exemplo, o método será denotado por MQDL-FBR(PHS).

Capítulo 3

Testes com a Equação de Poisson

Este capítulo visa avaliar numericamente informações importantes sobre o MQDL-FBR para aproximação de operadores diferenciais na solução de EDPs. Para isso, o método foi aplicado na solução da equação de Poisson em um domínio bidimensional, quadrado e unitário ($0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq y \leq 1$).

Os primeiros testes apresentados referem-se a nuvens estruturadas com suporte fixo e centrado, usando a estratégia de pontos fantasmas, para destacar a viabilidade da extensão do intervalo do parâmetro de forma no MQDL-FBR(GA) Estabilizado frente ao MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) (seção 3.2).

Na seção 3.3, são apresentados testes com o MQDL-FBR(Mq), mostrando a influência benéfica do aumento de precisão em ponto flutuante no cálculo dos coeficientes de ponderação (de precisão dupla para quádrupla). Tanto nuvens estruturadas como não-estruturadas são testadas, sem pontos fantasmas, com o critério de pontos mais próximos ao ponto de referência na formação dos suportes locais. Nas nuvens não-estruturadas, somente os pontos de fronteira são dispostos de modo regular.

Em seguida (seção 3.4), são apresentadas comparações entre o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) em diversas soluções exatas da equação de Poisson, destacando-se a influência de fatores importantes na utilização dessas duas abordagens: parâmetro de forma ϵ (caso GA), quantidade de pontos do suporte local n_s , quantidade de pontos da discretização do domínio N (refinamento de nuvem, h_{medio}) e maior grau permissível do polinômio suplementar (caso PHS). Estimativas de ordem de precisão, *a posteriori*, para quantidades diversas de pontos dos suportes locais, n_s , foram encontradas para ambas as metodologias. Por último, erros absolutos nas primeiras e segundas derivadas de uma função de teste foram avaliadas em todos os pontos da discretização do domínio usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS).

3.1 Discretização da Equação de Poisson com o MQDL-FBR

A equação de Poisson é dada por:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) \quad (3.1)$$

As condições de contorno são dadas pela condição de Dirichlet, ou seja, os pontos das fronteiras são tratados como pontos onde a solução é conhecida ($u_{fronteira} = u_{analitica}$).

De posse de qualquer solução analítica $u(x, y)$ é possível obter a função $f(x, y)$ de acordo com a equação (3.1). Para os testes numéricos quatro soluções analíticas foram adotadas. As funções u_1 , u_2 , u_3 e u_4 são definidas nas equações (3.2), (3.3), (3.4) e (3.5) e seus gráficos, respectivamente, nas Figuras 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4. A função u_1 foi proposta por Ding *et al.* (2005) e u_4 por Franke (1982), enquanto u_2 e u_3 foram propostas pelo autor.

$$u_1(x, y) = x^2 + y^2 \quad (3.2)$$

$$u_2(x, y) = \frac{-4x}{7x^2 + 9y^2 + 1} \quad (3.3)$$

$$u_3(x, y) = \frac{\sin(8\sqrt{x^2 + (y + 0.5)^2})}{\sqrt{x^2 + (y + 0.5)^2}} \quad (3.4)$$

$$u_4(x, y) = 0.75 \exp\left(-\frac{(9x - 2)^2 + (9y - 2)^2}{4}\right) + 0.75 \exp\left(-\frac{(9x + 1)^2}{49} - \frac{9y + 1}{10}\right) + \\ + 0.5 \exp\left(-\frac{(9x - 7)^2 + (9y - 3)^2}{4}\right) - 0.2 \exp(-(9x - 4)^2 - (9y - 7)^2) \quad (3.5)$$

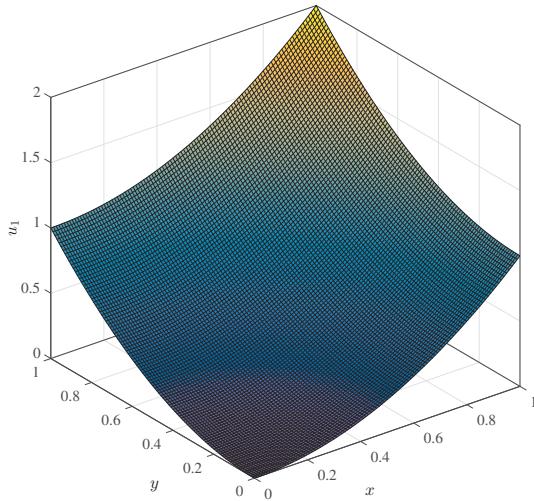
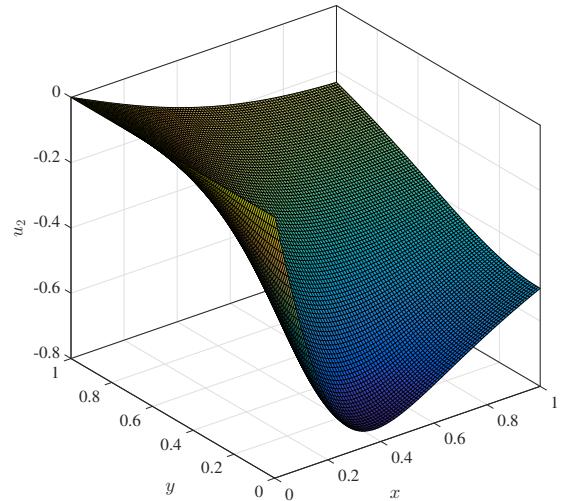
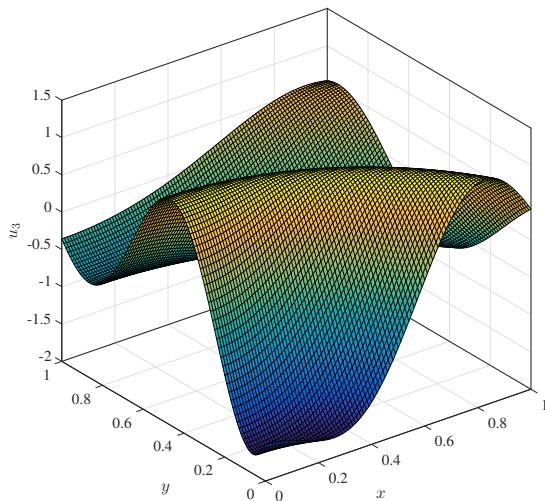
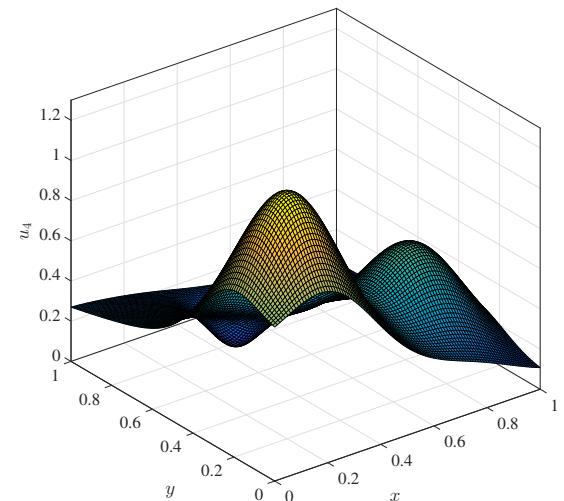
A discretização da equação de Poisson, equação (3.1), para um nó interior i , toma a seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_i)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x_i, y_i)}{\partial y^2} = f(x_i, y_i) \quad (3.6)$$

Pelo MQDL-FBR, sabe-se que:

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_i)}{\partial x^2} = \sum_{j=1}^{n_s} w_{i,j}^{2x} u(x_j, y_j) \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_i)}{\partial y^2} = \sum_{j=1}^{n_s} w_{i,j}^{2y} u(x_j, y_j) \quad (3.8)$$

**Figura 3.1:** Gráfico da função u_1 **Figura 3.2:** Gráfico da função u_2 **Figura 3.3:** Gráfico da função u_3 **Figura 3.4:** Gráfico da função u_4

Substituindo (3.7) e (3.8) em (3.6) e denotando $f(x_i, y_i)$ por f_i e também $u(x_j, y_j)$ por u_j , encontra-se a seguinte equação discretizada pelo MQDL-FBR:

$$\sum_{j=1}^{n_s} (w_{i,j}^{2x} + w_{i,j}^{2y}) u_j = f_i \quad (3.9)$$

sendo $w_{i,j}^{2x}$ e $w_{i,j}^{2y}$ os coeficientes de ponderação para o nó de referência i associados com as segundas derivadas com relação a x e a y , respectivamente. O índice i representa uma indexação global enquanto j representa uma indexação local dos nós de suporte incluindo também o nó de referência. Sem perda de generalidade, o índice global i é sempre associado ao índice local $j = 1$.

De posse da solução numérica da equação de Poisson utilizando o MQDL-FBR para os nós internos (N_{int}), e sabendo *a priori* a solução analítica, o erro relativo referente à precisão do método foi definido como

$$\|\varepsilon\| = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_{int}} (u_{num} - u_{exata})_i^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_{int}} (u_{exata})_i^2}} \quad (3.10)$$

3.2 Testes em Nuvens Estruturadas - Suporte Fixo e Centrado

Inicialmente, os testes com a equação de Poisson foram feitos em uma nuvem estruturada ("malha uniforme") de 21×21 pontos. Para comparação entre o MQDL-FBR(Mq), MQDL-FBR(GA) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado, adotaram-se três suportes locais fixos e centrados (estêncis), Figura 3.5, e variou-se o parâmetro de forma no intervalo entre 10 e 10^{-5} . Em seguida, verificou-se a precisão do MQDL-FBR(GA) Estabilizado para cada suporte local através de nuvens estruturadas de 21×21 , 61×61 , 93×93 , 118×118 e 201×201 pontos, para um parâmetro de forma fixo. A solução analítica utilizada nesses testes foi a u_1 .

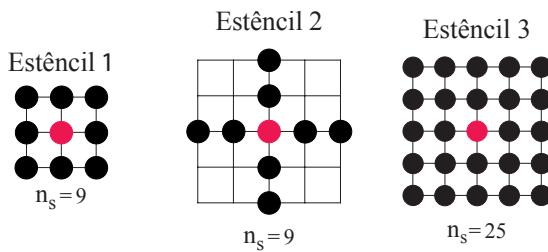


Figura 3.5: Suportes locais fixos utilizados nos testes numéricos

Fixando-se a configuração (estrutura e a quantidade de pontos) de um suporte local, os coeficientes de ponderação para todos os pontos de referências do domínio discretizado serão os mesmos, sendo assim necessário calcular os pesos de um único suporte local para cada parâmetro de forma ϵ . Além disso, dependendo da configuração do suporte, faz-se necessário a utilização de pontos fora do domínio de simulação, também chamados de pontos fantasma. Isso se aplica para os estêncis 2 e 3 da Figura 3.5, por exemplo. Os valores da solução numérica para os pontos fantasma foram tomados como iguais aos da solução analítica, ou seja, $u_{fantasma} = u_{analitica}$ (assim como os da fronteira).

A solução numérica do Sistema de Equações Lineares Global (SELG), dado por (3.9), foi obtida pelo Método Iterativo de Relaxações Sucessivas, da seguinte forma:

$$u_i^{it+1} = (1 - f_r)u_i^{it} + f_r u_*^{it} \quad (3.11)$$

sendo f_r o parâmetro de relaxação. Quando $0 < f_r \leq 1$ o método denomina-se Sub Relaxações Sucessivas (SuR) e para $1 \leq f_r < 2$ denomina-se Sobre Relaxações Sucessivas (SoR). Na expressão (3.11), u_* foi obtida pelo processo iterativo de Gauss-Seidel, dado por:

$$u_*^{it+1} = \frac{f_i - \sum_{k=2}^{n_s} (w_{i,k}^{2x} + w_{i,k}^{2y})u_k^{it}}{w_{i,1}^{2x} + w_{i,1}^{2y}} \quad (3.12)$$

A solução numérica da Equação de Poisson foi encontrada através do método SoR e, de acordo com sugestões da literatura (Ferziger (1981)), o parâmetro de relaxação, f_r , para uma malha uniforme pode ser calculado por:

$$f_r = \frac{8 - 4\sqrt{4 - \delta^2}}{\delta^2} \quad (3.13)$$

sendo $\delta = \cos\left(\frac{\pi}{N_x}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{N_y}\right)$. N_x e N_y são a quantidade de pontos (nós) na direção x e y , respectivamente. No presente trabalho $N_x = N_y$.

A média aritmética dos parâmetros de relaxação, calculado pela equação (3.13) para cada nuvem utilizada, foi adotado em todos os testes desta seção, ou seja, $f_r = 1,8989$. A tolerância para a convergência do Método de Relaxações ficou em torno de 10^{-13} .

As Figuras 3.6, 3.7 e 3.8, em escala log-log, mostram os resultados numéricos obtidos na aproximação da função analítica u_1 através do MQDL-FBR(Mq), MQDL-FBR(GA) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado, respectivamente, para os três estêncis, NPE de 21×21 pontos, em função do parâmetro de forma ϵ .

Observa-se claramente nesses testes simples (Figuras 3.6 e 3.7) que as soluções numéricas com o MQDL-FBR(Mq) e o MQDL-FBR(GA) divergem para os três estêncis locais quando o fator de forma assume valores abaixo de um certo limite ($\epsilon \lesssim 0,5$, nos casos). Esse fato já era esperado, conforme já mencionado na seção 2.3 do Capítulo 2, devido ao mal-condicionamento da matriz do sistema de equações lineares local para o cálculo dos coeficientes de ponderação. Entretanto, essas divergências em geral não ocorrem com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado (Figura 3.8), sendo possível encontrar soluções numéricas para toda a faixa do parâmetro de forma estudada e, para ϵ pequeno, erros relativos abaixo de 10^{-14} (próximo da precisão da máquina).

Na Figura 3.9 observa-se que os erros relativos em função do refinamento da nuvem de pontos estruturada (refinamento de "malha", h), em escala log-log, para os estêncis 1, 2 e 3

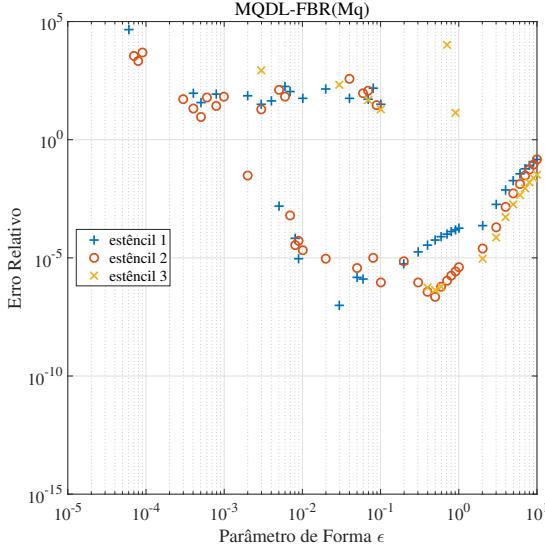


Figura 3.6: Erro relativo em função de ϵ com o MQDL-FBR(Mq) para os estêncéis de teste

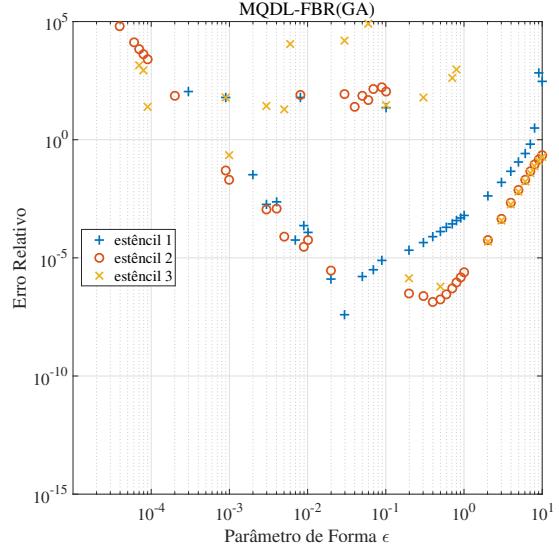


Figura 3.7: Erro relativo em função de ϵ com o MQDL-FBR(GA) para os estêncéis de teste

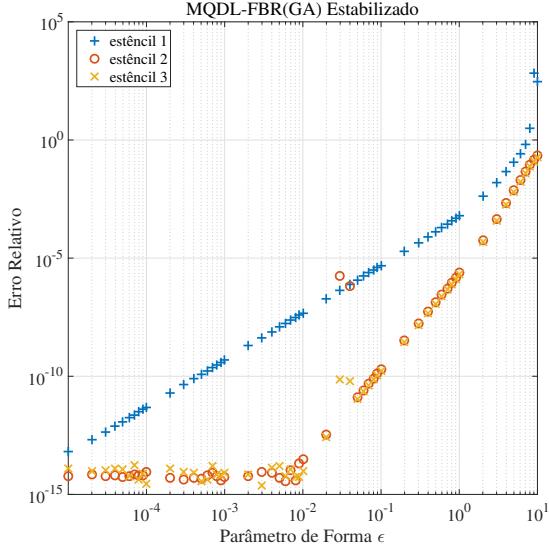


Figura 3.8: Erro relativo em função de ϵ com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado para os estêncéis de teste

são retas e, isso implica que a estimativa de erro é $O(h^l)$ (LeVeque, 2007), sendo l a ordem de precisão do MQDL-FBR(GA) Estabilizado. Na Tabela 3.1 são aferidas as ordens de precisão do método fixando-se o parâmetro de forma em 0,5. Para o estêncil 1 a ordem de precisão foi de aproximadamente 2, enquanto que para os estêncéis 2 e 3 a ordem foi próxima a 4. Nota-se que há uma tendência de ganho de precisão, estêncéis 2 e 3 em relação ao 1, quando se aumenta a extensão do estêncil. Por outro lado, mesmo aumentando o número de pontos do suporte local, caso do estêncil 3 frente ao estêncil 2, a ordem de precisão não aumenta. Isso ocorre

porque os coeficientes de ponderação obtidos para o estêncil 3, nas direções x e y , ficam muito próximos dos coeficientes correspondentes obtidos para o estêncil 2, enquanto os coeficientes dos outros pontos do suporte tendem a zero, para $\epsilon \rightarrow 0$. Isso demonstra a falta de compacidade do MQDL-FBR, que não é capaz de gerar pesos semelhantes aos de DF compactas, na sua abordagem tradicional. Realmente, essa é uma tendência indesejável do MQDL-FBR, mas que pode ser superada pelo emprego de uma abordagem hermitiana (Wright e Fornberg, 2006).

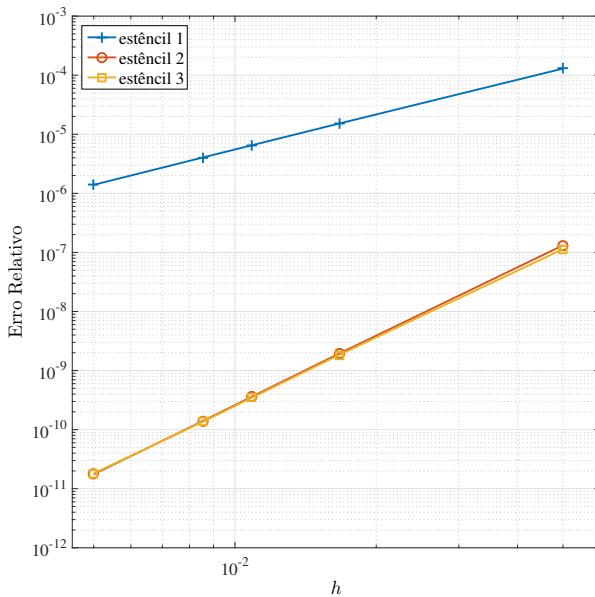


Figura 3.9: Variação do erro relativo com o refinamento de nuvem estruturada, h , para os estêncéis 1, 2 e 3

Tabela 3.1: Ordem de precisão obtidas para os estêncéis 1, 2 e 3

estêncéis	1	2	3
l	1,9662	3,8769	3,8057

Com esses testes iniciais fica claro a importância de se poder estender o intervalo de utilização do parâmetro de forma da FBR ou mesmo utilizar abordagens que não dependam desse parâmetro, como é o caso do MQDL-FBR(PHS). Uma alternativa simples e de fácil implementação é aumentar a precisão na aritmética de ponto flutuante no cálculo dos coeficientes de ponderação no MQDL-FBR. Isso será discutido na próxima seção.

3.3 Testes em Nuvens Estruturadas e Não-Estruturadas - Cálculo dos Pesos em Precisão Dupla e Quádrupla

Nesta seção, discute-se como o aumento de precisão numérica (quantidade dígitos significativos na aritmética de ponto flutuante), implementado somente na subrotina de cálculo dos coeficientes de ponderação, influencia na obtenção da solução numérica da Equação de Poisson pelo MQDL-FBR(Mq). Normalmente utiliza-se precisão dupla (em inglês double precision) com 15 dígitos significativos. O Intel Visual Fortran 11 permite a implementação de variáveis em precisão quádrupla (em inglês quadruple precision) com 33 dígitos significativos. Nessa seção, concretiza-se também o conceito de Nuvem de Pontos Estruturada e Não-Estruturada, a serem utilizadas como discretizações dos domínios em todos os demais testes deste trabalho.

Para a solução numérica da equação de Poisson, dois tipos de nuvens de pontos da discretização do domínio foram adotadas. Discretizações com pontos correspondentes a um reticulado regular serão chamados de Nuvens de Pontos Estruturadas (NPE), ou somente Nuvens Estruturadas (NE). De outro modo, elas serão chamadas de Nuvens de Pontos Não-Estruturadas (NPNE), ou somente Nuvens Não-Estruturadas (NNE). As Figuras 3.10 e 3.11 exemplificam as NPE e NPNE. Três NPEs foram utilizadas: 61x61 (3721 pontos), 93x93 (8649 pontos) e 118x118 (13924 pontos). Para comparação entre as nuvens, as NPNEs geradas foram de 3738 pontos, 8636 pontos e 13931 pontos.

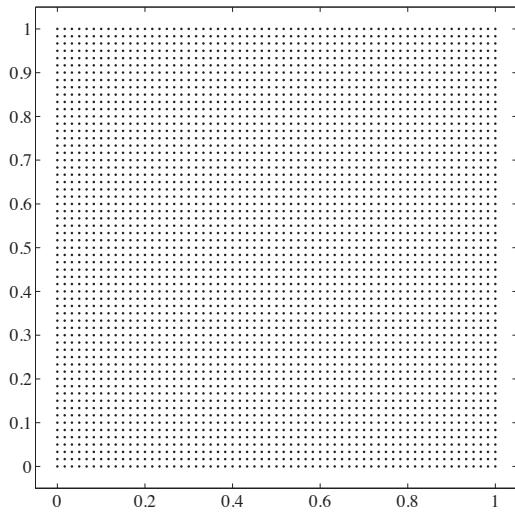


Figura 3.10: Nuvem de pontos estruturada (NPE): $61 \times 61 = 3721$ pontos

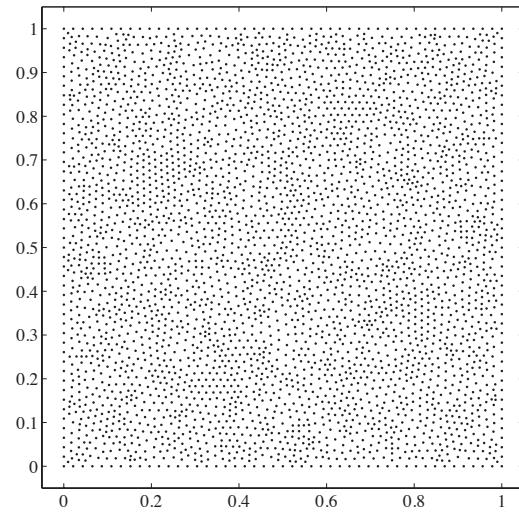


Figura 3.11: Nuvem de pontos não-estruturada (NPNE): 3738 pontos

As NPNEs foram obtidas a partir de uma malha não-estruturada triangular, oriunda do *pdetool* do Matlab®, em que somente as coordenadas dos pontos da discretização foram usadas,

como pode ser visto na Figura 3.12. Uma das contribuições desse trabalho é verificar se esse tipo de discretização é suficiente para resolver a equação de Poisson (condição de contorno de Dirichlet) e também problemas que envolvam cálculos de operadores nos pontos de fronteira, visto que na literatura é usual a NPNE possuir uma malha estruturada próximo a fronteira, como foi exemplificado na revisão bibliográfica (por exemplo, Figura 1.1).

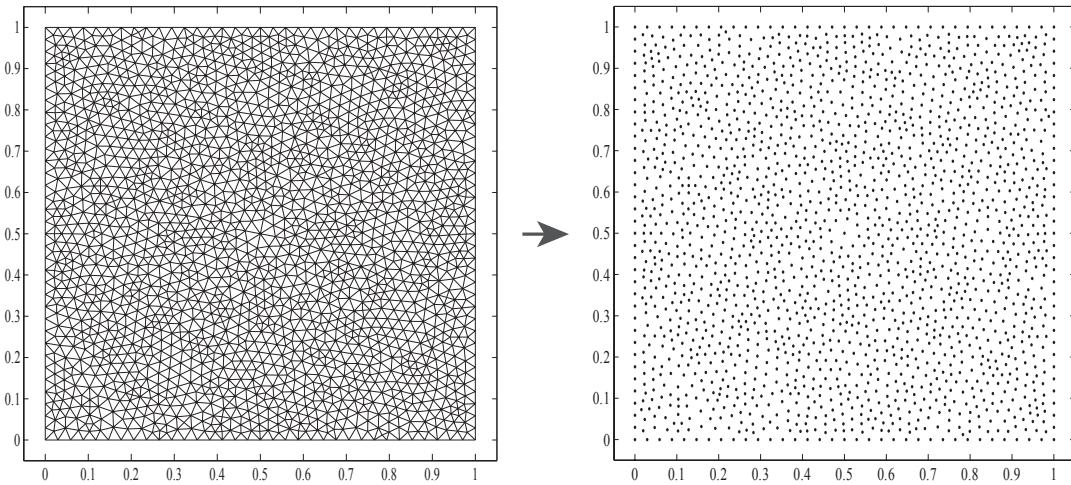


Figura 3.12: Formação da NPNE a partir de uma malha não-estruturada triangular

O critério dos pontos mais próximos ao ponto de referência foi usado para formação dos suportes locais em todos os casos. Para os testes numéricos dessa seção, o número de pontos do suporte local foi fixado em 9 ($n_s = 9$). Variou-se o parâmetro de forma c no intervalo de $0,04 \leq c \leq 7,50$ com incremento de 0,02 para as diversas nuvens de pontos. Esse procedimento foi feito para as duas funções de teste, u_1 e u_3 . A solução do SELG, resultante de (3.9), foi feita pelo SoR em NPE (parâmetro de relaxação $fr = 1,8958$) e SuR em NPNE (parâmetro de relaxação $fr = 0,75$). A tolerância do Método de Relaxações foi fixada em 10^{-8} em todos os testes dessa seção. A utilização desse método foi motivada por ser de fácil implementação computacional e também por resultados satisfatórios obtido por autores como Shu *et al.* (2003) e Ding *et al.* (2005) usando-o em suas simulações numéricas.

As Figuras 3.13 e 3.14 ilustram os resultados numéricos que convergiram obtidos com a subrotina do cálculo dos coeficientes de ponderação em dupla precisão. Destaca-se o comportamento parecido do erro relativo diante das duas soluções analíticas. Entretanto, é importante salientar que para as NPEs aparecem instabilidades numéricas da solução a partir de um determinado parâmetro de forma c . Estas instabilidades ocorrem devido ao mal-condicionamento das matrizes $[A]_i$ utilizadas nos cálculos dos coeficientes de ponderação. Este comportamento não foi observado para as NPNEs. Porém, vale ressaltar que, a partir de um determinado valor do parâmetro de forma, também há divergência das soluções usando NPNE, o que explica a interrupção das linhas pontilhadas nas Figuras 3.13 e 3.14. Esse fato ocorre devido ao mal-

condicionamento dos SELLs.

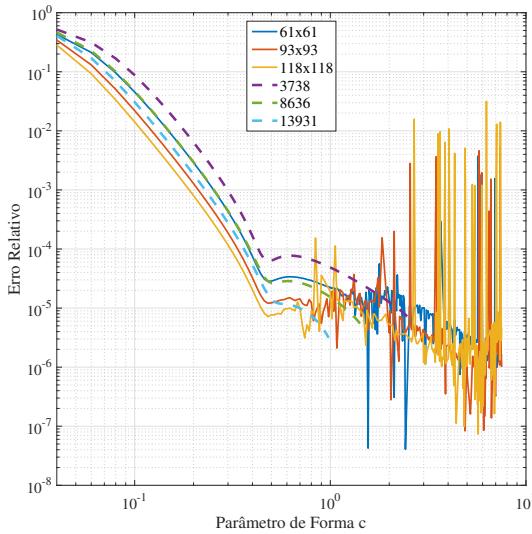


Figura 3.13: Erro relativo obtido variando o parâmetro de forma c para diversas nuvens de pontos - Solução analítica u_1 - Precisão dupla

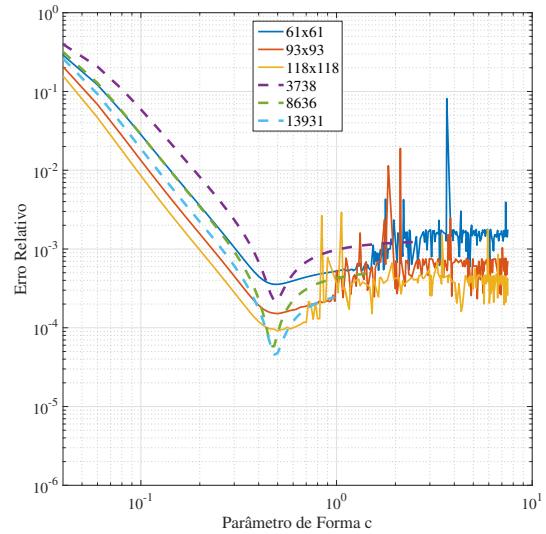


Figura 3.14: Erro relativo obtido variando o parâmetro de forma c para diversas nuvens de pontos - Solução analítica u_3 - Precisão dupla

Refazendo os testes numéricos anteriores, mas utilizando uma subrotina para o cálculo dos pesos em quádrupla precisão (Intel Visual Fortran 11), nota-se que há uma melhora significativa dos resultados conforme cresce o parâmetro de forma c . Observa-se, nas Figuras 3.15 e 3.16, que não há instabilidades numéricas nas NPEs, pois agora os coeficientes de ponderação são calculados com melhor precisão. Assim sendo, aumentar a precisão na aritmética de ponto flutuante para o cálculo dos coeficientes de ponderação possibilita uma extensão dos valores do parâmetro de forma que podem ser utilizados sem o aparecimento de instabilidades numéricas nos resultados.

Há melhora nos resultados com o aumento da precisão na aritmética de ponto flutuante, entretanto essa melhora é mais significativa na diminuição das instabilidades em NPEs do que no aumento da extensão do intervalo do parâmetro de forma. A partir de um certo valor de c , as soluções numéricas com o cálculo dos pesos em precisão quádrupla acabam divergindo também. E assim será: quanto maior o valor de c , maior deverá ser a precisão requerida para garantir soluções convergentes. Para isso, é possível utilizar softwares de precisão arbitrária, mas eles se tornam computacionalmente muito caros. Vale salientar que o aumento de precisão aritmética de dupla para quádrupla já acarreta um aumento no tempo de processamento para o cálculo dos coeficientes de ponderação em torno de 20 vezes. Sendo assim, é importante avaliar variantes do MQDL-FBR que possam produzir soluções convergentes para qualquer tipo de nuvem em precisão dupla.

Já foi visto na seção 3.2 que o MQDL-FBR(GA) Estabilizado é bem sucedido para $\epsilon \rightarrow 0$ no caso de NEs com pontos fantasma. Outro esquema que a literatura referencia como promis-

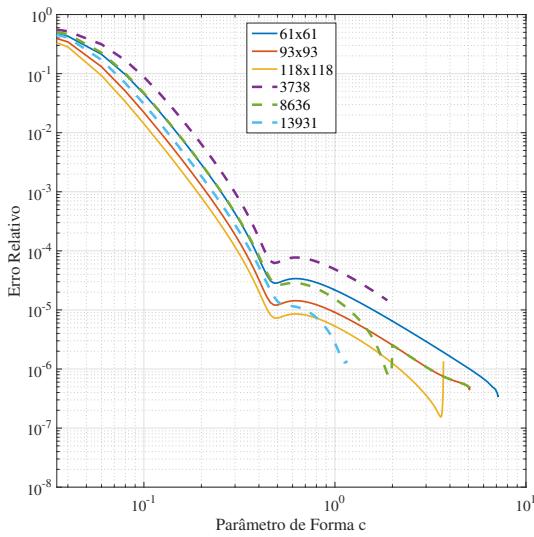


Figura 3.15: Erro relativo obtido variando o parâmetro de forma c para diversas nuvens de pontos - Solução analítica u_1 - Precisão quádrupla

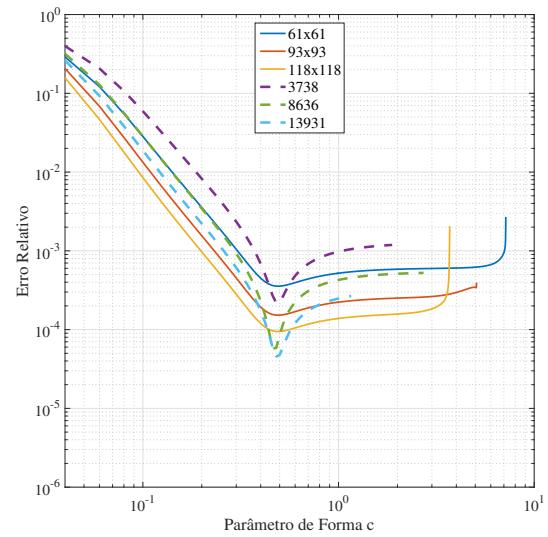


Figura 3.16: Erro relativo obtido variando o parâmetro de forma c para diversas nuvens de pontos - Solução analítica u_3 - Precisão quádrupla

sor é o MQDL-FBR(PHS). Um estudo comparativo entre esses dois esquemas é apresentado a seguir.

3.4 Testes com MQDL-FBR(GA) Estabilizado e MQDL-FBR(PHS) em Nuvens Estruturadas e Não-Estruturadas

O intuito dessa seção é comparar os resultados encontrados na solução da equação de Poisson pelo MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) no contexto de Nuvens Estruturadas e Não-Estruturadas, variando-se a quantidade de pontos das discretizações, a quantidade de pontos do suporte local, o parâmetro de forma (caso GA), o maior grau permissível dos polinômios suplementares (caso PHS), dentre outros parâmetros que possam influenciar nos resultados numéricos.

Inicialmente, a solução numérica da equação de Poisson foi obtida pelo MQDL-FBR(GA) Estabilizado nas mesmas nuvens da seção anterior para as soluções analíticas u_1 e u_3 . O parâmetro de forma ϵ variou entre 10^{-1} e 10^{-5} e a quantidade de pontos do suporte local foi fixado em 17. A solução do SELG, equação (3.9), foi obtida pelo SoR ($fr = 1,8958$) no caso de NPE e SuR em NPNE (fr em torno de 0,2) com tolerância fixada em 10^{-14} .

As Figuras 3.17 e 3.18 ilustram os resultados do erro relativo em função do parâmetro de forma ϵ , em escala log-log, para a solução analítica u_1 e u_3 , respectivamente. Pode-se notar que em ambos os gráficos não apareceram instabilidades numéricas em nenhuma das de nuvem de discretização abordadas, como observadas na seção anterior. Soluções numéricas são encontra-

das em quase toda a faixa do parâmetro de forma estudada e ainda aparece um valor ótimo de ϵ no qual o erro relativo é mínimo (ϵ_{otimo}). Também se observa que para u_1 os erros relativos para as NPEs são mais baixos em relação as NPNEs, enquanto que para u_3 os erros relativos são menores em NPNEs em comparação com as NPEs com número de pontos aproximadamente igual. Ainda, algumas divergências nas soluções numéricas ocorreram para valores de ϵ em torno de 1 em ambos os gráficos para algumas NPNEs. Esse fato pode ter sido causado pelo uso do método SuR, cujo parâmetro de relaxação empregado estava em torno de 0,2. Como foi observado por Silva (2014), a utilização de métodos iterativos, como por exemplo o SuR, pode sofrer de instabilidades numéricas e muitas vezes ocorre a divergência da solução, principalmente para NPNEs.

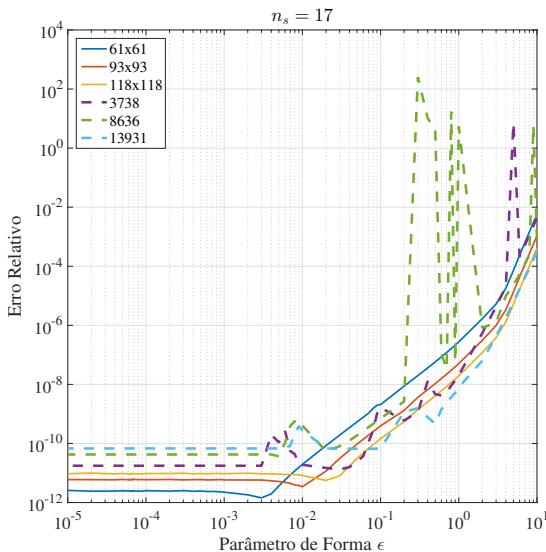


Figura 3.17: Erro relativo em função do parâmetro de forma ϵ para NEs e NNEs - Solução analítica u_1 - MQDL-FBR(GA) Estabilizado

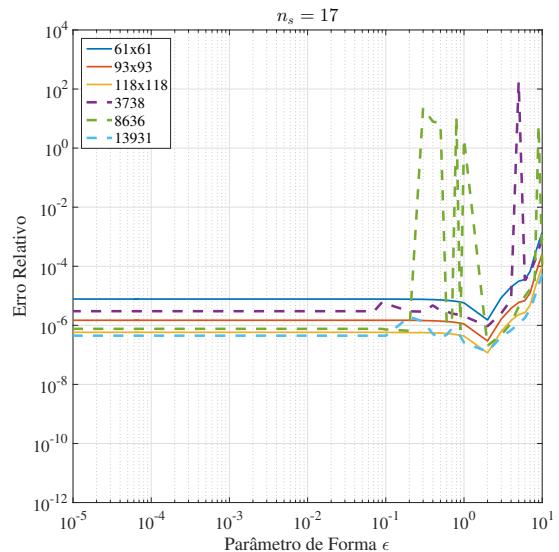


Figura 3.18: Erro relativo em função do parâmetro de forma ϵ para NEs e NNEs - Solução analítica u_3 - MQDL-FBR(GA) Estabilizado

A estrutura das matrizes dos SELGs, $[W]$, por exemplo para a NPE 65×65 e a NPNE 7284 pontos, com $n_s = 17$, podem ser vistas nas Figuras 3.19 e 3.20, respectivamente. Nota-se que as matrizes resultam bem esparsas. No caso da NPE, devido a numeração global empregada (em zig-zag), a estrutura da matriz revela um aspecto pentadiagonal com uma largura de banda, lb , pequena; por outro lado, a matriz da NPNE apresenta uma estrutura bem mais volátil e a largura de banda é praticamente completa. A razão disso está no método de geração da NPNE utilizado nesse trabalho, o *pdetool* do Matlab[®].

Como será observado no Capítulo 4, a utilização do método de Sub-Relaxações Sucessivas não é indicado para a solução numérica da equação da função-corrente (equação de Poisson) oriundas de uma discretização em NPNE, pois causa oscilações nas soluções não sendo possível obter o regime permanente. Faz-se então necessário a utilização de outro método de solução de SELG que resulte em melhores resultados principalmente para NPNEs.

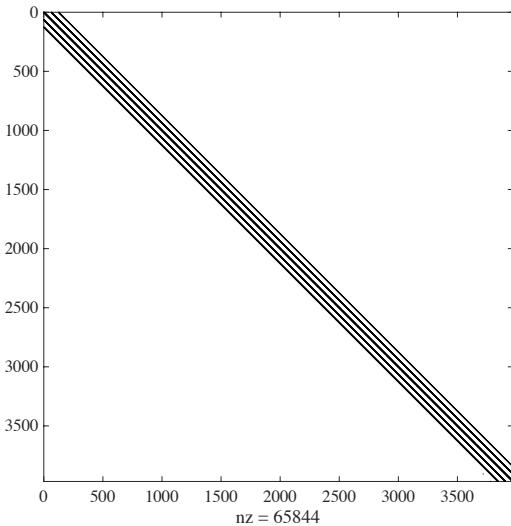


Figura 3.19: Exemplo de matriz global $[W]$ gerada para uma NPE de 65×65 pontos e $n_s = 17$

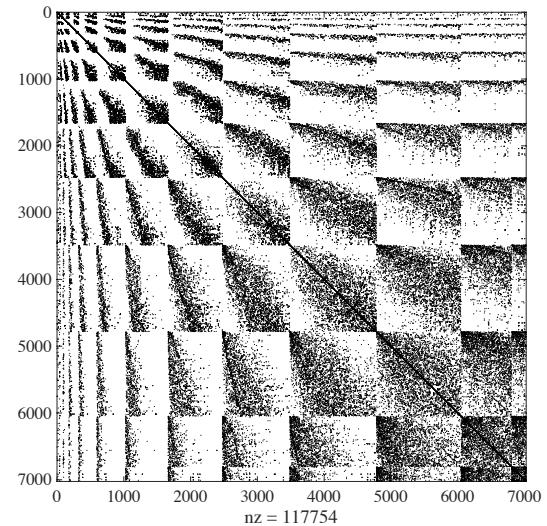


Figura 3.20: Exemplo de matriz global $[W]$ gerada para uma NPNE de 7284 pontos e $n_s = 17$

Assim sendo, nos próximos testes a serem apresentados, a solução numérica do SELG, $[W]\{u\} = \{F\}$, resultante da equação (3.9), foi obtida pelo método direto de Decomposição LU em substituição ao método Iterativo de Relaxações Sucessivas. A fim de reduzir a largura de banda da matriz, especialmente para as NPNEs, o algoritmo Cuthill-McKee Reverso (RCM: Reverse Cuthill-McKee) foi empregado (Carmo, 2005). Esse algoritmo visa a renumeração dos chamados grafos, não simétricos, com a finalidade de minimizar a distância entre a numeração dos pontos, diminindo, por conseguinte, a largura de banda da matriz global. O código fonte, em linguagem Fortran, foi disponibilizado por Burkardt (2007).

Duas subrotinas do MKL Intel Fortran são adotadas para a solução do sistema $[W]\{u\} = \{F\}$. A subrotina ***dgbtrf*** faz a decomposição LU da matriz global $[W]$, da qual é armazenado somente os elementos contidos na banda de $[W]$, isto é, $[W]_{(2ku+kl+1) \times N}$, sendo ku a quantidade de diagonais superiores e kl a quantidade de diagonais inferiores. As Figuras 3.21 e 3.22 ilustram as estruturas das matrizes das Figuras 3.19 e 3.20 respectivamente armazenadas após a redução da largura de banda feita pelo RCM. Nesse exemplo, no caso da NPE houve uma redução na largura de banda de 521 para 461, enquanto que para a NPNE a banda foi reduzida de 16479 para 794. A subrotina ***dgbtrs*** encontra a solução do sistema linear a partir das matrizes $[L]$ e $[U]$ decomposta por ***dgbtrf***.

A solução do sistema de equações lineares pelo método direto de decomposição LU tem a vantagem de utilizar a decomposição da matriz $[W]$ apenas uma vez para vários segundos membros $\{F\}$, o que pode vir a reduzir o tempo de processamento em casos onde a Equação de Poisson tenha que ser resolvida diversas vezes, como é o caso das equações de Navier-Stokes bidimensional na formulação vorticidade e função-corrente (Shu *et al.*, 2003), por exemplo, que será abordado no capítulo 4. Outra vantagem é que parâmetros como o parâmetro de relaxação

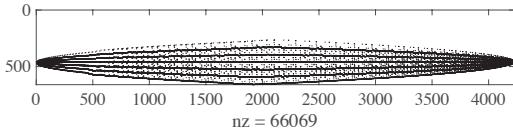


Figura 3.21: Armazenamento de $[W]$ para a NPE de 65×65 pontos e $n_s = 17$

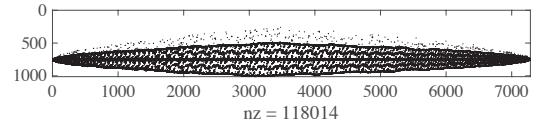


Figura 3.22: Armazenamento de $[W]$ para a NPNE de 7284 pontos e $n_s = 17$

e a tolerância não são necessários no método direto. Todos os demais testes apresentados nesse capítulo foram feitos com o método direto de decomposição LU.

3.4.1 Variação do Erro Relativo com relação ao parâmetro de forma ϵ no MQDL-FBR(GA) Estabilizado

Para averiguar a relação entre o erro relativo e o parâmetro de forma ϵ para o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, uma NPE de 85×85 pontos (7225 pontos), uma NPNE de 7284 pontos e o suporte local de 17 pontos ($n_s = 17$) foram fixados e variou-se o parâmetro de forma entre 10^{-5} e 10^{-5} para todas as soluções analíticas u_1, u_2, u_3 e u_4 . As Figuras 3.23 e 3.24 mostram os resultados encontrados para a NPE e a NPNE, respectivamente.

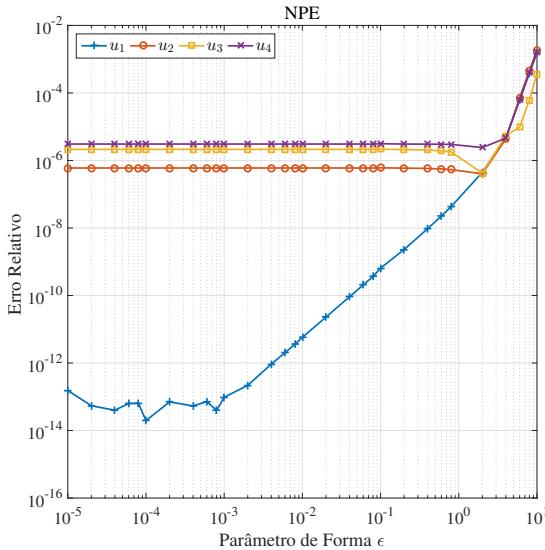


Figura 3.23: Variação do Erro Relativo com relação a ϵ para a NPE de 85×85 pontos e $n_s = 17$

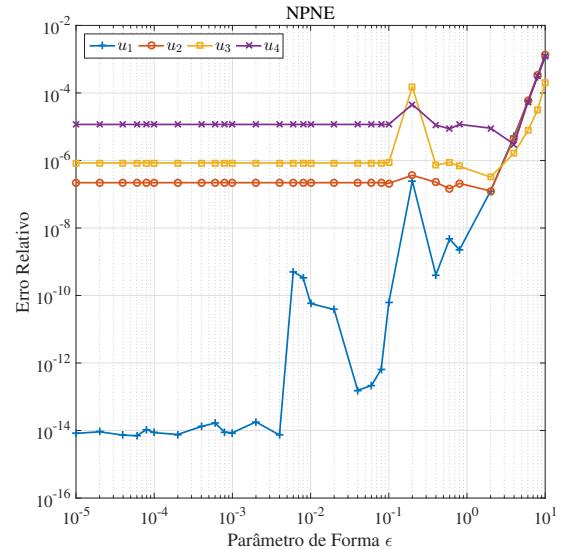


Figura 3.24: Variação do Erro Relativo com relação a ϵ para a NPNE de 7284 pontos e $n_s = 17$

De acordo com os resultados, para a solução analítica u_1 , conforme o valor de ϵ diminui o erro relativo também vai diminuindo até se tornar quase constante, com poucas variações, para valores bem pequenos de ϵ , ocorrendo tanto em NPE quanto em NPNE. Importante ressaltar neste caso que para a NPNE o erro relativo é menor do que em NPE, para ϵ pequeno, mostrando

que o MQDL-FBR(GA) Estabilizado adapta-se muito bem em NPNE. Em NPNE aparecem faixas de ϵ onde o erro relativo aumenta. Este fato pode estar relacionado com a implementação recursiva da função Gamma Incompleta em Fortran que pode acarretar acúmulo de erros de arredondamento. Entretanto, os interesses maiores são valores de ϵ menores que 10^{-4} para os quais não ocorre esse tipo de variação indesejada.

Para as soluções analíticas u_2 , u_3 e u_4 o erro relativo diminui para valores de ϵ entre 10 e 1 e para valores abaixo de 1 o erro relativo é praticamente constante tanto em NPE quanto em NPNE mostrando que a solução numérica já se torna independente de ϵ .

3.4.2 Variação do Erro Relativo com relação ao número de pontos do suporte local n_s

Para estudar a variação do erro relativo com relação ao número de pontos do suporte local, n_s , para a solução analítica u_1 , fixaram-se as discretizações de 45×45 pontos (NPE), 2048 pontos (NPNE) e o parâmetro de forma $\epsilon = 10^{-4}$ com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado. O número de pontos do suporte local variou de 9 a 60 pontos.

A Figura 3.25 ilustra os resultados encontrados e mostra que mesmo para nuvens de relativamente poucos pontos, o erro relativo está bastante baixo (em torno de 10^{-14} para a NPE e 10^{-13} para a NPNE) para n_s a partir de 16 pontos. Esse fato ocorre porque a solução analítica u_1 é simples e a solução numérica é bem aproximada pelo MQDL-FBR(GA) Estabilizado. Isso inviabiliza o estudo de ordem de precisão (estudo da taxa de convergência) com u_1 para praticamente todos os suportes locais. Pode-se notar também um ligeiro aumento no erro relativo para a NPNE conforme se aumenta n_s , que está relacionado a erros de arredondamento na aritmética de ponto flutuante e a suportes locais com menor precisão. Para NPE ocorre divergência da solução numérica para $n_s = 13$ e $n_s = 15$. Este fato ocorre pois, conforme cita Fornberg *et al.* (2013), em NPE há a necessidade de uma renumeração local dos pontos para tentar garantir colunas linearmente independentes da matriz $[P]$ (Vandermonde); para alguns suportes locais com $n_s = 13$ e $n_s = 15$ isso não foi possível (*rank* deficiente), resultando em SELL muito mal-condicionados e, consequentemente, coeficientes de ponderação sem qualquer significância. Esse fato será evidenciado na seção 3.4.4 nos estudos dos erros absolutos das primeiras e segunda derivadas em todos os pontos do domínio. Em NPNE não houve divergências das soluções numéricas.

Para os testes com u_2 , u_3 e u_4 fixaram-se as discretizações de 65×65 pontos (NPE), 4230 pontos (NPNE) e o parâmetro de forma $\epsilon = 10^{-4}$ do MQDL-FBR(GA) Estabilizado. A Figura 3.26 refere-se à NPE enquanto a Figura 3.27 à NPNE. Na Figura 3.26 existem intervalos de valores de n_s nos quais não há variação do erro relativo, mostrando que alguns n_s são transições para intervalos onde o erro relativo diminui (degraus). Assim, n_s igual a 16, 25, 36 e

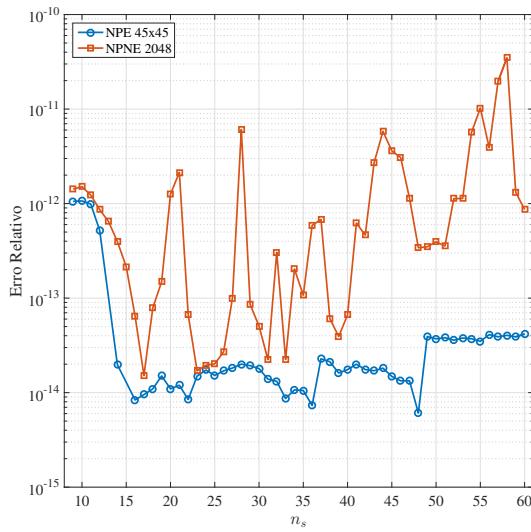


Figura 3.25: Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_1

49 aproximadamente são valores onde ocorrem essas transições. Isso mostra que o suporte local torna-se mais preciso quando pontos do suporte são adicionados nas direções x e y e não apenas adicionando pontos no suporte com a mesma extensão, fato relacionado com a não-compacidade do MQDL-FBR, como mencionado na Seção 3.2. As oscilações observadas nos gráficos das funções de teste para NPNE são naturais, pois o espaçamento entre os pontos é diferente em cada suporte local, tornando possível o cálculo dos coeficientes de ponderação mais ou menos precisos conforme a distribuição dos pontos mais próximo ao ponto de referência (critério de formação do suporte local adotado nesse trabalho). Entretanto, observa-se que o erro relativo tende a diminuir em todas as funções de teste conforme se aumenta n_s . Também os erros relativos obtidos com a NPNE, em muitos casos, são menores que os obtidos com a NPE, evidenciando uma boa adequação do MQDL-FBR(GA) Estabilizado com este tipo de discretização.

Testes análogos aos anteriores foram feitos para o MQDL-FBR(PHS). A Tabela 3.2 mostra o maior grau permissível do polinômio suplementar por faixas de n_s para $\varphi(r) = r^3$ e $\varphi(r) = r^7$, que foi obtida através dos experimentos numéricos dessa seção e da seção 3.4.4. Para montar a Tabela 3.2, levou-se em consideração a proposta de solução indicada por Flyer *et al.* (2016a), no qual recomendaram incluir todas as bases polinomiais até o maior grau permissível para o número de pontos do suporte local. Neste trabalho, teve-se ainda a preocupação em escolher o maior grau permissível do polinômio observando os menores erros absolutos nas primeiras e segundas derivadas (resultados que serão apresentados na seção 3.4.4). Note que é possível escolher graus maiores para NPNE em relação à NPE para um mesmo n_s . Flyer *et al.* (2016a) destacam que a ordem de precisão do método está relacionada com o grau do polinômio suplementar escolhido e que não há diferenças significativas entre a escolha de $\varphi(r) = r^{2p-1}$, $p \in \mathbb{N}$ e $\varphi(r) = r^{2p} \log(r)$, $p \in \mathbb{N}_0$.

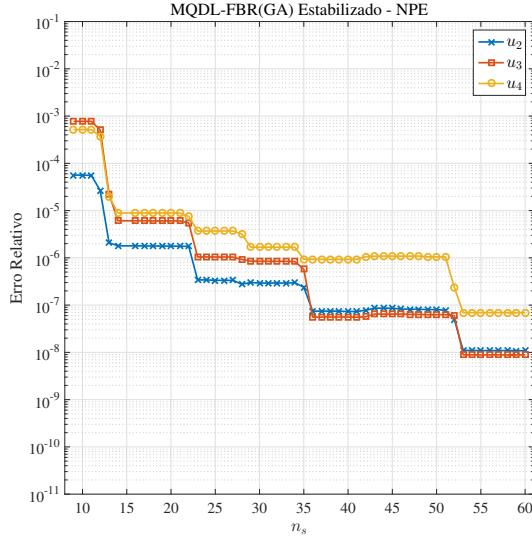


Figura 3.26: Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2 , u_3 e u_4 para NPE 65×65 pontos - MQDL-FBR(GA) Estabilizado

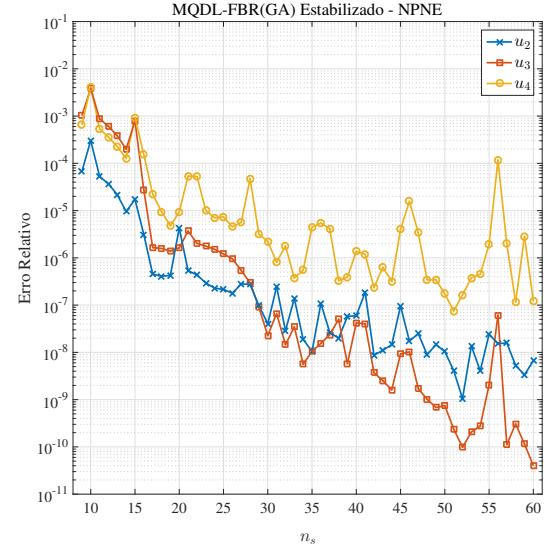


Figura 3.27: Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2 , u_3 e u_4 para NPNE 4230 pontos - MQDL-FBR(GA) Estabilizado

Tabela 3.2: Maior grau permitível q do polinômio suplementar por faixas de n_s

$\varphi(r) = r^3$			$\varphi(r) = r^7$			NPE	
NPE		NPNE		NPE		NPNE	
Faixa de n_s	q	Faixa de n_s	q	Faixa de n_s	q	Faixa de n_s	q
9 a 17	2	9 a 10	2	9 a 17	2	9 a 10	2
18 a 28	3	11 a 16	3	18 a 28	3	11 a 16	3
29 a 43	4	17 a 21	4	29 a 45	4	17 a 21	4
44 a 62	5	22 a 27	5	46 a 62	5	22 a 27	5
63 a 65	6	28 a 35	6	63 a 65	6	28 a 36	6
-	-	36 a 44	7	-	-	37 a 44	7
-	-	45 a 55	8	-	-	45 a 55	8
-	-	56 a 65	9	-	-	56 a 65	9

As Figuras 3.28 e 3.29 mostram os resultados obtidos com MQDL-FBR(PHS) usando $\varphi(r) = r^3$ em NPE de 65×65 pontos e NPNE de 4230 pontos, respectivamente. De forma análoga, nas Figuras 3.30 e 3.31 tem-se os resultados para $\varphi(r) = r^7$ com as mesmas nuvens de pontos da discretização do domínio. Esses resultados mostram que não há diferenças relevantes no comportamento do erro relativo em função de n_s quando se comparam as funções r^3 e r^7 , tanto em NPE (Figuras 3.28 e 3.30) quanto em NPNE (Figuras 3.29 e 3.31).

Quando se comparam os resultados do erro relativo em função do n_s obtidos com o MQDL-FBR(PHS) e o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, pode-se verificar o seguinte: 1) para NPEs, o MQDL-FBR(PHS) também produz um comportamento em degraus, com o erro relativo diminuindo mais bruscamente para determinados valores de n_s de transição; o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, porém, não produz as oscilações do MQDL-FBR(PHS) (comparar a

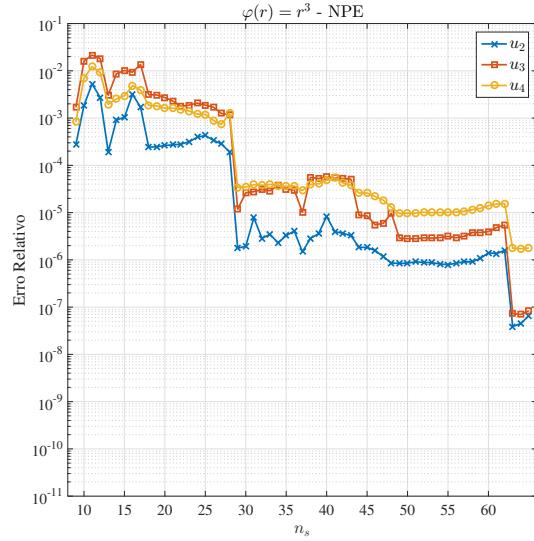


Figura 3.28: Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2 , u_3 e u_4 para NPE 65×65 pontos - $\varphi(r) = r^3$

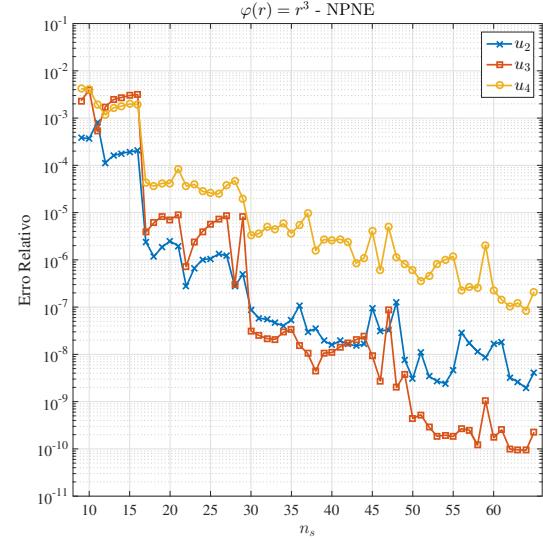


Figura 3.29: Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2 , u_3 e u_4 para NPNE 4230 pontos - $\varphi(r) = r^3$

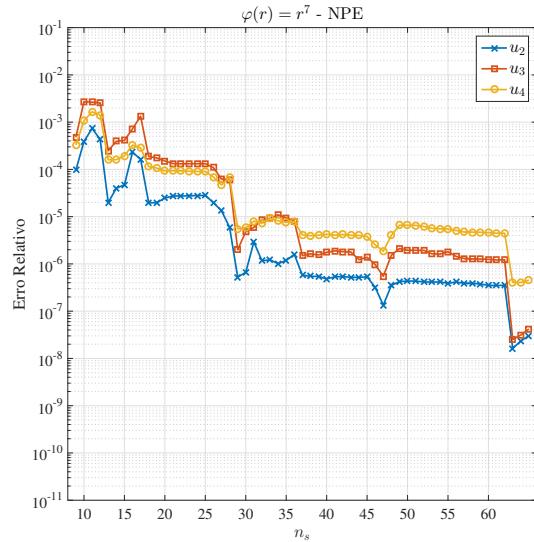


Figura 3.30: Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2 , u_3 e u_4 para NPE 65×65 pontos - $\varphi(r) = r^7$

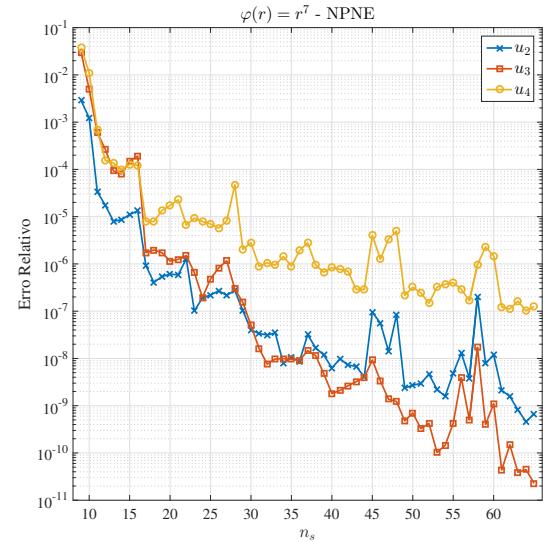


Figura 3.31: Variação do Erro Relativo com relação a n_s para u_2 , u_3 e u_4 para NPNE 4230 pontos - $\varphi(r) = r^7$

Figura 3.26, por exemplo, com a Figura 3.28 ou 3.30); 2) para NPNEs, o MQDL-FBR(PHS) produz menores amplitudes de oscilação dos erros relativos que o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, principalmente para valores de n_s mais altos (comparar a Figura 3.27, por exemplo, com a Figura 3.29 ou 3.31); 3) para uma mesma faixa de n_s , a ordem de grandeza dos erros relativos produzidos por ambos os métodos não diferem significativamente.

3.4.3 Variação do Erro Relativo com relação ao espaçamento médio entre os pontos (refinamento de nuvens)

Para medir a ordem de precisão, l , do MQDL-FBR(GA) Estabilizado e do MQDL-FBR(PHS) variou-se a quantidade de pontos das discretizações em NPEs e NPNEs para alguns valores de n_s . Para o MQDL-FBR(GA) Estabilizado fixou-se o parâmetro de forma em $\epsilon = 10^{-5}$ enquanto para o MQDL-FBR(PHS) foram usados os mesmos parâmetros da Tabela 3.2, aferidos e utilizados no item 3.4.2.

A Tabela 3.3 mostra as discretizações usadas nos testes com seus respectivos espaçamentos médios entre os pontos, h_{medio} , que é dado por:

$$h_{medio} = \frac{1}{\sqrt{N} - 1} \quad (3.14)$$

sendo N a quantidade total de pontos da discretização. Para uma melhor comparação, procurou-se usar quantidades próximas de pontos nas respectivas nuvens, NPEs e NPNEs.

Tabela 3.3: Nuvens de Pontos Estruturadas e Não-Estruturadas

NPE		NPNE	
Quantidade de Pontos (N)	h_{medio}	Quantidade de Pontos (N)	h_{medio}
45×45 (2025)	0,0227	2048	0,0226
65×65 (4225)	0,0156	4230	0,0156
85×85 (7225)	0,0119	7284	0,0119
105×105 (11025)	0,0096	11030	0,0096
125×125 (15625)	0,0081	15739	0,0080

As Figuras 3.32 e 3.33 ilustram a variação do erro relativo em função do h_{medio} , em escala log-log, para a solução analítica u_3 em NPE e NPNE, respectivamente, e diversos n_s com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado. Algumas variações naturais nos erros relativos para algumas NPNE são observadas. Para verificar o ajustamento dos dados com a regressão linear, o coeficiente de determinação, R^2 , foi calculado. Sabe-se que seu valor varia entre 0 e 1 e, quanto mais próximo de 1, melhor a linearização ajusta-se aos pontos.

A Tabela 3.4 mostra a ordem de precisão do MQDL-FBR(GA) Estabilizado para u_2 , u_3 e u_4 em NPEs para vários n_s e os coeficientes de determinações, R^2 , das linearizações das curvas. Conforme se aumenta o número de pontos do suporte local há uma tendência a se obter maior precisão com o método, mas essa precisão é dependente também da função da qual está se aproximando a solução numérica. Em NPEs, praticamente todos os coeficientes de determinação são bem próximos de 1, mostrando que as curvas são bem ajustadas com retas, em escala log-log.

De forma análoga, a Tabela 3.5 mostra a ordem de precisão do MQDL-FBR(GA) Estabilizado para u_2 , u_3 e u_4 em NPNEs para vários n_s , e os coeficientes de determinação, R^2 ,

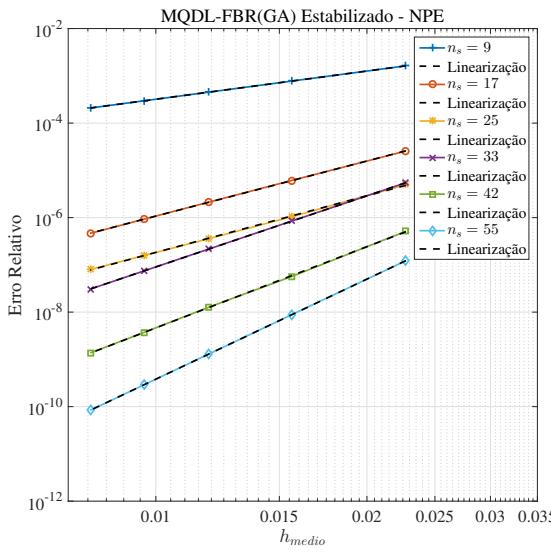


Figura 3.32: Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPE para diversos n_s - MQDL-FBR(GA) Estabilizado

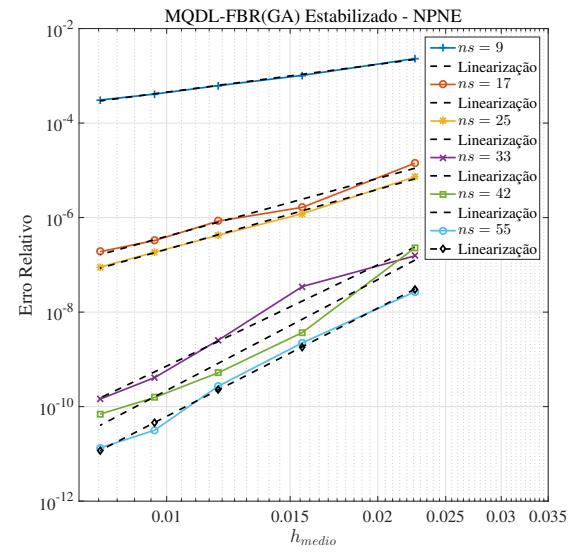


Figura 3.33: Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPNE para diversos n_s - MQDL-FBR(GA) Estabilizado

Tabela 3.4: Ordem de Precisão do MQDL-FBR(GA) Estabilizado para vários n_s em NPEs

n_s	u_2		u_3		u_4	
	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2
9	1,9879	0,9999	1,9831	0,9999	1,9978	0,9999
17	4,0133	0,9999	4,0688	0,9732	3,9133	0,9999
25	4,3717	0,9999	3,9878	0,9995	4,0922	0,9993
33	4,5635	0,9997	5,0091	0,9999	6,1000	0,9999
42	5,9290	0,9999	5,7144	0,9999	5,8319	0,9985
55	6,7196	0,9998	7,0487	1,0000	7,6382	0,9462

das linearizações das curvas. Nestes casos, também há uma tendência de aumento de precisão do método conforme se aumenta o número de pontos do suporte local e, na maioria dos casos, ordem de precisão maior que nos casos análogos em NPEs. Devido a oscilações nos erros relativos para algumas NPNEs, alguns coeficientes de determinação são insatisfatórios, como o caso da solução analítica u_2 com $n_s = 33$. Isso ocorre naturalmente por causa da não-estruturação das nuvens, acarretando uma variação do erro relativo. Esses resultados mostram que o método estudado produz bons resultados em discretizações com NPNEs podendo ser até mais precisos, em muitas situações, que em discretizações com NPEs.

Testes análogos foram feitos para o MQDL-FBR(PHS). As Figuras 3.34 e 3.35 mostram a variação do erro relativo em função do h_{medio} para a solução analítica u_3 em NPEs e NPNEs, respectivamente, com a PHS $\varphi(r) = r^3$. As Figuras 3.36 e 3.37 mostram os mesmos testes, mas agora com a PHS $\varphi(r) = r^7$. Nota-se que há variações para alguns valores de n_s , especialmente para $n_s = 17$, e em NPEs. Percebe-se também que não há diferenças significativas entre os testes com a PHS r^3 e r^7 , resultados que corroboram os de Flyer *et al.* (2016b). Em comparação

Tabela 3.5: Ordem de Precisão do MQDL-FBR(GA) Estabilizado para vários n_s em NPNEs

n_s	u_2		u_3		u_4	
	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2
9	1,8924	0,9872	1,9549	0,9960	2,1552	0,9920
17	5,0114	0,9766	4,0738	0,9719	3,0185	0,8073
25	4,1864	0,9974	4,2124	0,9961	4,8128	0,9943
33	5,6972	0,7126	7,1163	0,9700	6,3040	0,9406
42	7,1857	0,9304	7,7960	0,9583	6,5020	0,9847
55	8,8664	0,9756	7,6120	0,9919	9,0980	0,9903

com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, nota-se claramente que há mais oscilações dos resultados em NPEs (comparar Figuras 3.32 com 3.34 e Tabelas 3.4 com 3.6, por exemplo).

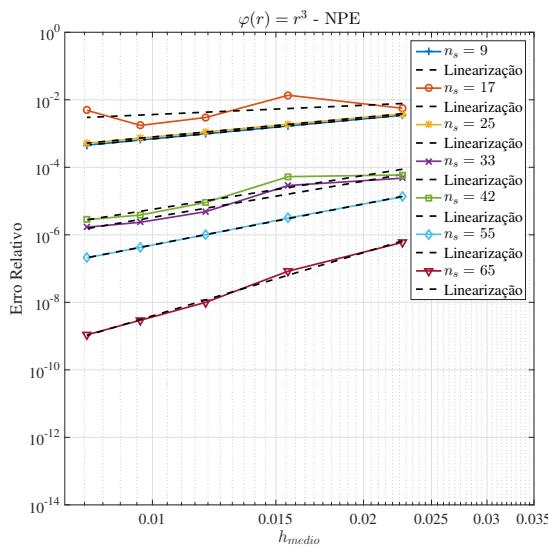


Figura 3.34: Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPE para diversos n_s

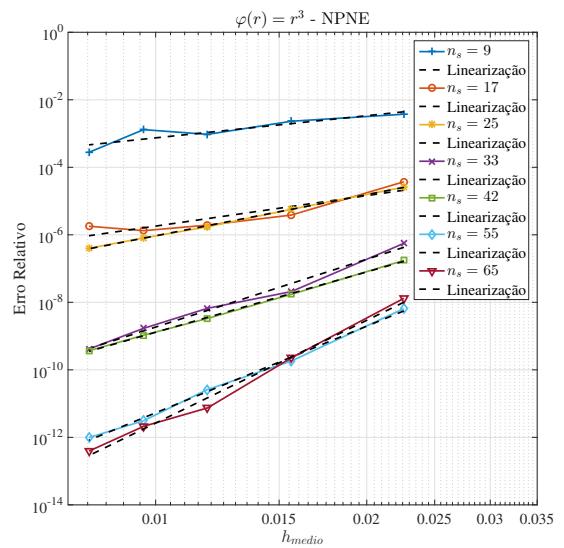


Figura 3.35: Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPNE para diversos n_s

Nas Tabelas 3.6 e 3.7 encontram-se as ordens de precisão para o MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^3$ para NPEs e NPNEs para u_2 , u_3 e u_4 e seus respectivos R^2 . De forma análoga, as Tabelas 3.8 e 3.9 referem-se aos resultados com a $\varphi(r) = r^7$. Em NPEs, as taxas de convergência para cada n_s testado são praticamente as mesmas comparando-se r^3 com r^7 . Já para as NPNEs houve algumas diferenças entre r^3 e r^7 nas ordens de convergência para alguns n_s . Todavia, foi possível atingir ordens de convergência mais altas com NPNEs do que com NPEs. Isso também ocorreu com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, mostrando que ambas as abordagens adaptam-se bem a NPNEs.

O tempo de processamento total foi medido em cada caso teste usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado (T_{GA}) e o MQDL-FBR(PHS) (T_{PHS}) com um computador Intel Core i7-3770 CPU 3.40GHz com 32 Gigas de memória RAM com um sistema operacional de 64 bits. As Figuras 3.38 e 3.39 mostram a relação entre T_{GA}/T_{PHS} conforme se aumenta a quantidade de pontos da

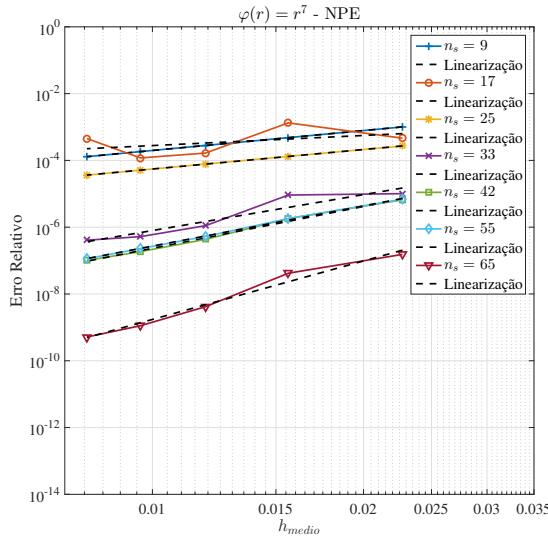


Figura 3.36: Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPE para diversos n_s

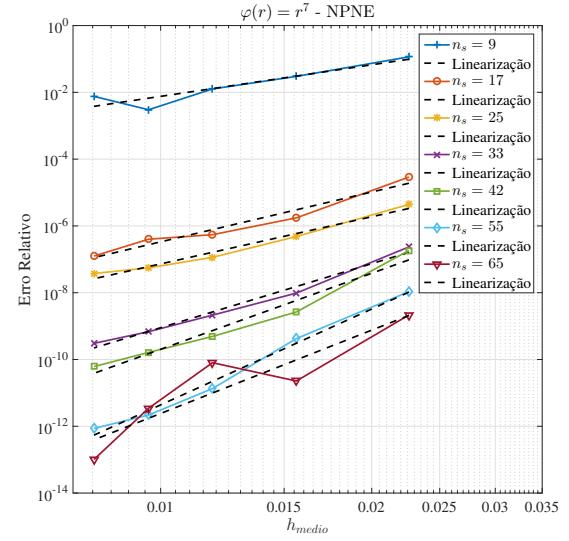


Figura 3.37: Variação do Erro Relativo com relação a h_{medio} em NPNE para diversos n_s

Tabela 3.6: Ordem de Precisão do MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^3$ para vários n_s em NPE

n_s	u_2		u_3		u_4	
	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2
9	1,9805	0,9999	1,9727	0,9999	1,9573	0,9999
17	1,4416	0,2580	0,9160	-	1,7863	0,7634
25	1,9562	0,9999	1,9303	0,9998	1,9861	1,0000
33	4,0829	0,9485	3,5633	0,9248	4,0305	0,9953
42	3,8644	0,9481	3,3316	0,8732	3,9731	0,9790
55	3,7542	0,9987	4,0339	0,9997	4,0438	0,9994
65	6,2241	0,9908	6,2314	0,9940	6,1114	0,9997

Tabela 3.7: Ordem de Precisão do MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^3$ para vários n_s em NPNE

n_s	u_2		u_3		u_4	
	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2
9	1,9299	0,8915	2,1814	0,7453	2,3658	0,8346
17	2,1233	0,2447	3,0024	0,7582	3,9929	0,9715
25	3,9721	0,9792	4,0496	0,9991	4,1074	0,9672
33	5,5840	0,9792	6,6754	0,9808	5,9763	0,9875
42	5,9024	0,9898	5,9385	0,9991	7,1836	0,9891
55	7,6590	0,9611	8,5276	0,9949	8,4585	0,9623
65	9,8212	0,9742	10,1163	0,9869	8,8800	0,9956

discretização do domínio N , em NPEs e NPNEs, respectivamente, para vários n_s . De acordo com que se aumenta o número de pontos do suporte local para uma mesma nuvem, aumenta-se o tempo de processamento, o que é natural, e ainda quando N cresce a relação entre T_{GA} e T_{PHS} diminui. O MQDL-FBR(GA) Estabilizado exige uma quantidade muito maior de cálculos para se obter as novas bases, e consequentemente os coeficientes de ponderação, e isso

Tabela 3.8: Ordem de Precisão do MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^7$ para vários n_s em NPE

n_s	u_2		u_3		u_4	
	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2
9	1,9854	1,0000	1,9800	1,0000	1,9919	1,0000
17	1,4321	0,1542	1,0059	-	1,8665	0,7092
25	1,9570	0,9999	1,9408	0,9999	1,9967	0,9999
33	4,1294	0,9472	3,5715	0,8536	4,0709	0,9802
42	4,2245	0,9995	4,1568	0,9926	4,0903	0,9998
55	3,8591	0,9987	3,9996	0,9979	4,1443	0,9981
65	6,1174	0,9891	5,8175	0,9713	6,1583	0,9974

Tabela 3.9: Ordem de Precisão do MQDL-FBR(PHS) com $\varphi(r) = r^7$ para vários n_s em NPNE

n_s	u_2		u_3		u_4	
	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2	Ordem (l)	R^2
9	1,4902	0,3219	3,1414	0,8041	2,5189	0,9421
17	5,0105	0,9883	4,9584	0,9404	2,8380	0,9181
25	5,1387	0,9417	4,6885	0,9662	4,6733	0,9389
33	6,4404	0,9141	6,3731	0,9759	6,1181	0,9146
42	8,3518	0,9771	7,5660	0,9515	7,1431	0,9825
55	8,9119	0,9688	9,5370	0,9853	10,6604	0,9894
65	9,3956	0,8481	8,2940	0,7855	9,5780	0,8007

resulta em um tempo de processamento que pode chegar, nos casos testados, a ser 60 vezes maior, em NPEs. Também, como pode ser observado nos gráficos, as relações de tempo entre os métodos são maiores em NPEs, e isso é devido a reordenação dos pontos do suporte local para garantir $[P]$ com *rank* completo, o que exige uma quantidade ainda maior de cálculos, e isso não é necessário em NPNEs. Entretanto, de acordo com que o número de pontos da discretização aumenta, juntamente com a diminuição do suporte local, a relação entre os tempos de processamento tende a diminuir, pois o tempo gasto para a solução do SELG (Decomposição LU) passa a prevalecer sobre o tempo gasto para o cálculo dos coeficientes de ponderação. A Tabela 3.10 mostra os tempos de processamento total, T_{GA} e T_{PHS} , para $n_s = 25$ e 55 , em NEs e NNEs, para exemplificar a grandeza dos tempos em segundos.

Tabela 3.10: Tempo de processamento total T_{GA} e T_{PHS} , em segundos (s), para alguns n_s em NEs e NNEs

T_{GA} (s)				T_{PHS} (s)			
N - NE	$n_s = 25$	N - NNE	$n_s = 55$	N - NE	$n_s = 25$	N - NNE	$n_s = 55$
2025	13,1328	2048	52,1171	2025	0,5000	2048	2,7578
4225	26,7734	4230	111,1015	4225	1,6054	4230	7,3164
7225	48,7187	7284	195,0898	7225	3,8515	7284	14,0390
11025	77,4062	11030	303,3750	11025	8,1718	11030	25,7734
15625	112,0703	15739	438,5351	15625	15,4921	15739	44,5234

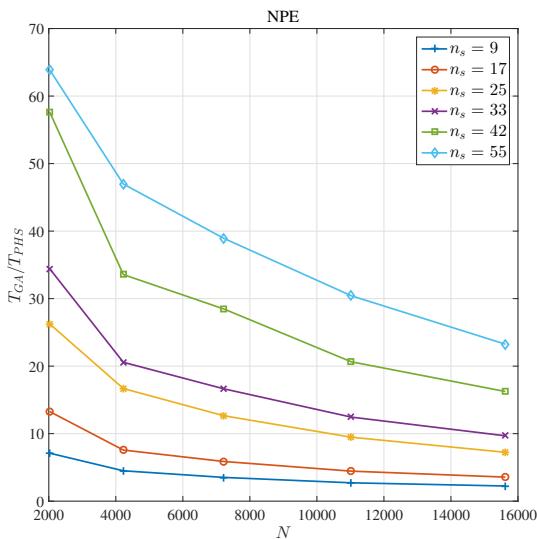


Figura 3.38: Relação entre o tempo de Processamento Total no MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) em NPE

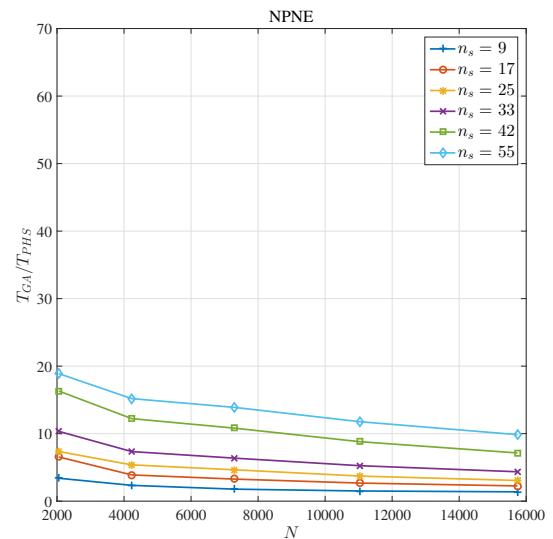


Figura 3.39: Relação entre o tempo de Processamento Total no MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) em NPNE

Os resultados apresentados com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e MQDL-FBR(PHS) no contexto de nuvem de pontos na solução da Equação de Poisson são satisfatórios. Porém, os valores das funções na fronteira utilizados nos testes são conhecidos (condições de contorno de Dirichlet) e, em muitos casos, há a necessidade de cálculos de derivadas na fronteira, como são os casos das aplicações do Capítulo 4. Assim sendo, a próxima seção visa averiguar o erro absoluto dos métodos no cálculo de derivadas em todos os pontos do domínio, inclusive na fronteira.

3.4.4 Erros Absolutos nas Primeiras e Segundas Derivadas

A avaliação do erro relativo nos experimentos numéricos das seções anteriores acontecem para os pontos internos, visto que a solução na fronteira é conhecida (condição de contorno de Dirichlet). Porém, em muitos casos práticos é necessário calcular derivadas nas fronteiras. Assim, é interessante verificar como o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) aproximam valores das derivadas em todos os pontos do domínio, incluindo os pontos de fronteira. Para isso, as derivadas $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $\frac{\partial}{\partial y}$ e $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ foram calculadas de forma exata e de forma aproximada pelo MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) para a função de testes u_3 , sendo o erro absoluto entre eles definido como segue:

$$\epsilon_a = \left| \left(\frac{\partial^m u}{\partial \mathbf{x}^m} \right)_{exato} - \left(\sum_{j=1}^{n_s} w_{i,j}^{m\mathbf{x}} u(\mathbf{x}_j) \right)_{num} \right| \quad (3.15)$$

sendo $\mathbf{x} = (x, y)$ e m a ordem da derivada.

Para averiguar os erros absolutos nas derivadas, escolheu-se, inicialmente, o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em uma NPE de 45×45 pontos, n_s igual a 9 e o parâmetro de forma ϵ igual a 10^{-5} .

As Figuras 3.40, 3.41, 3.42 e 3.43 mostram os resultados encontrados para $\frac{\partial u_3}{\partial x}$, $\frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2}$, $\frac{\partial u_3}{\partial y}$ e $\frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2}$, respectivamente. Os gráficos são obtidos através de uma interpolação entre os valores encontrados na NPE e uma malha estruturada de 101×101 pontos. Esses resultados mostram que os maiores erros absolutos ocorrem em alguns suportes locais descentrados e com os pontos de referências nas fronteiras. Esses altos erros absolutos são causados por uma deficiência do MQDL-FBR(GA) Estabilizado que não é capaz de obter, para esses suportes, uma matriz $[A]_{n_s \times n_s}$, com as novas bases, com *rank* completo (número de linhas ou colunas linearmente independentes). Sabe-se que uma matriz quadrada é inversível se, e somente se, seu posto for o mesmo que o tamanho da matriz e, o posto de $[A]$ é definido como sendo o número de linhas linearmente independentes da matriz (Burden *et al.*, 2015). Ainda, se uma matriz $[A]$ é singular (ou não inversível), então o problema $[A]\{w\} = \{b\}$, ou não possui solução, ou tem infinitas soluções. Essa situação ocorreu para 3 suportes locais que possuem *rank* deficiente (*rank* = 8 ao invés de 9) e, consequentemente, não se pode garantir solução única para o sistema de equações lineares local. Tentou-se, em vão, minimizar os erros absolutos resolvendo esses SELL oriundos desses suportes locais deficientes usando Decomposição SVD.

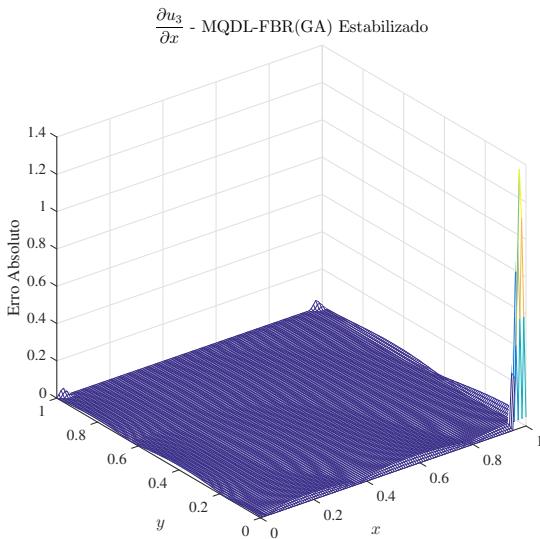


Figura 3.40: Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial x$ para NPE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado

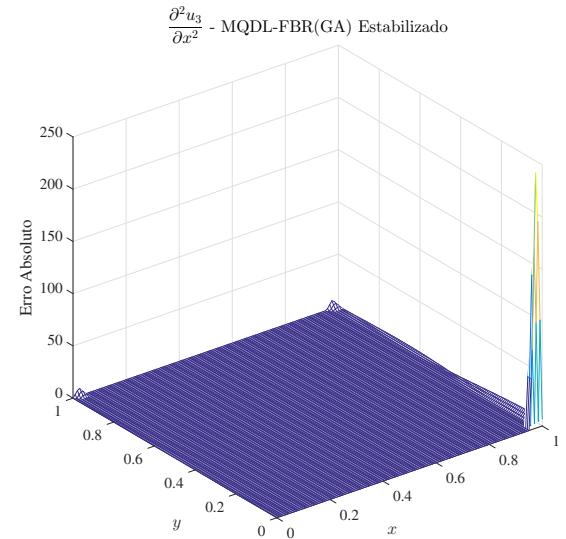


Figura 3.41: Erro absoluto de $\frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2}$ para NPNE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado

A configuração do suporte local que possui o maior erro absoluto pode ser visualizado na Figura 3.44. As curvas coloridas são as curvas de nível do erro absoluto para a primeira derivada com relação a x . Suas coordenadas, com apenas 4 casas decimais, encontram-se na Tabela 3.11. No Apêndice E apresentam-se os coeficientes de ponderação calculados pelo

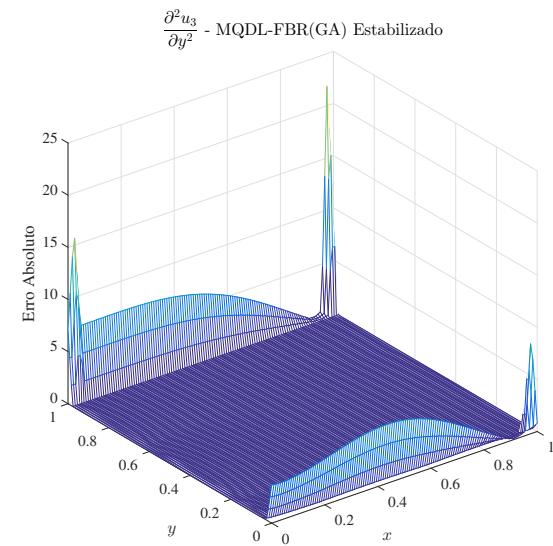
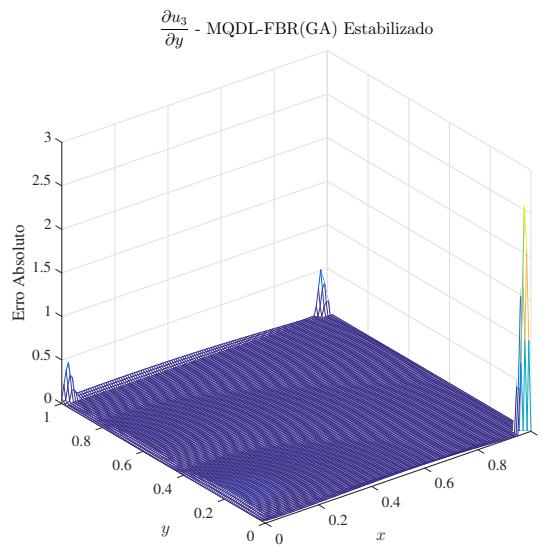


Figura 3.42: Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial y$ para NPNE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado

Figura 3.43: Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial y^2$ para NPNE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado

programa original em Matlab[®] fornecido por Lehto (2014) comparados como os obtidos no Fortran.

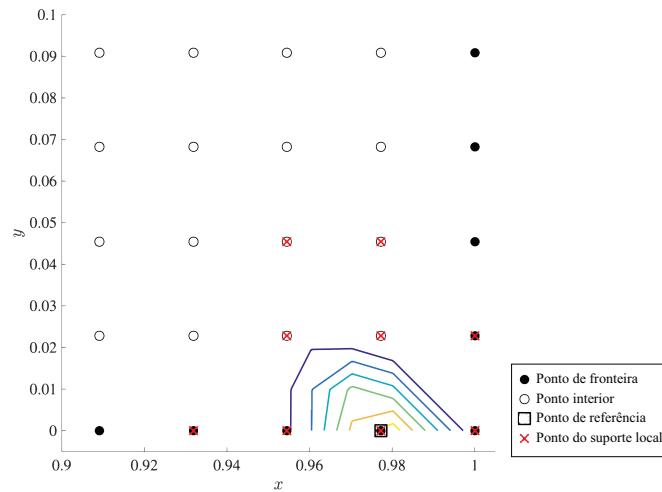


Figura 3.44: Suporte defeituoso encontrado em NPE 45×45 pontos e $n_s = 9$

Tabela 3.11: Coordenadas do suporte deficiente da Figura 3.44

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
x	0,9773	0,9545	1,0000	0,9773	0,9545	1,0000	0,9773	0,9318	0,9545
y	0,0000	0,0000	0,0000	0,0227	0,0227	0,0227	0,0455	0,0000	0,0455

Com esses resultados pode-se afirmar que o erro absoluto elevado obtido para esses su-

portes "defeituosos" é causado pela tentativa de se obter a por solução numérica de SELLs que, ou não possuem solução ou possuem infinitas soluções (sistemas não-unisolventes); logo, esses coeficientes não devem ser utilizados para aproximações de derivadas na fronteira. Caso fossem usados, causariam certamente um acúmulo de erros nas soluções numéricas de sistemas globais que necessitam dessas derivadas em sua formação resultando em divergência.

Uma tentativa para melhorar os resultados dos coeficientes de ponderação para suportes não-unisolventes é calcular as novas bases em etapas diferentes das naturais, 1, 2, 3, 4, 5 e, assim por diante (opção fornecida pelo algoritmo), mas essa opção também pode não funcionar com eficiência (ver Apêndice E). O fato é que o MQDL-FBR(GA) Estabilizado ainda não é robusto o suficiente para se obter coeficientes de ponderação satisfatórios em todos os tipos de suportes locais, principalmente quando os suportes são descentrados (na fronteira ou próximos à fronteira).

De forma análoga, os erros absolutos nas derivadas com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado são averiguados escolhendo-se agora uma NPNE de 4230 pontos com suportes locais de 25 pontos. O parâmetro de forma foi fixado em $\epsilon = 10^{-5}$.

As Figuras 3.45, 3.46, 3.47 e 3.48 mostram os resultados encontrados para $\frac{\partial u_3}{\partial x}$, $\frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2}$, $\frac{\partial u_3}{\partial y}$ e $\frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2}$, respectivamente. Esses resultados indicam que, também em NPNE, erros absolutos extremamente elevados ocorrem em suportes locais descentrados e com pontos de referências nas fronteiras. Novamente, esse erros são causados por uma deficiência do MQDL-FBR(GA) Estabilizado que não é capaz de encontrar, para esses suportes, uma matriz $[A]$ com *rank* completo. Aparecem, neste caso, 14 suportes locais *rank* deficiente (*rank* = 24 ao invés de 25).

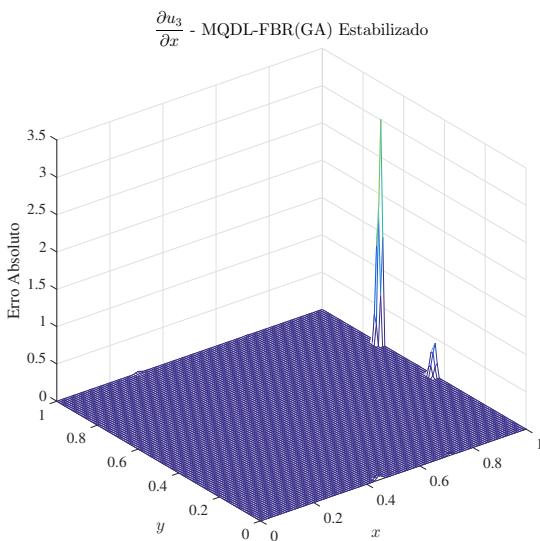


Figura 3.45: Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial x$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado

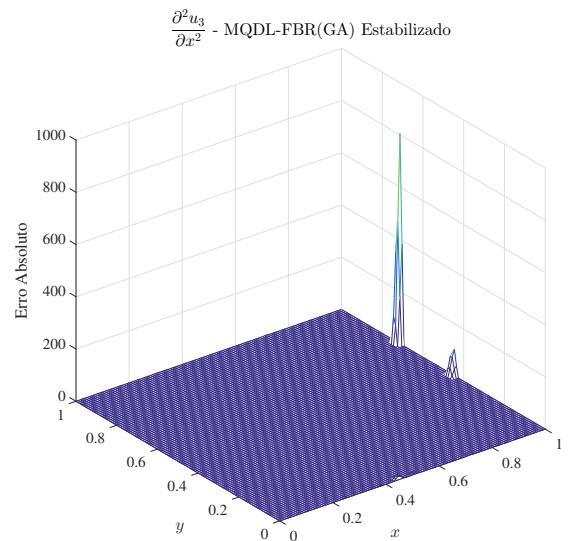


Figura 3.46: Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial x^2$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado

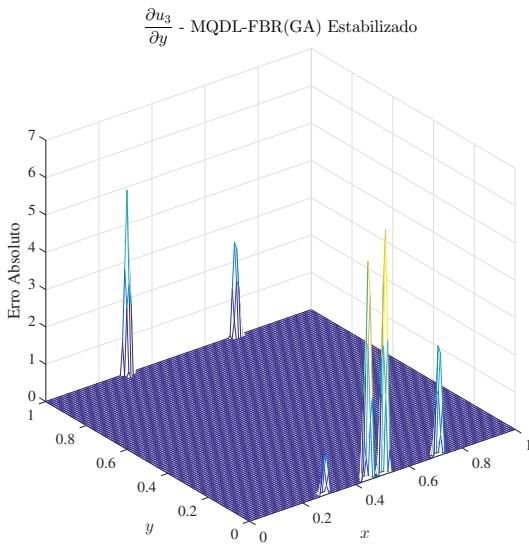


Figura 3.47: Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial y$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado

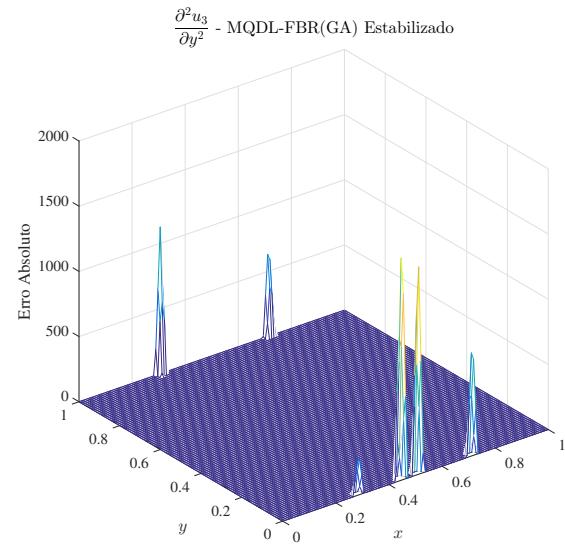


Figura 3.48: Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial y^2$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado

Nota-se que há uma maior ocorrência de suportes locais deficientes no experimento com NPNE do que em NPE. As conclusões com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPNE são iguais às do experimento com NPE. Assim sendo, caso haja a necessidade de cálculos de derivadas nas fronteiras, o MQDL-FBR(GA) Estabilizado não é recomendável. Uma opção seria substituir o cálculo dos coeficientes de ponderação desses suportes defeituosos por outra abordagem que possa ser viável na aproximação dos operadores, como por exemplo, o MQDL-FBR(Mq) com c pequeno, ou mesmo o MQDL-FBR(PHS) cujos testes virão a seguir.

Para comparação com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, os mesmos testes numéricos foram feitos com o MQDL-FBR(PHS) usando a PHS $\varphi(r) = r^7$. As Figuras 3.49, 3.50, 3.51 e 3.52 referem-se a NPE de 45×45 pontos, $n_s = 9$, e $q = 2$, enquanto 3.53, 3.54, 3.55 e 3.56 referem-se a NPNE de 4230 pontos, $n_s = 25$ e $p = 5$, para $\frac{\partial u_3}{\partial x}$, $\frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2}$, $\frac{\partial u_3}{\partial y}$ e $\frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2}$, respectivamente. Analisando esses resultados, nota-se que os erros absolutos em NPE são relativamente baixos, especialmente para as primeiras derivadas, mostrando que o cálculo das primeiras derivadas pode ser satisfatório. As segundas derivadas acumulam mais erros próximo às fronteiras, especialmente nas fronteiras normais às derivadas de interesse.

No caso de NPNE, com $n_s = 25$ e $q = 5$, há mais precisão, como pode ser visto na Tabela 3.9 ou na Figura 3.37, e com isso os erros absolutos resultam bem menores que no caso anterior. Os erros absolutos nas primeiras derivadas são menores que nas segundas derivadas, evidenciando a procedência do uso de primeiras derivadas nos cálculos próximos à fronteira com essa configuração. As maiores variações dos erros absolutos ocorrem nas fronteiras normais às respectivas derivadas. Essas variações estão associadas ao fenômeno de Runge, que é caracterizado como oscilações nas bordas de um intervalo ocorrendo quando se usa interpolação

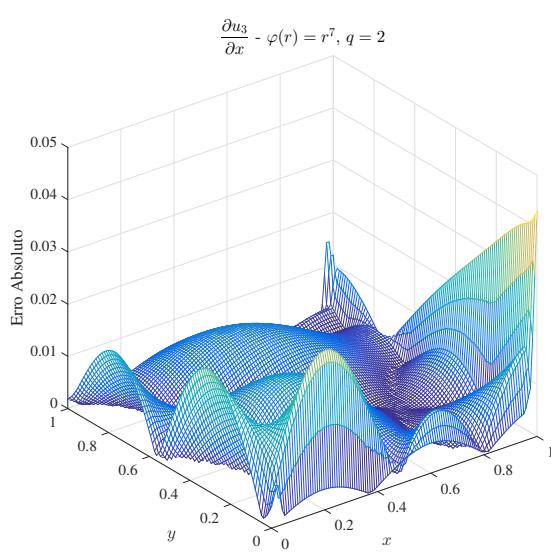


Figura 3.49: Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial x$ para NPE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando MQDL-FBR(PHS)

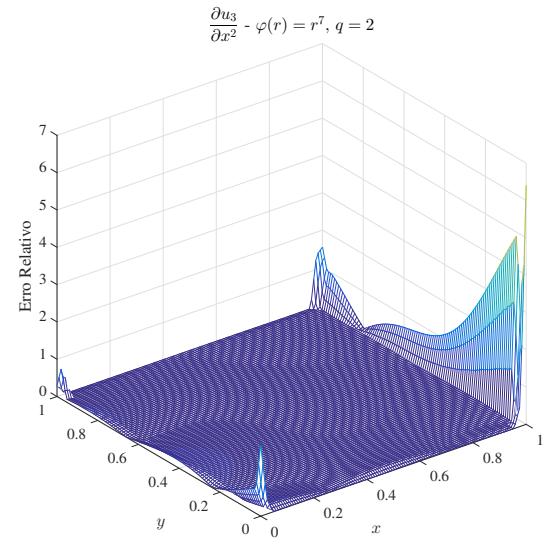


Figura 3.50: Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial x^2$ para NPE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(PHS)

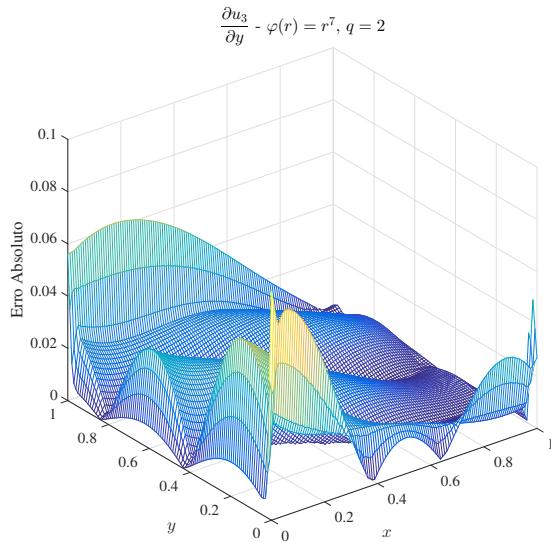


Figura 3.51: Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial y$ para NPE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(PHS)

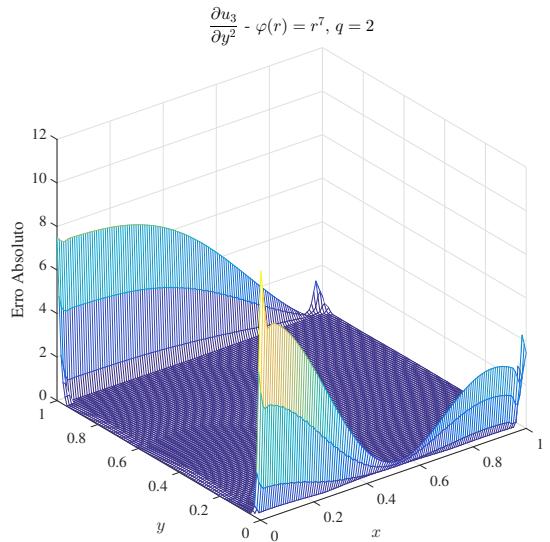


Figura 3.52: Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial y^2$ para NPNE de 45×45 pontos e $n_s = 9$ usando o MQDL-FBR(PHS)

polinomial com polinômios de ordem elevada. Fornberg *et al.* (2002) estudaram esse fenômeno no contexto de aproximação espacial de derivadas usando FBRs e afirmam que incluir polinômios de baixa ordem pode melhorar a precisão das aproximações nas fronteiras do domínio, e isso é feito pelo MQDL-FBR(PHS). Com esses resultados, o MQDL-FBR(PHS) se credencia como uma opção viável para as soluções dos problemas físicos que serão abordados no Capítulo 4.

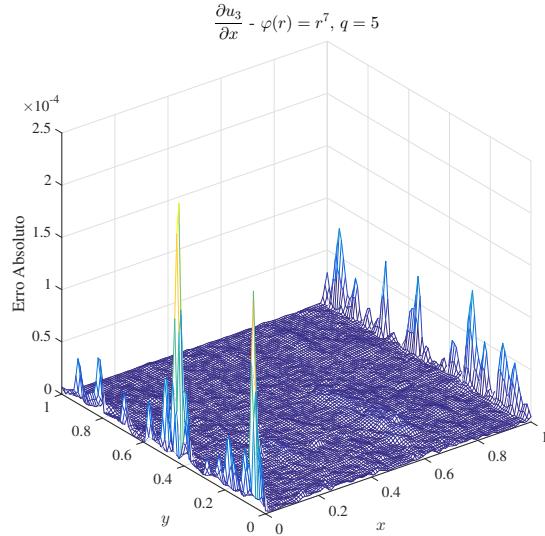


Figura 3.53: Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial x$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(PHS)

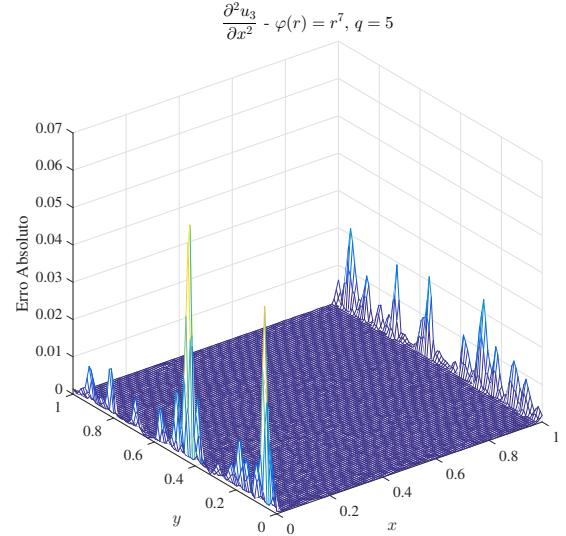


Figura 3.54: Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial x^2$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(PHS)

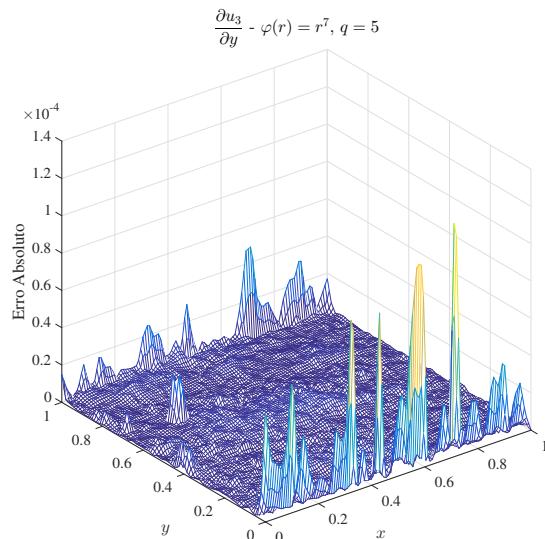


Figura 3.55: Erro absoluto de $\partial u_3 / \partial y$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(PHS)

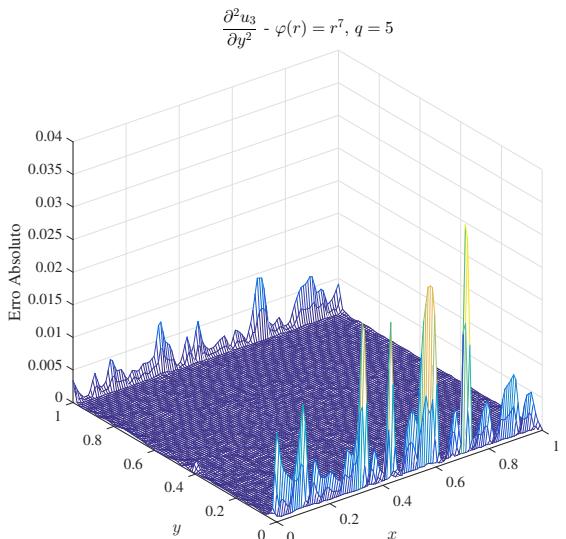


Figura 3.56: Erro absoluto de $\partial^2 u_3 / \partial y^2$ para NPNE de 4230 pontos e $n_s = 25$ usando o MQDL-FBR(PHS)

Capítulo 4

Aplicações do MQDL-FBR em Simulações de Problemas Físicos Envolvendo as Equações de Navier-Stokes

Nesse capítulo são abordados dois problemas testes que envolvem a solução das equações de Navier-Stokes: o problema de Convecção Natural em uma Cavidade Quadrada e o problema da Cavidade Quadrada com Tampa Móvel.

No problema de Convecção Natural em uma Cavidade Quadrada, utilizaram-se o MQDL-FBR(Mq) e o MQDL-FBR(GA) Estabilizado no contexto de nuvem estruturada e o MQDL-FBR(Mq) no contexto de nuvem não-estruturada para resolver as equações que regem o movimento do fluido dentro da cavidade (vorticidade, função-corrente e temperatura). A solução do SELG resultante da equação da função-corrente (equação de Poisson) foi obtida pelo método de Relaxações Sucessivas. Em seguida, substitui-se esse método de solução numérica do SELG pelo método de decomposição LU com armazenamento de banda esparsa e se obteve resultados com o MQDL-FBR(Mq) em NE e NNE e com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NE. As equações da vorticidade e temperatura foram resolvidas pelo método de Euler explícito. Por último, utilizou-se o MQDL-FBR(PHS) no contexto de NEs e NNEs. Todos os resultados foram comparados com a literatura (Davis, 1983; Shu *et al.*, 2003).

As equações de vorticidade e função-corrente do problema da Cavidade Quadrada com Tampa Móvel foram resolvidas pelo MQDL-FBR(PHS) no contexto de NE e NNE para Reynolds 400, 1000 e 3200. A solução do SELG resultante da equação da função-corrente (equação de Poisson) foi obtida pelo método de decomposição LU com armazenamento de banda esparsa e a equação da vorticidade foi resolvida pelo método de Euler explícito. Todos os resultados foram comparados com a literatura (Ghia *et al.*, 1982).

4.1 Convecção Natural em uma Cavidade Quadrada

Destina-se esta seção a aplicar o MQDL-FBR para se obter a solução numérica aproximada das equações de Navier-Stokes e equação da Energia para um problema de convecção natural em uma cavidade quadrada. Esse problema é um caso teste ("benchmark") bastante utilizado em pesquisas sobre métodos numéricos para verificação de resultados. As equações que regem o movimento do fluido dentro da cavidade são abordadas pela formulação vorticidade, função-corrente e temperatura. As condições iniciais e de contorno são apresentadas e os resultados obtidos são discutidos e comparados com os da literatura.

4.1.1 Formulação do Problema Físico e Discretização das Equações

O problema de convecção natural em uma cavidade quadrada é um modelo bastante usado para validação de resultados. Autores como Davis (1983) e Shu *et al.* (2003) obtiveram resultados para esse problema. Davis (1983) utilizou o MDF centradas em malha uniforme, enquanto Shu *et al.* (2003) utilizou o MQDL-FBR(Mq) com uma discretização dispersa de pontos no domínio e pontos organizados próximos a fronteira (Figura 1.1). Os resultados obtidos por Shu *et al.* (2003) são compatíveis com os de Davis (1983).

O Apêndice F apresenta as hipóteses simplificadoras e mostra todo o processo para obtenção das equações adimensionais que regem o movimento do fluido na formulação vorticidade (ω), função-corrente (ψ) e temperatura (θ). Essas equações assumem as seguintes formas:

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \omega}{\partial X} + V \frac{\partial \omega}{\partial Y} = \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial Y^2} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial X} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} = \omega \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + U \frac{\partial \theta}{\partial X} + V \frac{\partial \theta}{\partial Y} = \frac{1}{Pr\sqrt{Gr}} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} \right) \quad (4.3)$$

sendo Pr e Gr os números de Prandtl e Grashof, respectivamente. As velocidades U e V podem ser obtidas através da função-corrente da seguinte forma:

$$U = - \frac{\partial \psi}{\partial Y} \quad (4.4)$$

$$V = \frac{\partial \psi}{\partial X} \quad (4.5)$$

As condições iniciais, $\tau = 0$, e as condições de contorno, ($\tau > 0$), são dadas por:

$$\omega = \psi = \theta = 0, \quad \text{quando} \quad \tau = 0 \quad (4.6)$$

$$\psi = 0, \quad \theta = 1, \quad \text{para} \quad X = 0, \quad 0 \leq Y \leq 1 \quad (4.7)$$

$$\psi = 0, \quad \theta = -1, \quad \text{para} \quad X = 1, \quad 0 \leq Y \leq 1 \quad (4.8)$$

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial Y} = 0, \quad \text{para} \quad Y = 0 \quad \text{e} \quad Y = 1, \quad 0 < X < 1 \quad (4.9)$$

A Figura 4.1 ilustra o problema da cavidade quadrada e as condições de contorno utilizadas para se obter a solução aproximada das equações pelo MQDL-FBR.

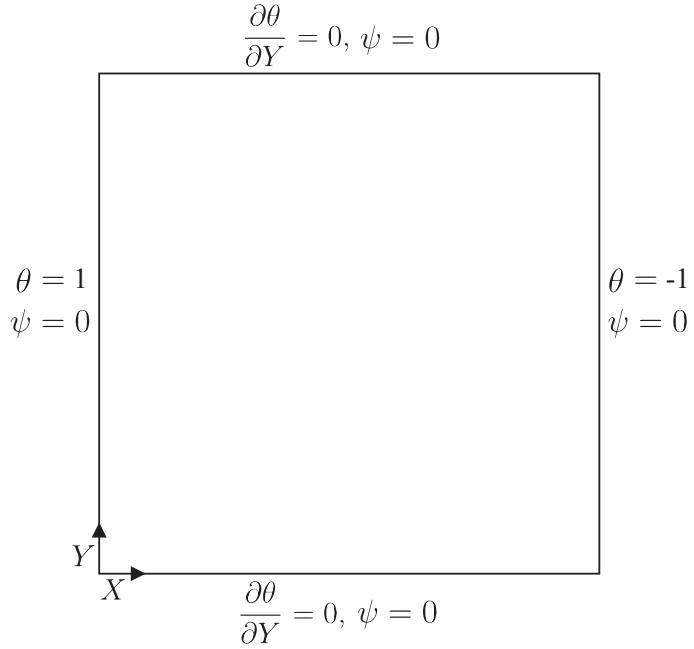


Figura 4.1: Geometria e condições de contorno para o problema de convecção natural.

As equações (4.1), (4.2), (4.3), (4.4) e (4.5) colocadas em um ponto de numeração global i assumem as seguintes equações discretizadas pelo MQDL-FBR:

$$\begin{aligned} \frac{d\omega_i}{d\tau} = & -U_i \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \omega_{i,k} - V_i \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1Y} \omega_{i,k} + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left(\sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2X} \omega_{i,k} + \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2Y} \omega_{i,k} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \theta_{i,k} \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2X} \psi_{i,k} + \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2Y} \psi_{i,k} = \omega_i \quad (4.11)$$

$$\frac{d\theta_i}{d\tau} = -U_i \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \theta_{i,k} - V_i \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1Y} \theta_{i,k} + \frac{1}{Pr\sqrt{Gr}} \left(\sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2X} \theta_{i,k} + \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2Y} \theta_{i,k} \right) \quad (4.12)$$

$$U_i = - \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1Y} \psi_{i,k} \quad (4.13)$$

$$V_i = \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \psi_{i,k} \quad (4.14)$$

sendo $w_{i,k}^{1X}$, $w_{i,k}^{1Y}$, $w_{i,k}^{2X}$ e $w_{i,k}^{2Y}$ os coeficientes de ponderação de primeiras e segundas derivadas com relação a X e Y , respectivamente. Valores de uma função f_i são calculados diretamente para ponto i , enquanto $f_{i,k}$ são valores da mesma função para cada ponto k do suporte local vinculado ao ponto de referência i . As equações diferenciais ordinárias (4.10) e (4.12) são ditas semi-discretas, pois as discretizações espaciais são feitas pelo MQDL-FBR enquanto a discretização do domínio temporal é feita através de métodos explícitos, adotado nesta tese, ou implícitos.

De início, o SELG resultante da equação da função-corrente, (4.11), foi resolvido utilizando o Método Iterativo de Relaxações Sucessivas (SoR ou SuR) para os pontos interiores de discretização como nas seções 3.2 e 3.3. Posteriormente, outros testes foram feitos substituindo o Método Iterativo de Relaxações Sucessivas pelo Método Direto de Decomposição LU como na seção 3.4.

As equações de vorticidade e temperatura, (4.10) e (4.12), respectivamente, sendo dependentes do tempo, foram resolvidas, para os pontos de discretização interiores do domínio, pelo método explícito de Euler, que é um método de primeira ordem e possui uma região de estabilidade pequena. Então, para cada incremento temporal, $\delta\tau$, um novo valor de vorticidade, ω^{n+1} , e temperatura, θ^{n+1} , são obtidos através dos valores das funções do passo anterior, n , da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \omega_i^{n+1} &= \omega_i^n - \delta\tau \left(U_i^n \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \omega_{i,k}^n + V_i^n \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1Y} \omega_{i,k}^n \right) + \\ &+ \frac{\delta\tau}{\sqrt{Gr}} \left(\sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2X} \omega_{i,k}^n + \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2Y} \omega_{i,k}^n \right) + \frac{\delta\tau}{2} \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \theta_{i,k}^n \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\theta_i^{n+1} = \theta_i^n + \delta\tau \left\{ -U_i^n \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \theta_{i,k}^n - V_i^n \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1Y} \theta_{i,k}^n + \frac{1}{Pr\sqrt{Gr}} \left(\sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2X} \theta_{i,k}^n + \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2Y} \theta_{i,k}^n \right) \right\} \quad (4.16)$$

O valor do incremento de tempo foi adotado baseando-se no número de Courant da seguinte forma:

$$\kappa \frac{\delta\tau}{h_{medio}^2} = \alpha, \quad \text{com } 0,05 \leq \alpha \leq 0,15 \quad (4.17)$$

sendo $\kappa = \frac{1}{Pr\sqrt{Gr}}$ e h_{medio} a distância média entre os pontos da discretização.

A atualização dos valores de vorticidade nas paredes e das temperaturas nas paredes adiabáticas foram feitas pelo próprio MQDL-FBR com o uso de suportes descentrados resultantes do critério de criação dos suportes locais. Os valores das velocidades U e V foram calculados também pelo MQDL-FBR, de acordo com as equações (4.13) e (4.14), respectivamente, para os pontos interiores da discretização.

O número de Nusselt médio (Nu) na superfície quente ($X = 0$) foi obtido por integração numérica do número de Nusselt local (Nu_L) (ver equação (F.21), Apêndice F). O método de Simpson foi aplicado no caso de número par de subintervalos e o método dos Trapézios no caso de número ímpar. O número de Nusselt local (ver equação (F.20), Apêndice F) foi calculado em cada ponto de referência da superfície quente através do MQDL-FBR.

O fluxograma da Figura 4.2 mostra a sequência de passos executada do programa em linguagem Fortran para se obter a solução numérica aproximada do problema da convecção natural.

4.1.2 Resultados com MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado - Método Iterativo de Relaxações Sucessivas

Em todos os experimentos numéricos, o número de Prandtl foi de 0,71 que corresponde a simulações com o ar. Foram testados dois números de Rayleigh: $Ra = 10^4$ e $Ra = 10^6$ ($Ra = GrPr$) para comparação do número de Nusselt médio da parede vertical quente ($X = 0$) no regime permanente com valores da literatura. Com as NPEs, simulações foram feitas com os coeficientes de ponderação calculados pelo MQDL-FBR(Mq) e com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, para as NPNEs somente com o MQDL-FBR(Mq), pois não foi possível obter convergência com os calculados pelo MQDL-FBR(GA) Estabilizado devido a presença de suportes defeituosos, como comentado na seção 3.4.4. Vários valores de n_s foram utilizados.

Inicialmente, o SELG resultante da equação da função-corrente foi resolvido utilizando o método Iterativo de Relaxações Sucessivas (SoR ou SuR) para os pontos interiores da discretização, por se tratar de um método utilizado por Shu *et al.* (2003) e Ding *et al.* (2005), de fácil implementação e pelos resultados satisfatórios das seções 3.2 e 3.3 do capítulo 3.

Parâmetros das simulações como o espaçamento médio entre os pontos, h_{medio} , parâmetro de relaxação, fr , tolerância do método de relaxação sucessivas, tol , incremento de tempo, $\delta\tau$,

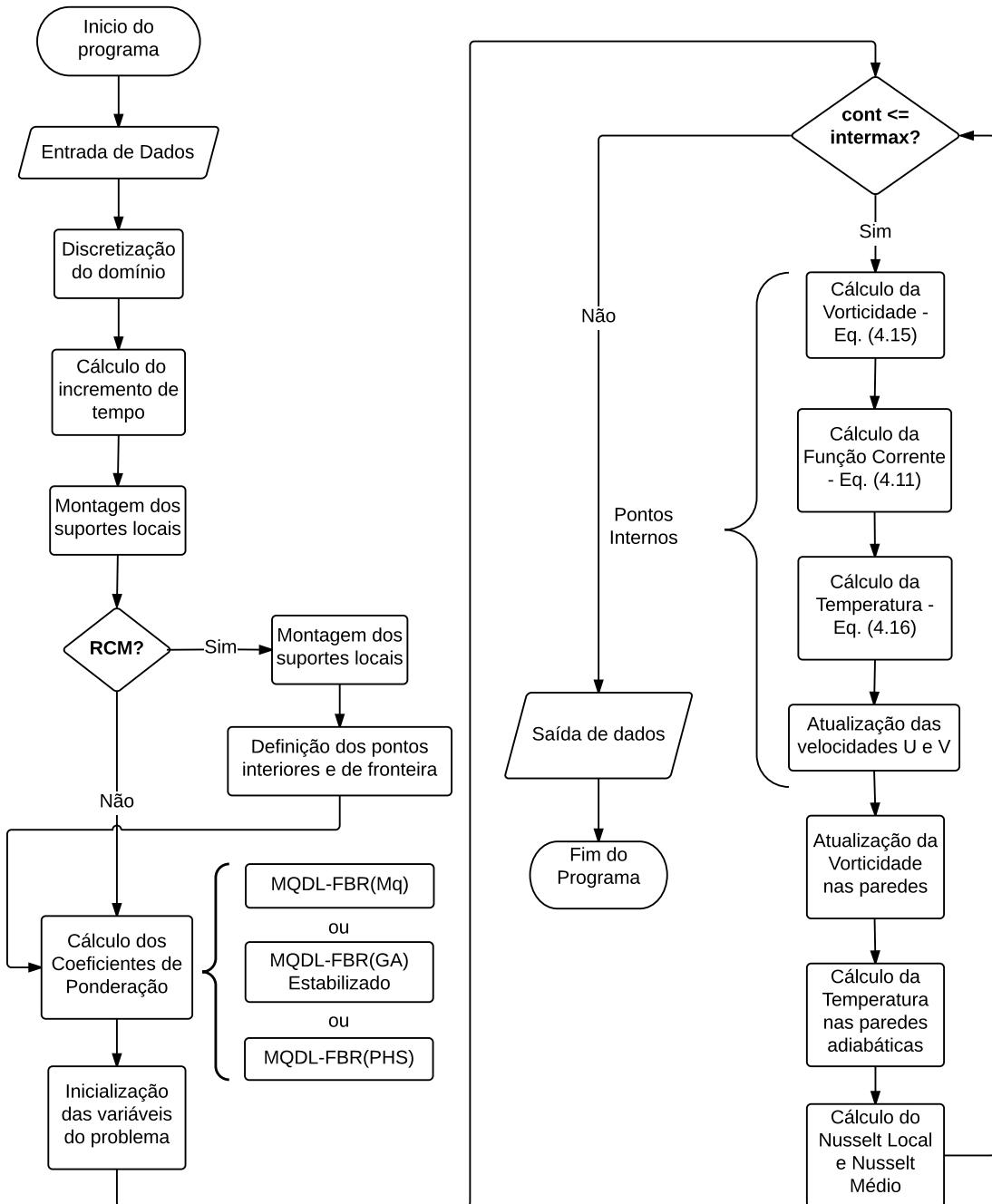


Figura 4.2: Fluxograma utilizado para obter as soluções do problema de convecção natural

número máximo de iterações, itermax , parâmetro de forma, c ou ϵ , tempo de processamento em segundos, TP , podem ser encontrados no Apêndice G. Ressalva-se que em NPE utilizou-se SoR, enquanto o SuR foi utilizado para as NPNEs.

A Tabela 4.1 contém os resultados obtido pelo MQDL-FBR(Mq) em NPEs (Mq com parâmetro de forma c), o número de Nusselt Médio, Nu , e seu desvio percentual com relação à referência da literatura para $Ra = 10^4$ para diversos suportes locais, n_s . Os desvios percentuais

calculados para as simulações em NPEs basearam-se nos dados de Davis (1983) que usou uma malha uniforme de 41×41 pontos, obtendo o número de Nusselt Médio de 2,238. Nota-se que os resultados encontrados para o Nu foram próximos ao da referência, com desvios percentuais em torno de 1%, exceto para as simulações feitas com $n_s = 25$ (ver parâmetros das simulações nas Tabelas G.1, G.2 e G.3).

Tabela 4.1: Resultados com o MQDL-FBR(Mq) em NPEs para $Ra = 10^4$

$Nu=2,238$ (Davis, 1983)						
61×61			93×93		118×118	
n_s	Nu	Desvio (%)	Nu	Desvio (%)	Nu	Desvio (%)
9	2,2460	0,3575	2,2446	0,2949	2,2446	0,2949
13	2,2468	0,3932	2,2468	0,2994	2,2397	0,0760
17	2,2482	0,4468	2,2545	0,7373	2,2568	0,8400
21	2,2636	1,1439	2,2510	0,5809	2,2571	0,8534
25	2,3156	3,4674	2,3526	5,1206	2,3747	6,1081
49	2,2643	1,2511	2,2563	0,8177	2,2660	1,2511

A Tabela 4.2 mostra resultados para simulações análogas às anteriores mas com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado, com o parâmetro de forma ϵ (em torno de 10^{-5}). Pode-se destacar que os resultados para o número de Nusselt Médio usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPEs, em quase todos os casos simulados, são próximos ao de Davis (1983), com desvios percentuais abaixo de 0,50%, exceto para $n_s = 12$ e 61×61 pontos (ver parâmetros das simulações nas Tabelas G.4, G.5 e G.6).

Tabela 4.2: Resultados com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE para $Ra = 10^4$

$Nu=2,238$ (Davis, 1983)						
61×61			93×93		118×118	
n_s	Nu	Desvio (%)	Nu	Desvio (%)	Nu	Desvio (%)
12	2,2540	0,7149	2,2481	0,4513	2,2463	0,3709
17	2,2465	0,3798	2,2444	0,2860	2,2448	0,3038
21	2,2435	0,2458	2,2443	0,2815	2,2446	0,2949
25	2,2435	0,2458	2,2444	0,2860	2,2446	0,2941
49	2,2448	0,3038	2,2449	0,3083	2,2432	0,2323

Finalmente, a Tabela 4.3 mostra os resultados obtidos pelo MQDL-FBR(Mq) para as mesmas NPNEs utilizadas na seção 3.3 do capítulo 3. Para essas nuvens de pontos os desvios percentuais foram calculados a partir dos resultados encontrados por Shu *et al.* (2003) onde o número de Nusselt Médio foi de 2,240. Os resultados encontrados foram satisfatórios, com desvios percentuais abaixo de 1,75%, mesmo em discretizações em NPNEs mostrando o grande potencial do MQDL-FBR. Note também que não foi necessária a utilização de pontos organizados próximos a fronteira ou mesmo a estratégia de usar pontos fantasmas, bastando organizar os pontos na fronteira (ver parâmetros das simulações nas Tabelas G.7, G.8 e G.9).

Tabela 4.3: Resultados com o MQDL-FBR(Mq) em NPNEs para $Ra = 10^4$

$Nu=2,240$ (Shu <i>et al.</i> , 2003)							
3738			8636		13931		
n_s	Nu	Desvio (%)	Nu	Desvio (%)	Nu	Desvio (%)	
9	2,2342	0,2589	2,2211	0,8437	2,2312	0,3928	
17	2,2582	0,8125	2,2576	0,7857	2,2636	1,0536	
21	2,2536	0,6071	2,2794	1,7589	2,2568	0,7500	
25	2,2488	0,3929	2,2490	0,4018	2,2532	0,5893	
49	2,2570	0,7589	2,2455	0,2455	2,2459	0,2643	

Os resultados para as linhas de corrente e isotérmicas no regime permanente utilizando a NPNE de 13931 pontos e n_s igual a 49 para $Ra = 10^4$ são apresentados nas Figuras 4.3 e 4.4, respectivamente.

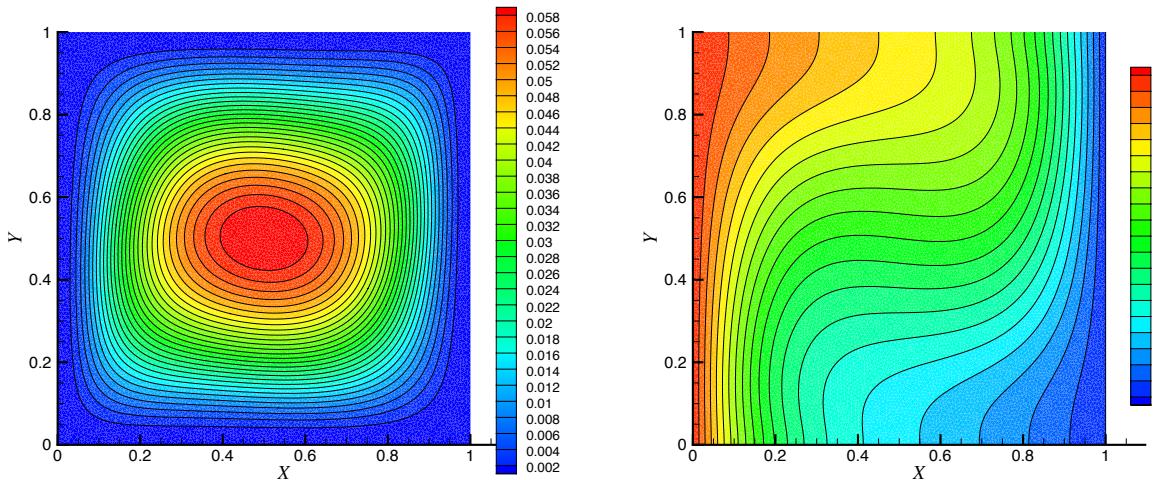


Figura 4.3: Linhas de corrente para a NPNE de 13931 pontos e $n_s = 49$ - $Ra = 10^4$

Figura 4.4: Isotérmicas para a NPNE de 13931 pontos e $n_s = 49$ - $Ra = 10^4$

É interessante estudar a evolução temporal do número de Nusselt Médio para as NPEs e NPNEs. A Figura 4.5 apresenta essa evolução para a NPE de 93×93 pontos com o MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado e em NPNE de 8636 com o MQDL-FBR(Mq). O número de pontos do suporte local foi fixado em $n_s = 17$. Nota-se uma maior variação do Nu para a NPNE frente às NPEs, com a evolução temporal apresentando pequenas flutuações em torno de um valor médio. A princípio, pensou-se que esse fato poderia estar relacionado a fatores, como: qualidade das aproximações, cálculos dos valores das funções nas fronteiras, instabilidades geradas pelo método iterativo de Relaxações Sucessivas, dentre outros. Essas oscilações mostraram-se ainda mais intensas para $Ra = 10^6$, como será visto a seguir.

Com o aumento do número de Rayleigh, ocorre uma diminuição dos efeitos difusivos e consequentemente um aumento dos efeitos convectivos nas equações. A Tabela 4.4 apresenta os parâmetros e os resultados para algumas simulações com Rayleigh $Ra = 10^6$. Os desvios

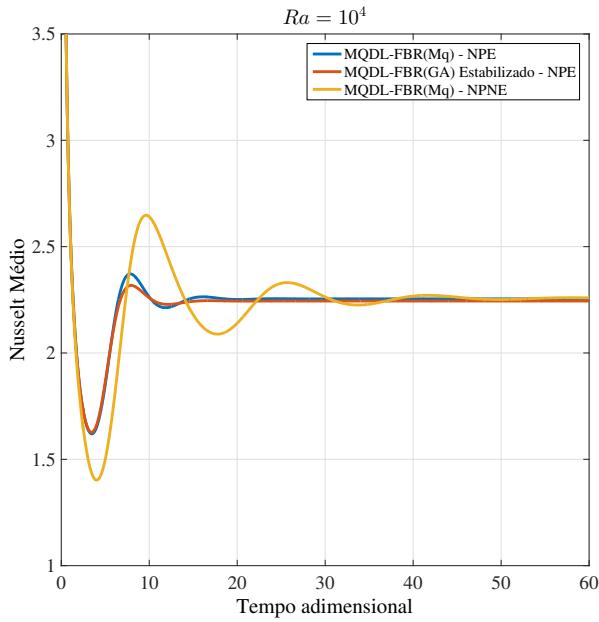


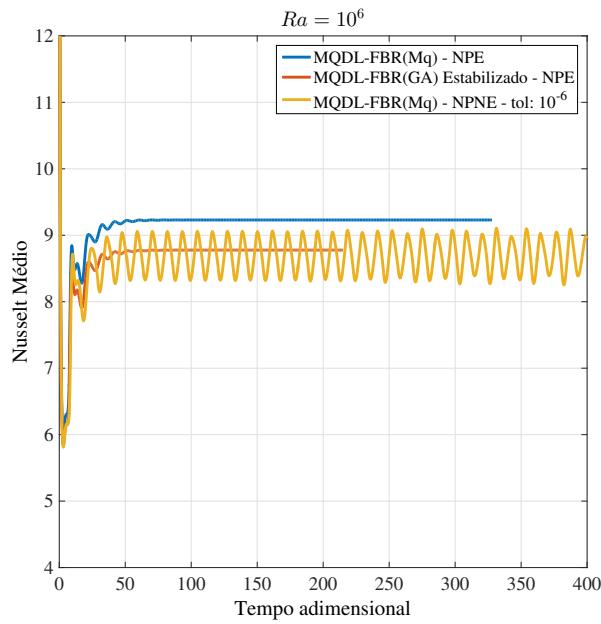
Figura 4.5: Comparação na evolução temporal do número de Nusselt Médio, Nu , para o MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE e MQDL-FBR(Mq) em NPNE com $n_s = 17$ e $Ra = 10^4$

percentuais calculados para as NPEs basearam-se nos resultados de Davis (1983), que utilizou uma malha uniforme de 81×81 pontos, obtendo o número de Nusselt Médio de 8,817. Já para as NPNEs, o desvio percentual foi calculado a partir de Shu *et al.* (2003) que obtiveram o número de Nusselt Médio de 8,932. Nas simulações em NPNEs verificaram-se oscilações na evolução temporal do número de Nusselt Médio, e nesses casos uma média foi calculada usando os valores de Nu em uma faixa final da evolução temporal (*média Nu*). Os melhores resultados foram para a NPE de 93×93 pontos com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado ($n_s = 21$) e para a NPNE de 13931 pontos com o MQDL-FBR (Mq) ($n_s = 17$) com a tolerância do SuR de 10^{-7} .

A Figura 4.6, análoga a Figura 4.5, mostra a evolução temporal do número de Nusselt Médio em discretizações de NPEs e NPNEs (três primeiras colunas de resultados da Tabela 4.4), mostrando que as oscilações ocorrem, de maneira constante, somente em NPNEs. A Figura 4.7 ilustra a evolução temporal do número de Nusselt médio em NPNEs de 13931 pontos utilizando o SuR com tolerâncias diferentes (três últimas colunas de resultados da Tabela 4.4). Conforme se diminui o valor da tolerância, menores são as oscilações do Nu , e isso evidencia a grande influência que a escolha do método iterativo de Relaxações Sucessivas tem sobre os resultados. Fica evidente a necessidade de um método mais adequado para solução do SELG referente à equação de Poisson da função-corrente ao se tratar problemas em NPNEs.

Tabela 4.4: Parâmetros e resultados obtidos para as simulações para $Ra = 10^6$ - SoR/SuR

	$Nu=8,817$ (Davis, 1983)	$Nu=8,932$ (Shu <i>et al.</i> , 2003)			
	NPE	NPE	NPNE	NPNE	
	61×61	93×93	13931 pontos	13931 pontos	13931 pontos
n_s	17	21	9	9	17
h_{medio}	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,54 \cdot 10^{-3}$	$8,54 \cdot 10^{-3}$	$8,54 \cdot 10^{-3}$
fr	1,75	1,75	0,45	0,50	0,50
tol	10^{-9}	10^{-9}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-7}
$\delta\tau$	$2,34 \cdot 10^{-2}$	$9,96 \cdot 10^{-3}$	$4,92 \cdot 10^{-3}$	$4,92 \cdot 10^{-3}$	$6,15 \cdot 10^{-3}$
itermax	14007	21601	172139	172139	137711
ϵ	-	10^{-5}	-	-	-
c	0,13	-	0,07	0,07	0,05
TP(s)	554,37	6325,29	2676,01	1050,04	-
$Nu / \text{média } Nu$	9,2301	8,7772	8,6869	8,0142	8,8654
Desvio (%)	4,6853	0,4514	2,7440	10,2754	0,7456

**Figura 4.6:** Comparação na evolução temporal do número de Nusselt Médio, Nu , para o MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE e MQDL-FBR(Mq) em NPNE - $Ra = 10^6$

Os resultados para as linhas de corrente e isotérmicas no regime permanente utilizando a NPE de 93×93 pontos e n_s igual a 21 para $Ra = 10^6$ são apresentadas nas Figuras 4.8 e 4.9, respectivamente.

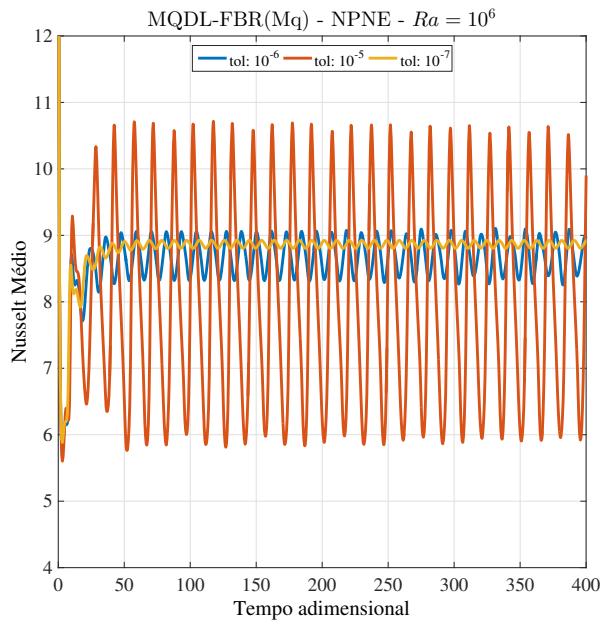


Figura 4.7: Variação do número de Nusselt Médio em função do tempo com o MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $tol = 10^{-6}, 10^{-5}$ e 10^{-7}

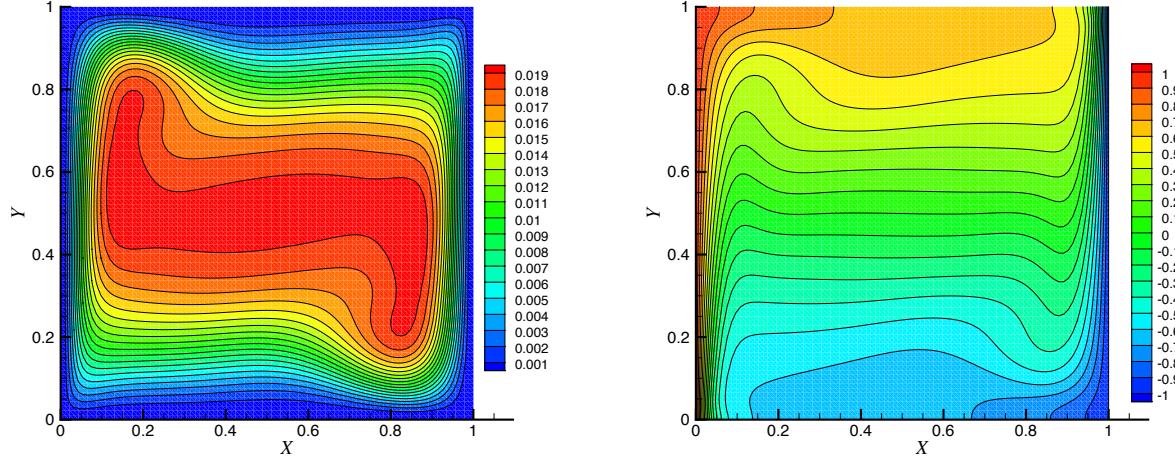


Figura 4.8: Linhas de corrente para a NPE de 93×93 pontos e $n_s = 21$ - $Ra = 10^6$

Figura 4.9: Isotérmicas para a NPE de 93×93 pontos e $n_s = 21$ - $Ra = 10^6$

4.1.3 Resultados com MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado - Método de Decomposição LU

Testes análogos aos da Tabela 4.4 foram feitos substituindo o método de Relaxações Sucessivas pelo método de decomposição LU onde a matriz do SELG resultante da equação de Poisson para a função-corrente foi armazenada como na seção 3.4 do capítulo 3 após a utilização do RCM. Os resultados para o número de Nusselt Médio estão bem próximos aos encontrados

anteriormente, como pode ser visto na Tabela 4.5, porém, o tempo de processamento de cada simulação foi bem menor, mostrando uma vantagem desse tipo de abordagem frente a utilização do método de Relaxações Sucessivas (ver parâmetros das simulações na Tabela G.10).

Tabela 4.5: Resultados obtidos para as simulações para $Ra = 10^6$ - Decomposição LU

	NPE	NPE	NPNE
	61×61	93×93	13931 pontos
n_s	17	21	9
TP(s)	185,99	883,72	1192,43
Nu	9,2135	8,7781	8,7046
Desvio (%)	4,4979	0,4414	2,5463

A Figura 4.10 mostra a evolução temporal do número de Nusselt Médio como na Figura 4.6. Observa-se que não há diferença significativa nos experimentos em NPE, evidenciando que ambos os métodos de solução do SELG, SoR e Decomposição LU, podem ser usados. Em NPNE, por outro lado, os resultados com a decomposição LU não apresentaram as oscilações ocorridas com o SuR. Logo, em NPNEs, a decomposição LU é adequada para tratar a evolução temporal do problema utilizando o MQDL-FBR(Mq).

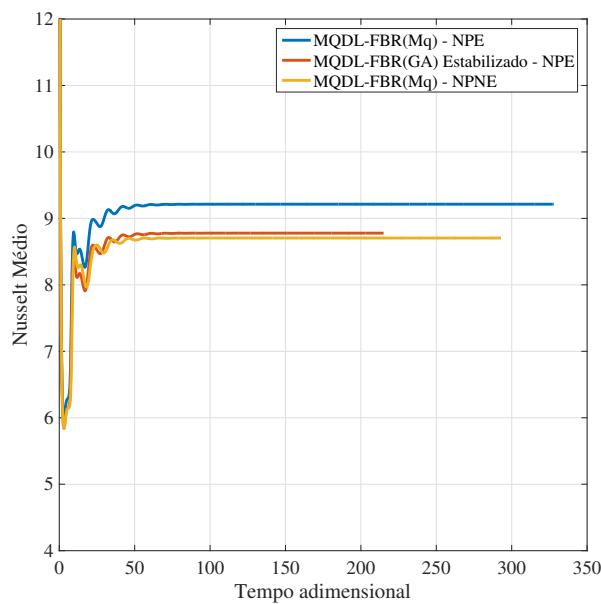


Figura 4.10: Comparação na evolução temporal do número de Nusselt Médio, Nu , para o MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE e MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $Ra = 10^6$ - Decomposição LU

4.1.4 Resultados com o MQDL-FBR(PHS) - Método de Decomposição LU

O MQDL-FBR(PHS) com polinômios suplementares surgiu recentemente (Flyer *et al.*, 2016a,b) como uma alternativa para o cálculo dos coeficientes de ponderação em aproximações de derivadas espaciais com boa acurácia. Suas principais vantagens, já apontadas na seção 3.4 do capítulo 3, são: 1) não há a necessidade de se preocupar com a escolha de um parâmetro de forma, ausente nesse caso; 2) as aproximações de derivadas próximas às fronteiras são relativamente acuradas, não ocorrendo suportes defeituosos (*rank* deficiente); 3) a ordem de precisão do método está ligada ao grau do polinômio suplementar que é um número inteiro.

Experimentos numéricos foram feitos aplicando o MQDL-FBR(PHS) com a PHS $\varphi(r) = r^7$ em NPEs e NPNEs, com as mesmas nuvens da Tabela 3.3. No caso de NPEs, a escolha do grau do polinômio seguiu a Tabela 3.2. No caso de NPNEs, a escolha do grau do polinômio foi diferente para os pontos de fronteira e para os pontos internos: para um determinado n_s , o maior grau do polinômio para os pontos de fronteira foi igual ao especificado para NPEs; para os pontos internos, porém, foi necessário em algumas situações, reduzir o grau indicado na Tabela 3.2 para que hovesse a convergência das soluções. O grau do polinômio usado em cada experimento pode ser visto no Apêndice G (Tabelas G.11 para NPE e G.13 para NPNE). Em todos os casos foi aplicado o RCM e, para a solução da equação de função-corrente, utilizou-se a decomposição LU com armazenamento em banda da matriz global.

As Tabelas 4.6 e 4.7 mostram os resultados para o número de Nusselt Médio na parede quente ($X = 0$) para $Ra = 10^6$ e seus respectivos desvios percentuais com relação à referência da literatura (Davis (1983)) em discretizações em NPE e NPNE, respectivamente, para diversos n_s (ver parâmetros das simulações nas Tabelas G.12 e G.14).

Tabela 4.6: Resultados para o número de Nusselt Médio para diversas NPE e vários n_s

$Nu = 8,817$ (Davis, 1983)					
n_s		45×45	65×65	85×85	105×105
9	Nu	11,1548	9,6996	9,2545	9,0746
	Desvio(%)	20,9576	9,0997	4,7270	2,8383
25	Nu	9,6223	8,8612	8,7714	8,7759
	Desvio(%)	8,3687	0,4986	0,5194	0,4688
33	Nu	9,0022	8,6000	8,6803	8,7481
	Desvio(%)	2,0575	2,5233	1,5748	0,7871
45	Nu	9,1420	8,7287	8,7531	8,7843
	Desvio(%)	3,5546	1,0115	0,7304	0,3727
55	Nu	8,4563	8,4914	8,6968	8,7808
	Desvio(%)	4,2657	3,8344	1,3818	0,4125

Percebe-se que há uma maior aproximação nos resultados conforme se aumenta a quantidade de pontos da discretização (refinamento) em NPE para um determinado n_s . Isso é um

bom indicativo da consistência nos resultados. Também, em alguns casos, ocorre maior aproximação quando se toma uma NPE e se aumenta o número de pontos do suporte local (n_s), mas esse fato não ocorre em todos os casos. O menor desvio percentual encontrado foi para a NPE de 125×125 com $n_s = 55$, inferior a 0,08 %. É importante salientar que os resultados de Davis (1983) foram obtidos com uma malha uniforme de 81×81 pontos para $Ra = 10^6$.

Em NPNE, também ocorre maior aproximação nos resultados de acordo com que se aumenta a quantidade de pontos da discretização para um determinado n_s . Isso indica a consistência do MQDL-FBR(PHS) também em NPNEs. Ainda, em alguns casos, há melhora quando se toma uma NPNE e se aumenta o número de pontos do suporte local (n_s), o que pode ser observado claramente nas NPNEs de 11030 e 15739 pontos. O menor desvio percentual aferido nas simulações numéricas foi para a NPNE de 15739 pontos com $n_s = 55$, inferior a 0,05%.

Tabela 4.7: Resultados para o número de Nusselt Médio para diversas NPNE e vários n_s

$Nu = 8,817$ (Davis, 1983)					
n_s	2048	4230	7284	11030	15739
25	Nu	9,0405	8,6732	8,7413	8,7773
	Desvio(%)	2,4722	1,6576	0,8656	0,4523
33	Nu	8,5923	8,5756	8,7455	8,7909
	Desvio(%)	2,6152	2,8153	0,8176	0,2967
45	Nu	8,5173	8,7035	8,8090	8,8093
	Desvio(%)	3,5188	1,3035	0,0909	0,0878
55	Nu	8,3824	8,6460	8,8057	8,8225
	Desvio(%)	5,1841	1,9783	0,1289	0,0621

As Figuras 4.11, 4.12, 4.13, 4.14 e 4.15 apresentam os resultados para as linhas de corrente (curvas de nível da função-corrente), isotérmicas (curvas de nível de temperatura), curvas de nível da velocidade U , curvas de nível da velocidade V e curvas de nível da vorticidade, respectivamente, para $Ra = 10^6$, NPNE de 15739 pontos (Figura 4.16) e $n_s = 55$. Os resultados podem ser comparados com os obtidos por Davis (1983), para esse mesmo caso, na Figura 4.17 (Figura adaptada de Davis (1983)).

4.2 Cavidade Quadrada com Tampa Móvel

Essa seção visa aplicar o MQDL-FBR(PHS) no problema da Cavidade Quadrada com Tampa Móvel em NPEs e NPNEs. As equações que regem o movimento do fluido dentro da cavidade foram abordadas pela formulação vorticidade e função-corrente. As condições iniciais e de contorno são apresentadas e os resultados para Reynolds 400, 1000 e 3200 comparados com os encontrados por Ghia *et al.* (1982).

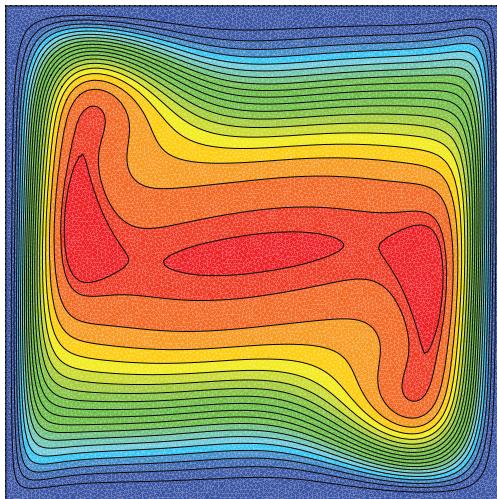


Figura 4.11: Linhas de Corrente ψ - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 a).

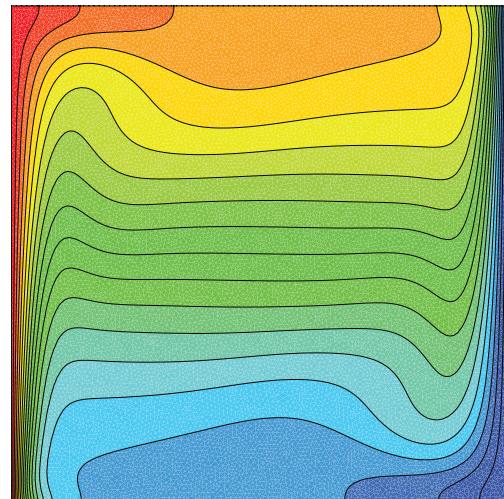


Figura 4.12: Isotérmicas θ - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 b).

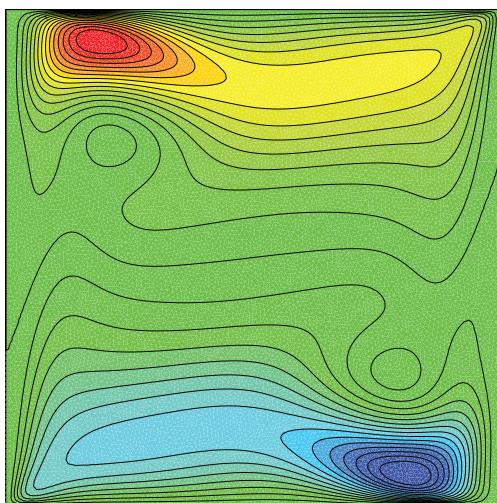


Figura 4.13: Curvas de nível para velocidade U - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 c).

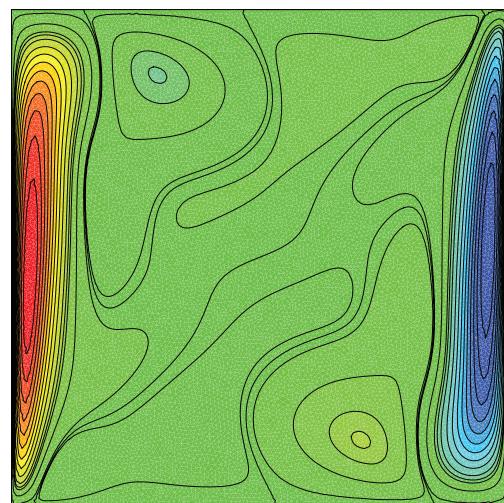


Figura 4.14: Curvas de nível para velocidade V - $Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 d).

4.2.1 Formulação do Problema Físico e Discretização das Equações

A aplicação física da cavidade quadrada com tampa móvel é um problema puramente hidrodinâmico também bastante utilizado para verificação de resultados (*benchmark*). De forma simples, é um problema em que a cavidade, preenchida por um fluido, é submetida à uma velocidade constante e diferente de zero em sua superfície superior (tampa) resultando no movimento do fluido no interior da cavidade. Ghia *et al.* (1982) resolveu esse problema usando o método de Diferenças Finitas com malhas estruturadas de 129×129 e 257×257 pontos para diversos números de Reynolds.

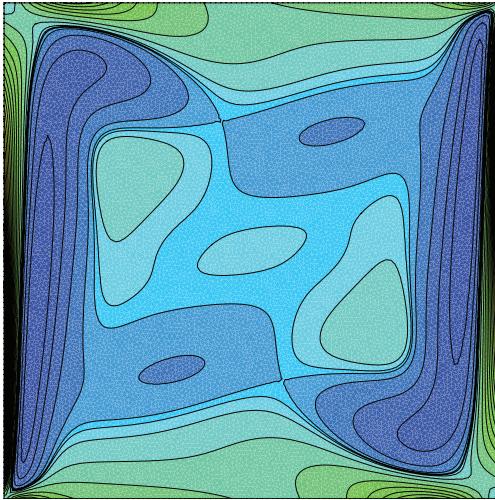


Figura 4.15: Curvas de nível para vorticidade $\omega - Ra = 10^6$. Comparar com Figura 4.17 e).

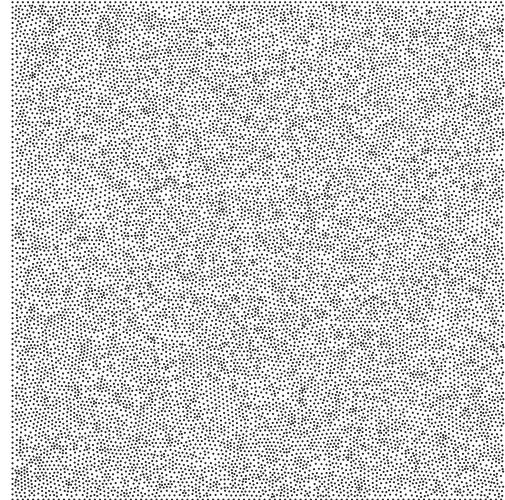


Figura 4.16: Nuvem de Pontos de Não-Estruturada de 15739 pontos

O Apêndice H apresenta as hipóteses simplificadoras e todo o processo para obtenção das equações adimensionais que regem o movimento do fluido na formulação vorticidade (ω) e função-corrente (ψ). Essas equações assumem as seguintes formas:

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \omega}{\partial X} + V \frac{\partial \omega}{\partial Y} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial Y^2} \right) \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} = \omega \quad (4.19)$$

sendo Re o número de Reynolds e a vorticidade definida por:

$$\omega = \frac{\partial U}{\partial Y} - \frac{\partial V}{\partial X} \quad (4.20)$$

As componentes de velocidade U e V são definidas a partir da função-corrente da seguinte maneira:

$$U = \frac{\partial \psi}{\partial Y} \quad (4.21)$$

$$V = -\frac{\partial \psi}{\partial X} \quad (4.22)$$

As condições iniciais, $\tau = 0$, e as condições de contorno, $\tau > 0$, são definidas como segue:

$$\omega = \psi = 0, \quad \text{quando} \quad \tau = 0 \quad (4.23)$$

$$\psi = 0, \quad U = 1, \quad V = 0, \quad \text{para} \quad Y = 1, \quad 0 < X < 1 \quad (4.24)$$

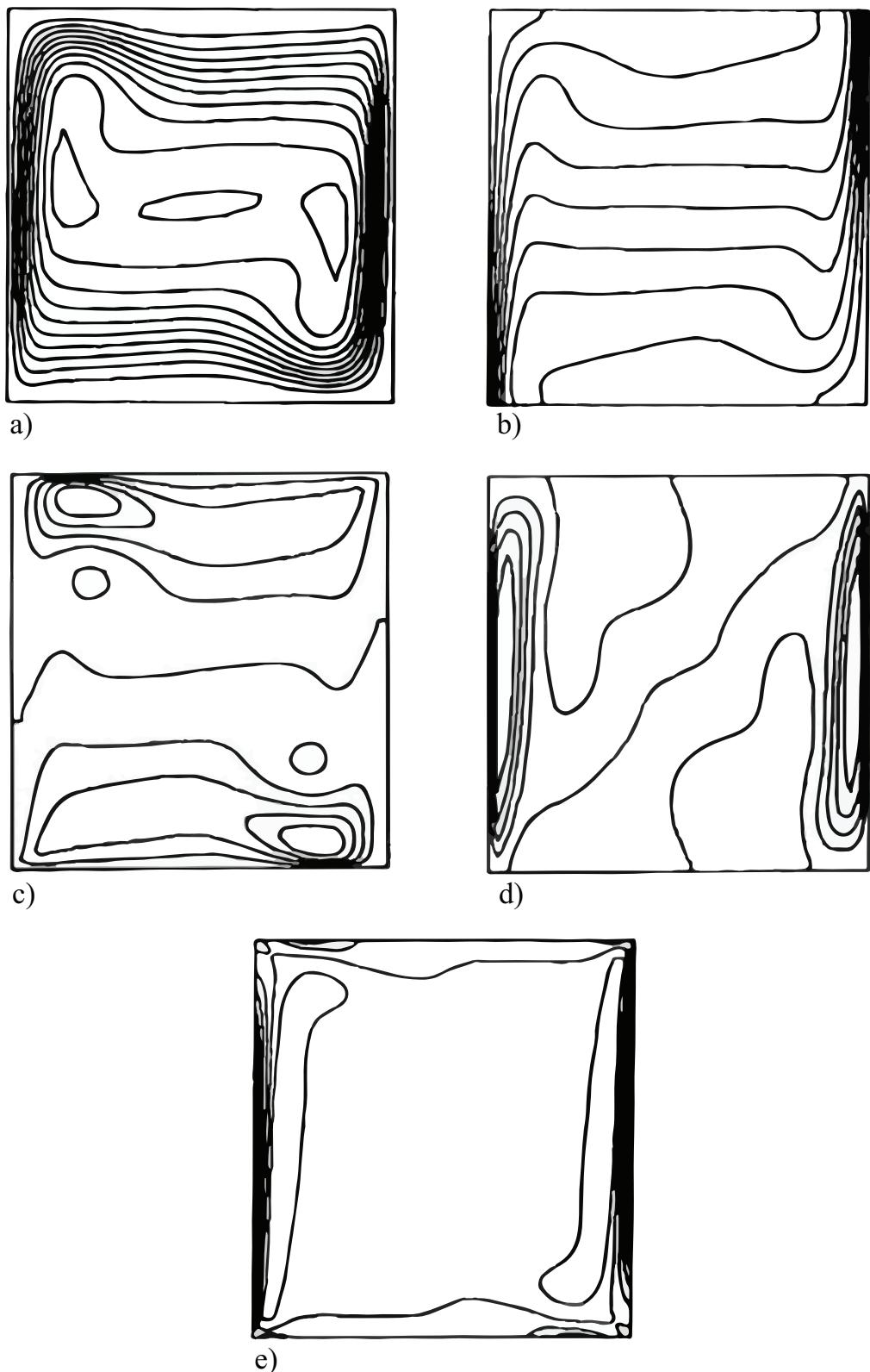


Figura 4.17: Resultados de Davis (1983) para $Ra = 10^6$: a) linhas de corrente; b) isotérmicas; c) curvas de nível U ; d) curvas de nível V , e) curvas de nível da vorticidade. (Adaptada de Davis (1983))

$$\psi = 0, \quad U = 0, \quad V = 0, \quad \text{para} \quad Y = 0, \quad 0 < X < 1 \quad (4.25)$$

$$\psi = 0, \quad U = 0, \quad V = 0, \quad \text{para} \quad X = 0, \quad 0 \leq Y \leq 1 \quad (4.26)$$

$$\psi = 0, \quad U = 0, \quad V = 0, \quad \text{para} \quad X = 1, \quad 0 \leq Y \leq 1 \quad (4.27)$$

A Figura 4.18 ilustra o problema da cavidade quadrada e as condições de contorno empregadas para se obter a solução aproximada das equações pelo MQDL-FBR. As retas pontilhadas representam as coordenadas centrais da cavidade onde as velocidades U e V são calculadas para comparação com os perfis de velocidades obtidos por Ghia *et al.* (1982).

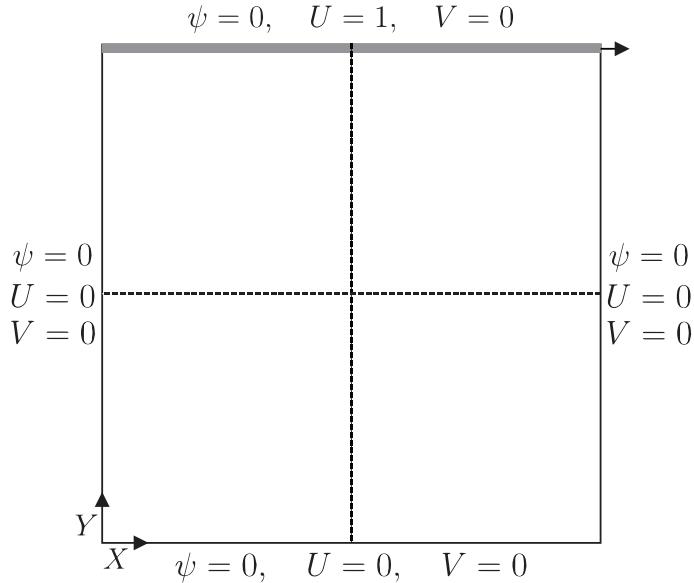


Figura 4.18: Geometria e condições de contorno para o problema hidrodinâmico da cavidade quadrada com tampa móvel

As equações (4.18), (4.19), (4.20), (4.21) e (4.22) colocadas em um ponto global i , de acordo com o MQDL-FBR, assumem as seguinte equações discretizadas:

$$\frac{d\omega_i}{d\tau} = \frac{1}{Re} \left(\sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2X} \omega_{i,k} + \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2Y} \omega_{i,k} \right) - U_i \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \omega_{i,k} - V_i \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1Y} \omega_{i,k} \quad (4.28)$$

$$\sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2X} \psi_{i,k} + \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{2Y} \psi_{i,k} = \omega_i \quad (4.29)$$

$$U_i = \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1Y} \psi_{i,k} \quad (4.30)$$

$$V_i = - \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} \psi_{i,k} \quad (4.31)$$

$$\omega_i = \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1Y} U_{i,k} - \sum_{k=1}^{n_s} w_{i,k}^{1X} V_{i,k} \quad (4.32)$$

sendo $w_{i,k}^{1X}$, $w_{i,k}^{1Y}$, $w_{i,k}^{2X}$ e $w_{i,k}^{2Y}$ os coeficientes de ponderação de primeiras e segundas derivadas com relação a X e Y , respectivamente. Valores de uma função g_i são calculados diretamente para ponto i , enquanto $g_{i,k}$ são valores da mesma função para cada ponto k do suporte local vinculado ao ponto de referência i . Nesse caso, a equação (4.28) é semi-discreta, com os termos espaciais discretizados pelo MQDL-FBR enquanto a discretização do domínio temporal feita através de um método explícito.

A equação (4.28), da vorticidade, foi resolvida de forma análoga ao descrito na seção 4.1.1 deste capítulo, ou seja, pelo método de Euler Explícito. O valor adotado para o incremento de tempo em cada experimento numérico foi suficientemente baixo para situar-se na região de estabilidade do método e, por conseguinte, garantir a convergência da solução aproximada.

O SELG resultante da equação (4.29), função-corrente, foi resolvido pelo método de decomposição LU com armazenamento em banda da matriz global, como já foi feito anteriormente nos testes com a equação de Poisson e no problema de convecção natural em uma cavidade quadrada.

As equações (4.30) e (4.31) são usadas para calcular os valores das velocidades U e V , respectivamente, para os pontos internos da cavidade, enquanto a equação (4.32) para o cálculo dos valores de vorticidade nas fronteiras do domínio.

O fluxograma da Figura 4.19 representa a sequência de passos executada pelo programa em linguagem Fortran para a obtenção das soluções numéricas aproximadas pelo MQDL-FBR do problema da cavidade quadrada com tampa móvel.

4.2.2 Resultados

Os experimentos numéricos com o MQDL-FBR(PHS) no problema da cavidade com tampa móvel foram feitos para os seguintes números de Reynolds (Re): 400, 1000 e 3200. Note-se que, aumentando o número de Reynolds, equação (4.18), os efeitos difusivos diminuem e, consequentemente, há uma maior influência dos efeitos convectivos na equação. Para fins de comparação, situações com esses números de Reynolds remetem-se às mesmas analisadas por Ghia *et al.* (1982).

Todas as simulações foram feitas em NPE de 125×125 pontos e, analogamente, em NPNE de 15739 pontos com $n_s = 25$. Os parâmetros das simulações, que estão relacionados com as nuvens e com o cálculo dos pesos, como a distância média entre os pontos, h_{medio} , largura de banda antes e após a utilização do RCM e o grau dos polinômio suplementar, q_i (pontos internos) e q_f (pontos de fronteira) encontram-se na Tabela 4.8. Na Tabela 4.9 estão os parâmetros e resultados relacionados com cada simulação (número de Reynolds) como incremento de tempo,

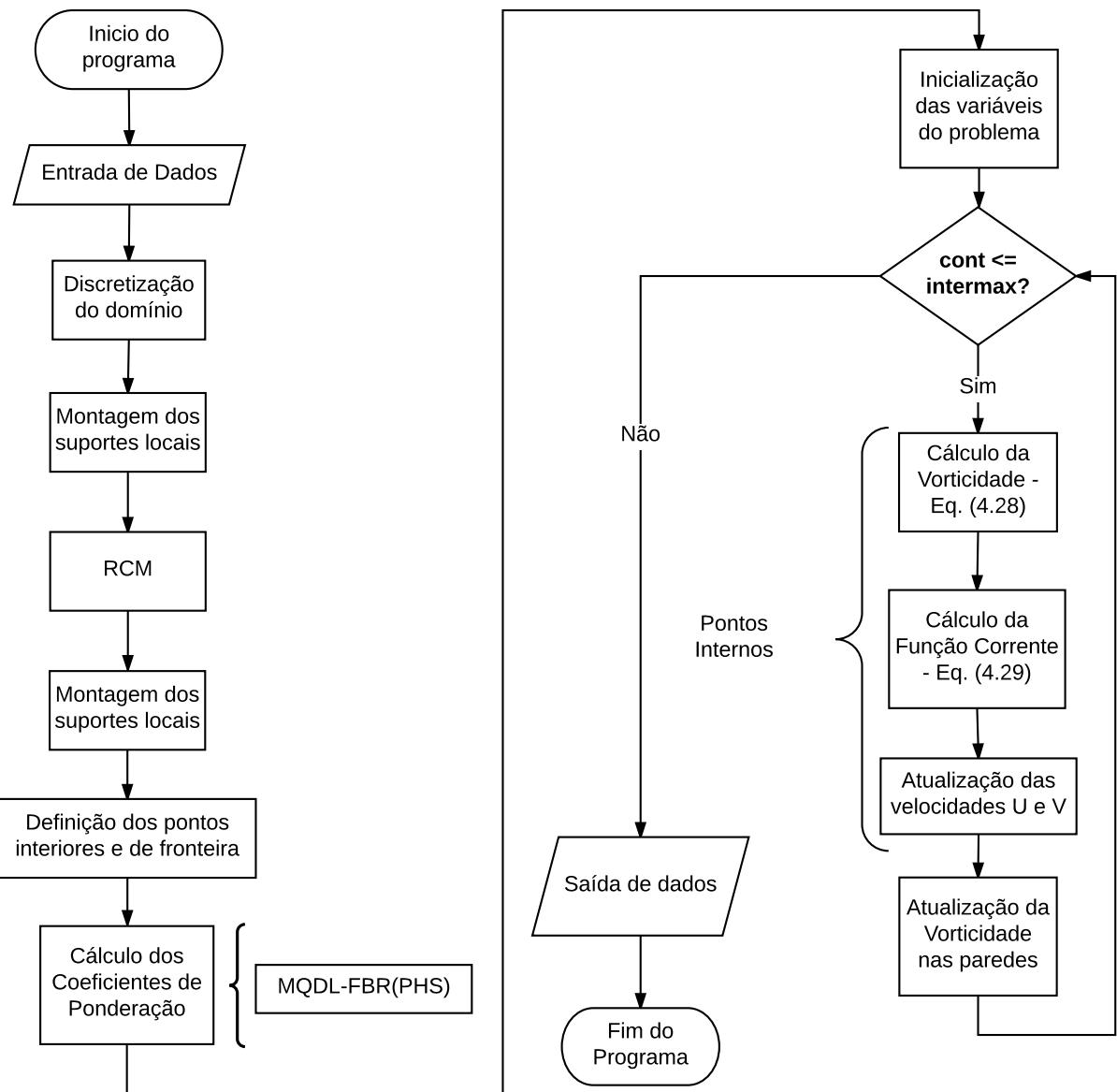


Figura 4.19: Fluxograma utilizado para obter as soluções do problema da cavidade quadrada com tampa móvel

$\delta\tau$, número máximo de iterações, itermax e o tempo de processamento total, TP.

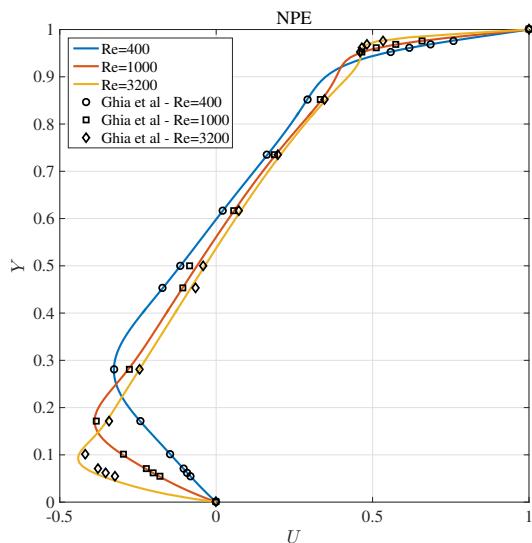
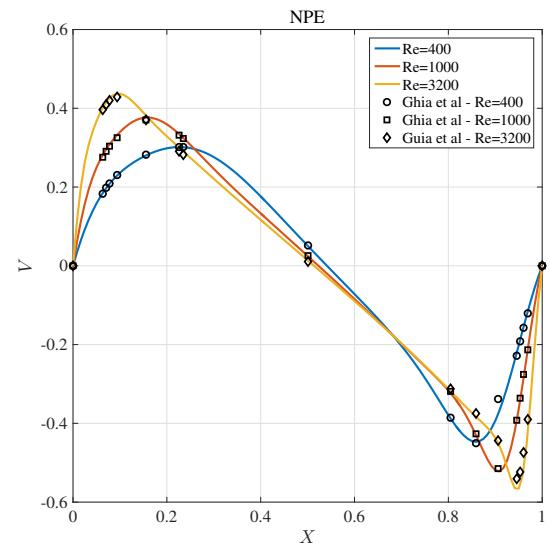
Tabela 4.8: Parâmetros relacionados com as nuvens de pontos e cálculo dos pesos

	NPE - 125×125	NPNE - 15739
h_{medio}	$8,06 \cdot 10^{-3}$	$8,03 \cdot 10^{-3}$
lb sem RCM	1129	30597
lb com RCM	1306	1709
q_i	3	4
q_f	3	3

Tabela 4.9: Parâmetros e Resultados obtidos em cada experimentos numérico

	NPE			NPNE		
	$Re = 400$	$Re = 1000$	$Re = 3200$	$Re = 400$	$Re = 1000$	$Re = 3200$
$\delta\tau$	10^{-3}	10^{-3}	2.10^{-3}	$2.58.10^{-3}$	$6.46.10^{-4}$	10^{-3}
itermax	59801	131201	265001	25801	100001	220001
TP	2211,97	5706,03	9873,69	1191,55	4599,67	8728,26

A Figura 4.20 mostra os perfis de velocidade U na linha central vertical da cavidade, enquanto a Figura 4.21 os perfis de velocidade V na linha central horizontal da cavidade para Reynolds 400, 1000 e 3200 em simulações em NPE. Resultados análogos foram obtidos para simulações em NPNE e encontram-se nas Figuras 4.22 e 4.23. Os resultados tanto em NPE quanto em NPNE concordam bem com os obtidos por Ghia *et al.* (1982). Pequenos desvios podem ser vistos nas simulações com $Re = 3200$.

**Figura 4.20:** Perfis de velocidade U na linha central vertical da cavidade - NPE**Figura 4.21:** Perfis de velocidade V na linha central horizontal da cavidade - NPE

As Figuras 4.24, 4.25 e 4.26 ilustram as linhas de corrente e as Figuras 4.27, 4.28 e 4.29 as curvas de nível da vorticidade, no regime permanente, encontradas com a MQDL-FBR(PHS) em NPNE para Reynolds 400, 1000 e 3200, respectivamente. Esses resultados podem ser comparados com os obtidos por Ghia *et al.* (1982) nas Figuras 4.36 e 4.37 (adaptadas de Ghia *et al.* (1982)).

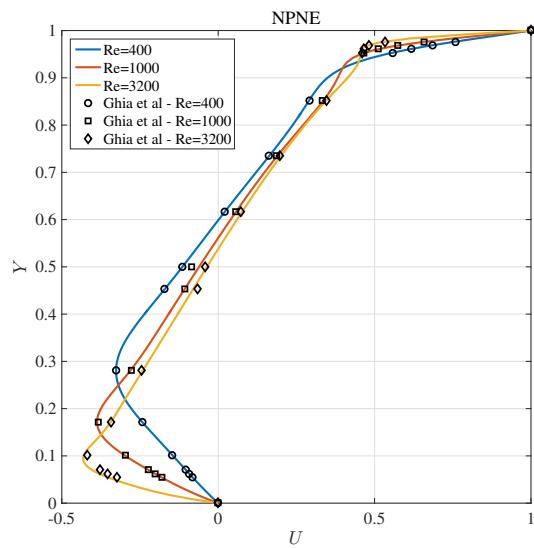


Figura 4.22: Perfis de velocidade U na linha central vertical da cavidade - NPNE

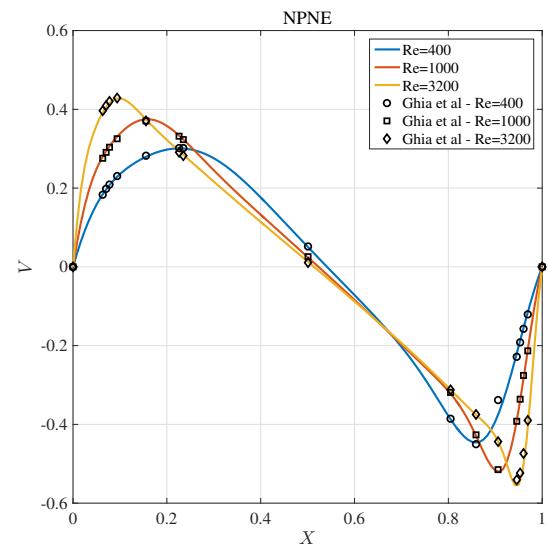


Figura 4.23: Perfis de velocidade V na linha central horizontal da cavidade - NPNE

As Figuras 4.30, 4.31 e 4.32 mostram as curvas de nível para a velocidade U e as Figuras 4.33, 4.34 e 4.35 as curvas de nível para a velocidade V , no regime permanente, obtidas com a MQDL-FBR(PHS) em NPNE para Reynolds 400, 1000 e 3200, respectivamente.

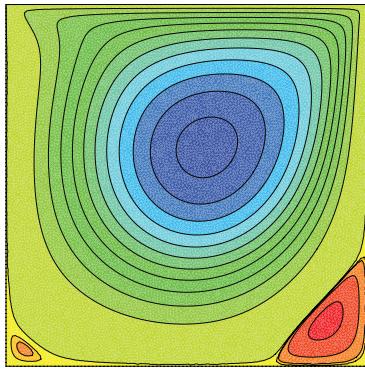


Figura 4.24: Linhas de Corrente - $Re = 400$

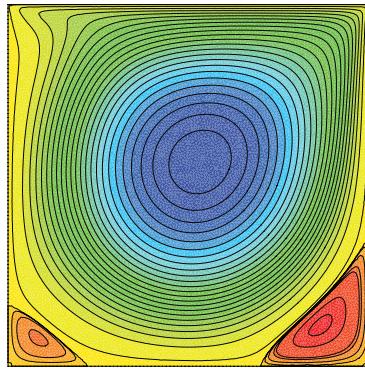


Figura 4.25: Linhas de Corrente para $Re = 1000$

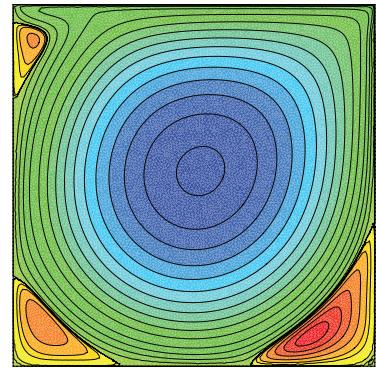


Figura 4.26: Linhas de Corrente para $Re = 3200$

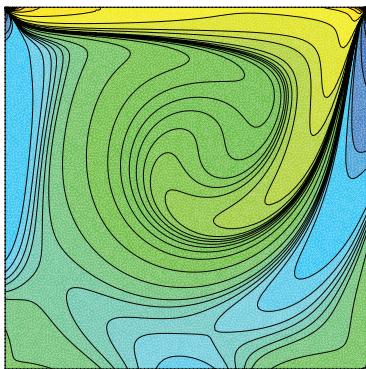


Figura 4.27: Curvas de nível para Vorticidade - $Re = 400$

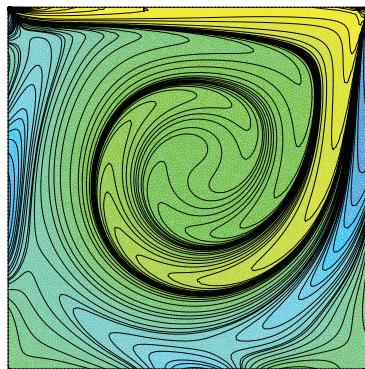


Figura 4.28: Curvas de nível para Vorticidade - $Re = 1000$

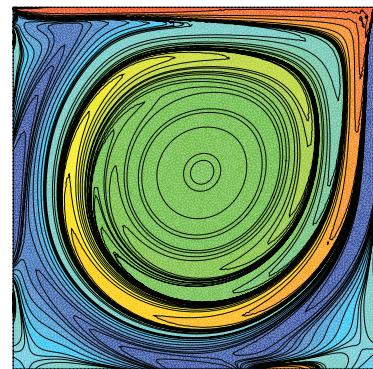


Figura 4.29: Curvas de nível para Vorticidade - $Re = 3200$

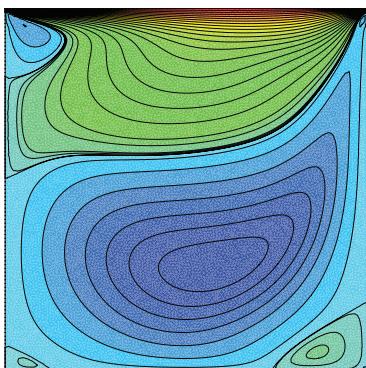


Figura 4.30: Curvas de nível para Velocidade U - $Re = 400$

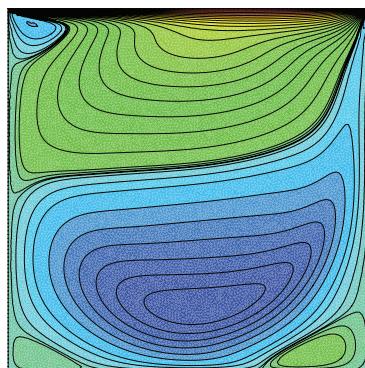


Figura 4.31: Curvas de nível para Velocidade U - $Re = 1000$

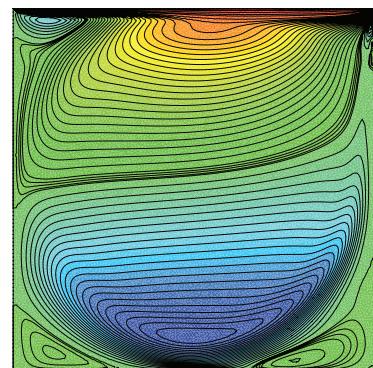


Figura 4.32: Curvas de nível para Velocidade U - $Re = 3200$

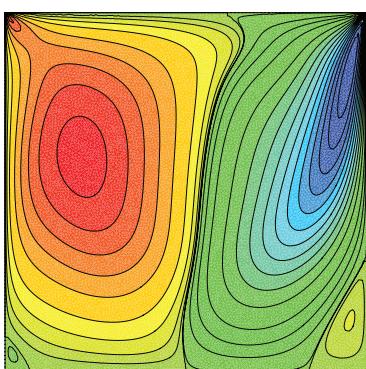


Figura 4.33: Curvas de nível para Velocidade V - $Re = 400$

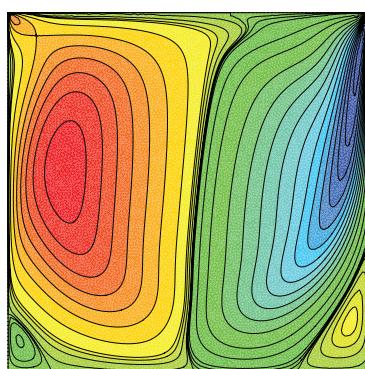


Figura 4.34: Curvas de nível para Velocidade V - $Re = 1000$

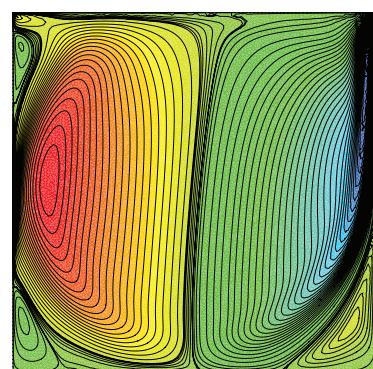


Figura 4.35: Curvas de nível para Velocidade V - $Re = 3200$

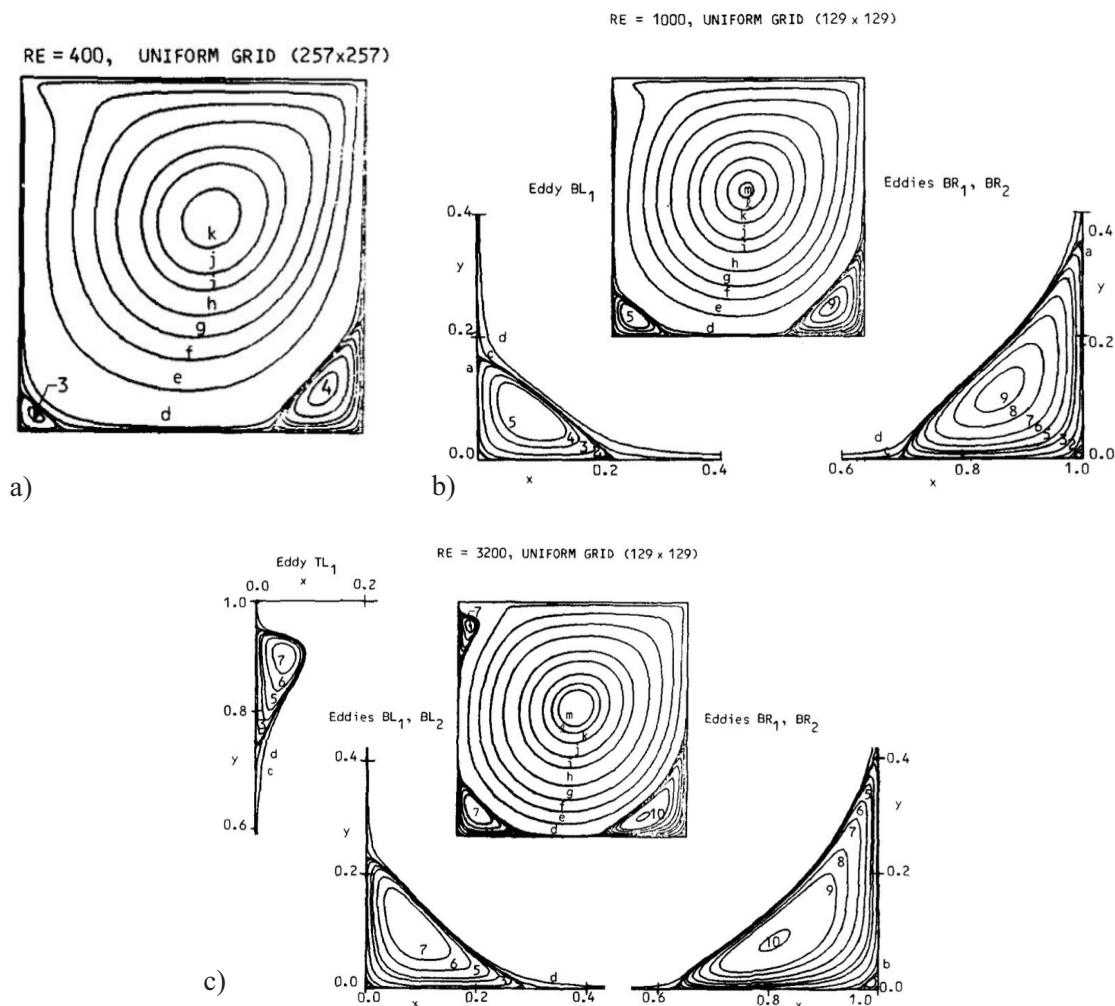


Figura 4.36: Linhas de Corrente obtidas por Ghia *et al.* (1982). a) $Re = 400$, b) $Re = 1000$ e c) $Re = 3200$ (adaptadas de Ghia *et al.* (1982))

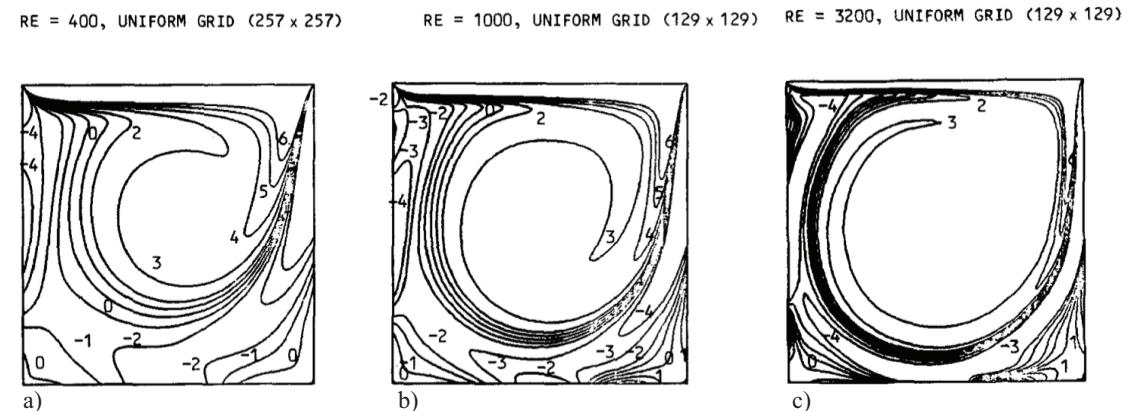


Figura 4.37: Curvas de nível para vorticidade obtidas por Ghia *et al.* (1982). a) $Re = 400$, b) $Re = 1000$ e c) $Re = 3200$ (adaptadas de Ghia *et al.* (1982))

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões de Trabalhos Futuros

5.1 Conclusões

O MQDL-FBR(Mq), MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) foram implementados em discretizações de nuvens de pontos estruturadas e não-estruturadas com o critério dos pontos mais próximos ao pontos de referência como formação dos suportes locais.

Nos testes numéricos com a Equação de Poisson, se evidenciou a vantagem do MQDL-FBR(GA) Estabilizado frente ao MQDL-FBR(Mq) e MQDL-FBR(GA) na extensão do intervalo do parâmetro de forma em um caso simples em nuvem estruturada e suportes fixos e centrados. Também se verificou o aspecto de não-compacidade do MQDL-FBR, ou seja, que a ordem de precisão aumenta com a extensão do suporte local mas não com o aumento do número de pontos para um suporte com a mesma extensão.

A estratégia de aumento de precisão na aritmética de ponto flutuante no cálculo dos coeficientes de ponderação do MQDL-FBR(Mq) (de dupla para quádrupla) no contexto de NPEs e NPNEs propiciou bons resultados, principalmente quanto à diminuição das instabilidades nos gráficos do erro relativo em função do parâmetro de forma, c . O efeito no entanto não foi significativo quanto à extensão do intervalo do parâmetro de forma.

A solução numérica da equação de Poisson foi feita através do MQDL-FBR(GA) Estabilizado no contexto de NPEs e NPNE. Algumas divergências foram verificadas nas soluções numéricas para alguns parâmetros de forma em NPNE, sugerindo o emprego de métodos mais estáveis para a solução do sistema de equações lineares global (SELG) resultante da discretização da equação de Poisson pelo MQDL-FBR. Até então, esse sistema vinha sendo resolvido pelo método iterativo de Sobre-Relaxações Sucessivas (SoR), no caso de NPEs e, Sub-Relaxações Sucessivas (SuR) no caso de NPNEs. Verificou-se que a numeração global das NPNEs geradas

com o *pdetool* do Matlab produzia matrizes globais com largura de banda praticamente completa. Assim sendo, utilizou-se o algoritmo RCM para redução da largura de banda e se passou a resolver o SELG pelo método direto de Decomposição LU com armazenamento de banda esparsa.

Em NPEs, as soluções numéricas da equação de Poisson obtidas com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado mostraram a ocorrência de valores específicos de n_s nos quais os erros relativos diminuem, evidenciando novamente o aspecto de não-compacidade do MQDL-FBR. Ocorrência análoga se deu com o MQDL-FBR(PHS), acompanhada, porém, de maiores oscilações nos resultados. Em NPNEs, tanto com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado quanto para o MQDL-FBR(PHS) ocorreram oscilações nos resultados, que são naturais devido à grande variação na configuração dos suportes locais; no entanto, destaca-se que os erros relativos foram relativamente maiores em NPEs, evidenciando-se a boa adequação do MQDL-FBR em NPNEs. Estimativas de ordem de precisão, à *posteriori*, de ambas as abordagens foram feitas, verificando-se ordens bem elevadas com o aumento de n_s principalmente em NPNEs.

Erros absolutos nas primeiras e segundas derivadas usando o MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) foram calculados em todos os pontos do domínio para uma função teste (u_3). O intuito foi verificar os erros absolutos nas derivadas principalmente nas proximidades da fronteira. Com os resultados, concluiu-se que o MQDL-FBR(GA) Estabilizado não é robusto o suficiente para calcular os coeficientes de ponderação em todos os tipos de suporte local, podendo em certos casos aparecerem matrizes locais com *rank* deficiente cujos pesos resultantes não servem para aproximação das derivadas. Já o MQDL-FBR(PHS) forneceu resultados satisfatórios para os erros absolutos das derivadas, credenciando-se como uma opção viável para soluções numéricas principalmente em NPNEs.

O MQDL-FBR(Mq), MQDL-FBR(GA) Estabilizado e o MQDL-FBR(PHS) foram aplicados para se obter a solução numérica das equações de Navier-Stokes do problema clássico de convecção natural em uma cavidade quadrada. Resultados foram obtidos para o número de Nusselt Médio na parede quente com número de Rayleigh $Ra = 10^4$ e $Ra = 10^6$. Inicialmente, para $Ra = 10^4$, resultados satisfatórios (próximos aos das referências bibliográficas (Davis, 1983; Shu *et al.*, 2003)) foram encontrados com o MQDL-FBR(Mq) (valores baixos de c) em NPEs e NPNEs, bem como com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPEs. Entretanto, não foi possível obter resultados com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPNEs devido ao surgimento de suportes locais defeituosos na fronteira. Ainda com o MQDL-FBR(Mq), em NPNEs, $Ra = 10^6$, verificaram-se oscilações do número de Nusselt Médio em função do tempo adimensional, dependentes da tolerância utilizado no método SuR. Ficou evidente a importância da substituição desse método por outro mais estável na solução dos SELGs. Com o uso do método de decomposição LU, os resultados não apresentaram oscilações. Com isso, os resultados com o MQDL-FBR(PHS) para $Ra = 10^6$ foram os que mais se aproximaram da referência bibliográfica (Davis, 1983), tanto para NPEs quanto para NPNEs, chegando a desvios percentuais

inferiores a 0,05%.

O problema da cavidade com tampa móvel foi resolvido pelo MQDL-FBR(PHS) com Reynolds 400, 1000 e 3200. Os resultados em NPEs e em NPNEs foram próximos à referência (Ghia *et al.*, 1982).

A Tabela 3.2 pode ser considerada um resultado sintético útil, resultante dos esforços despendidos em diversos experimentos numéricos deste trabalho. Ela serve para orientar a escolha do grau do polinômio suplementar em função do número de pontos do suporte local escolhido para a utilização do MQDL-FBR(PHS) no contexto de NPEs e NPNEs.

É importante salientar que os suportes locais utilizados no MQDL-FBR, no contexto geral de nuvens de pontos, são descentrados na fronteira e em suas proximidades. Mesmo assim, permitiram o cálculo satisfatório de valores na fronteira e a aplicação consequente da condição de contorno de Neumann. Com isso, tornou-se possível evitar a utilização de nuvens estruturadas próximo à fronteira ou o emprego de pontos fora do domínio (pontos fantasmas). Essa conclusão pode ser considerada uma contribuição desta tese. Todavia, na busca de altas precisões no cálculo de derivadas na fronteira, a utilização de nuvens estruturadas nas suas proximidades pode ser indicada.

Conclui-se por fim que o MQDL-FBR(Mq) é uma opção para solução de EDPs no contexto de nuvens de pontos, mas está restrito a uma faixa muito pequena do parâmetro de forma. O MQDL-FBR(GA) Estabilizado amplia consideravelmente a faixa do parâmetro de forma e pode ser aplicado no contexto de nuvens de pontos; entretanto quando há a necessidade de cálculos de derivadas nas fronteiras (suportes descentrados), o método ainda não é robusto o suficiente. Já o MQDL-FBR(PHS) mostrou-se uma opção viável e promissora tanto para NPEs quanto para NPNEs.

5.2 Propostas para Trabalhos Futuros

Algumas propostas para trabalhos futuros, baseadas nos resultados encontrados nesta tese, são discutidas a seguir.

(i) Neste trabalho, a equação de Poisson em um domínio quadrado com condição de contorno de Dirichlet serviu como uma equação de teste para verificar os parâmetros importantes que influenciam na obtenção da solução numérica através do MQDL-FBR. Todavia, muitos problemas contém termos temporais e ainda termos não-lineares, que são os casos abordados no capítulo 4. Problemas que contêm termos convectivos dominantes (EDP hiperbólica) já vem sendo estudados no contexto do MQDL-FBR, como no trabalho de Chan *et al.* (2014) relatado na revisão bibliográfica. Trabalhos recentes como o de Stevens e Power (2015) e Yun e Hon (2016) servem como referência para estudos do MQDL-FBR em problemas que tem termos

convectivos dominantes. Por isso é importante estudar aplicação do MQDL-FBR em outros tipos de EDPs, em problemas de valor inicial e/ou de contorno.

(ii) A formulação vorticidade e função-corrente, e temperatura quando há transferência de calor, é uma abordagem simples e eficiente, mas restringe-se à problemas bidimensionais. Para viabilizar a aplicação do MQDL-FBR em problemas tridimensionais que envolvam as equações de Navier-Stokes, estudos de formulações tais como velocidade-pressão (variáveis primitivas), como em Ding *et al.* (2006), e vorticidade-velocidade, presente em Lo *et al.* (2005), por exemplo, podem ser estudadas e implementadas.

(iii) Verificou-se a não-compacidade do MQDL-FBR nos testes com a equação de Poisson. A implementação da formulação hermitiana para o MQDL-FBR, que foi comentada na revisão bibliográfica com o trabalho de Wright e Fornberg (2006), permitiria aumentar a precisão do método sem aumentar consideravelmente a quantidade de pontos dos suportes locais. Trabalhos recentes como os de Krowiak (2016) e Stevens e Power (2015) trazem abordagens hermitianas do MQDL-FBR e algumas aplicações, e podem servir como referências para futuros trabalhos nessa linha.

(iv) Nesta tese, foi utilizado apenas o método explícito de Euler para a evolução temporal das equações dependentes do tempo, vorticidade e temperatura no caso da convecção natural em uma cavidade quadrada e vorticidade no caso da cavidade quadrada com tampa móvel. Existem diversos outros métodos, com maior região de estabilidade que o método de Euler explícito e/ou mais precisos, que podem acelerar a convergência das soluções das equações para um eventual regime permanente. Métodos como Runge-Kutta, Adams-Bashforth e Euler implícito são alguns exemplos que podem ser estudados em LeVeque (2007). Também pode-se abordar as equações de Navier-Stokes utilizando o método de Adams-Bashforth nos termos convectivos e o método de Crank-Nicolson nos termos difusivos, ambos de segunda ordem, como feito por Ding *et al.* (2006).

(v) O MQDL-FBR foi aplicado neste trabalho em uma geometria simples. Porém, o método pode ser aplicado em problemas que envolvam geometrias mais complexas, como, por exemplo, escoamentos aerodinâmicos em torno de corpos. Ainda, pode-se implementar modelos de turbulência no contexto do MQDL-FBR, que é algo ainda não observado na literatura atual.

(vi) As nuvens podem influenciar significativamente os resultados obtidos com o MQDL-FBR. Nuvens muito irregulares ou regiões com poucos pontos de discretização podem resultar em aproximações pouco acuradas. Algumas metodologias para geração de nuvens quase uniformes podem ser estudadas. Destaca-se, por exemplo, o método CVT (em inglês, Centroidal Voronoi Tessellation, Hateley *et al.* (2015)), em que as nuvens correspondem aos centróides das regiões de Voronoi. Cita-se também os métodos baseados em dinâmica molecular, em que os pontos da nuvem são considerados como partículas interagindo (Zheleznyakova e Surzhikov,

2013).

(vii) O MQDL-FBR ainda carece de estudos em uma vertente de análise matemática como erro de truncamento local, estabilidade e convergência de modo mais geral. Bayona *et al.* (2010) estudaram o erro de truncamento local para alguns suportes específicos, com uma quantidade pequena de pontos no suporte local até duas dimensões espaciais e serve como referência para estudos futuros.

(viii) A comparação de resultados com o MQDL-FBR com outros métodos de aproximação de operadores, como o de diferenças finitas tradicional e o de elementos finitos, podem servir para destacar vantagens e desvantagens desse tipo de abordagem. Comparações entre o MQDL-FBR e o método de elementos finitos já foram abordados, para solução de alguns problemas físicos, como foi relatados em trabalhos de Bararnia *et al.* (2010) e Soleimani *et al.* (2010) na revisão bibliográfica, por exemplo. Recomenda-se também o estudo de abordagens híbridas, em que o MQDL-FBR é combinado com outros métodos de aproximação de operadores, como, por exemplo, o trabalho de Ding *et al.* (2004) comentado na revisão bibliográfica.

(ix) Existem diversos fenômenos físicos que são descritos através de equações diferenciais parciais, em problemas de valor inicial e/ou de contorno, que poderiam ser abordados pelo Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial, tais como eletromagnetismo, vibrações, propagação de ondas, transferência de calor e de massa, fenômenos atmosféricos, dentre outros.

Apêndice A

Uma Interpretação do MQDL-FBR - Interpolação e Cálculo dos Pesos

De acordo com Flyer *et al.* (2016b), um interpolante com FBR para dados dispersos, $s(\mathbf{x})$ em \mathbb{R}^d , toma a seguinte forma:

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \lambda_k \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|) \quad (\text{A.1})$$

sendo $\|\cdot\|$ a norma Euclidiana.

Os coeficientes λ_k podem ser encontrados conhecendo os valores g_k nos pontos \mathbf{x}_k , $k = 1, \dots, N$ e, por conseguinte, resolvendo o seguinte sistema de equações lineares:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \varphi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|) & \dots & \varphi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_N\|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_1\|) & \dots & \varphi(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_N\|) \end{bmatrix}}_{[A]} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_N \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

A matriz $[A]$ é simétrica e será não singular para algumas escolhas de FBR, $\varphi(r)$. Conforme Fasshauer (2007), funções como Gaussiana, Bessel, Multiquádrica Inversa, dentre outras são estritamente positivas definidas, enquanto a Multiquádrica e Polihamônica Spline, por exemplo, são condicionalmente positivas definidas. Assim, o sistema (A.2) é frequentemente modificado para incluir termos polinomiais, em conjunto com restrições sobre os correspondentes coeficientes da expansão, para garantir solução única quando utiliza-se FBR condicionalmente positiva-definida (ou negativa) (Fasshauer (2007), capítulo 6). Como exemplo, incluindo

polinômios de primeira ordem em 2-d ($\mathbf{x} = (x, y)$), tem-se

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \lambda_k \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|) + \gamma_1 + \gamma_2 x + \gamma_3 y \quad (\text{A.3})$$

com as seguintes restrições

$$\sum_{k=1}^N \lambda_k = 0; \quad \sum_{k=1}^N \lambda_k x_k = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{k=1}^N \lambda_k y_k = 0; \quad (\text{A.4})$$

Em forma de sistema de equações lineares, tem-se

$$\left[\begin{array}{c|cc|ccc} [A] & & & [P] & \\ \hline - & - & - & - & - & - \\ [P]^T & & & [0] & \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_N \\ - \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} g_1 \\ \vdots \\ g_N \\ - \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right], \text{ com } [P] = \left[\begin{array}{ccc} 1 & x_1 & y_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_N & y_N \end{array} \right] \quad (\text{A.5})$$

Flyer *et al.* (2016b) ainda afirmam que no espaço dos parâmetros de restrição, o sistema (A.5) irá representar operadores definidos-positivos (ou negativos) e assim garantir uma única solução. E ainda que, γ_1 , γ_2 e γ_3 são multiplicadores de Lagrange que restringem os coeficientes das FBRs no espaço $[P]^T \lambda = 0$. Baseados no trabalho de Fornberg *et al.* (2002), eles afirmam que incluir polinômios de baixa ordem pode melhorar a precisão das aproximações nas fronteiras do domínio.

O MQDL-FBR pode ser visto, segundo Flyer *et al.* (2016b), conceitualmente, como um caso de superposições de um domínio discretizado com subdomínios separados em torno de um ponto juntamente com seus vizinhos mais próximos. Como foi definido no capítulo 2, pode-se aproximar um operador linear L de qualquer ordem, de uma função $f(\mathbf{x})$, como uma soma ponderada de valores funcionais em pontos discretos vizinhos do ponto de referência \mathbf{x}_i do \mathbb{R}^d , incluindo ele próprio. De forma compacta, tem-se

$$Lf(\mathbf{x}_i) \cong \sum_{k=1}^{n_s} w_k f(\mathbf{x}_k) \quad (\text{A.6})$$

sendo w_k os respectivos coeficientes de ponderação ou pesos associados ao operador L . Nessa interpretação, para calcular os coeficientes de ponderação, w_k , força-se que a combinação linear

dos valores da função seja exata para o seguinte interpolante:

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{n_s} \lambda_k \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|) + \sum_{k=1}^{\binom{q+d}{q}} \gamma_k \text{pol}_k(\mathbf{x}) \quad (\text{A.7})$$

com as seguintes restrições

$$\sum_{k=1}^{n_s} \lambda_k \text{pol}_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, \binom{q+d}{q} \quad (\text{A.8})$$

no qual $\text{pol}_q(\mathbf{x})$ são todos os polinômios multivariados de grau q .

Para se calcular os coeficientes de ponderação para um operador L , por exemplo, com $q = 1$, basta resolver o seguinte sistema linear:

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} \varphi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|) & \dots & \varphi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_{n_s}\|) & | & 1 & x_1 & y_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & | & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi(\|\mathbf{x}_{n_s} - \mathbf{x}_1\|) & \dots & \varphi(\|\mathbf{x}_{n_s} - \mathbf{x}_{n_s}\|) & | & 1 & x_1 & y_1 \\ \hline 1 & \dots & 1 & | & 0 & 0 & 0 \\ x_1 & \dots & x_{n_s} & | & 0 & 0 & 0 \\ y_1 & \dots & y_{n_s} & | & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} w_1 \\ \vdots \\ w_{n_s} \\ \hline w_{n_s+1} \\ w_{n_s+2} \\ w_{n_s+3} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} L\varphi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1\|) \\ \vdots \\ L\varphi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{n_s}\|) \\ \hline L1|_{\mathbf{x}_i} \\ Lx|_{\mathbf{x}_i} \\ Ly|_{\mathbf{x}_i} \end{array} \right] \quad (\text{A.9})$$

Os pesos w_{n_s+1} , w_{n_s+2} , e w_{n_s+3} são excluídos.

Tomando a FBR PHS $\varphi(r) = r^{2p-1}$ e $L = \partial/\partial x$ em (A.9) tem-se o mesmo sistema de equações lineares de (2.36). Para interpolação, L pode ser visto como uma aproximação de um operador de ordem zero, isto é, L é o operador identidade.

Apêndice B

Cálculo dos Coeficientes de Ponderação Analíticos com MQDL-FBR(GA)

Um suporte local unidimensional com 3 pontos equidistante ($n_s = 3$), como ilustrado na Figura (B.1), foi escolhido para esse experimento. O ponto em vermelho é o ponto de referência, que também faz parte do suporte local, e os pontos em preto completam o suporte local com uma distância h ($h > 0$) do ponto de referência.

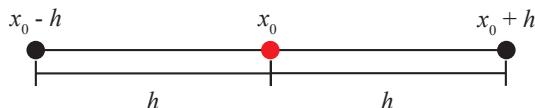


Figura B.1: Suporte local em torno de um nó de referência

A FBR escolhida foi a Gaussiana e, assim, a matriz $[A]$ do sistema (2.6) é dado por:

$$[A] = \begin{bmatrix} 1 & e^{-\frac{h^2}{c^2}} & e^{-\frac{4h^2}{c^2}} \\ e^{-\frac{h^2}{c^2}} & 1 & e^{-\frac{4h^2}{c^2}} \\ e^{-\frac{4h^2}{c^2}} & e^{-\frac{4h^2}{c^2}} & 1 \end{bmatrix}_{3 \times 3} \quad (\text{B.1})$$

Para o cálculo do coeficiente de ponderação para a aproximação da primeira derivada em relação a x e vetor segundo membro, $\{b\}$, deve ser calculado. Assim os SELL que é resolvido

analiticamente pelo software de computação simbólica é dado por:

$$\begin{bmatrix} 1 & e^{-\frac{h^2}{c^2}} & e^{-\frac{4h^2}{c^2}} \\ e^{-\frac{h^2}{c^2}} & 1 & e^{-\frac{4h^2}{c^2}} \\ e^{-\frac{4h^2}{c^2}} & e^{-\frac{4h^2}{c^2}} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{x_0}^{1x} \\ w_{x_0-h}^{1x} \\ w_{x_0+h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{2he^{-\frac{h^2}{c^2}}}{c^2} \\ \frac{2he^{-\frac{h^2}{c^2}}}{c^2} \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

A solução analítica para o sistema (B.2) é, portanto:

$$\begin{bmatrix} w_{x_0}^{1x} \\ w_{x_0-h}^{1x} \\ w_{x_0+h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{2he^{-\frac{h^2}{c^2}}}{c^2(e^{-\frac{4h^2}{c^2}} - 1)} \\ -\frac{2he^{-\frac{h^2}{c^2}}}{c^2(e^{-\frac{4h^2}{c^2}} - 1)} \end{bmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Tem-se, assim, os coeficientes de ponderação para a aproximação da primeira derivada em relação a x . Os valores dos coeficientes dependem da distância entre os pontos (discretização) e do parâmetro de forma c . Assim sendo, pode-se tomar o limite de $c \rightarrow \infty$ para a obtenção dos coeficientes dependentes apenas da discretização do domínio. Assim, tem-se:

$$\begin{bmatrix} \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0-h}^{1x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0+h}^{1x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2h} \\ \frac{1}{2h} \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

Os resultados da equação (B.4) mostam que os coeficientes de ponderação são os mesmos coeficientes de diferenças finitas (centrada) de segunda ordem quando tomado o limite do parâmetro de forma tendendo a ∞ .

De forma análoga ao procedimento anterior, os coeficientes de ponderação para aproximação da segunda derivada com relação a x do suporte da Figura B.1 pode ser obtido resolvendo

o seguinte SELL:

$$\begin{bmatrix} 1 & e^{-\frac{h^2}{c^2}} & e^{-\frac{h^2}{c^2}} \\ e^{-\frac{h^2}{c^2}} & 1 & e^{-\frac{4h^2}{c^2}} \\ e^{-\frac{h^2}{c^2}} & e^{-\frac{4h^2}{c^2}} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{x_0}^{2x} \\ w_{x_0-h}^{2x} \\ w_{x_0+h}^{2x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{2}{c^2} \\ \frac{(4h^2 - 2c^2)e^{-\frac{h^2}{c^2}}}{c^4} \\ \frac{(4h^2 - 2c^2)e^{-\frac{h^2}{c^2}}}{c^4} \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

A solução analítica para o sistema (B.5) é, portanto, dado por:

$$\begin{bmatrix} w_{x_0}^{2x} \\ w_{x_0-h}^{2x} \\ w_{x_0+h}^{2x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{2 \left[c^2(e^{-\frac{4h^2}{c^2}} + 1) + 2e^{-\frac{2h^2}{c^2}}(2h^2 - c^2) \right]}{c^4 \left[e^{-\frac{4h^2}{c^2}} - 2e^{-\frac{2h^2}{c^2}} + 1 \right]} \\ \frac{4h^2 e^{-\frac{h^2}{c^2}}}{c^4 \left(e^{-\frac{4h^2}{c^2}} - 2e^{-\frac{2h^2}{c^2}} + 1 \right)} \\ \frac{4h^2 e^{-\frac{h^2}{c^2}}}{c^4 \left(e^{-\frac{4h^2}{c^2}} - 2e^{-\frac{2h^2}{c^2}} + 1 \right)} \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

Novamente, tomando o limite do parâmetro de forma tendendo a ∞ , tem-se:

$$\begin{bmatrix} \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0}^{2x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0-h}^{2x} \\ \lim_{c \rightarrow \infty} w_{x_0+h}^{2x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{2}{h^2} \\ \frac{1}{h^2} \\ \frac{1}{h^2} \end{bmatrix} \quad (\text{B.7})$$

Os resultados dos coeficientes de ponderação em (B.7) são os mesmos obtidos no método de diferenças finitas centradas de segunda ordem.

Interessante notar que a matriz $[A]$ é a mesma para os 3 casos estudados anteriormente, e portanto, algumas informações a seu respeito podem ser consideradas. Os autovalores da matriz

[A] são encontrados através do seguinte polinômio característico:

$$\begin{aligned}
 p_c(\lambda) = -\lambda^3 + 3\lambda^2 + \left[-3 + \left(e^{-\frac{4h^2}{c^2}} \right)^2 + \left(e^{-\frac{h^2}{c^2}} \right)^2 \right] \lambda + 1 - 2 \left(e^{-\frac{h^2}{c^2}} \right)^2 - \left(e^{-\frac{4h^2}{c^2}} \right)^2 + \\
 + 2 \left(e^{-\frac{h^2}{c^2}} \right)^2 e^{-\frac{4h^2}{c^2}} = 0
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

Para alguns valores de h e c , tem-se as seguintes tabelas para os autorvalores da matriz A e também do respectivo número de condição $\mathcal{K}_2(A)$:

Tabela B.1: Autovalores e número de condição relacionados a matriz [A] para alguns valores de h para $c = 0,50$

	$c = 0,50$			
	λ_1	λ_2	λ_3	$\mathcal{K}_2(A)$
$h = 10^{-1}$	$2,07 \times 10^{-3}$	$1,48 \times 10^{-1}$	$2,85 \times 10^0$	$1,37 \times 10^3$
$h = 10^{-2}$	$2,13 \times 10^{-7}$	$1,60 \times 10^{-3}$	$3,00 \times 10^0$	$1,41 \times 10^7$
$h = 10^{-3}$	$2,13 \times 10^{-11}$	$1,60 \times 10^{-5}$	$3,00 \times 10^0$	$1,41 \times 10^{11}$
$h = 10^{-4}$	$2,13 \times 10^{-15}$	$1,60 \times 10^{-7}$	$3,00 \times 10^0$	$1,41 \times 10^{15}$
$h = 10^{-5}$	$2,13 \times 10^{-19}$	$1,60 \times 10^{-9}$	$3,00 \times 10^0$	$1,41 \times 10^{19}$
$h = 10^{-6}$	$2,13 \times 10^{-23}$	$1,60 \times 10^{-11}$	$3,00 \times 10^0$	$1,41 \times 10^{23}$

Tabela B.2: Autovalores e número de condição relacionados a matriz [A] para alguns valores de h para $c = 1$

	$c = 1$			
	λ_1	λ_2	λ_3	$\mathcal{K}_2(A)$
$h = 10^{-1}$	$1,32 \times 10^{-4}$	$3,92 \times 10^{-2}$	$2,96 \times 10^0$	$2,24 \times 10^4$
$h = 10^{-2}$	$1,33 \times 10^{-8}$	$4,00 \times 10^{-4}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^8$
$h = 10^{-3}$	$1,33 \times 10^{-12}$	$4,00 \times 10^{-6}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{12}$
$h = 10^{-4}$	$1,33 \times 10^{-16}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{16}$
$h = 10^{-5}$	$1,33 \times 10^{-20}$	$4,00 \times 10^{-10}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{20}$
$h = 10^{-6}$	$1,33 \times 10^{-24}$	$4,00 \times 10^{-12}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{24}$

Tabela B.3: Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 10$

	$c = 10$			
	λ_1	λ_2	λ_3	$\mathcal{K}_2(A)$
$h = 10^{-1}$	$1,33 \times 10^{-8}$	$4,00 \times 10^{-4}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^8$
$h = 10^{-2}$	$1,33 \times 10^{-12}$	$4,00 \times 10^{-6}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{12}$
$h = 10^{-3}$	$1,33 \times 10^{-16}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{16}$
$h = 10^{-4}$	$1,33 \times 10^{-20}$	$4,00 \times 10^{-10}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{20}$
$h = 10^{-5}$	$1,33 \times 10^{-24}$	$4,00 \times 10^{-12}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{24}$
$h = 10^{-6}$	$1,33 \times 10^{-28}$	$4,00 \times 10^{-14}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{28}$

Tabela B.4: Autovalores e número de condição relacionados a matriz $[A]$ para alguns valores de h para $c = 100$

	$c = 100$			
	λ_1	λ_2	λ_3	$\mathcal{K}_2(A)$
$h = 10^{-1}$	$1,33 \times 10^{-12}$	$4,00 \times 10^{-6}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{12}$
$h = 10^{-2}$	$1,33 \times 10^{-16}$	$4,00 \times 10^{-8}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{16}$
$h = 10^{-3}$	$1,33 \times 10^{-20}$	$4,00 \times 10^{-10}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{20}$
$h = 10^{-4}$	$1,33 \times 10^{-24}$	$4,00 \times 10^{-12}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{24}$
$h = 10^{-5}$	$1,33 \times 10^{-28}$	$4,00 \times 10^{-14}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{28}$
$h = 10^{-6}$	$1,33 \times 10^{-32}$	$4,00 \times 10^{-16}$	$3,00 \times 10^0$	$2,25 \times 10^{32}$

Note que os autovalores são positivos. De acordo com Fasshauer (2007), a FBR GA é estritamente positiva definida, o que gera matrizes $[A]$ positivas definidas.

Apêndice C

Função Gamma Incompleta

Da expansão em série de Taylor da Função de Base Radial Gaussiana, equação (2.31), o resto da expansão é denotado e definido por:

$$G_k(z) = e^z - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{z^j}{j!} = e^z \left(1 - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{z^j}{j!} \right) \quad (\text{C.1})$$

As definições das Funções Especiais Gamma Incompleta Inferior e Superior respectivamente são:

$$\gamma(k, z) = \int_0^z t^{k-1} e^{-t} dt \quad (\text{C.2})$$

$$\Gamma(k, z) = \int_z^\infty t^{k-1} e^{-t} dt \quad (\text{C.3})$$

sendo k um inteiro ($k > 0$) e z é um número real.

Uma vez que a Função Gamma é definida por:

$$\Gamma(k) = \int_0^\infty t^{k-1} e^{-t} dt \quad (\text{C.4})$$

então, pode-se afirmar que:

$$\gamma(k, z) + \Gamma(k, z) = \Gamma(k) \quad (\text{C.5})$$

Das propriedades envolvendo as Funções Gamma e Gamma Incompleta, destacam-se:

$$\Gamma(k, z) = (k-1)! e^{-z} \sum_{j=0}^{k-1} \frac{z^j}{j!} \quad (\text{C.6})$$

e

$$\Gamma(k) = (k - 1)! \quad (\text{C.7})$$

se k é um inteiro positivo.

Substituindo (C.6) e (C.7) em (C.5), tem-se:

$$\gamma(k, z) + (k - 1)!e^{-z} \sum_{j=0}^{k-1} \frac{z^j}{j!} = (k - 1)! \quad (\text{C.8})$$

Dividindo toda a expressão por $(k - 1)!$ e multiplicando ambos os lados por e^z , tem-se:

$$e^z \frac{\gamma(k, z)}{(k - 1)!} = e^z \left(1 - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{z^j}{j!} \right) \quad (\text{C.9})$$

ou seja,

$$G_k(z) = \frac{e^z}{(k - 1)!} \gamma(k, z) = \frac{e^z}{(k - 1)!} \int_0^z t^{k-1} e^{-t} dt \quad (\text{C.10})$$

Outras propriedades importantes são:

- Relação de recorrência

$$\gamma(k, z) = (k - 1)\gamma(k - 1, z) - z^{k-1}e^{-z} \quad (\text{C.11})$$

- Valores especiais

$$\gamma(1, z) = 1 - e^{-z} \quad (\text{C.12})$$

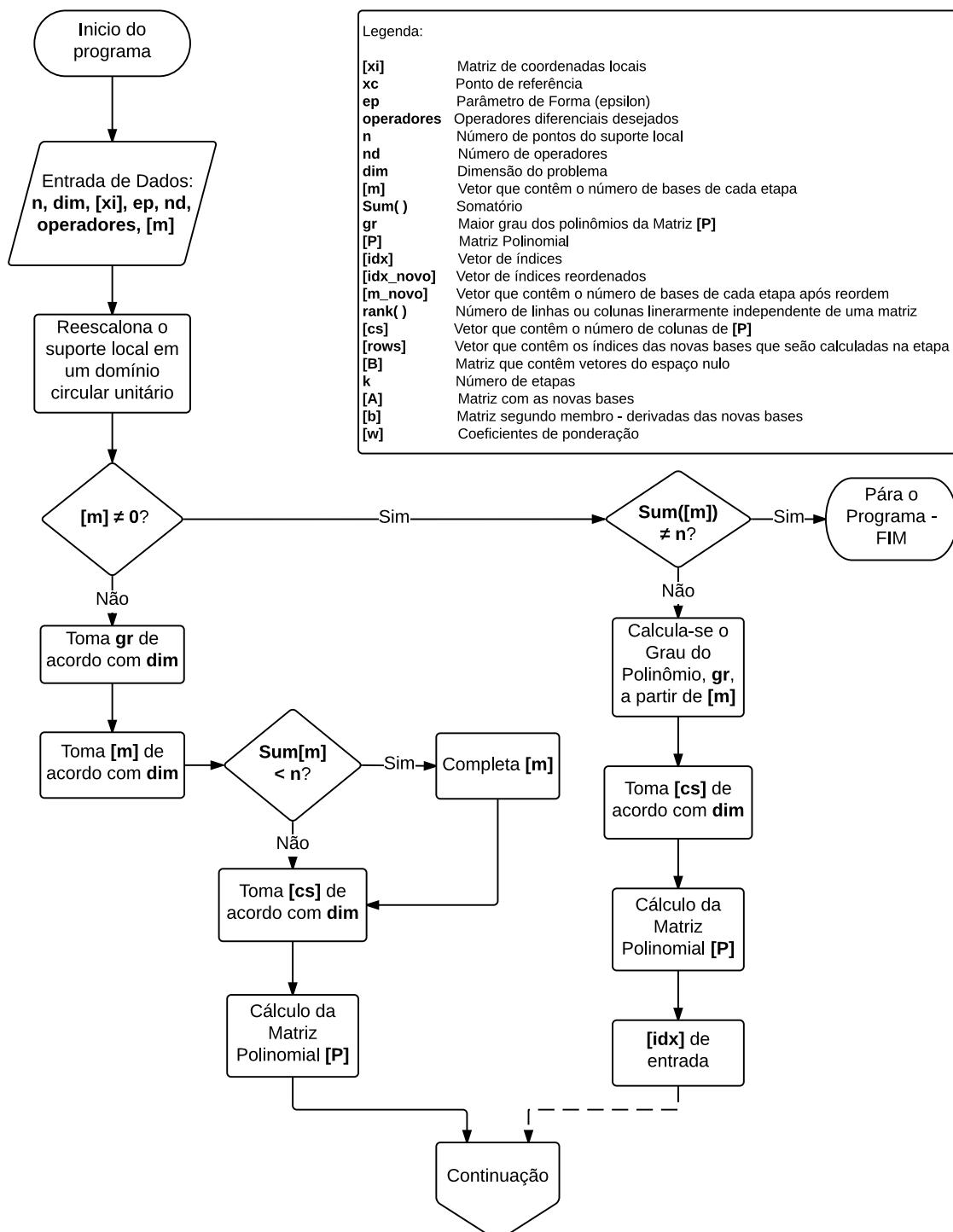
- Valores assintóticos

$$\frac{\gamma(k, z)}{z^k} \rightarrow \frac{1}{k} \quad \text{quando } z \rightarrow 0 \quad (\text{C.13})$$

Apêndice D

Fluxograma do MQDL-FBR(GA) Estabilizado

A Figura D.1 mostra do fluxograma do MQDL-FBR(GA) Estabilizado (Fornberg *et al.*, 2013) baseado na implementação de Lehto (2014) e implementado em Fortran. Na entrada de dados fornece-se a quantidade de pontos do suporte local, **n**, a dimensão do problema, **dim**, a matriz com as coordenadas locais, **[xi]**, o parâmetro de forma, **ep**, os operadores de interesse, **operadores** e o vetor com a quantidade de bases que são calculadas em cada etapa, **[m]**. Caso **[m]=0**, o programa calcula um novo vetor **[m]** com as etapas naturais do algoritmo, ou seja, 1, 2, 3, 4, 5, Também há a opção de se fornecer o vetor **[m]**. Em seguida, calcula-se a matriz polinomial, **[P]**. Caso essa matriz possua *rank* deficiente, há a necessidade de reordenar os índices locais para tentar garantir *rank* completo (mesmo número de pontos do suporte local). Os próximos passos são montar a matriz de novas bases, **[A]**, e a matriz segundo membro de acordo com os operadores escolhidos, **[b]**, do SELL, calculando-se as matrizes, **[B]**, que contém um conjunto vetores do espaço nulo das matrizes polinomiais. Por último, resolve-se o SELL **[A][w]=[b]** obtendo-se uma matriz com os coeficientes de ponderação dos operadores requeridos.



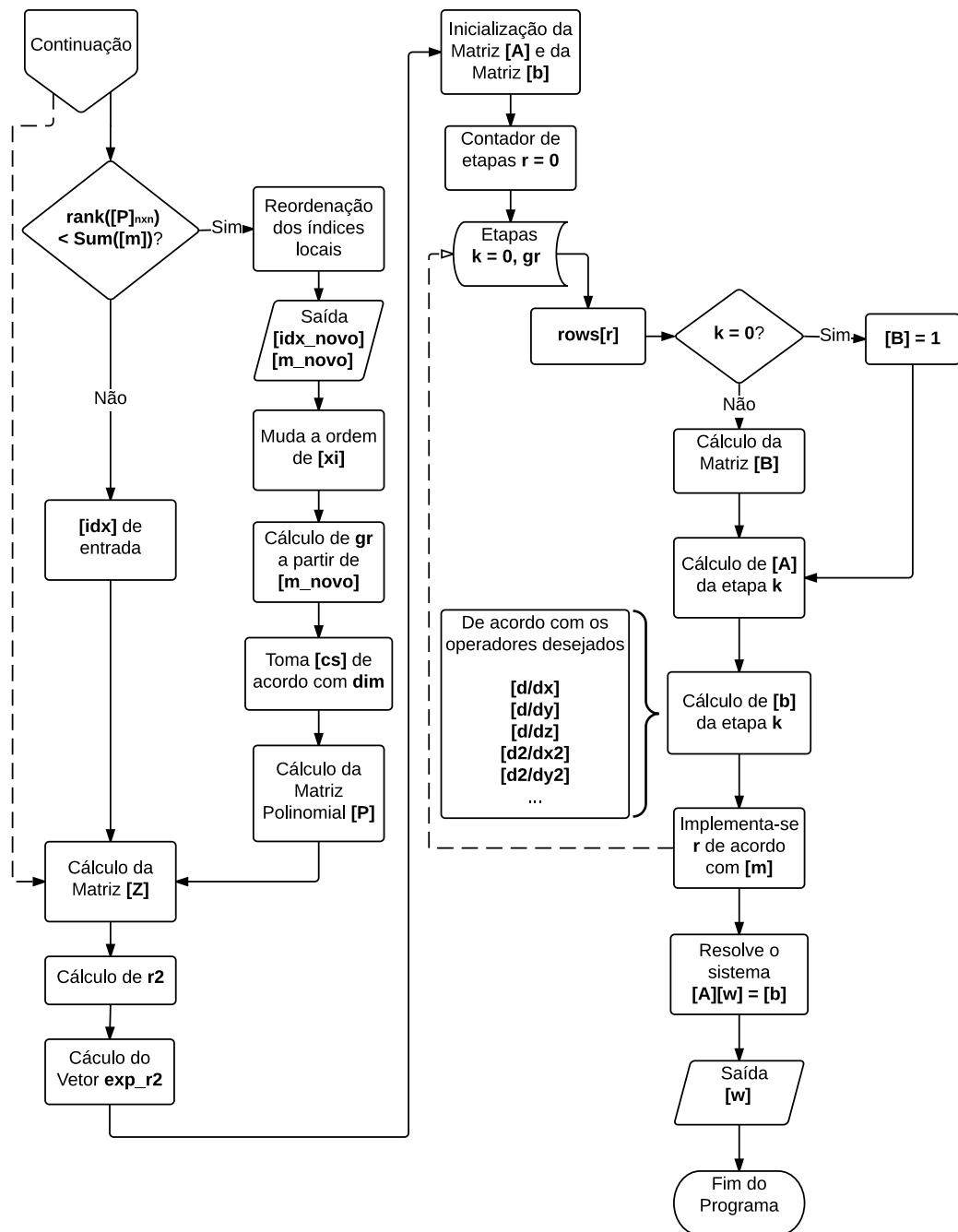


Figura D.1: Fluxograma do MQDL-FBR(GA) Estabilizado

Apêndice E

Pesos para um suporte defeituoso - Matlab vs Fortran

A Figura E.1 a), b), c) e d) mostra os coeficientes de ponderação w^{1x} , w^{2x} , w^{1y} e w^{2y} , respectivamente, calculados para o suporte local defeituoso da Figura 3.44 com o programa fornecido por Lehto (2014) em Matlab®. O parâmetro de forma usado foi de 10^{-5} . Note que, em todos os casos, na saída dos dados, há uma mensagem de perigo (*warning*) informando que a matriz de novas bases, $[A]$, é quase singular ou mal-dimensionada, e fornece o inverso do número de condição da matriz, RCOND, que em todos os casos é muito pequeno. Os resultados dos coeficientes de ponderação w^{1x} , w^{2x} e w^{2y} são extremamente elevados enquanto w^{1y} todos os coeficientes são zeros. Isso mostra que esses pesos não devem ser utilizados para aproximação de derivadas.

Uma outra opção fornecida pelo algoritmo de Lehto (2014) é calcular os coeficientes de ponderação em etapas diferentes das naturais fornecidas pelo algoritmo de Fornberg *et al.* (2013), isto é, 1, 2, 3, 4, 5, Assim, a Figura E.2 a), b), c) e d) são os coeficientes de ponderação w^{1x} , w^{2x} , w^{1y} e w^{2y} , respectivamente, análogos aos anteriores, substituindo-se as etapas naturais pelas etapas 1, 1, 1, 1, ... (n_s vezes). Note que, na saída dos resultados, também neste caso, há a mesma mensagem de perigo (*warning*) e com o inverso do número de condição pequeno. Neste caso, os coeficientes de ponderação também não devem ser utilizado para aproximação de derivadas.

Os exemplos anteriores realçam o fato de que o MQDL-FBR(GA) Estabilizado ainda não é robusto o suficiente para calcular coeficientes de ponderação para todos os tipos de suportes locais, principalmente descentrados e próximos à fronteira.

```

>> [weights] = rbfga_weights('x',1e-5,x,x(1,:))
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =
2.573454e-31.
> In rbfga_weights (line 181)
a)   weights =
      1.0e+15 *
      -1.8131   -0.0000    0.0000    1.0934   -0.0000   -0.0000    0.7197    0.0000   -0.0000


---


>> [weights] = rbfga_weights('xx',1e-5,x,x(1,:))
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =
2.573454e-31.
> In rbfga_weights (line 181)
b)   weights =
      1.0e+17 *
      2.0257    0.0000    0.0000   -1.2216    0.0000    0.0000   -0.8041    0.0000    0.0000


---


>> [weights] = rbfga_weights('y',1e-5,x,x(1,:))
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =
2.573454e-31.
> In rbfga_weights (line 181)
c)   weights =
      0     0     0     0     0     0     0     0     0


---


>> [weights] = rbfga_weights('yy',1e-5,x,x(1,:))
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =
2.573454e-31.
> In rbfga_weights (line 181)
d)   weights =
      1.0e+03 *
      -1.6035    0.0000    0.0000    0.6531   -0.0000   -0.0000    0.9504   -0.0000   -0.0000

```

Figura E.1: Coeficientes de ponderação calculados com o programa em Matlab[®] (Lehto, 2014) para um suporte defeituoso - etapas naturais do algoritmo

Os coeficientes de ponderação w^{1x} , w^{2x} , w^{1y} e w^{2y} da Tabela E.1 são obtidos pelo programa implementados em Fortran, cujos SELLs foram resolvidos pela decomposição SVD e mostram, apesar da diferença de grandeza com os obtidos em Matlab[®], que também não devem ser utilizados para aproximação de derivadas (coeficientes de w^{1y} todos iguais a zero).

Tabela E.1: Coordenadas do suporte deficiente da Figura 3.44

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
w^{1x}	7,333	-44,000	14,667	7,333	-0,000	0,000	7,333	7,333	0,000
$w^{2x} \cdot 10^3$	-1,291	1,936	1,936	-1,291	0,000	0,000	-1,291	-0,000	-0,000
w^{1y}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$w^{2y} \cdot 10^{-10}$	-0,667	0,001	0,001	-0,667	-0,000	0,0000	-0,667	0	0,0000

```

>> opts=struct('m',[1 1 1 1 1 1 1 1]);
>> [weights] = rbfga_weights('x',1e-5,x,x(1,:),opts)
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =
1.598950e-18.
> In rbfga_weights (line 181)
a) weights =
    1.0e+03 *
   -2.9504   -0.0440    0.0147    3.0178   -0.0000   -0.0000   -0.0453    0.0073    0.0000


---


>> [weights] = rbfga_weights('xx',1e-5,x,x(1,:),opts)
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =
1.598950e-18.
> In rbfga_weights (line 181)
b) weights =
    1.0e+03 *
   -6.5339    1.9360    1.9360    2.6996   -0.0000   -0.0000   -0.0377   -0.0000    0.0000


---


>> [weights] = rbfga_weights('y',1e-5,x,x(1,:),opts)
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =
1.598950e-18.
> In rbfga_weights (line 181)
c) weights =
    0      0      0      0      0      0      0      0      0


---


>> [weights] = rbfga_weights('yy',1e-5,x,x(1,:),opts)
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND =
1.598950e-18.
> In rbfga_weights (line 181)
d) weights =
    1.0e-09 *
   -0.2000        0        0        0        0        0        0        0

```

Figura E.2: Coeficientes de ponderação calculados com o programa em Matlab® (Lehto, 2014) para um suporte defeituoso - etapas diferentes das naturais

Apêndice F

Problema de Convecção Natural em uma Cavidade Quadrada

As seguintes hipóteses simplificadoras são adotadas para a formulação do modelo físico (Souza (2006)):

- Regime não permanente;
- Escoamento bidimensional e laminar;
- Escoamento incompressível;
- Função dissipaçāo viscosa desprezada;
- Propriedades termodinâmicas do fluido constantes, exceto a massa específica no termo de empuxo (aproximação de Boussinesq);
- Sem geração de calor interno.

As equações diferenciais que regem o movimento do fluido em uma cavidade bidimensional sujeita a aquecimento e/ou resfriamento são a equação de Conservação de Massa, equações de Navier-Stokes e a equação da Energia. A equação de Conservação da Massa ou equação da Continuidade é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (\text{F.1})$$

sendo ρ a massa específica do fluido. Supondo ρ constante, a equação da continuidade toma a seguinte forma:

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (\text{F.2})$$

Essa equação em duas dimensões, onde $\vec{U} = u\hat{x} + v\hat{y}$, será:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{F.3})$$

As equações de Quantidade de Movimento ou equações de Navier-Stokes, em duas dimensões, adicionando o termo de empuxo (hipótese de Boussinesq) na equação em y , são dadas por:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (\text{F.4})$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho g \beta (T - T_0) \quad (\text{F.5})$$

sendo β o coeficiente de expansão volumétrica do fluido e μ a viscosidade dinâmica do fluido. Também pode-se representar $\mu = \rho v$, sendo v a viscosidade cinemática do fluido.

A equação da Energia é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (\text{F.6})$$

onde α é o coeficiente de difusão térmica. $\alpha = k/\rho c_p$ sendo k a condutividade térmica e c_p o calor específico do fluido a pressão constante.

As seguintes variáveis adimensionais são introduzidas a fim de adimensionalizar as equações de conservação (as variáveis dimensionais t, x, y, u, v, p, T , representam o tempo, as coordenadas espaciais, velocidades, pressão e temperatura, respectivamente):

$$\tau = \frac{U_0 t}{H}, \quad X = \frac{x}{H}, \quad Y = \frac{y}{H}, \quad U = \frac{u}{U_0}, \quad V = \frac{v}{U_0}, \quad P = \frac{p}{\rho U_0^2}, \quad \theta = \frac{T - T_0}{T_h - T_0} \quad (\text{F.7})$$

sendo H o comprimento de referência (lado da cavidade), U_0 a velocidade de referência dada por $U_0 = \sqrt{g\beta\Delta TH}$, com $\Delta T = T_h - T_c$ e T_h e T_c representando as temperaturas das superfícies quente e fria, respectivamente. A temperatura de referência T_0 é dada por $T_0 = (T_h + T_c)/2$. g é a aceleração da gravidade.

Substituindo (F.7) em (F.3), tem-se

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (\text{F.8})$$

Substituindo (F.7) em (F.4) e (F.5) obtém-se

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} + U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} = - \frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{F.9})$$

$$\frac{\partial V}{\partial \tau} + U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} = - \frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} \right) + \frac{\theta}{2} \quad (\text{F.10})$$

sendo Gr o número de Grashof e definido como sendo $\text{Gr} = g\beta\Delta TH^3/v^2$. Essa grandeza adimensional expressa a relação entre a sustentação de um fluido e sua viscosidade (White, 2011).

De forma análoga, substituindo (F.7) em (F.6) tem-se

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + U \frac{\partial \theta}{\partial X} + V \frac{\partial \theta}{\partial Y} = \frac{1}{Pr\sqrt{Gr}} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{F.11})$$

sendo $Pr = v/\alpha$ é o número de Prandtl. Essa grandeza adimensional expressa a relação entre a difusão de quantidade de movimento e a difusão da quantidade de calor de um fluido representando uma medida de eficiência destas transferências nas camadas limites hidrodinâmica e térmica. O número de Rayleigh, que é um número adimensional é definido por $Ra = Pr\text{Gr}$, pode ser introduzido na expressão (F.11), e expressa a relação entre a difusividade dinâmica e a difusividade térmica em um fluido (White, 2011).

Derivando a equação (F.9) com relação a Y , a equação (F.10) com relação a X e subtraindo-as, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial V}{\partial X} - \frac{\partial U}{\partial Y} \right) + U \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial V}{\partial X} - \frac{\partial U}{\partial Y} \right) + V \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial V}{\partial X} - \frac{\partial U}{\partial Y} \right) = \\ = \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left[\frac{\partial^2}{\partial X^2} \left(\frac{\partial V}{\partial X} - \frac{\partial U}{\partial Y} \right) + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \left(\frac{\partial V}{\partial X} - \frac{\partial U}{\partial Y} \right) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial X} \end{aligned} \quad (\text{F.12})$$

Definindo a vorticidade por

$$\omega = \frac{\partial V}{\partial X} - \frac{\partial U}{\partial Y} \quad (\text{F.13})$$

Assim, a equação (F.12) será

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \omega}{\partial X} + V \frac{\partial \omega}{\partial Y} = \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left[\frac{\partial^2 \omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial Y^2} \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial X} \quad (\text{F.14})$$

A definição da função-corrente adimensional é dada por

$$U = - \frac{\partial \psi}{\partial Y}, \quad V = \frac{\partial \psi}{\partial X} \quad (\text{F.15})$$

Substituindo (F.15) em (F.13) tem-se a formulação da função-corrente adimensional, que

satisfaz a equação da Conservação da Massa dada por (F.8). Assim,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} = \omega \quad (\text{F.16})$$

Portanto, as equações adimensionalizadas que governam o movimento do fluido dentro da cavidade, dadas pela formulação vorticidade, ω , função corrente, ψ , e temperatura, θ , assumem a forma:

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \omega}{\partial X} + V \frac{\partial \omega}{\partial Y} = \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial Y^2} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial X} \quad (\text{F.17})$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} = \omega \quad (\text{F.18})$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + U \frac{\partial \theta}{\partial X} + V \frac{\partial \theta}{\partial Y} = \frac{1}{Pr\sqrt{Gr}} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{F.19})$$

O número de Nusselt local para uma superfície S é definido como:

$$Nu_L = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial \theta}{\partial X} \right|_S \quad (\text{F.20})$$

Para a superfície S , o número de Nusselt Médio é calculado da seguinte maneira:

$$Nu = \frac{1}{S} \int_S Nu_L |_S dS \quad (\text{F.21})$$

O Número de Nusselt é uma grandeza adimensional que expressa a relação entre a transferência de calor por convecção e a transferência de calor por condução e é bastante usada na determinação do coeficiente de transferência de calor por convecção (Incropora *et al.*, 2014).

Apêndice G

Parâmetros das Simulações - Problema de Convecção Natural

G.1 Parâmetros e Resultados para $Ra = 10^4$

G.1.1 Referentes à Tabela 4.1

Tabela G.1: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPE para $n_s = 9$ e $n_s = 12$

	$n_s = 9$			$n_s = 13$		
NPE	61×61	93×93	118×118	61×61	93×93	118×118
h_{medio}	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	1,75	1,75	1,75	1,25	1,25	1,25
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}
$\delta\tau$	$3,04 \cdot 10^{-3}$	$1,29 \cdot 10^{-3}$	$8,00 \cdot 10^{-4}$	$3,04 \cdot 10^{-3}$	$1,29 \cdot 10^{-3}$	$8,00 \cdot 10^{-4}$
itermax	16162	24925	31771	32325	49850	63543
c	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,10
TP(s)	26,21	92,35	219,19	82,28	406,46	781,24
Nu	2,2460	2,2446	2,2446	2,2468	2,2447	2,2397
Desvio (%)	0,3575	0,2949	0,2949	0,3932	0,2994	0,0760

Tabela G.2: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPE para $n_s = 17$ e $n_s = 21$

	$n_s = 17$			$n_s = 21$		
NPE	61×61	93×93	118×118	61×61	93×93	118×118
h_{medio}	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	1,25	1,25	1,05	0,75	0,75	0,75
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
$\delta\tau$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$
itermax	42023	64805	82606	42023	64805	82606
c	0,15	0,09	0,07	0,10	0,10	0,07
TP(s)	140,31	894,25	1336,26	195,45	964,28	1590,76
Nu	2,2482	2,2545	2,2568	2,2636	2,2510	2,2571
Desvio (%)	0,4468	0,7373	0,8400	1,1439	0,5809	0,8534

Tabela G.3: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPE para $n_s = 25$ e $n_s = 49$

	$n_s = 25$			$n_s = 49$		
NPE	61×61	93×93	118×118	61×61	93×93	118×118
h_{medio}	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	0,75	0,30	0,75	0,10	0,10	0,10
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
$\delta\tau$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$
itermax	42023	64805	82606	42023	64805	82606
c	0,06	0,04	0,03	0,07	0,06	0,05
TP(s)	281,10	1393,63	1850,13	589,19	2561,33	3256,05
Nu	2,3156	2,3526	2,3747	2,2643	2,2563	2,2660
Desvio (%)	3,4674	5,1206	6,1081	1,2511	0,8177	1,2511

G.1.2 Referentes à Tabela 4.2

Tabela G.4: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE para $n_s = 12$ e $n_s = 17$

	$n_s = 12$			$n_s = 17$		
NPE	61×61	93×93	118×118	61×61	93×93	118×118
h_{medio}	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	1,75	1,75	1,75	1,75	1,75	1,75
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
$\delta\tau$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$
itermax	42023	64805	82606	42023	64805	82606
ϵ	10^{-4}	10^{-5}	10^0	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
TP(s)	86,56	343,29	765,43	158,69	870,27	1381,02
Nu	2,2540	2,2481	2,2463	2,2465	2,2444	2,2448
Desvio (%)	0,7149	0,4513	0,3709	0,3798	0,2860	0,3038

Tabela G.5: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE para $n_s = 21$ e $n_s = 25$

	$n_s = 21$			$n_s = 25$		
NPE	61×61	93×93	118×118	61×61	93×93	118×118
h_{medio}	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	1,75	1,75	1,75	1,25	1,25	1,75
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
$\delta\tau$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$
itermax	42023	64805	82606	42023	64805	82606
ϵ	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
TP(s)	203,97	1023,87	1667,89	274,48	1368,52	1973,91
Nu	2,2435	2,2443	2,2446	2,2435	2,2444	2,2446
Desvio (%)	0,2458	0,2815	0,2949	0,2458	0,2860	0,2941

Tabela G.6: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(GA) Estabilizado em NPE para $n_s = 49$

	$n_s = 49$		
NPE	61×61	93×93	118×118
h_{medio}	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	0,40	0,40	0,40
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
$\delta\tau$	$2,34 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$
itermax	49027	75606	96373
ϵ	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
TP(s)	919,19	3553,95	4843,44
Nu	2,2448	2,2449	2,2432
Desvio (%)	0,3038	0,3083	0,2323

G.1.3 Referentes à Tabela 4.3

Tabela G.7: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $n_s = 9$ e $n_s = 17$

	$n_s = 9$			$n_s = 17$		
NPNE	3738	8636	13931	3738	8636	13931
h_{medio}	$1,66 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,54 \cdot 10^{-3}$	$1,66 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	0,75	0,75	0,50	0,25	0,25	0,20
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
$\delta\tau$	$2,33 \cdot 10^{-3}$	$9,97 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$	$2,33 \cdot 10^{-3}$	$9,97 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$
itermax	49143	75548	96398	49143	75548	96398
c	0,20	0,10	0,07	0,10	0,07	0,05
TP(s)	73,43	262,53	608,41	203,28	739,64	2305,91
Nu	2,2342	2,2211	2,2312	2,2582	2,2576	2,2636
Desvio (%)	0,2589	0,8437	0,3928	0,8125	0,7857	1,0536

Tabela G.8: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $n_s = 21$ e $n_s = 25$

	$n_s = 21$			$n_s = 25$		
NPNE	3738	8636	13931	3738	8636	13931
h_{medio}	$1,66 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,54 \cdot 10^{-3}$	$1,66 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
$\delta\tau$	$2,33 \cdot 10^{-3}$	$9,97 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$	$2,33 \cdot 10^{-3}$	$9,97 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$
itermax	63184	97134	123940	63184	64756	96398
c	0,10	0,05	0,05	0,10	0,07	0,05
TP(s)	282,08	1097,78	-	334,98	899,43	3226,24
Nu	2,2536	2,2794	2,2568	2,2488	2,2490	2,2532
Desvio (%)	0,6071	1,7589	0,7500	0,3929	0,4018	0,5893

Tabela G.9: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(Mq) em NPNE para $n_s = 49$

	$n_s = 49$		
NPNE	3738	8636	13931
h_{medio}	$1,66 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
fr	0,25	0,25	0,15
tol	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
$\delta\tau$	$2,33 \cdot 10^{-3}$	$9,96 \cdot 10^{-4}$	$6,15 \cdot 10^{-4}$
itermax	63184	97134	123940
c	0,05	0,07	0,05
TP(s)	802,38	2576,98	9872,19
Nu	2,2570	2,2455	2,2459
Desvio (%)	0,7589	0,2455	0,2634

G.2 Parâmetros e Resultados para $Ra = 10^6$

G.2.1 Referentes à Tabela 4.5

Tabela G.10: Parâmetros para as simulações com $Ra = 10^6$ - Decomposição LU

	NPE	NPE	NPNE
	61×61	93×93	13931 pontos
n_s	17	21	9
h_{medio}	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$8,55 \cdot 10^{-3}$
$\delta\tau$	$1,17 \cdot 10^{-2}$	$1,19 \cdot 10^{-3}$	$4,92 \cdot 10^{-3}$
itermax	28016	43204	59501
lb sem RCM	489	748	26869
lb com RCM	599	659	726

G.2.2 Referentes à Tabela 4.6

Tabela G.11: Maior grau dos polinômios suplementares em NPE

n_s		45×45	65×65	85×85	105×105	125×125
9	$q_f = q_i$	2	2	2	2	2
25	$q_f = q_i$	3	3	3	3	3
33	$q_f = q_i$	4	4	4	4	4
45	$q_f = q_i$	3	3	3	3	3
55	$q_f = q_i$	5	5	5	5	5

Tabela G.12: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(PHS) em NPE

n_s		45×45	65×65	85×85	105×105	125×125
9	h_{medio}	$2,27 \cdot 10^{-2}$	$1,56 \cdot 10^{-2}$	$1,19 \cdot 10^{-2}$	$9,62 \cdot 10^{-3}$	$8,06 \cdot 10^{-3}$
	$\delta\tau$	$2,18 \cdot 10^{-2}$	$1,03 \cdot 10^{-2}$	$5,97 \cdot 10^{-3}$	$3,89 \cdot 10^{-3}$	$2,74 \cdot 10^{-3}$
9	itermax	12201	26201	46801	70601	97201
	lb sem RCM	185	265	345	425	505
	lb com RCM	172	252	410	555	492
	TP(s)	14,10	96,75	369,22	-	2041,97
25	$\delta\tau$	$2,17 \cdot 10^{-2}$	$1,08 \cdot 10^{-2}$	$5,97 \cdot 10^{-3}$	$3,89 \cdot 10^{-3}$	$2,74 \cdot 10^{-3}$
	itermax	18901	29301	49301	74601	90601
	lb sem RCM	451	589	851	1051	1129
	lb com RCM	468	602	891	1109	1306
	TP(s)	65,39	278,23	950,64	2662,47	4601,77
33	$\delta\tau$	$2,17 \cdot 10^{-2}$	$1,28 \cdot 10^{-2}$	$5,97 \cdot 10^{-3}$	$3,89 \cdot 10^{-3}$	$2,74 \cdot 10^{-3}$
	itermax	13001	34201	42301	60101	83801
	lb sem RCM	457	657	857	1057	1257
	lb com RCM	410	583	825	1013	1130
	TP(s)	71,82	472,09	1203,01	2886,70	5954,85
45	$\delta\tau$	$2,17 \cdot 10^{-2}$	$1,02 \cdot 10^{-2}$	$5,97 \cdot 10^{-3}$	$3,89 \cdot 10^{-3}$	$2,74 \cdot 10^{-3}$
	itermax	14001	18201	43101	65001	95701
	lb sem RCM	631	911	1191	1471	1751
	lb com RCM	592	776	1069	1621	1622
	TP(s)	100,47	342,32	1511,04	3961,92	8035,03
55	$\delta\tau$	$2,17 \cdot 10^{-2}$	$1,02 \cdot 10^{-2}$	$5,97 \cdot 10^{-3}$	$3,89 \cdot 10^{-3}$	$2,74 \cdot 10^{-3}$
	itermax	13801	28301	47901	70901	75201
	lb sem RCM	637	917	1197	1477	1757
	lb com RCM	576	823	1053	1289	1513
	TP(s)	116,11	680,31	1953,61	4805,16	6904,48

G.2.3 Referentes à Tabela 4.7

Tabela G.13: Maior grau dos polinômios suplementares em NPNE

n_s	2048	4230	7284	11030	15739
25	q_i 4	4	4	4	4
	q_f 3	3	3	3	3
33	q_f 5	5	5	5	5
	q_i 4	4	4	4	4
45	q_f 6	7	7	7	7
	q_i 4	4	4	4	4
55	q_f 7	7	7	7	7
	q_i 5	5	5	5	3

Tabela G.14: Parâmetros e resultados obtidos com o MQDL-FBR(PHS) em NPNE

		2048	4230	7284	11030	15739
25	h_{medio}	$2,26 \cdot 10^{-2}$	$1,56 \cdot 10^{-2}$	$1,19 \cdot 10^{-2}$	$9,62 \cdot 10^{-3}$	$8,06 \cdot 10^{-3}$
	$\delta\tau$	$2,15 \cdot 10^{-2}$	$1,03 \cdot 10^{-2}$	$5,92 \cdot 10^{-3}$	$3,89 \cdot 10^{-3}$	$2,72 \cdot 10^{-3}$
	itermax	20401	36701	63301	68601	70601
	lb sem RCM	3886	8129	13963	21418	30597
	lb com RCM	477	688	934	1235	1709
33	TP(s)	68,23	335,49	1354,80	2297,68	4226,90
	$\delta\tau$	$2,15 \cdot 10^{-2}$	$1,03 \cdot 10^{-2}$	$5,92 \cdot 10^{-3}$	$3,89 \cdot 10^{-3}$	$2,72 \cdot 10^{-3}$
	itermax	21601	25701	41801	60201	82701
	lb sem RCM	3888	8130	14027	21420	30597
	lb com RCM	508	767	1036	1298	1516
45	TP(s)	114,76	324,85	1247,00	2515,62	5741,51
	$\delta\tau$	$2,15 \cdot 10^{-2}$	$1,02 \cdot 10^{-2}$	$5,92 \cdot 10^{-3}$	$3,83 \cdot 10^{-3}$	$2,72 \cdot 10^{-3}$
	itermax	18901	37401	58501	66201	135001
	lb sem RCM	3927	8132	14027	21420	30662
	lb com RCM	583	903	1223	1940	1970
55	TP(s)	163,98	773,77	2504,74	3930,85	10988,17
	$\delta\tau$	$2,15 \cdot 10^{-2}$	$1,02 \cdot 10^{-2}$	$5,92 \cdot 10^{-3}$	$3,83 \cdot 10^{-3}$	$2,72 \cdot 10^{-3}$
	itermax	17901	31001	39701	56501	92701
	lb sem RCM	3929	8226	14027	21422	30679
	lb com RCM	600	915	1220	1582	1789
	TP(s)	172,47	782,27	2010,55	4041,94	8777,45

Apêndice H

Problema Hidrodinâmico - Cavidade Quadrada com Tampa Móvel

As seguintes hipóteses simplificadoras são adotadas para a formulação do modelo físico (Souza (2006)):

- Regime não permanente;
- Escoamento bidimensional e laminar;
- Escoamento incompressível;
- Propriedades do fluido constantes.

O movimento de um fluido em uma cavidade bidimensional sujeito a uma velocidade constante em sua superfície superior é dado pelas equações de Conservação de Massa e de Navier-Stokes. A equação de Conservação da Massa, também chamada de equação da Continuidade, é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (\text{H.1})$$

sendo ρ a massa específica do fluido. Supondo ρ constante, a equação da Continuidade torna-se:

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (\text{H.2})$$

Em um problema bidimensional, considerando o vetor velocidade como sendo $\vec{U} = u\hat{x} + v\hat{y}$, a equação (H.2) torna-se:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{H.3})$$

As equações de Quantidade de Movimento ou equações de Navier-Stokes bidimensionais são escritas da seguinte forma:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (\text{H.4})$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (\text{H.5})$$

sendo μ a viscosidade dinâmica do fluido.

A fim de adimensionalizar as equações de conservação, as seguintes variáveis adimensionais são introduzidas:

$$P = \frac{p}{\rho U_0^2}, \quad X = \frac{x}{H}, \quad Y = \frac{y}{H}, \quad U = \frac{u}{U_0}, \quad V = \frac{v}{U_0}, \quad \tau = \frac{U_0 t}{H} \quad (\text{H.6})$$

sendo as variáveis dimensionais o tempo, t , as coordenadas espaciais, x e y , as velocidades, u e v , e a pressão, p . Ainda, H o comprimento de referência (lado da cavidade) e U_0 a velocidade de referência, adotada como sendo a velocidade da parede superior da cavidade.

Substituindo (H.6) em (H.3), tem-se:

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (\text{H.7})$$

Ainda, substituindo (H.6) em (H.4) e (H.5), obtém-se:

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} + U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} = - \frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{H.8})$$

$$\frac{\partial V}{\partial \tau} + U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} = - \frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{H.9})$$

sendo Re o número de Reynolds e definido como sendo $Re = \rho v_s H / \mu$. A velocidade característica é definida por $v_s = U_0$. O número de Reynolds expressa a relação entre forças inerciais e forças viscosas em um fluido (White, 2011).

Derivando a equação (H.8) com relação a Y e a equação (H.9) com relação a X e substraindo-as, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial U}{\partial Y} - \frac{\partial V}{\partial X} \right) + U \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial U}{\partial Y} - \frac{\partial V}{\partial X} \right) + V \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial U}{\partial Y} - \frac{\partial V}{\partial X} \right) = \\ \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2}{\partial X^2} \left(\frac{\partial U}{\partial Y} - \frac{\partial V}{\partial X} \right) + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \left(\frac{\partial U}{\partial Y} - \frac{\partial V}{\partial X} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{H.10})$$

Define-se a vorticidade como sendo o seguinte termo:

$$\omega = \frac{\partial U}{\partial Y} - \frac{\partial V}{\partial X} \quad (\text{H.11})$$

Portanto, a equação (H.10), substituindo (H.11), é escrita como:

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \omega}{\partial X} + V \frac{\partial \omega}{\partial Y} = \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 \omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial Y^2} \right] \quad (\text{H.12})$$

A definição das velocidades adimensionais em termos da função-corrente é:

$$U = \frac{\partial \psi}{\partial Y} \quad (\text{H.13})$$

$$V = -\frac{\partial \psi}{\partial X} \quad (\text{H.14})$$

Substituindo (H.13) e (H.14) em (H.11) tem-se a formulação da função-corrente adimensional, que satisfaz a equação da Conservação da Massa, dada por (H.7), e é, portanto, dada por:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} = \omega \quad (\text{H.15})$$

Assim, as equações adimensionalizadas que governam o movimento do fluido dentro da cavidade, dadas pela formulação vorticidade e função-corrente (ω - ψ), assumem a forma:

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \omega}{\partial X} + V \frac{\partial \omega}{\partial Y} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial Y^2} \right) \quad (\text{H.16})$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} = \omega \quad (\text{H.17})$$

Referências Bibliográficas

- Bararnia et al.(2010)** H. Bararnia, M. Jalaal, E. Ghasemi, S. Soleimani, D. Ganji and F. Mohammadi. Numerical simulation of joule heating phenomenon using meshless RBF-DQ method. *International Journal of Thermal Sciences*, 49:2117–2127.
- Bayona(2013)** V. Bayona. *The RBF-FD Method: Developments and Applications*. Tese de Doutorado, Universidad Carlos III de Madrid, Madri, Espanha.
- Bayona et al.(2010)** V. Bayona, M. Moscoso, M. Carretero and M. Kindelan. RBF-FD formulas and convergence properties. *Journal of Computational Physics*, 229:8281–8295.
- Bayona et al.(2011)** V. Bayona, M. Moscoso and M. Kindelan. Optimal constant shape parameter for multiquadric based RBF-FD method. *Journal of Computational Physics*, 230(19): 7384–7399.
- Bayona et al.(2012a)** V. Bayona, M. Moscoso and M. Kindelan. Gaussian RBF-FD weights and its corresponding local truncation errors. *WIT Transactions on Modelling and Simulation*, 53 (9):97–108.
- Bayona et al.(2012b)** V. Bayona, M. Moscoso and M. Kindelan. Optimal variable shape parameter for multiquadric based rbf-fd method. *Journal of Computational Physics*, 231(6): 2466–2481.
- Bellman et al.(1972)** E. Bellman, G. Kashef and J. Casti. Differential quadrature: a technique for the rapid solution of nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Numerical Physics*, 10:40–52.
- Buhmann(2003)** M. D. Buhmann. *Radial Basis Functions: Theory and Implementations*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- Burden et al.(2015)** R. L. Burden, D. J. Faires and A. M. Burden. *Análise Numérica*. Cengage Learning, São Paulo, SP, 3 edição.
- Burkardt(2007)** J. Burkardt. *RCM - Reverse Cuthill McKee Ordering*, 2007. http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f_src/rsm/rsm.html.

- Carmo(2005)** F. C. Carmo. Análise da Influência de Algoritmos de Reordenaccão de Matrizes Esparsas no Desempenho do Método CCCG(η). Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Minas Gerais.
- Cecil et al.(2004)** T. Cecil, J. Qian and S. Osher. Numerical methods for high dimensional hamilton-jacobi equations using radial basis functions. *Journal of Computational Physics*, 196(1):327–347.
- Chan et al.(2014)** Y. L. Chan, L. H. Shen, C. T. Wu and D. L. Young. A novel upwind-based local radial basis function differential quadrature method for convection-dominated flows. *Computers and Fluids*, 89:157–166.
- Cheng(2012)** A. H. D. Cheng. Multiquadric and its shape parameter - a numerical investigation of error estimate, condition number, and round-off error by arbitrary precision computation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 36(2):220–239.
- Cunha(2015)** M. C. C. Cunha. *Métodos Numéricos*. Editora Unicamp, Campinas, SP, Brasil, 2 edição.
- Davis(1983)** G. Davis. Natural convection of air in a square cavity: a benchmark numerical solution. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 3:249–263.
- Ding et al.(2004)** H. Ding, C. Shu, K. S. Yeo and D. Xu. Simulation of incompressible viscous flows past a circular cylinder by hybrid fd scheme and meshless least square-based finite difference method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(9-11): 727–744.
- Ding et al.(2005)** H. Ding, C. Shu and D. Tang. Error estimates of local multiquadric-based differential quadrature (LMQDQ) method through numerical experiments. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 63:1513–1529.
- Ding et al.(2006)** H. Ding, C. Shu, S. Yeo and D. Xu. Numerical computation of three-dimensional incompressible viscous flows in the primitive variable form by local multiquadric differential quadrature method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195:516–533.
- Fasshauer(2007)** G. F. Fasshauer. *Meshfree Approximation Methods with MATLAB*. World Scientific Publishing, River Edge, NJ, USA.
- Ferziger(1981)** J. H. Ferziger. *Numerical Methods for Engineering Application*. John Wiley & Sons, Universidade de Michigan, 1 edição.

- Flyer et al.(2016a)** N. Flyer, G. A. Barnett and L. J. Wicker. Enhancing finite differences with radial basis functions: Experiments on the navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 316:39–62.
- Flyer et al.(2016b)** N. Flyer, B. Fornberg, V. Bayona and G. A. Barnett. On the role of polynomials in rbf-fd approximations: I. interpolation and accuracy. *Journal of Computational Physics*, 321:21–38.
- Fornberg e Driscoll(2002)** B. Fornberg and T. Driscoll. Interpolation in the limit of increasingly flat radial basis function. *Computer and Mathematics with Applications*, 43:379–391.
- Fornberg e Piret(2008)** B. Fornberg and C. Piret. A stable algorithm for flat radial basis functions on a sphere. *Journal on Scientific Computing*, 30(1):60–80.
- Fornberg e Wright(2004)** B. Fornberg and G. Wright. Stable computation of multiquadric interpolants for all values of the shape parameter. *Computers and Mathematics with Applications*, 48(5-6):853–867.
- Fornberg e Zuev(2007)** B. Fornberg and J. Zuev. The runge phenomenon and spatially variable shape parameters in rbf interpolation. *Computers and Mathematics with Applications*, 54(3):379–398.
- Fornberg et al.(2002)** B. Fornberg, T. A. Driscoll, G. Wright and R. Charles. Observations on the behavior of radial basis function approximations near boundaries. *Computers and Mathematics with Applications*, 43(3-5):473–490.
- Fornberg et al.(2004)** B. Fornberg, G. Wright and E. Larsson. Some observations regarding interpolants in the limit of flat radial basis function. *Computer and Mathematics with Applications*, 47:37–55.
- Fornberg et al.(2011)** B. Fornberg, E. Larsson and N. Flyer. Stable computations with gaussian radial basis functions. *Journal on Scientific Computing*, 33(2):869–892.
- Fornberg et al.(2013)** B. Fornberg, E. Lehto and C. Powell. Stable calculation of gaussian-based rbf-fd stencils. *Computers and Mathematics with Applications*, 65(4):627–637.
- Franke(1982)** R. Franke. Scatered data interpolation: tests of some methods. *Mathematics of Computation*, 38:181–199.
- Ghia et al.(1982)** U. Ghia, K. Ghia and T. Shin. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multi-grid method. *Journal of Computational Physics*, 48:387–411.

- Gonzalez-Rodriguez et al.(2015)** P. Gonzalez-Rodriguez, V. Bayona, M. Moscoso and M. Kindelan. Laurent series based rbf-fd method to avoid ill-conditioning. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 52:24–31.
- Hardy(1971)** L. Hardy. Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces. *Journal of Geophys*, 76:1905–1915.
- Hateley et al.(2015)** J. C. Hateley, H. Wei and L. Chen. Fast methods for computing centroidal voronoi tessellations. *Journal of Scientific Computing*, 63(1):185–212.
- Incropera et al.(2014)** F. P. Incropera, T. L. Bergman, A. S. Lavine and D. P. Dewitt. *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*. LTC, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 7 edição.
- Iske e Arnold(2004)** A. Iske and V. I. Arnold. *Multiresolution Methods in Scattered Data Modelling*. Springer.
- Kansa(1990a)** J. Kansa. Multiquadratics - a scattered data approximations and scheme with applications to computational fluid dynamics-I. surface approximations and partial derivative estimates. *Computers and Mathematics with Applications*, 19:127–145.
- Kansa(1990b)** J. Kansa. Multiquadratics - a scattered data approximations and scheme with applications to computational fluid dynamics-II. solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations. *Computers and Mathematics with Applications*, 37:147–161.
- Krowiak(2016)** A. Krowiak. Hermite type radial basis function-based differential quadrature method for higher order equations. *Applied Mathematical Modelling*, 40(3):2421 – 2430.
- Lehto(2014)** E. Lehto. *RBF-GA Differentiation Weights*, 2014. <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/48198-rbf-ga-differentiation-weights>.
- LeVeque(2007)** R. LeVeque. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA.
- Ling(2003)** L. Ling. *Radial Basis Function in Scientific Computing*. Tese de Doutorado, Simon Fraser University, Burnaby, Canadá.
- Lo et al.(2005)** D. C. Lo, K. Murugesan and D. L. Young. Numerical solution of three-dimensional velocity-vorticity navier-stokes equations by finite difference method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47(12):1469–1487.
- Maliska(2010)** C. R. Maliska. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 2 edição.

- Matérn(1960)** B. Matérn. *Stochastic models and their application to some problems in forest surveys and other sampling investigations.* Tese de Doutorado, University of Stockholm, Stockholm, Suécia.
- Micchelli(1986)** C. Micchelli. Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions. *Constructive Aproximation*, 2:11–22.
- Piret(2007)** C. Piret. *Analitical and Numerical Advances in Radial Bases Function.* Tese de Doutorado, University of Colorado, Denver, E.U.A.
- Powell(1992)** M. J. D. Powell. *The theory of radial basis function approximation in 1990, Advances in Numerical Analysis, Vol. II: Wavelets, Subdivision Algorithms and Radial Functions.* Oxford University Press, Oxford, UK.
- Qajarjazi et al.(2010)** A. Qajarjazi, S. Soleimani, H. Bararnia, A. Barari and G. Domairry. Entropy generation due to natural convection in a partially heated cavity by local RBF-DQ method. *Meccanica*, 46:1023–1033.
- Santos(2012)** L. G. C. Santos. Método de Quadratura Diferencial com Funções de Base Radial em Problemas de Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, Minas Gerais.
- Santos et al.(2014)** L. G. C. Santos, N. Manzanares-Filho and J. R. Silva. A local differential quadrature method with variable shape multiquadratics: Tests on poisson equation and fluid dynamics using consistent cloud refinements. *15th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering - Encit 2014*, 1:1–4.
- Sarra e Kansa(2009)** S. A. Sarra and E. J. Kansa. Multiquadric radial basis function approximation methods for the numerical solution of partial differential equations. *Advances in Computational Mechanics*, 2:2009.
- Seibold(2008)** B. Seibold. Minimal positive stencils in meshfree finite difference methods for the poisson equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(3-4): 592–601.
- Shen(2010)** Q. Shen. Local rbf-based differential quadrature collocation method for the boundary layer problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 34(3):213–228.
- Shu(2000)** C. Shu. *Differential Quadrature and Its Application in Engineering.* Springer, Great Britain, 1 edição.
- Shu et al.(2003)** C. Shu, H. Ding and S. Yeo. Local radial basis function-based differential quadrature method and its application to solve two-dimensional incompressible navier-stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192:941–954.

- Shu et al.(2005a)** C. Shu, H. Ding, H. Q. Chen and T. G. Wang. An upwind local RBF-DQ method for simulation of inviscid compressible flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(18-20):2001–2017.
- Shu et al.(2005b)** C. Shu, H. Ding and S. Yeo. Computation of incompressible navier-stokes equations by local RBF-based differential quadrature method. *Tech Science Press*, 7:195–205.
- Silva(2014)** J. R. Silva. Método de Quadratura Diferencial Local com Funções de Base Radial: Uma Abordagem com Nuvens de Pontos e Aplicaccões em Dinâmica dos fluidos. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, Minas Gerais.
- Soleimani et al.(2010)** S. Soleimani, M. Jalaal, H. Bararnia, E. Ghasemi, D. Ganji and F. Mohammadi. Local RBF-DQ method for two-dimnensional transient heat conduction problems. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 37:1411–1418.
- Souza(2006)** J. J. Souza. Simulação Numérica da Transferência de Calor por Convecção Forçada, Natural e Mista numa Cavidade Retangular. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, Minas Gerais.
- Stevens e Power(2015)** D. Stevens and H. Power. The radial basis function finite collocation approach for capturing sharp fronts in time dependent advection problems. *Journal of Computational Physics*, 298:423 – 445.
- Wendland(1995)** H. Wendland. Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree. *Advances in Computational Mathematics*, 4(1): 389–396.
- Wendland(2004)** H. Wendland. *Scattered data approximation*, volume 17. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- White(2011)** M. F. White. *Mecânica dos Fluidos*. McGraw-Hill, São Paulo, SP, 6 edição.
- Wright e Fornberg(2006)** G. Wright and B. Fornberg. Scattered node compact finite difference-type formulas generated from radial basis functions. *Computational Methods*, 1(1):1391–1395.
- Wright(2003)** G. B. Wright. *Radial Basis Function Interpolation: Numerical and Analytical Developments*. Ph.d. thesis, University of Colorado, Boulder.
- Wu et al.(2007)** X. Wu, C. Shu and M. Wang. Vibration analysis of arbitrarily shaped membranes using local radial basis function-based differential quadrature method. *Journal of Sound and Vibration*, 307:252–270.

- Yun e Hon(2016)** D. F. Yun and Y. C. Hon. Improved localized radial basis function collocation method for multi-dimensional convection-dominated problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 67:63 – 80.
- Zheleznyakova e Surzhikov(2013)** A. L. Zheleznyakova and S. T. Surzhikov. Molecular dynamics-based unstructured grid generation method for aerodynamic applications. *Computer Physics Communications*, 184(12):2711 – 2727.