

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

MÁRCIO ANDRÉ MARTINS

**MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON COM INTERPOLAÇÃO
PARA REDUZIR E ESTIMAR O ERRO DE DISCRETIZAÇÃO EM CFD**

CURITIBA

2013

MÁRCIO ANDRÉ MARTINS

**MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON COM INTERPOLAÇÃO
PARA REDUZIR E ESTIMAR O ERRO DE DISCRETIZAÇÃO EM CFD**

Tese apresentada como requisito para obter o título de Doutor em Engenharia Mecânica no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná, na área de concentração de Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi.

Co-orientadores:

Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki

Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto

CURITIBA

2013

Martins, Márcio André.

Multiextrapolação de Richardson com interpolação para reduzir e estimar o erro de discretização em CFD / Márcio André Martins – Curitiba, 2013.

198f. : il., tab.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi

Co-orientador: Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki

Co-orientador: Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto

Tese (Doutorado) – Tese apresentada como requisito para obter o título de Doutor em Engenharia Mecânica no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná, na área de concentração de Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Inclui Bibliografia

1. Dinâmica dos fluidos. 2. Método de diferenças finitas. 3. Método de volumes finitos. I. Marchi, Carlos Henrique . II. Araki, Luciano Kiyoshi. III Pinto, Marcio Augusto Villela. IV. Título.

TERMO DE APROVAÇÃO

MÁRCIO ANDRÉ MARTINS

**MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON COM INTERPOLAÇÃO
PARA REDUZIR E ESTIMAR O ERRO DE DISCRETIZAÇÃO EM CFD**

Tese aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica, área de concentração de Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná, pela banca examinadora:

Prof. Dr. António Fábio Carvalho da Silva
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Dr. Admilson Teixeira Franco
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Prof. Dra. Viviana Cocco Mariani
Pontifícia Universidade Católica do Paraná

Prof. Dr. Saulo Pomponet Oliveira
Universidade Federal do Paraná

Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi
Universidade Federal do Paraná
Presidente

Curitiba, 27 de novembro de 2013.

A Deus.

À minha querida esposa, Danyelle.

À minha querida filha Amanda.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi por ter aceitado me orientar neste trabalho e pelo conhecimento compartilhado.

Agradeço aos meus co-orientadores, Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki e Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto, pela dedicação.

Agradeço aos membros da banca examinadora, Prof. Dr. António Fábio Carvalho da Silva, Prof. Dr. Admilson Teixeira Franco, Prof. Dr. Saulo Pomponet Oliveira e Prof. Dra. Viviana Cocco Mariani pelo tempo dispensado à leitura deste trabalho.

Agradeço aos meus familiares pelo apoio incondicional.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PG-MEC) da Universidade Federal do Paraná (UFPR), à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), à Fundação Araucária pela oportunidade de cursar o doutorado e ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual do Centro-Oeste (UNICENTRO-PR) pela licença concedida para a dedicação ao curso.

“O que sabemos é uma gota; o que ignoramos é um oceano.

Mas o que seria o oceano se não infinitas gotas?”

Isaac Newton.

RESUMO

A principal motivação deste trabalho consiste no aperfeiçoamento de métodos adotados para reduzir e estimar erros de discretização em CFD. Com esse propósito, analisa-se o desempenho de Multiextrapolação de Richardson (MER) e propõe-se a classificação em cinco tipos de variáveis de acordo com as suas localizações em malhas distintas. Desses tipos, o emprego de MER é abordado com sucesso na literatura apenas em variáveis globais ou que possuem localização nodal fixa em malhas distintas (primeiro tipo). Para os demais casos, MER não é empregada ou é considerada como de baixo desempenho. Nesse contexto, busca-se o desenvolvimento de estratégias, aplicáveis a variáveis com coordenadas móvel ou fixa, porém não coincidentes com um ponto nodal. Propõe-se um conjunto de procedimentos numéricos que, juntamente com MER, permitem reduzir o erro de discretização. Para isso, considera-se o uso de funções de interpolação polinomial, em domínios uni e bidimensionais e, em alguns casos, também o emprego de técnicas de otimização. Com o emprego da metodologia proposta, MER tem seu desempenho melhorado: a magnitude dos erros de discretização reduz-se progressivamente com o refinamento de malha, com um concomitante aumento das suas ordens efetiva e aparente. Com relação às estimativas para o erro de discretização, analisa-se o desempenho de alguns estimadores disponíveis na literatura, sendo que suas expressões são adaptadas para MER. Uma nova proposta de estimador para MER é apresentada. Tal abordagem baseia-se na ordem de acurácia prática, calculada *a posteriori* das soluções numéricas, e mostrou-se acurada e confiável. Como problemas-modelo são considerados: equação de Poisson, equação de advecção-difusão e equações de Burgers. A discretização dessas equações é realizada utilizando-se o Método de Diferenças Finitas ou o Método de Volumes Finitos.

Palavras-chave: Erro de discretização. Multiextrapolação de Richardson (MER). Interpolação polinomial. Dinâmica dos fluidos computacional (CFD).

ABSTRACT

The main motivation for this work consists on the improvement of adopted methods to reduce and estimate the discretization error in CFD. With this purpose, the performance of the Repeated Richardson Extrapolation (RRE) is analyzed, especially proposed for five types of variables, which are classified according to their location in different grids. For all these types of variables, the use of RRE is successful, in literature, only for global variables or the ones which preserve their fixed nodal location in distinct grids (first type of variable). For all remaining cases, RRE is not used or presents low performance. Based on these facts, the development of applicable strategies is sought for cases, in which variables do not present fixed coordinates or, even when they are fixed, they are not coincident to any nodal point. A set of numerical procedures is proposed, and associated to RRE, allow the reduction of the discretization error. To achieve these objectives, the use of polynomial interpolation functions, for both one- and two-dimensional problems, is analyzed; for some cases, also optimization techniques are employed to search for extreme points. Based on the use of the proposed methodology, RRE presents its performance improved: the magnitude of the discretization error progressively reduces with the grid refinement, until the achievement of the round-off error, associated to a concomitant increasing of effective and apparent error orders. Regarding to the discretization error estimates, the performance of some estimators available in literature is analyzed, by adapting their expressions for RRE. Also a new estimator for RRE is presented. Such approach is based on the practical accuracy order, evaluated *a posteriori* and based on the numerical solutions. The considered model problems are: the Poisson-type, the advection-diffusion and the Burgers equations. Such equations are discretized by using the Finite Difference or the Finite Volume Methods.

Key-words: Discretization error. Repeated Richardson Extrapolation (RRE). Polynomial interpolation. Computational fluid dynamics (CFD).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Desempenho de MER sobre Eh em variável com a mesma localização coordenada em malhas distintas (Tc), e coincidente com um ponto nodal.....	21
Figura 1.2	Desempenho de MER sobre Eh em variável que apresenta mudança de localização coordenada ($Tmax$), ao se considerar a sua resolução em malhas distintas.....	22
Figura 2.1	Representação do ponto i sobre a malha unidimensional.....	40
Figura 2.2	Representação da face e entre os volumes P e E sobre a malha unidimensional (face e centrada entre os pontos nodais).....	42
Figura 2.3	Restrição por injeção (TROTTEBERG <i>et al.</i> , 2001), abordagem 2D, $q = 2$	46
Figura 2.4	Prolongação bilinear (adaptado de Trottenberg <i>et al.</i> (2001)), $q = 2$	47
Figura 3.1	Variável com mesma localização nodal em malhas distintas.....	71
Figura 3.2	Variável com localização pré-estabelecida, e situada no ponto médio entre pontos nodais em malhas distintas.....	72
Figura 3.3	Variável com localização pré-estabelecida, porém não situada em um nó específico ou no ponto médio entre pontos nodais em malhas distintas.....	72
Figura 3.4	Variável com valor pré-estabelecido e com localização dependente da malha adotada.....	72
Figura 3.5	Variável com localização indeterminada e que apresenta alteração de coordenadas ao se considerar malhas distintas.....	73
Figura 3.6	Metodologia para o emprego de MER.....	78
Figura 4.1	Erro de discretização com $O(h^{pm})$, para $m = g - 1$, nas malhas Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$, em perspectiva monocoefficiente.....	82
Figura 5.1	Problema do escoamento na cavidade quadrada com tampa móvel (adaptado de Marchi <i>et al.</i> (2009)).....	96
Figura 5.2	Função $u(x, y)$, $(x, y) \in \Omega$	96
Figura 5.3	Função $v(x, y)$, $(x, y) \in \Omega$	97
Figura 5.4	Malha bidimensional uniforme, sob a representação do volume de controle P	103

Figura 5.5	Representação do volume fictício P , nos contornos.....	105
Figura 6.1	Eh , Em e suas respectivas estimativas; para ϕ do tipo I em Poisson 1D.....	109
Figura 6.2	Ep , Epm e suas estimativas; para $T(3/4)$, $r = 3$ (ϕ tipo II) em Poisson 1D.....	111
Figura 6.3	Ordem de acurácia associada ao cálculo de $T(3/4)$, $r = 3$ (ϕ tipo II) em Poisson 1D, com e sem MER.....	112
Figura 6.4	Ep , Epm e suas estimativas; para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) em Poisson 1D.....	112
Figura 6.5	Ep , Epm e suas estimativas; para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) com $p_0 = 4$ em Poisson 1D.....	114
Figura 6.6	Ep , Epm e suas estimativas; x inerente a $T = 1$, $r = 2$ (ϕ tipo IV), Poisson 1D.....	115
Figura 6.7	Eh , Em , Ep e Epm para $T \max$ (ϕ tipo V) em Poisson 1D.....	116
Figura 6.8	p_A inerente ao erro numérico de $T \max$ (ϕ tipo V), em Poisson 1D.....	117
Figura 6.9	Eh e Epm para $T \max$ (ϕ tipo V) em Poisson 1D, com $p_0 = 4$ e 2.....	118
Figura 6.10	Erro numérico com e sem MER e suas respectivas estimativas e ordens, para variável do tipo I ($T(3/4)$, $r = 2$) em Advecção-difusão 1D, com UDS/CDS.....	119
Figura 6.11	Ep e Epm para $T(3/4)$, $r = 3$ (ϕ tipo II) e suas estimativas em Advecção-difusão 1D, com o esquema UDS/CDS.....	122
Figura 6.12	Ep , Epm e suas estimativas; para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) em Advecção-difusão 1D, com o esquema UDS/CDS.....	123
Figura 6.13	Ep , Epm e suas estimativas; para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) em Advecção-difusão 1D, com o esquema CDS/CDS.....	123
Figura 6.14	Eh , Em e suas estimativas; para Fs , $r = 2$ (ϕ tipo I) em Burgers 2D.....	125
Figura 6.15	Ep , Epm e suas estimativas; para $uc = u(1/2, 1/2)$ (ϕ tipo II) com interpolação bilinear, em Burgers 2D.....	127
Figura 6.16	Erro numérico com interpolação polinomial, com e sem MER e suas ordens, para ϕ do tipo III (vm) em Burgers 2D, com $p_0 = 2$	128
Figura 6.17	Erro numérico com e sem MER e suas respectivas estimativas e ordens,	

	para ϕ do tipo IV ($y(vm)$) em Burgers 2D; esquema com $p_0 = 2$	130
Figura 6.18	Erro numérico com e sem MER aliado a interpolação polinomial e suas estimativas, para ϕ do tipo V (Ψ min) em Burgers 2D.....	131
Figura 6.19	Comparação entre o tempo de processamento para a obtenção de Eh e Epm com interpolação polinomial 2D, para ϕ do tipo V (Ψ min em Burgers 2D).....	132
Figura C.1	Representação dos pontos, $(i, j) = (x_i, y_j)$; $i = 0, \dots, p$; $j = 0, \dots, p$; utilizados na obtenção de ξ_p	166
Figura C.2	Representação dos pontos, $(i, j) = (x_i, y_j)$; $i = 0, 1, 2$; $j = 0, 1, 2$; considerados na obtenção de $\xi_2(x, y)$	168
Figura E.1	Eh e U_{mc} para $\phi = (\lambda_{CDS}^i)_j$ em $x_j = 1/2$	177
Figura E.2	Eh e Em para $\phi = (\lambda_{CDS}^i)_j$, em $x_j = 1/2$	178
Figura E.3	Ordens efetiva e aparente para $\phi = (\lambda_{CDS}^i)_j$, em $x_j = 1/2$, com e sem o emprego de MER.....	178
Figura E.4	Em e estimadores U_Δ , U_{pm} , U_{pmc} , U_ψ e U_{ψ^*} , para $\phi = (\lambda_{CDS}^i)_j$ em $x_j = 1/2$	180
Figura E.5	Eh e U_{mc} para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)_j$ em $x_j = 1/2$	183
Figura E.6	Eh e Em para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)_j$, em $x_j = 1/2$	184
Figura E.7	Ordens efetiva e aparente para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)_j$, em $x_j = 1/2$, com e sem o emprego de MER.....	185
Figura E.8	Em e estimadores U_Δ , U_{pm} , U_{pmc} , U_ψ e U_{ψ^*} , para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)_j$ em $x_j = 1/2$	186
Figura F.1	Varição de u sobre o eixo $x = 1/2$, $u(x = 1/2, y)$, e u min 1D.....	190
Figura F.2	Varição de v sobre o eixo $y = 1/2$, $v(x, y = 1/2)$, e v min 1D.....	192
Figura F.3	Varição de $\Psi(x, y)$ sobre Ω e Ψ min.....	194
Figura F.4	Varição de $u(x, y)$ sobre Ω , e u min 2D.....	195
Figura F.5	Varição de $v(x, y)$ sobre Ω , e v min 2D.....	197
Figura F.6	Varição de $v(x, y)$ sobre Ω , e v max 2D.....	198

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Dados nodais considerados na interpolação 2D.....	55
Tabela 2.2	Diferenças Divididas de Newton, enfoque bidimensional.....	57
Tabela 2.3	Algoritmo I, Diferenças Divididas de Newton (2D).....	57
Tabela 2.4	Algoritmo II, Método do Gradiente.....	60
Tabela 2.5	Algoritmo III, aplicação de MER.....	67
Tabela 2.6	Representação esquemática do emprego de MER.....	68
Tabela 4.1	Representação esquemática do emprego de $U_{\Delta}(\phi_{g,m})$	80
Tabela 4.2	Representação esquemática do emprego de U_{pm}	81
Tabela 4.3	Representação esquemática do emprego de U_{ψ}	84
Tabela 4.4	Representação esquemática do emprego de U_{GCI} sobre $\phi_{g,m}$	88
Tabela 5.1	Variáveis de interesse consideradas no caso 3.....	99
Tabela 5.2	Símbolos empregados na Eq. (5.30) para resolução do caso 3.....	103
Tabela 6.1	Em e ψ para ϕ do tipo I em Poisson 1D.....	109
Tabela 6.2	Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} para Em associado ao cálculo de $T(1/2)$, $r = 2$ (ϕ tipo I) em Poisson 1D.....	110
Tabela 6.3	Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} , para Epm , $p = 1$ associado ao cálculo de $T(3/4)$, $r = 3$ (ϕ tipo II) em Poisson 1D.....	111
Tabela 6.4	Ep , Epm ($p = 10$) e ψ para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III), em Poisson 1D....	113
Tabela 6.5	Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} , para Epm , $p = 10$ associado ao cálculo de $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) em Poisson 1D.....	113
Tabela 6.6	Eh , Em , e suas ordens para $T(3/4)$, $r = 2$ (ϕ tipo I), em Advecção-difusão 1D, com o esquema UDS/CDS.....	120
Tabela 6.7	Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} , para Em associado ao cálculo de $T(3/4)$, $r = 2$ (ϕ tipo I) em Advecção-difusão 1D, com UDS/CDS.....	121

Tabela 6.8	Efetividade de U_{mc} e U_{ψ^*} , e suas ordens aparentes, para Fs (ϕ do tipo I) em Burgers 2D, com $p_0 = 2$	126
Tabela 6.9	Ordens obtidas para ϕ do tipo II; uc , com interpolação bilinear, em Burgers 2D.....	127
Tabela 6.10	Ordem e magnitude do erro numérico (com MER) obtido para ϕ do tipo III, vm , com interpolação polinomial 2D, em Burgers 2D.....	129
Tabela 6.11	Efetividade de U_{mc} e U_{ψ^*} para ϕ do tipo III, vm , com interpolação polinomial 2D, $p = 6$, em Burgers 2D.....	129
Tabela 6.12	Efetividade de U_{mc} e U_{ψ^*} , e suas ordens aparentes, $\Psi \min$ (ϕ do tipo V) em Burgers 2D, com $p = 6$ e $p_0 = 2$	131
Tabela E.1	Resultados para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$, Eh e U_{mc} em $x_j = 1/2$	176
Tabela E.2	Erro de discretização, ordem e razão de convergência para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$ com o emprego de MER, em $x_j = 1/2$	177
Tabela E.3	Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pm} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{ψ^*} , para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$, em $x_j = 1/2$	179
Tabela E.4	Resultados para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)_j$, Eh e U_{mc} em $x_j = 1/2$	183
Tabela E.5	Erro de discretização, ordem e razão de convergência para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)_j$ com o emprego de MER, em $x_j = 1/2$	184
Tabela E.6	Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pm} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{ψ^*} , para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)_j$, em $x_j = 1/2$	186

LISTA DE SÍMBOLOS

A	matriz de coeficientes
B	vetor termo independente
$c_0, c_1, c_2, c_3, \dots$	coeficientes do erro de discretização
d	direção de subida ou de descida associada ao método do Gradiente
Eh	erro de discretização
Em	erro de discretização obtido após o emprego de MER com o maior nível de extrapolação possível ($m = g - 1$)
Ep	erro numérico obtido após o emprego de interpolação polinomial sobre os pontos nodais
Epm	erro numérico obtido após o emprego de interpolação polinomial e MER com o maior nível de extrapolação possível ($m = g - 1$)
E_l	erro de iteração
E_{pr}	erro de programação
E_π	erro de arredondamento
E_T	erro de truncamento
fm	fluxo de massa que escoa em uma localização específica de Ω
Fn	força de arrasto viscoso referente ao contorno norte de Ω
Fs	força de arrasto viscoso referente ao contorno sul de Ω
FS	fator de segurança do estimador GCI
f	função analítica
g	indicador do nível de malha
G	número total de malhas consideradas
h	espaçamento entre os pontos nodais (ou nós) da malha
i, j	indicação da numeração do ponto nodal
k	condutividade térmica
$k_0, k_1, k_2, k_3, \dots$	coeficientes da série de Richardson
m	indicador do nível de extrapolação
M	fluxo de massa

M	número de pontos nodais da malha em cada direção (dimensão)
p	grau do polinômio interpolador
\dot{p}	pressão
p_A	ordem de acurácia
p_E	ordem efetiva
$(p_{E,M})_g$	ordem efetiva inerente à solução obtida com o emprego de MER
p_0	ordem assintótica
$p_V = \{p_0, p_1, p_2, p_3, \dots\}$	ordens verdadeiras
p_U	ordem aparente
$(p_{U,M})_g$	ordem aparente inerente à solução obtida com o emprego de MER
P	volume de controle de malha
Pe	número de Peclet
q	razão de engrossamento de malha
r	razão de refino de malha
R	resíduo
Re	número de Reynolds
S	termo fonte da equação diferencial
T	temperatura
T_c	temperatura no ponto central do domínio de cálculo
T_i	valor obtido para a variável T no ponto nodal i
T_{\max}	temperatura máxima em Ω
u	componente do vetor velocidade do escoamento na direção x
u_c	u no ponto central de Ω
$u_{\min 1D}$	valor mínimo de u sobre o perfil $x = 1/2$, em Ω
$u_{\min 2D}$	valor mínimo de u em Ω
Uh	estimativa para Eh
U_{Δ}	estimador δ
U_{GCI}	estimador GCI
U_{mc}	estimador multicoeficiente
U_{Ri}	estimador Richardson

U_{pm}	U_{Ri} com base em p_v para MER, estimador pm
U_{pmc}	U_{pm} corrigido
U_{ψ}	Estimador psi
U_{ψ^*}	U_{ψ} corrigido
v	componente do vetor velocidade do escoamento na direção y
vc	v no ponto central de Ω
vm	v em um ponto específico de Ω , com coordenadas irracionais
$v \max 2D$	valor máximo de v em Ω
$v \max 1D$	valor máximo de v sobre o perfil $y = 1/2$, em Ω
$v \min 1D$	valor mínimo de v sobre o perfil $y = 1/2$, em Ω
$v \min 2D$	valor mínimo de v em Ω
x	abscissa – coordenada espacial
$x \max$	x de $T \max$
$x(u \min 2D)$	x de $u \min 2D$
$x(v \max 2D)$	x de $v \max 2D$
$x(v \max 1D)$	x de $v \max 1D$
$x(v \min 1D)$	x de $v \min 1D$
$x(v \min 2D)$	x de $v \min 2D$
y	ordenada – coordenada espacial
$y(u \min 1D)$	y de $u \min 1D$
$y(u \min 2D)$	y de $u \min 2D$
$y(v \max 2D)$	y de $v \max 2D$
$y(v \min 2D)$	y de $v \min 2D$
Letras gregas	
$\alpha, \beta, \delta, \theta, \varepsilon$	números reais (escalares)
Φ	solução analítica para a variável de interesse
ϕ	solução numérica para variável de interesse
ϕ_{ex}	solução exata para os sistema de equações algébricas
ϕ_M	ϕ obtida com MER, com m máximo
ϕ_{pM}	ϕ obtida com interpolação polinomial e com MER (m máximo)

ϕ_∞	solução analítica estimada
$\phi^{(I)}$	ϕ obtida na iteração I
φ	valor real atribuído a ϕ
$\kappa_0, \kappa_1, \dots, \kappa_p$	coeficientes do polinômio interpolador
χ	coordenada do ponto considerado para realização de interpolação
μ	Viscosidade dinâmica
ρ	massa específica
$\theta(U)$	efetividade da estimativa U
Ω	domínio de cálculo (contínuo)
Ω^h	domínio de cálculo discretizado com espaçamento h (malha uniforme)
ξ	polinômio
ξ_p	polinômio de grau p
ψ	razão de convergência
Ψ	função de corrente
$\Psi \min$	valor mínimo de Ψ em Ω
$x(\Psi \min)$	abscissa de $\Psi \min$
$y(\Psi \min)$	ordenada de $\Psi \min$
∇	operador gradiente

Acrônimos

CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CS	<i>Correction Scheme</i>
ER	Extrapolação de Richardson
FAS	<i>Full Approximation Scheme</i>
GCI	<i>Grid Convergence Index</i>
MDF	Método de Diferenças Finitas
MER	Multiextrapolação de Richardson
MVF	Método de Volumes Finitos
TDMA	<i>Tridiagonal Matrix Algorithm</i>
UDS	<i>Upwind Differencing Scheme</i>
V&V	Verificação e Validação Numérica

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	DELIMITAÇÃO DO PROBLEMA.....	19
1.2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	22
1.3	OBJETIVOS	32
1.4	ORGANIZAÇÃO DO TEXTO.....	33
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	34
2.1	ERRO NUMÉRICO	34
2.1.1	Erro de Truncamento	34
2.1.2	Erro de Iteração	35
2.1.3	Erro de Arredondamento.....	36
2.1.4	Erro de Programação.....	36
2.1.5	Erro de Discretização	37
2.2	MÉTODOS DE DISCRETIZAÇÃO	39
2.2.1	Método de Diferenças Finitas.....	39
2.2.2	Método dos Volumes Finitos	42
2.3	RESOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES ALGÉBRICAS.....	43
2.4	INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL.....	47
2.4.1	Abordagem unidimensional	48
2.4.2	Abordagem bidimensional	51
2.5	MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO	58
2.6	EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON	61
2.7	MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON.....	63
2.8	RESUMO DO CAPÍTULO 2.....	69
3	METODOLOGIA PARA O EMPREGO DE MER	71
3.1	CLASSIFICAÇÃO DAS VARIÁVEIS	71
3.1.1	Variável do tipo I.....	73
3.1.2	Variável do tipo II.....	73
3.1.3	Variável do tipo III	73
3.1.4	Variável do tipo IV	73
3.1.5	Variável do tipo V.....	74
3.2	PROCEDIMENTOS PARA O EMPREGO DE MER	74
3.2.1	MER em variável do tipo I.....	74
3.2.2	MER em variável do tipo II.....	74
3.2.3	MER em variável do tipo III	75
3.2.4	MER em variável do tipo IV	76
3.2.5	MER em variável do tipo V	76
3.3	ALGORITMO GERAL PARA O EMPREGO DE MER	77
3.4	RESUMO DO CAPÍTULO 3.....	78
4	ESTIMATIVA PARA O ERRO DE DISCRETIZAÇÃO	79
4.1	ESTIMADOR <i>DELTA</i>	79
4.2	ESTIMADOR <i>PM</i>	80
4.3	ESTIMADOR <i>PM</i> CORRIGIDO.....	81
4.4	ESTIMADOR <i>PSI</i>	82
4.4.1	Critério para o emprego efetivo de MER.....	84
4.5	ESTIMADOR <i>PSI</i> CORRIGIDO.....	85
4.6	ESTIMADOR <i>GCI</i>	87

4.7	ESTIMADOR MULTICOEFICIENTE.....	88
4.8	EFETIVIDADE DE UMA ESTIMATIVA DE ERRO.....	90
4.9	RESUMO DO CAPÍTULO 4.....	90
5	PROBLEMAS-TESTE.....	91
5.1	MODELOS MATEMÁTICOS.....	91
5.1.1	Caso 1: Poisson 1D.....	91
5.1.2	Caso 2: Advecção-difusão 1D.....	93
5.1.3	Caso 3: Burgers 2D.....	94
5.2	MODELOS NUMÉRICOS.....	100
5.2.1	Resolução numérica do caso 1.....	100
5.2.2	Resolução numérica do caso 2.....	102
5.2.3	Resolução numérica do caso 3.....	102
5.3	DADOS DAS SIMULAÇÕES.....	106
5.4	RESUMO DO CAPÍTULO 5.....	107
6	RESULTADOS.....	108
6.1	RESULTADOS PARA O CASO 1: POISSON 1D.....	108
6.2	RESULTADOS PARA O CASO 2: ADVECÇÃO-DIFUSÃO 1D.....	118
6.3	RESULTADOS PARA O CASO 3: BURGERS 2D.....	124
6.4	SÍNTESE DO CAPÍTULO 6.....	133
7	CONCLUSÃO.....	134
7.1	ESCOPO DO TRABALHO.....	134
7.2	CONCLUSÃO GERAL.....	134
7.3	CONTRIBUIÇÕES.....	136
7.4	TRABALHOS FUTUROS.....	136
	REFERÊNCIAS.....	138
	APÊNDICE A - IMPLEMENTAÇÃO DA INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL 1D.....	145
	APÊNDICE B - PARTICULARIDADES DO PROCESSO DE OTIMIZAÇÃO 1D.....	163
	APÊNDICE C - IMPLEMENTAÇÃO DA INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL 2D.....	166
	APÊNDICE D - IMPLEMENTAÇÃO DO PROCESSO DE OTIMIZAÇÃO 2D.....	171
	APÊNDICE E - TESTES NUMÉRICOS COM CDS-2 E UDS-1.....	173
	APÊNDICE F - DETERMINAÇÃO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE DO CASO 3: BURGERS 2D.....	187

1 INTRODUÇÃO

Na resolução de problemas em engenharia podem-se considerar três tipos de métodos: experimentais, analíticos e numéricos. Desses, cada um possui vantagens e desvantagens que dependem das particularidades do problema. Tannehill *et al.* (1997), em uma discussão a esse respeito, ressaltam que o emprego de métodos numéricos está livre de algumas restrições impostas aos métodos experimentais. Entre elas pode-se destacar a repetição de simulações ao se considerar a variação de parâmetros e de geometrias de cálculo.

Maliska (2004) classifica os métodos analíticos e numéricos por métodos teóricos. Quanto à aplicação de métodos teóricos, problemas que têm solução analítica conhecida são aqueles que envolvem equações, geometrias e condições de contorno e iniciais muito simples, ou seja, são as exceções. Para os demais problemas utilizam-se métodos numéricos cujas soluções são obtidas com o emprego de computadores.

A Dinâmica dos Fluidos Computacional (em inglês, *Computational Fluid Dynamics – CFD*) está inserida nesse contexto. CFD consiste, basicamente, na aplicação de métodos numéricos para resolver equações que representam problemas envolvendo fluidos em movimento, com ou sem troca de calor, onde o interesse principal é obter as distribuições de velocidade, pressão e temperatura na região de escoamento (FORTUNA, 2000).

As demandas atuais em CFD requerem o uso de métodos que forneçam soluções numéricas acuradas. Entretanto, de modo geral, as soluções numéricas podem ser afetadas por erros numéricos, cujas fontes são: erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação. Quando as demais fontes são minimizadas ou inexistentes, o erro de truncamento passa a ser denominado erro de discretização (MARCHI, 2001). Dentre as fontes de erro numérico, a decorrente do emprego dos métodos de discretização, ou **erro de discretização**, é considerada a mais significativa (ROY e OBERKAMPF, 2011). Segundo Roy e Blottner (2006), o erro de discretização pode ser definido como a diferença entre a solução analítica para as equações diferenciais (modelo matemático) e a solução numérica obtida para as equações discretizadas (equações algébricas resultantes do método numérico empregado).

As alternativas disponíveis para se reduzir o erro de discretização são: refinamento de malha, cuja desvantagem é o aumento de memória e tempo computacionais; emprego de métodos de alta ordem, cuja desvantagem é o aumento da complexidade do modelo numérico; e por último, mas não menos importante, a utilização de técnicas de extrapolação.

Segundo Brezinski e Zaglia (2009), qualquer transformação aplicada a uma sequência de escalares ou vetores pode ser entendida como um método de extrapolação. Nos últimos anos a importância desses métodos, como ferramentas computacionais eficazes, vem sendo cada vez mais reconhecida no âmbito científico. Porém, um bom método de extrapolação geralmente leva em consideração o comportamento assintótico de uma sequência convergente (SIDI, 2003). Dentre esses métodos, a extrapolação de Richardson (ER) é um dos mais conhecidos.

Ao se considerar a aplicação da ER de forma recursiva, em que cada aplicação representa um nível de extrapolação, é possível potencializar a sua eficácia. Esse processo é denominado Multiextrapolação de Richardson (MER) ou em inglês por *Repeated Richardson Extrapolation* (RRE) (DAHLQUIST e BJORCK, 2008).

MER pode ser entendido como um pós-processamento sendo aplicável a códigos já existentes, ou em resultados já obtidos. Basta, apenas, a disposição de soluções numéricas em malhas distintas, estabelecidas por um processo de refinamento. Com MER, mesmo considerando-se a aplicação de esquemas numéricos de baixa ordem, é possível obter soluções numéricas de alta ordem.

Nesta tese, considera-se o emprego de MER sobre cinco tipos de variáveis classificadas de acordo com a sua localização em malhas distintas (detalhamento apresentado no capítulo 3). Tal localização pode ser fixa e coincidir ou não com um ponto nodal, ou ainda ser móvel devido ao processo de refinamento de malha. Nesse contexto, são exploradas as limitações do emprego de MER e propostas estratégias para contorná-las.

1.1 DELIMITAÇÃO DO PROBLEMA

Marchi *et al.* (2009) verificaram a eficácia de MER em variáveis dependentes primárias e secundárias, com o objetivo de melhorar a acurácia dos resultados numéricos disponíveis na literatura, para um problema clássico em CFD: o escoamento laminar dentro de uma cavidade quadrada de tampa móvel com velocidade constante. No entanto, na literatura vigente em CFD, não é comum se encontrar o emprego de MER com vários níveis de extrapolação. Cogita-se que essa falta de aplicação seja impulsionada por alguns relatos, pouco explorados (exemplos descritos na sequência), disponíveis na literatura.

No âmbito da resolução numérica de equações diferenciais parciais, Burg e Erwin (2009) relatam algumas dificuldades encontradas na utilização de MER, inerentes ao processo

de refinamento de malha. Em CFD, Marchi *et al.* (2008) também descrevem algumas dessas dificuldades, dentre elas: **a eficácia de MER é bem mais modesta no caso de valores extremos (valores máximos ou mínimos); e para a determinação das coordenadas de pontos extremos (pontos de máximo ou de mínimo) o desempenho de MER é totalmente prejudicado.**

Nesses casos, ao se considerar a resolução em malhas distintas, a coordenada da variável de interesse é alterada. Como exemplo: o ponto de máximo pode apresentar diferente localização nodal em duas malhas, fina e grossa. E, como MER necessita da solução para a variável de interesse em malhas distintas, essa mudança de localização caracteriza uma limitação para o seu emprego efetivo. Tal limitação é identificada até mesmo para ER. O baixo desempenho da ER em variável com coordenada móvel com a malha é mencionado por Nicolas *et al.* (2011) em um problema de escoamento termo-convectivo, devido à ocorrência de extremo local no funcional que descreve o gradiente de temperatura, em que o ponto extremo tem a sua localização alterada ao se considerar malhas distintas.

Para melhor ilustrar o problema em questão considera-se a resolução numérica (por Diferenças Finitas) da equação de Poisson, no enfoque de difusão de calor unidimensional, discretizada considerando-se o espaçamento h entre os pontos (nós) da malha. Adota-se a resolução em diversas malhas, estabelecidas por um processo de refinamento. Primeiramente, como variável de interesse analisa-se a temperatura no ponto central do domínio de cálculo (T_c), o que corresponde a uma **variável dependente primária com coordenada fixa e coincidente com um ponto nodal, em todas as malhas consideradas.** Pode-se observar na Fig. 1.1 o resultado obtido com o emprego de MER nesse caso. Nessa figura, com o processo de refinamento de malha, ou seja, com a diminuição de h , é possível identificar a queda do erro de discretização (Eh) sem o emprego de MER, e com o seu emprego (Em). Observa-se que os valores de Em são muito inferiores a Eh , e tornam-se progressivamente menores com o processo de refinamento de malha até que se atinja o nível de erro de máquina em precisão quádrupla (10^{-32}). Tal situação caracteriza o caso ideal para utilização de MER, ou seja, devido à localização fixa e nodal da variável de interesse (em malhas distintas), MER resulta no seu desempenho teórico esperado. Isto é, obtém-se uma redução progressiva do erro de discretização com uma concomitante elevação da sua ordem de acurácia, o que é caracterizado pelo aumento do declive do gráfico em escala bilogarítmica (Fig. 1.1). Percebe-se que o gráfico de Eh possui uma inclinação constante, o que, nesse caso, corresponde ao emprego de um método de segunda ordem de acurácia. Em contrapartida, o gráfico de Em possui uma inclinação variável, sendo aumentada progressivamente com a diminuição de h ,

isto é, a solução numérica sofre uma elevação sucessiva da sua ordem de acurácia, até que se atinja o nível de erro de máquina em precisão quádrupla.

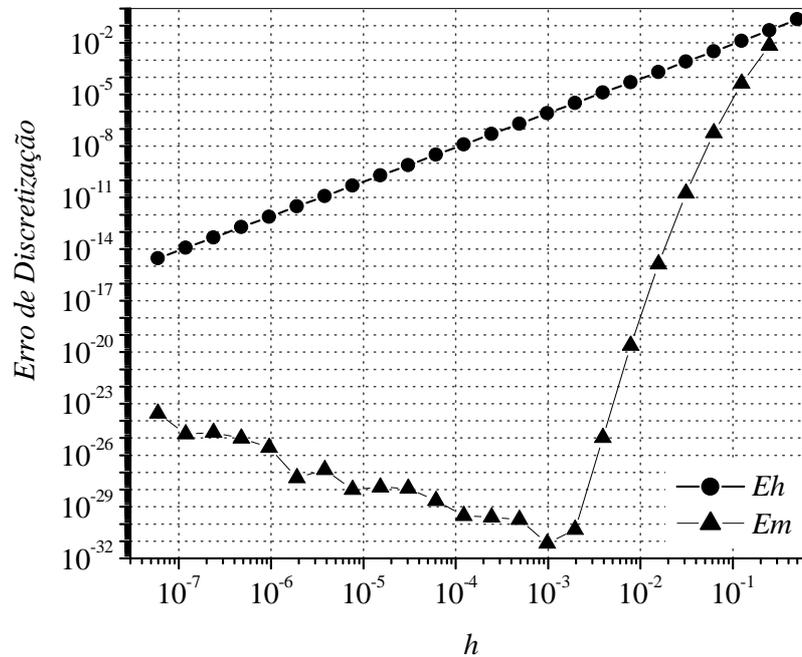


Figura 1.1: Desempenho de MER sobre Eh em variável com a mesma localização coordenada em malhas distintas (Tc), e coincidente com um ponto nodal.

Esse comportamento de Em (Fig. 1.1) pode ser analisado sob dois aspectos: primeiramente ao se considerar um determinado valor fixo de h (eixo horizontal), ou a adoção de uma malha específica, como exemplo, $h \cong 10^{-2}$, nota-se que a magnitude de Em é significativamente menor que a de Eh ; por outro lado, ao se adotar como foco a magnitude do erro de discretização (eixo vertical), ou o alcance de determinada precisão desejada, por exemplo, a obtenção de um erro de discretização com magnitude inferior a 10^{-20} , tal nível de acurácia só é permitido com o emprego de MER (no computador utilizado).

No entanto, para o mesmo problema (Poisson 1D), esse comportamento (desejável) não é alcançado ao se considerar como variável de interesse a temperatura máxima ($Tmax$) do domínio de cálculo. Nesse caso, **a coordenada (nodal) da variável de interesse é alterada com o processo de refinamento de malha**, o que corresponde a uma variável com mudança de localização ao se considerar a sua resolução em malhas distintas. Em outras palavras, o ponto nodal que contém a temperatura máxima em malhas distintas não possui a mesma localização coordenada. Observa-se na Fig. 1.2 que, nesse caso, MER perde seu efeito teórico, isto é, não ocorre a redução progressiva da magnitude de Em com a diminuição de h , o que pode ser observado no gráfico de Em (Fig. 1.2).

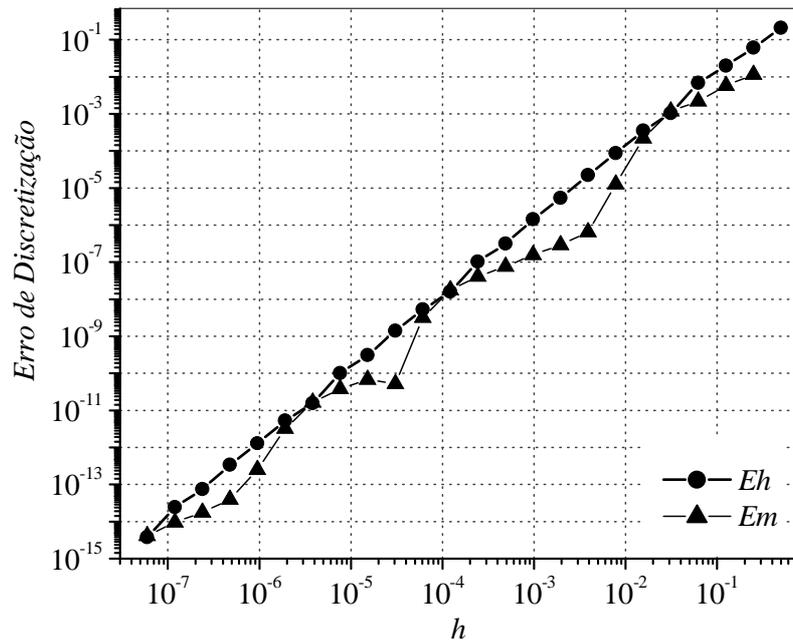


Figura 1.2: Desempenho de MER sobre E_h em variável que apresenta mudança de localização coordenada (T_{max}), ao se considerar a sua resolução em malhas distintas.

O presente trabalho propõe-se, então, em: analisar o desempenho de MER para variáveis que possuem diferentes características com relação à sua localização coordenada, em malhas distintas; estabelecer a metodologia adequada, para o emprego de MER para reduzir E_h , em cada tipo de variável identificada; e fornecer uma expressão confiável e acurada para se estimar o valor do erro de discretização obtido com a aplicação de MER, em cada caso.

Com os mecanismos propostos, busca-se contribuir com a superação das dificuldades do emprego de MER em CFD, especialmente para variáveis que possuem localização não nodal.

Os modelos matemáticos considerados na realização deste estudo são: equações de Poisson e de advecção-difusão com domínio unidimensional e equações de Burgers (SHIH *et al.*, 1989) com domínio bidimensional.

1.2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Atualmente a computação científica desempenha um papel crescente na predição do comportamento de sistemas naturais e artificiais. Muitas vezes, ela é baseada em modelos

matemáticos representados por equações diferenciais. A aplicação de um método numérico, para resolver tais modelos pode ser definida como uma **simulação numérica** (ROY e OBERKAMPF, 2011).

De modo geral, as simulações numéricas em CFD destacam-se pela sua robustez e abrangência. Como exemplos de áreas de aplicação: aerodinâmica de aviões e veículos, engenharia biomédica (escoamento de sangue por artérias e veias), meteorologia (previsão do tempo), entre outras. Entretanto, um dos grandes desafios encontrados diz respeito ao nível de acurácia das soluções numéricas (KARIMI *et. al.*, 2012).

Tipicamente a identificação desse nível de acurácia é realizada exclusivamente pela comparação dos resultados numéricos com dados experimentais. No entanto, essa abordagem não considera os erros inerentes às soluções numéricas. Embora os erros numéricos não possam ser totalmente eliminados, eles devem ser minimizados ou delimitados (KARIMI *et. al.*, 2012).

Para Mariani *et al.* (2002), a credibilidade de uma simulação numérica em CFD está condicionada ao emprego de rigorosos processos de **Verificação e Validação numérica** (V&V). As palavras verificação e validação, em algumas situações cotidianas, são tratadas como sinônimos. No entanto, no presente contexto elas têm significados distintos. **Verificação** é um processo puramente matemático, e se ocupa em avaliar o quão bem um método numérico resolve determinado modelo matemático – avalia a resolução numérica de equações. **Validação**, por sua vez, trata da adequação do modelo matemático em reproduzir a realidade – avalia se as equações descrevem corretamente o fenômeno físico estudado (ROY, 2005).

Em CFD, V&V dedica-se à avaliação da acurácia de simulações numéricas. Para V&V o objetivo final é a Validação, entretanto ela deve ser precedida pela Verificação. A Verificação é constituída pelos processos de verificação do código computacional adotado, e de verificação da solução numérica obtida (ASME, 2009).

A verificação do código computacional pode ser realizada pela comparação dos resultados obtidos com a solução analítica do modelo matemático, com soluções de referência (*benchmarks*, disponíveis na literatura), ou com o emprego do método das soluções fabricadas (ROACHE, 1998). Uma vez que a confiança do código é verificada, a acurácia das soluções numéricas deve ser investigada (ROY e BLOTTNER, 2006).

A verificação da solução numérica tem como objeto de estudo o erro numérico e suas fontes. Os trabalhos de Roache (1998), Marchi e Silva (2002) e Roy (2005) tratam do erro de soluções numéricas, e denominam o processo que o quantifica de **Verificação Numérica**.

No âmbito da Verificação Numérica em CFD, quando a solução analítica para determinada variável de interesse é desconhecida, ela pode ser estimada considerando-se as soluções numéricas obtidas em duas ou mais malhas (domínio de cálculo discretizado) (ROY e OBERKAMPF, 2011). Uma maneira de se obter essa estimativa é com o emprego de **métodos de extrapolação**.

De acordo com Brezinski e Zaglia (2002), estimar o erro numérico para uma sequência convergente é equivalente a acelerar a sua convergência. E em se tratando do erro de discretização (Eh) de uma solução numérica, ‘acelerar a convergência’ resume-se em aumentar a sua **ordem de acurácia** (p_A). O valor de p_A teórica para Eh pode ser encontrado a partir de uma análise sobre as ordens do erro de truncamento das equações diferenciais discretizadas (análise *a priori*). Entretanto, se estiverem disponíveis as soluções numéricas em malhas distintas, p_A pode ser estimada (ROY e BLOTTNER, 2006).

Muitas vezes p_A é tratada na literatura, apenas, por ordem do erro ou **ordem da solução numérica** e as discussões sobre os resultados obtidos são baseadas nessa ordem. Falcão *et al.* (2006) e Matheou *et al.* (2008) são exemplos dessa abordagem. Simonsen e Stern (2003) destacam, ainda, **a importância de se monitorar p_A durante um processo de refinamento de malha**. “Um comportamento monotônico e convergente – existência de uma faixa assintótica – inerente ao processo de refinamento de malha, para p_A estimada é essencial para a obtenção de uma ‘boa’ estimativa de erro”, ou seja, para obtenção de uma estimativa de Eh confiável e acurada.

De modo geral, segundo Simonsen e Stern (2003) as técnicas de Verificação Numérica em CFD contam essencialmente com os tópicos: convergência de malha (devido ao processo de refinamento de malha), ordem de acurácia, **extrapolação de Richardson** e comparação com soluções de referência.

A técnica denominada extrapolação de Richardson (**ER**), (em inglês, *Richardson Extrapolation* - **RE**) (Richardson, 1910), foi concebida com o objetivo de aperfeiçoar as aproximações numéricas (aumentar sua ordem de acurácia) envolvidas na resolução de equações diferenciais pelo método de Diferenças Finitas. As necessidades da época, em engenharia, demandavam métodos rápidos, fáceis de serem entendidos e aplicáveis às equações estudadas. Richardson e Gaunt (1927) já consideraram a aplicação de ER de maneira repetida (MER) com dois níveis de extrapolação.

Ainda hoje, a busca por métodos numéricos de alta ordem (p_A elevada) para resolução de equações diferenciais parciais (EDP) é um tema de pesquisa ativo, onde a eficiência computacional é a questão principal. Nesse cenário pode-se citar: Xiu e Hesthaven (2005),

Dumbser *et al.* (2008), Zhang e Shu (2012), Nonomura *et al.* (2012) e Leonenko e Phillips (2012). Em análise numérica, ‘esquemas de alta ordem’ normalmente são elaborados formalmente com base em preceitos teóricos, como é o caso de Wang e Yao (2012). No entanto, resultados semelhantes também podem ser obtidos a partir de esquemas de baixa ordem considerando-se o emprego de métodos de extrapolação, dos quais ER é bastante utilizada. Tecnicamente, tal abordagem não caracteriza a obtenção de um novo esquema numérico. Pelo contrário, é uma **forma de melhorar o desempenho de esquemas já existentes eliminando-se cuidadosamente o termo principal do erro de discretização** (termo de ordem mais baixa) – termo que caracteriza p_A . Quando possível, esse enfoque pode ser um poderoso instrumento para aumentar o valor de p_A sem alterar a complexidade do algoritmo adotado (CHU, 2011).

Em Joyce (1971) é possível identificar a semelhança entre ER e outros métodos de extrapolação existentes. Esse trabalho contempla uma pesquisa sobre o desenvolvimento dos métodos de extrapolação no contexto da análise numérica.

Sidi (2010) traz uma análise sobre a convergência e estabilidade de ER, e enfoca a sua aplicação na aceleração da convergência de uma grande classe de sequências numéricas com diferentes graus de complexidade, incluindo casos divergentes. Afirma, ainda, que a **aplicação de ER nas proximidades de pontos de singularidade pode trazer resultados benéficos**, isto é, pode melhorar a acurácia de soluções numéricas singularmente perturbadas (onde p_A pode sofrer degeneração).

Zlatev *et. al* (2010) e Faragó *et al.* (2013) consideram a aplicação de ER para melhorar a acurácia de soluções numéricas, obtidas por métodos de passos múltiplos (métodos θ e de Runge–Kutta), em sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDO). Nesse sentido, um método de passos múltiplos é combinado com ER e são analisadas as propriedades relacionadas à estabilidade e eficácia do processo computacional. Tais resultados (aplicação de ER) são testados na resolução de um sistema de EDO não-lineares de primeira ordem, onde a melhoria da acurácia das soluções é verificada e, também, **é obtida uma grande economia de tempo de computação** para se atingir determinado nível de acurácia pré-estabelecido. Em perspectiva e resultados semelhantes, Zhang *et al.* (2011) propõe um método de passo variável com base em ER para o cálculo do erro de truncamento local em modelos que envolvem acoplamento de EDO resolvidas paralelamente (computação paralela).

Pomeranz (2011) considera a aplicação de ER com o mesmo objetivo – melhorar a acurácia de soluções numéricas – sobre a resolução da equação de Laplace em dois problemas teste, com soluções analíticas fabricadas. O modelo numérico utilizado consiste do método de

Elementos de Contorno e as variáveis de interesse consideradas são dos tipos primária (variável dependente) e secundária (fluxo normal no contorno). Nesse trabalho, p_A **é utilizada como parâmetro para avaliação da eficácia de ER**, isto é, os valores obtidos para p_A (estimada) devem ser números positivos (reais), e resultados imaginários, negativos, ou ‘muito pequenos’ (em relação aos valores obtidos em pontos ou nós vizinhos) são interpretados como indicadores de que ER não fornecerá resultados acurados e confiáveis. Nos casos em que p_A pode ser obtida *a priori* da solução numérica, essa informação pode ser usada para determinar um valor aceitável para p_A *a posteriori* – indica um valor de corte para o emprego efetivo de ER (onde ER pode ser considerada com sucesso). Ainda, segundo Pomeranz (2011), **“o tempo de computação adicional para a utilização de ER é insignificante em comparação ao tempo necessário para obtenção da solução na malha mais fina (com mais pontos) adotada”**.

Xing e Stern (2010) tratam de aspectos teóricos (baseados em conceitos estatísticos) sobre a aplicação de ER como estimador de Eh . O método proposto é avaliado em 17 problemas envolvendo mecânica de fluidos e transferência de calor. Como principal contribuição propõe-se a **utilização de um fator de segurança envolvendo p_A teórica (obtida *a priori*) e estimada (obtida *a posteriori*), no cálculo de estimativas de Eh** , o que garante um limite de **confiança superior a 95%**. Tal proposta é empregada por Castiglione *et al.* (2011) no processo de V&V de um modelo matemático, através da execução de um código computacional baseado em aproximações numéricas de segunda ordem, em Diferenças Finitas, para simular o escoamento em alto mar ao redor de um navio multicasco. Essa investigação inclui a avaliação dos movimentos do navio, e os efeitos de inclinação, frequência e resistência das ondas. Nesse trabalho, verificou-se (na prática) que Eh realmente representa a principal fonte de erro numérico. A validação do modelo proposto foi alcançada para todas as variáveis de interesse adotadas (campo de velocidades). Segundo os autores, os resultados obtidos demonstram que, no âmbito de CFD, a **metodologia proposta (emprego de ER) é um instrumento válido para a simulação de problemas de escoamentos envolvendo modelos matemáticos complexos**.

No entanto, ainda sobre o trabalho de Xing e Stern (2010), Roache (2011) critica a utilização do fator de segurança proposto (envolvendo o cálculo de p_A teórica e estimada) na obtenção de estimativas de Eh , e afirma que tais estimativas (com base em ER) devem ser realizadas considerando-se o fator de segurança FS . Essa é a perspectiva do estimador GCI (*Grid Convergence Index*), proposto originalmente no trabalho de Roache (1994). Tal argumentação leva em conta a necessidade de convergência de malha, o que requer níveis de

refinamento elevados para obtenção de valores razoáveis para p_A estimada – limite de 5% de diferença entre p_A teórica e estimada (ROACHE, 2011). Nesse enfoque, presume-se que **o valor de p_A estimada não pode ser considerado no cálculo do fator de segurança de uma estimativa de Eh em uma malha qualquer.**

A escolha da magnitude de FS depende da acurácia desejada, e um valor maior pode ser escolhido se um nível mais conservador de confiança é desejado. Na prática recomenda-se o uso de $FS = 3$, de modo geral (KARIMI *et al*, 2012). Entretanto, a única variação admitida como sendo correta por Roache (2011) sobre o valor de FS é: para p_A estimada pertencente a uma faixa assintótica de valores, é possível relaxar esse parâmetro e admitir, no mínimo, $FS = 1,25$, ou ainda, $1,25 \leq FS \leq 3$. O autor enfatiza que **é imprudente e não recomendada a utilização de p_A estimada com valores superiores à p_A teórica**, independentemente do valor de FS adotado, e indica (quando possível) o emprego do valor mínimo entre p_A estimada e p_A teórica no cálculo da estimativa de Eh com o estimador GCI . Contudo, é importante mencionar que o estimador GCI despreza o sinal de Eh e fornece, apenas, uma previsão para o seu valor absoluto (magnitude). Em algumas situações práticas isso pode representar uma limitação para a sua utilização.

Marchi e Silva (2002; 2005) consideram a aplicação de ER para obtenção de estimativas de Eh em domínios uni e multidimensional. Nesses trabalhos verificou-se que, para a situação em que p_A estimada pertence a uma faixa assintótica de valores, com o refinamento de malha, é possível se estimar um intervalo que contém Eh verdadeiro. Com isso, é possível **delimitar a magnitude de Eh em problemas práticos.**

Simonsen e Stern (2003) tratam da V&V de um modelo matemático proposto para simular o escoamento ao redor do casco de um navio petroleiro, considerando a interação de forças hidrodinâmicas e manobras simples (determinação de forças durante movimentos prescritos por hélice, leme e casco em função da velocidade e aceleração). Nesse trabalho, ER é considerada para estimar Eh resultante em todo domínio de cálculo. Como conclusão, com base nos resultados obtidos (V&V), os autores afirmam que o método proposto apresenta nível de concordância condizente com o problema real. Entretanto, destacam que esse nível de concordância é reduzido em algumas regiões da malha e sugerem, como trabalho futuro, o refinamento da malha nessas regiões, ou seja, tal efeito pode estar relacionado com a magnitude de Eh local. Porém, nesse trabalho ER não foi empregada na redução de Eh , o que poderia representar uma alternativa viável para solucionar a imprecisão identificada.

Wang e Zhang (2009) e Wang *et al.* (2011) consideram a aplicação de ER, com o objetivo de reduzir Eh , na resolução numérica da equação de Poisson em domínio

bidimensional. Como resultado, obtêm uma solução numérica de sexta ordem de acurácia a partir da solução obtida pelo esquema compacto de quarta ordem proposto por Zhang (2002), em Diferenças Finitas. Segundo os autores, um esquema compacto de sexta ordem explícito pode ser impossível de ser desenvolvido em uma única malha, e afirmam que essa **metodologia envolvendo ER (e duas malhas) requer baixo custo computacional**. Sugerem, ainda, a extensão do trabalho para as equações de Poisson e de advecção-difusão em domínio tridimensional. Nessa perspectiva, Ma e Ge (2010) e Wang e Zhang (2010) aplicam ER na resolução da equação de advecção-difusão em domínio tridimensional e obtêm resultados semelhantes, isto é, soluções numéricas de sexta ordem a partir de soluções numéricas de quarta ordem. Contudo, nesses trabalhos ER não é empregada como estimador de Eh .

Rahul e Bhattacharyya (2006) analisam a p_A de soluções resultantes de aproximações numéricas unilaterais, em Diferenças Finitas, empregadas quando as condições de contorno envolvem o cálculo de derivadas. Para elevação dessa ordem, aplicam ER duas vezes, isto é, consideram **MER com três malha distintas e dois níveis de extrapolação**. Dessa forma, passam pelas ordens: dois, três e atingem a ordem quatro. Esse resultado é comparado com um esquema de quarta ordem, que envolve cinco pontos da malha, na resolução numérica de um problema de condução de calor em domínio bidimensional. Para o caso considerado, ambas as soluções têm comportamento semelhante, ou seja, resultam em mesmo valor de p_A . Entretanto, a aproximação proposta (com o emprego de MER) envolve um número menor de pontos da malha e, conseqüentemente, acarreta em um melhor condicionamento para a matriz de coeficientes do sistema de equações algébricas (gerado pelo processo de discretização).

Ashraf *et al.* (2011) realizam um estudo numérico sobre os efeitos da variação do número de Reynolds (Re) (baseado na velocidade de injeção) em um problema de escoamento laminar bidimensional, em regime permanente, de fluido incompressível em um canal com parede porosa. O modelo numérico envolve a aplicação de aproximações de segunda ordem de acurácia em Diferenças Finitas. Nesse trabalho ER é considerada a partir de soluções numéricas obtidas em três malhas distintas, isto é, considera-se a aplicação de **MER com dois níveis de extrapolação**. Segundo os autores "o uso de dois níveis de extrapolação melhora significativamente a acurácia dos resultados", e são apresentados os resultados numéricos para os três níveis de malha e com MER. No entanto, p_A não é calculada *a posteriori* da solução numérica, ou seja, não é identificada a ordem de acurácia (prática ou real) dos resultados numéricos obtidos. Além disso, nesse trabalho, ER não é utilizada para estimar Eh .

Zlatev *et al.* (2011) consideram a combinação de ER com o esquema Crank-Nicolson na resolução da equação de advecção, nas variáveis x (espaço) e t (tempo). O objetivo proposto é o aumento de p_A . Segundo os autores, "esperava-se que a combinação de ER e Crank-Nicolson resultasse em um método de terceira ordem, mas esse não foi o resultado obtido". No entanto, sabe-se (da literatura disponível) que a **aplicação de ER com um nível de extrapolação proporciona a obtenção da segunda ordem verdadeira de Eh** e, não necessariamente eleva em uma unidade o valor de p_A . Nesse trabalho, para a aplicação de ER, são considerados dois níveis de malha – fina e grossa. E, **para obtenção do mesmo número de pontos em ambas as malhas considerou-se o emprego de interpolação polinomial envolvendo dois casos: interpolação linear e cúbica**. Com a utilização de interpolação linear e ER obtém-se p_A com valor dois, já com o uso de interpolação cúbica e ER obtém-se p_A com valor quatro. Esses resultados podem ser atribuídos à ordem do erro do método de interpolação adotado – a interpolação linear possui um erro de ordem limitada inferiormente pelo valor dois, e a interpolação cúbica possui um erro de ordem limitada inferiormente pelo valor quatro. Nesse caso, **a ordem resultante depende da combinação de ER, Crank-Nicolson e também é afetada pela ordem do polinômio interpolador empregado**.

Prange *et al.* (2011) consideram a abordagem em Diferenças Finitas, com aproximações numéricas de segunda ordem no domínio espacial e de primeira ordem no domínio temporal, na resolução de um problema de escoamento em meio poroso. Nesse trabalho ER é considerada como estimador e, também, para reduzir Eh . Segundo os autores, o **tempo de simulação foi significativamente reduzido com uso de ER**, atingindo níveis de um segundo, em comparação com mil segundos necessários para obter a mesma acurácia nas soluções, sem o uso de ER, o que evidencia a sua eficácia para o problema estudado.

Mukherjee e Natesan (2011) propõem a utilização de uma técnica de pós-processamento, baseada em ER, em um problema advectivo-difusivo singularmente perturbado – utilização de um parâmetro ε tendendo a zero – em regime transiente. Com a **ocorrência de singularidade**, os métodos numéricos clássicos (Diferenças Finitas ou Volumes Finitos), aplicados com malhas uniformes, normalmente resultam em soluções numéricas inacuradas (baixa ordem de acurácia). Essa deficiência tem motivado o desenvolvimento de métodos numéricos que busquem garantir uma convergência uniforme em todo domínio de cálculo. Nessa perspectiva, o emprego de ER é considerado a partir de aproximações numéricas de primeira ordem. Ao final, são obtidas soluções numéricas de segunda ordem com suas respectivas estimativas de Eh .

Também com esse enfoque, Feng e Li (2010) consideram ER para obtenção de um esquema de segunda ordem de acurácia, em Diferenças Finitas, na resolução da equação de Poisson com coeficientes descontínuos em domínio bidimensional. Segundo os autores existem poucos métodos de alta ordem, disponíveis na literatura, tais como os métodos de fronteira imersa para resolução desse tipo de problema. Apesar de a dedução de esquemas consistentes em problemas de *interface* (fronteira imersa) ser relativamente simples, a verificação de sua estabilidade não é uma tarefa fácil. Além disso, a aplicação desses métodos torna-se complexa devido à alteração dos coeficientes das aproximações numéricas e por não resultarem em matrizes positivo definidas. Nesse sentido, os autores propõem a aplicação de aproximações de primeira ordem, convergentes (estáveis e consistentes) (ocorrência de matriz positivo definida), e então aplicam ER para obtenção de soluções numéricas de segunda ordem de acurácia. A confirmação da obtenção de segunda ordem é feita através do cálculo de p_A a posteriori da solução numérica. No entanto, os autores consideram a aplicação de ER, novamente, sobre os resultados obtidos (segunda ordem) e afirmam que: “o erro torna-se menor do que o obtido com apenas um nível de extrapolação, porém a ordem continua a ser a mesma (de segunda ordem)”. **Tal efeito pode estar relacionado com a localização da descontinuidade analisada, em malhas distintas, ou seja, tal localização pode ser alterada devido, apenas, ao processo de refinamento de malha (variável com coordenada móvel, com a malha). Com isso, ER perde o seu efeito teórico sobre o aumento de p_A .**

Ertuk *et al.* (2005) utilizam MER na resolução numérica do escoamento permanente bidimensional de fluido incompressível em uma cavidade com tampa móvel (na formulação função corrente \times vorticidade), para números de Reynolds (Re) de até $Re = 21.000$. Nesse trabalho considerou-se o emprego de **MER a partir das soluções numéricas disponíveis em três malhas distintas** (dois níveis de extrapolação). Com isso, a ordem de acurácia obtida passou de segunda para sexta ordem. As soluções numéricas encontradas concordam com os resultados de referência disponíveis na literatura; entretanto, não são apresentadas estimativas de Er considerando-se ER.

Em Análise Numérica o emprego (teórico) de MER, considerando vários níveis de extrapolação, pode ser encontrado em livros-texto e em artigos científicos, como: Burden e Faires (2008) e Christiansen e Petersen (1989). Por outro lado, um exemplo prático do emprego de MER (com diversos níveis) é detalhado em Chang *et al.* (2011), na área de finanças, para a predição de opções do mercado financeiro americano onde, segundo os autores, o desempenho de MER superou os resultados disponíveis na literatura envolvendo a

aplicação de métodos estocásticos. No entanto, em CFD não é comum se encontrar a utilização de MER com mais do que dois ou três níveis de extrapolação.

Em Marchi *et al.* (2013), verifica-se a **eficácia de MER**, para reduzir o erro de discretização em malhas triangulares e quadrangulares, na resolução numérica (por volumes finitos) da equação de Laplace em domínio bidimensional. A metodologia empregada envolve diversas variáveis, duas geometrias de cálculo, e até **onze níveis de extrapolação**. Dessa forma, verificou-se que MER é eficaz na redução do erro de discretização do problema investigado, entretanto, constatou-se que a redução do erro numérico (com MER) depende, entre outros fatores, da variável de interesse e da geometria de cálculo. Segundo os autores, embora o erro numérico tenha sido reduzido, o **comportamento teórico de MER não foi alcançado para todas as variáveis** – particularmente em variáveis localizadas nos contornos do domínio de cálculo ao se considerar uma geometria triangular. Segundo os autores, a razão pela qual MER não é eficaz para este tipo de variável de interesse, no segundo tipo de geometria empregado, ainda não está clara e requer estudos complementares, que estão em andamento.

Nesse contexto, dentre as dificuldades sobre o emprego de MER relatadas na literatura, Burg e Erwin (2009) destacam: a vulnerabilidade a efeitos de dispersão causados pela **localização** de características físicas, que pode **variar com o refinamento de malha**; a execução indevida de um algoritmo de forma que p_A teórica não seja alcançada; e o refinamento de malha resultando em uma sequência de malhas que não sejam geometricamente semelhantes (razão de refino variável). Segundo os autores, uma falha de MER pode ser erroneamente justificada pelo fato de ‘não se estar na faixa assintótica para p_A ’, quando, na verdade, a falha pode estar relacionada às causas mencionadas anteriormente. Esse equívoco de interpretação pode ser evitado ao se considerar o monitoramento de p_A estimada – identificação de comportamento monotônico e convergente para as ordens *a posteriori* da solução numérica (ordens efetiva e/ou aparente). Desse modo pode-se, também, identificar o alcance de p_A teórica.

Das dificuldades apontadas por Burg e Erwin (2009), para se garantir um bom desempenho de MER é recomendável se considerar: razão de refino constante, e análise de p_A *a priori* (teórica) (quando possível) e *a posteriori* (estimativa numérica). Quanto aos efeitos de dispersão, as oscilações em simulações numéricas podem ser inerentes às soluções analíticas com descontinuidades. E essas descontinuidades podem ser afetadas pela resolução da malha, devido à sua localização (situação encontrada por Feng e Li (2010)). Sobre essa variação de posição com a resolução da malha, como exemplo: numericamente a localização

de uma onda de choque pode mudar devido, exclusivamente, à malha adotada. Percebe-se que essa dificuldade tem semelhança à encontrada por Marchi *et al.* (2009) em variáveis com valores extremos, ou seja, o ponto extremo para determinada variável de interesse pode apresentar mudança de coordenada com o processo de refinamento de malha. Esse efeito caracteriza o que se denomina, neste trabalho, de **variável com coordenada móvel**.

Essa questão (variável com coordenada móvel) é mencionada, também, por Nicolas *et al.* (2011) ao empregar ER na obtenção de solução numérica de referência (*benchmark*) em um problema de escoamento tridimensional envolvendo convecção-mista sobre um canal retangular horizontal aquecido inferiormente – escoamento termo-convectivo, cujo modelo matemático é baseado nas equações de Navier-Stokes, de conservação da massa e da energia. Nesse trabalho, os métodos numéricos adotados foram: Diferenças Finitas e Volumes Finitos, e a acurácia dos resultados é elevada mediante o emprego de ER. Entretanto, sua eficácia é reduzida nas proximidades do contorno inferior. Nesse contorno detectou-se uma descontinuidade no funcional que descreve o gradiente de temperatura. Sobre esse fenômeno, contudo, os autores questionam se todo tipo de singularidade pode afetar o desempenho de ER e citam como exemplo: “**o que ocorre com ER em outras variáveis tais como extremos locais?**”.

De modo geral, com relação às dificuldades mencionadas sobre o **emprego de MER em variável com coordenada móvel** (com a resolução da malha) – dentre as quais está a localização de pontos extremos – não foram encontradas, na bibliografia atualmente disponível, pesquisas sobre alternativas que busquem contorná-las. Tais estudos são úteis no contexto de Verificação e Validação em CFD para obtenção de solução numérica com ordem elevada mesmo nos casos em que não se conhece *a priori* a localização exata da variável de interesse – caso em que, comprovadamente, MER perde o seu efeito teórico sobre a elevação da p_A e redução de Eh .

1.3 OBJETIVOS

O objetivo geral deste trabalho é contribuir com a superação das dificuldades do emprego de MER em CFD, especialmente para variáveis que não possuem localização nodal.

Os objetivos específicos consistem em:

- investigar o desempenho de MER em variáveis que possuem diferentes características com relação à sua localização coordenada, em malhas distintas;

- estabelecer a metodologia adequada, para o emprego de MER, em cada tipo de variável identificada;
- apresentar uma expressão confiável e acurada para se estimar o valor do erro de discretização obtido com a aplicação de MER, em cada caso.

1.4 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO

A continuidade do presente texto está organizada da seguinte forma: no capítulo 2 são tratados conceitos e aspectos teóricos sobre erros numéricos, ER e MER, bem como são abordados os métodos numéricos utilizados; no capítulo 3 é apresentada a metodologia proposta para o emprego de MER em cinco tipos de variáveis classificadas de acordo com a sua localização em malhas distintas; no capítulo 4 são propostos estimadores para Eh e Em , com base em MER; no capítulo 5 são apresentados detalhes sobre os problemas-teste adotados, isto é, são apresentados os modelos matemáticos e numéricos empregados com o objetivo de se testar a metodologia proposta; o capítulo 6 traz os resultados obtidos e no capítulo 7 são tratadas as conclusões, contribuições e as sugestões de trabalhos futuros.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo são tratados alguns fundamentos que constituem a base teórica do presente trabalho. Primeiramente são abordados conceitos e definições sobre erros numéricos e suas fontes. Em seguida são tratados aspectos envolvendo os tópicos: métodos de discretização; resolução de sistemas de equações; interpolação polinomial; métodos de otimização; Extrapolação de Richardson (ER) e Multiextrapolação de Richardson (MER). A abordagem considerada está focada no problema definido na seção 1.1.

2.1 ERRO NUMÉRICO

Segundo Ferziger e Peric (2002), o erro numérico é definido como a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ), ou seja,

$$E(\phi) = \Phi - \phi. \quad (2.1)$$

O erro numérico é causado por diversas fontes, que são (MARCHI, 2001): erros de truncamento (E_T), erros de iteração (E_I), erros de arredondamento (E_π) e erros de programação (E_{pr}). Simbolicamente, tem-se:

$$E(\phi) = E(E_T, E_I, E_\pi, E_{pr}). \quad (2.2)$$

Cada uma dessas quatro fontes de erro é explicada a seguir, separadamente.

2.1.1 Erro de Truncamento

O erro que ocorre ao se truncar um processo infinito é chamado erro de truncamento (E_T), ou seja, é proveniente do fato de se aproximar um modelo matemático contínuo, com informação em um conjunto infinito, por um modelo numérico discreto com informação em um conjunto finito (ROACHE, 1998).

Segundo Tannehill *et al.* (1997) e Ferziger e Peric (2002) o erro de truncamento de uma equação diferencial é o resíduo obtido quando se substitui a solução analítica exata de uma variável dependente na equação discretizada, que é resultante da aplicação de um método

numérico sobre a equação diferencial. Tal fonte de erro é igual ao oposto do valor correspondente ao operador numérico aplicado à solução analítica da variável dependente.

Ao se considerar a divisão de um domínio contínuo em pontos com espaçamento h , o erro de truncamento de uma equação diferencial ou de uma aproximação numérica qualquer pode ser representado genericamente por (FERZIGER e PERIC, 2002):

$$E_T = C_0 h^{p_0} + C_1 h^{p_1} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots, \quad (2.3)$$

onde os coeficientes reais $C_0, C_1, C_2, C_3, \dots$ podem ser positivos ou negativos e podem ser função da variável dependente e de suas derivadas, mas independem de h . Por definição, as ordens verdadeiras (p_v), são os expoentes de h dos termos não-nulos na Eq. (2.3) e são números reais que seguem a relação: $1 \leq p_0 < p_1 < p_2 < p_3, \dots$. Geralmente, p_v constitui uma progressão aritmética. O menor expoente de h (p_0), é chamado ordem assintótica.

Quando $h \rightarrow 0$, o E_T é dominado pela primeira parcela da Eq. (2.3), isto é, $C_0 h^{p_0}$ torna-se a principal componente de E_T , com a diminuição de h . Nesse caso, ao se considerar o gráfico bilogarítmico de E_T versus h , a sua inclinação em relação ao eixo das abscissas tende ao valor de p_0 (com a diminuição de h). Quanto maior for esse valor, maior será a taxa de redução de E_T com a diminuição de h .

Neste trabalho, o parâmetro h está relacionado à subdivisão de um domínio contínuo em N 'partes', elementos ou volumes de mesmo tamanho. A esse processo denomina-se discretização (uniforme) do domínio de cálculo, ou seja, da determinação, ao longo do domínio, sobre quais pontos (igualmente espaçados) se deseja conhecer a variável dependente. Ou ainda, h corresponde ao espaçamento entre esses pontos (ou nós). Aqui, essa consideração é estendida aos métodos: Diferenças Finitas e Volumes Finitos em domínios uni e bidimensional.

2.1.2 Erro de Iteração

De modo geral, o erro de iteração (E_I) tem como causas: o emprego de métodos iterativos para resolução do sistema de equações algébricas resultantes do processo de discretização; a resolução de problemas não lineares em que a matriz dos coeficientes é função da variável dependente do problema; e o tratamento de modelos matemáticos constituídos por mais de uma equação, sendo cada uma resolvida separadamente. Como

exemplo: com a aplicação de determinado método numérico sobre um modelo matemático obtém-se um sistema de equações algébricas; ao se considerar a resolução desse sistema com o emprego de métodos iterativos, tem-se uma das causas de E_I . De acordo com Ferziger e Peric (2002), neste caso, considerando-se a solução numérica (ϕ) para determinada variável de interesse, E_I é definido pela diferença entre a solução exata (ϕ_{ex}), para o sistema de equações algébricas, e a solução numérica em uma dada iteração I ($\phi^{(I)}$). Admitindo-se que a solução exata do sistema seja única, tem-se:

$$E_I = \phi_{ex} - \phi^{(I)}. \quad (2.4)$$

Usualmente os efeitos de E_I , em simulações numéricas, são controlados pelo aumento do número de iterações, isto é, para $I \rightarrow \infty$ obtém-se $E_I \rightarrow 0$. Um detalhamento sobre o controle e estimativa desse tipo de erro, em CFD, é apresentado em Martins e Marchi (2008).

2.1.3 Erro de Arredondamento

Os erros de arredondamento (E_π) ocorrem principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações. Eles dependem do compilador (*software*) usado para gerar o código computacional e do computador (*hardware*) empregado em sua execução. Quanto maior é a precisão utilizada para representar as variáveis, menores são os E_π ; entretanto, maior é a memória computacional necessária para o armazenamento dessas variáveis (MARCHI, 2001). De modo geral, a magnitude de E_π tende a crescer com o aumento do número de operações matemáticas realizadas, através do processo de propagação de erros.

2.1.4 Erro de Programação

Muitos erros podem ocorrer durante o desenvolvimento de um programa computacional. Esses erros podem ser ocasionados por um mau entendimento dos elementos da linguagem utilizada ou até mesmo por descuido. Na categoria de erros de programação (E_{pr}) incluem-se basicamente (ROACHE, 1998): os erros resultantes do uso incorreto de um modelo numérico na aproximação de um modelo matemático; os erros gerados na implementação do modelo numérico em um programa computacional; os erros cometidos no uso do programa computacional durante a obtenção da solução numérica; e qualquer outra

eventual fonte de erro, como por exemplo: usar uma solução analítica com precisão inferior à da solução numérica.

Uma maneira de se evitar esse tipo de erro é efetuar testes para detectar erros no programa. As obras de Maliska (2004) e Roache (1998) são exemplos de trabalhos que apresentam procedimentos para se detectar E_{Pr} , dentre eles: implementar um programa específico, para depois generalizá-lo; implementar o programa em módulos; a partir de uma malha pequena, verificar se a solução converge, isto é, se E_I atinge o nível do erro de máquina ou do erro de arredondamento; e resolver um problema ‘fabricado’ (com solução analítica conhecida) para verificar se com $h \rightarrow 0$ as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) (detalhadas na próxima subseção) tendem à p_0 .

2.1.5 Erro de Discretização

Quando as demais fontes de erro são minimizadas ou inexistentes, o erro de truncamento passa a ser denominado erro de discretização (FERZIGER e PERIC, 2002), e é representado aqui por Eh . Neste contexto, Eh corresponde ao erro de discretização associado a ϕ na malha uniforme com um espaçamento h sobre o domínio real Ω , ou apenas referenciada como malha Ω^h .

Neste trabalho as simulações numéricas são realizadas em precisão quádrupla, após a verificação dos códigos computacionais com base nos testes de coerência estabelecidos no protocolo de Marchi (2007), minimizando-se assim os efeitos de E_{Pr} e E_{π} . Por sua vez, E_I é controlado considerando-se o emprego de métodos *multigrid* (BRIGGS *et al.*, 2000) associados a um grande número de iterações (até que se atinja o erro de máquina) e o monitoramento de um parâmetro de controle baseado no resíduo das equações algébricas (conforme será detalhado na seção 2.3).

Consta na literatura sobre Verificação e Validação numérica (V&V) em CFD que Eh representa a principal fonte de erro numérico (ROY e OBERKAMPF, 2011). Nesta proposta, Eh representa o objeto de estudo e, por analogia à forma geral de E_T , considera-se:

$$Eh = c_0 h^{p_0} + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \dots, \quad (2.5)$$

onde os coeficientes c_j , com $j = 0, 1, 2, 3, \dots$, e os expoentes $p_V = \{p_0, p_1, p_2, p_3, \dots\}$ (ordens verdadeiras) seguem as definições apresentadas anteriormente (na Eq. (2.3)).

Segundo Szabó e Babuska (1991), Eh pode ser estimado *a priori* ou *a posteriori* da obtenção da solução numérica. As estimativas *a priori* consistem, basicamente, na estimativa da ordem de acurácia (p_A). Isto é feito considerando-se a definição de E_T e o emprego da série de Taylor (KREYSZIG, 1999). Com base nesse enfoque, admite-se que Eh tenha a mesma forma funcional quando $h \rightarrow 0$ (MARCHI, 2001) e considera-se uma perspectiva monocoefficiente, ou seja,

$$Eh = c h^{p_A}, \quad (2.6)$$

onde c é um coeficiente admitido ser constante e p_A corresponde, basicamente, ao valor de p_0 . Com a obtenção de p_A é possível avaliar, *a priori*, o efeito da redução de h sobre Eh . Por exemplo, ao se admitir os erros de discretização Eh_1 e Eh_2 associados a ϕ nas malhas Ω^{h_1} e Ω^{h_2} , grossa e fina, respectivamente, tem-se:

$$\frac{Eh_1}{Eh_2} = \frac{c h_1^{p_A}}{c h_2^{p_A}} = \left(\frac{h_1}{h_2} \right)^{p_A} = r^{p_A}, \quad (2.7)$$

onde $r = h_1/h_2$ representa a razão de refino de malha. Nessa perspectiva, r^{p_A} indica o fator de redução de Eh , com o refinamento de malha.

Por outro lado, segundo Marchi (2001) as estimativas de Eh *a posteriori* são usadas para estimar efetivamente a sua magnitude. Neste trabalho, essas estimativas são realizadas com base em soluções numéricas obtidas em duas ou mais malhas distintas, e considerando-se o emprego da ER (conforme detalhado na Seção 2.4).

A análise de p_A *a posteriori* da solução numérica é baseada no cálculo das ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U), em que p_E é definida como a inclinação local do gráfico bilogarítmico de $Eh \times h$. De maneira semelhante, p_U é definida como a inclinação local do gráfico bilogarítmico da estimativa de Eh , denotada por Uh (em inglês, *uncertainty*) versus h , ou seja, $Uh \times h$. As expressões para o cálculo de p_E e p_U são apresentadas na sequência (MARCHI, 2001):

$$p_E = \frac{\log\left[\frac{Eh_1}{Eh_2}\right]}{\log(r)} = \frac{\log\left[\frac{\Phi - \phi_1}{\Phi - \phi_2}\right]}{\log(r)}, \quad (2.8)$$

$$p_U = \frac{\log\left[\frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_3 - \phi_2}\right]}{\log(r)}, \quad (2.9)$$

onde ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 correspondem, respectivamente, às soluções numéricas obtidas nas malhas Ω^{h_1} (grossa), Ω^{h_2} (fina) e Ω^{h_3} (superfina); com $r = h_1/h_2 = h_2/h_3$ (razão de refino constante).

Nos casos em que não se conhecem a solução analítica (Φ) e a ordem assintótica (p_0) é possível se considerar a análise de p_A com base no cálculo de p_U .

2.2 MÉTODOS DE DISCRETIZAÇÃO

Ao se considerar a abordagem numérica para solucionar um dado modelo matemático constituído por equações diferenciais é necessário, inicialmente, se expressar de forma adequada o domínio de cálculo, ou seja, determinar em quais pontos (malha) as soluções numéricas serão obtidas (FORTUNA, 2000). As Figs. 2.1 e 5.4 são exemplos dessa representação, e constituem as malhas adotadas nos problemas-modelo considerados nesta tese.

Após a discretização do domínio de cálculo (geração da malha), um método numérico tem como tarefa resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvem a função incógnita (MARCHI, 2001). Esse processo é denominado discretização das equações. Na sequência são apresentados, resumidamente, os métodos de discretização adotados.

2.2.1 Método de Diferenças Finitas

O princípio fundamental do Método de Diferenças Finitas (MDF) é aproximar através de expressões algébricas cada termo do modelo matemático para cada ponto ou nó da malha (FERZIGER e PERIC, 2002). Para isso, considera-se a substituição das derivadas por aproximações em termos dos valores nodais das funções. O resultado é uma equação

algébrica por nó (ponto) da malha, em que o valor de cada variável nodal e de um determinado número de vizinhos aparecem como incógnitas.

Para obtenção das aproximações para as derivadas são consideradas expansões em séries de Taylor. Nesta proposta, no caso 1 (Poisson 1D, seção 5.1.1) considera-se a aproximação do tipo CDS (*Central Differencing Scheme*) (BURDEN e FAIRES, 2008), com $p_A = 2$ (CDS-2), e com $p_A = 4$ através do esquema compacto de quarta ordem proposto por Pulino e Torres (2006) (cujos detalhes são apresentados na seção 5.2.1).

Como exemplo: para as variáveis dependente T (temperatura) e independente x (coordenada espacial) a aproximação por CDS-2 para a derivada de segunda ordem é dada por

$$\left(\frac{d^2T}{dx^2}\right)_i \approx (T''_{CDS-2})_i = \frac{T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}}{h^2}, \quad (2.10)$$

onde o subscrito i representa a avaliação sobre o nó i (ou ponto i) da malha, com coordenada x_i , h é o espaçamento (uniforme) entre dois nós vizinhos, conforme ilustrado na Fig. 2.1, e $T_i = T(x_i)$ indica o valor obtido para a variável T no ponto i .

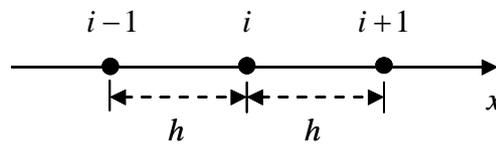


Figura 2.1: Representação do ponto i sobre a malha unidimensional.

A expressão para o erro cometido no processo de discretização em $\phi = (T''_{CDS-2})_i$, pode ser obtida considerando-se a expansão da série de Taylor, para os pontos $i-1$ e $i+1$ (Fig. 2.1), avaliada sobre o ponto i , ou seja,

$$T_{i-1} = T_i - \left(\frac{dT}{dx}\right)_i h + \left(\frac{d^2T}{dx^2}\right)_i \frac{h^2}{2} - \left(\frac{d^3T}{dx^3}\right)_i \frac{h^3}{6} + \left(\frac{d^4T}{dx^4}\right)_i \frac{h^4}{24} - \left(\frac{d^5T}{dx^5}\right)_i \frac{h^5}{120} + \dots, \quad (2.11)$$

$$T_{i+1} = T_i + \left(\frac{dT}{dx}\right)_i h + \left(\frac{d^2T}{dx^2}\right)_i \frac{h^2}{2} + \left(\frac{d^3T}{dx^3}\right)_i \frac{h^3}{6} + \left(\frac{d^4T}{dx^4}\right)_i \frac{h^4}{24} + \left(\frac{d^5T}{dx^5}\right)_i \frac{h^5}{120} + \dots \quad (2.12)$$

Então, utilizando-se as Eqs. (2.11) e (2.12) para obter uma expressão para aproximar $\frac{d^2T}{dx^2}$ e comparando-a com a Eq. (2.10), obtém-se

$$Eh(T''_{CDS-2})_i = -\left(\frac{d^4T}{dx^4}\right)_i \frac{h^2}{12} - \left(\frac{d^6T}{dx^6}\right)_i \frac{h^4}{360} - \left(\frac{d^8T}{dx^8}\right)_i \frac{h^6}{20160} - \dots \quad (2.13)$$

e, de acordo com as definições apresentadas anteriormente, tem-se:

$$c_0 = -\frac{1}{12} \left(\frac{d^4T}{dx^4}\right)_i, c_1 = -\frac{1}{360} \left(\frac{d^6T}{dx^6}\right)_i, c_2 = -\frac{1}{20160} \left(\frac{d^8T}{dx^8}\right)_i, \dots, \text{ e } p_V = 2, 4, 6, \dots \quad (2.14)$$

Analogamente, a aproximação por CDS-4 para a derivada de segunda ordem é dada por

$$\left(\frac{d^2T}{dx^2}\right)_i \approx (T''_{CDS-4})_i = \frac{16T_{i-1} + 16T_{i+1} - T_{i-2} - T_{i+2} - 30T_i}{12h^2}. \quad (2.15)$$

E a expressão para o erro cometido no processo de discretização em $\phi = (T''_{CDS-4})_i$, torna-se

$$Eh(T''_{CDS-4})_i = \left(\frac{d^6T}{dx^6}\right)_i \frac{h^4}{90} + \left(\frac{d^8T}{dx^8}\right)_i \frac{h^6}{1008} + \left(\frac{d^{10}T}{dx^{10}}\right)_i \frac{h^8}{21600} + \dots \quad (2.16)$$

onde, de acordo com as definições apresentadas anteriormente, se tem

$$c_0 = \frac{1}{90} \left(\frac{d^6T}{dx^6}\right)_i, c_1 = \frac{1}{1008} \left(\frac{d^8T}{dx^8}\right)_i, c_2 = \frac{1}{21600} \left(\frac{d^{10}T}{dx^{10}}\right)_i, \dots, \text{ e } p_V = 4, 6, 8, \dots \quad (2.17)$$

Os valores $p_V = 4, 6, 8, \dots$ também podem ser obtidos considerando-se o emprego de um esquema compacto de alta ordem, conforme descrito na seção 5.2.1 (Poisson 1D).

2.2.2 Método de Volumes Finitos

A característica básica do Método de Volumes Finitos (MVF) é a integração das equações diferenciais (modelo matemático), na forma conservativa, sobre um volume de controle elementar qualquer (MALISKA, 2004). A representação unidimensional do volume de controle genérico P é dada na Fig. 2.2, e o enfoque bidimensional é abordado na resolução do caso 3 (Burgers 2D, seção 5.3.3), sendo representado na Fig. 5.4.

Nesse método, as variáveis de interesse são armazenadas no centro geométrico do volume de controle (centroide) e, para a discretização do modelo matemático são necessárias expressões algébricas envolvendo a variável dependente e/ou suas derivadas, avaliadas nas faces dos volumes de controle. Essas expressões são chamadas funções de interpolação. Em geral, essas funções têm o objetivo de avaliar uma propriedade (genérica) na interface do volume de controle bem como suas derivadas. Normalmente, para a avaliação das derivadas é suficiente o uso de um esquema de diferenças centrais, e na avaliação da variável é empregado algum mecanismo que considere os efeitos advectivos do problema (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Como exemplo: para as variáveis dependente T e independente x a aproximação por CDS-2 para a derivada de primeira ordem na face (e), situada entre os volumes de controle com centroides P e E (pontos nodais) (Fig. 2.2), é dada por:

$$\left(\frac{dT}{dx}\right)_e \approx (T'_{CDS-2})_e = \frac{T_E - T_P}{h}, \quad (2.18)$$

em que o índice subscrito e representa a avaliação sobre a face e (Fig. 2.2).

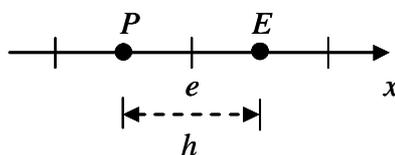


Figura 2.2: Representação da face e entre os volumes P e E sobre a malha unidimensional (face e centrada entre os pontos nodais).

A expressão para o erro cometido no processo de discretização em $\phi = (T'_{CDS-2})_e$ pode ser obtida considerando-se a expansão da série de Taylor, para os pontos P e E , avaliada sobre a face e , ou seja,

$$\begin{aligned}
T_P = T_e - \left(\frac{dT}{dx}\right)_e \frac{h}{2} + \left(\frac{d^2T}{dx^2}\right)_e \frac{h^2}{8} - \left(\frac{d^3T}{dx^3}\right)_e \frac{h^3}{48} + \left(\frac{d^4T}{dx^4}\right)_e \frac{h^4}{384} - \left(\frac{d^5T}{dx^5}\right)_e \frac{h^5}{3840} + \\
+ \left(\frac{d^6T}{dx^6}\right)_e \frac{h^6}{46080} - \left(\frac{d^7T}{dx^7}\right)_e \frac{h^7}{645120} + \dots,
\end{aligned} \tag{2.19}$$

$$\begin{aligned}
T_E = T_e + \left(\frac{dT}{dx}\right)_e \frac{h}{2} + \left(\frac{d^2T}{dx^2}\right)_e \frac{h^2}{8} + \left(\frac{d^3T}{dx^3}\right)_e \frac{h^3}{48} + \left(\frac{d^4T}{dx^4}\right)_e \frac{h^4}{384} + \left(\frac{d^5T}{dx^5}\right)_e \frac{h^5}{3840} + \\
+ \left(\frac{d^6T}{dx^6}\right)_e \frac{h^6}{46080} + \left(\frac{d^7T}{dx^7}\right)_e \frac{h^7}{645120} + \dots
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Então, utilizando-se as Eqs. (2.19) e (2.20) para a obtenção de uma aproximação para $\frac{dT}{dx}$ e comparando-a com a Eq. (2.18), obtém-se

$$Eh(T'_{CDS-2})_e = -\left(\frac{d^3T}{dx^3}\right)_e \frac{h^2}{24} - \left(\frac{d^5T}{dx^5}\right)_e \frac{h^4}{1920} - \left(\frac{d^7T}{dx^7}\right)_e \frac{h^6}{322560} - \dots \tag{2.21}$$

Portanto, de acordo com as definições apresentadas anteriormente, tem-se

$$\begin{aligned}
c_0 = -\frac{1}{24} \left(\frac{d^3T}{dx^3}\right)_e, c_1 = -\frac{1}{1920} \left(\frac{d^5T}{dx^5}\right)_i, c_2 = -\frac{1}{322560} \left(\frac{d^7T}{dx^7}\right)_i, \dots, e \\
p_V = 2, 4, 6, \dots
\end{aligned} \tag{2.22}$$

O emprego do Método de Volumes Finitos sobre o caso 3 (Burgers 2D) é detalhado na seção (5.3.3).

2.3 RESOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES ALGÉBRICAS

Com a aplicação dos métodos numéricos descritos anteriormente, as equações resultantes levam a um sistema de equações algébricas do tipo

$$A \phi = B, \tag{2.23}$$

onde A é a matriz dos coeficientes, B é o vetor independente e ϕ é o vetor de incógnitas (solução numérica). A estrutura da matriz A depende do método usado para discretizar o modelo matemático. Entretanto, as matrizes de banda tridiagonais e pentadiagonais são frequentes em CFD na discretização de modelos uni e bidimensionais, respectivamente. Então, devido a essas características apresentadas por A os métodos iterativos são mais adequados para obtenção de solução (TANNEHILL *et al.*, 1997; BURDEN e FAIRES, 2008).

A busca de um método iterativo (*solver*) eficiente e preciso para a resolução de sistemas de equações algébricas tem tido avanços significativos ao longo dos últimos anos. Os métodos iterativos clássicos são caracterizados por uma baixa taxa de convergência iterativa o que representa um grande obstáculo na resolução de problemas em CFD (PAZ *et al.*, 2006). De modo geral, pode-se dizer que a necessidade de algoritmos de aceleração de convergência iterativa, eficientes e confiáveis, sobre a redução de E_I , deu origem ao método *multigrid* (BRIGGS *et al.*, 2000; TROTTEBERG *et al.*, 2001; WESSELING e OOSTERLEE, 2001) .

Em geral E_I é desconhecido, entretanto, uma forma de se controlar a sua magnitude envolve o cálculo do resíduo (R),

$$R = B - A\phi^{(I)}. \quad (2.24)$$

O resíduo mede o quanto $\phi^{(I)}$, obtido na iteração I , é adequado para resolver a Eq. (2.23). Pode-se deduzir uma importante relação entre E_I e R denominada equação residual (BURDEN e FAIRES, 2008),

$$A E_I = R. \quad (2.25)$$

A Eq. (2.25) indica que E_I satisfaz a Eq. (2.23) (quando B é substituído por R). Além de ser utilizado como parâmetro de controle, R tem grande utilidade prática no seguinte sentido: dada uma solução numérica $\phi^{(I)}$ (determinada por um método iterativo na iteração I), pode-se calcular R com a Eq. (2.24) e, em seguida, calcular E_I com a Eq. (2.25). Então, ϕ pode ser melhorada (ou corrigida) considerando-se a definição de E_I , isto é, faz-se:

$$\phi = \phi^{(I)} + E_I. \quad (2.26)$$

As Eqs. (2.25) e (2.26) são de grande importância no âmbito do método *multigrid*. Tal método caracteriza-se, basicamente, como uma técnica eficiente utilizada para tornar suaves as oscilações que são inerentes ao comportamento de E_l , fazendo-se uso de diversas malhas estabelecidas por um processo de engrossamento. De modo geral, com o emprego de um método iterativo clássico, as iterações iniciais têm convergência rápida o que caracteriza a presença de modos oscilatórios em E_l . Entretanto, após algumas iterações o processo torna-se lento, o que indica que E_l está composto predominantemente por modos suaves (após a ‘suavização’ das iterações iniciais) (BRANDT, 1977).

Os métodos iterativos clássicos, dentre eles Gauss-Seidel, têm um forte efeito de suavização sobre E_l , não o tornando necessariamente pequeno, mas ‘suave’, e essa suavização constitui um dos princípios do método *multigrid* (ERLANGGA, 2008). Aliado ao método *multigrid*, os métodos Gauss-Seidel Lexicográfico e Gauss-Seidel *Red-black* são considerados os mais adequados por Singh e Williams (2005), Zhang (1996), Wang e Zhang (2010).

Existem muitas variações do método *multigrid*, entretanto, a característica mais representativa e comum a todos eles é a existência de uma coleção hierárquica de malhas, gerada por um processo de engrossamento. Então, considera-se o emprego do *solver* não apenas em uma única malha, mas em todas as malhas na sequência em que foram geradas, da mais fina para a mais grossa (onde os modos suaves de E_l tornam-se mais oscilatórios). Sucessivamente, as soluções numéricas são transferidas, de malha em malha, até a malha mais grossa considerada (processo de restrição). Na presente proposta, esse processo é repetido até que a malha mais grossa possível seja alcançada.

A partir de então, o procedimento adotado, conhecido como suavização, transfere (além de suavizar/corrigir) informações de uma malha mais grossa para a malha imediatamente mais fina (operador de prolongação), em um processo que só acaba quando se atinge a malha original. A esta forma de percorrer as malhas, dá-se o nome de ciclo V.

Em outras palavras, o método *multigrid* consiste basicamente na adoção de três passos: suavização, restrição e correção/prolongação (BRIGGS *et al.*, 2000). Utiliza-se do *solver* para suavizar E_l em uma malha Ω^h , então se transfere as informações (resíduo e/ou solução) dessa malha para a malha imediatamente mais grossa, Ω^{qh} (operador de restrição) com $q > 1$ (razão de engrossamento). Entre os operadores de restrição conhecidos, um dos mais utilizados é o operador de restrição por injeção (BRIGGS *et al.*, 2000; TROTTENBERG

et al., 2001; WESSELING e OOSTERLEE, 2001). A Fig. 2.3, retirada de Trottenberg *et al.* (2001), ilustra o uso do operador de restrição por injeção no caso de Ω bidimensional.

Em seguida, transferem-se as informações da malha grossa para a malha imediatamente mais fina (operador de prolongação), e suaviza-se novamente (correção). Entre os operadores de prolongação conhecidos, a interpolação linear (domínio unidimensional) e a bilinear (domínio bidimensional) (BRIGGS *et al.*, 2000; FERZIGER e PERIC, 1999; TANNEHILL *et al.*, 1997; TROTTEBERG *et al.*, 2001; WESSELING, 1992) são bastante utilizadas. A Fig. 2.4, adaptada de Trottenberg *et al.* (2001) ilustra o comportamento do operador de prolongação por interpolação bilinear, no caso de Ω bidimensional.

Esse processo (suavização, restrição e correção/prolongação) é desenvolvido até que E_l tenha sido satisfatoriamente minimizado, de acordo com um critério pré-estabelecido baseado nas Eqs (2.24) e (2.25). Mais detalhes sobre operadores de transferência entre malhas, *solvers*, tipos de ciclos, e esquema de correção (CS) (onde se transferem apenas informações sobre o resíduo) ou esquema de aproximação completa (FAS) (onde se transferem informações sobre o resíduo e solução) podem ser encontrados nos textos de Briggs *et al.* (2000), Trottenberg *et al.* (2001) e Wesseling e Oosterlee, (2001).

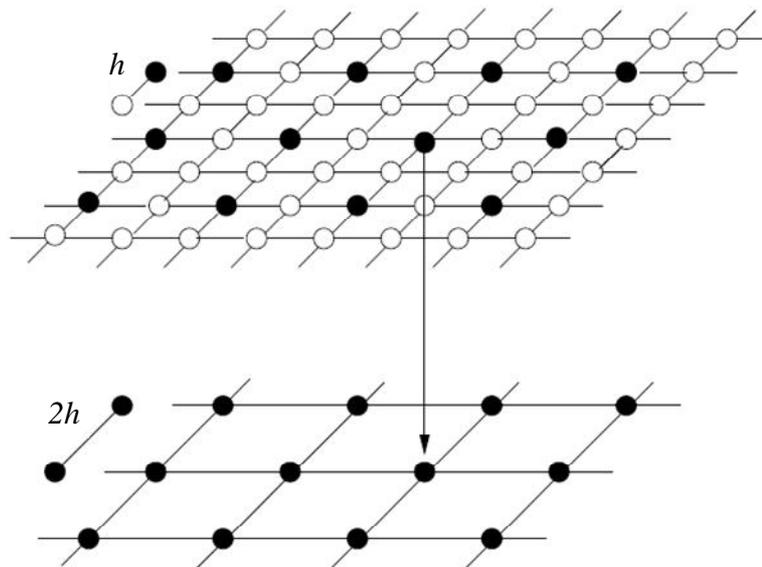


Figura 2.3: Restrição por injeção (TROTTEBERG *et al.*, 2001), abordagem 2D, $q = 2$.

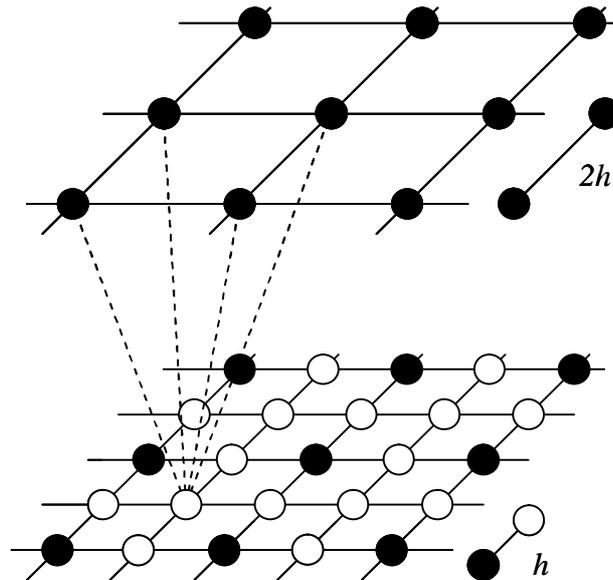


Figura 2.4: Prolongação bilinear (adaptado de Trottenberg *et al.* (2001)), $q = 2$.

2.4 INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL

Com a resolução de um modelo matemático através do emprego de um método numérico são obtidos valores para ϕ em pontos nodais determinados pela malha adotada. Entretanto, em alguns casos, pode ocorrer a necessidade de se obter ϕ em locais específicos que não coincidem com os pontos dessa malha. Nessa situação, o emprego de interpolação polinomial representa uma ferramenta que pode ser empregada com sucesso.

Os polinômios algébricos, ou apenas polinômios, representam uma das classes de funções mais conhecidas e úteis entre as que mapeiam o conjunto dos números reais, e se destacam por resultarem em aproximações contínuas e diferenciáveis (suaves). Para qualquer função f , definida e contínua em um domínio limitado Ω , existe um polinômio ξ que é ‘tão próximo’ da função quanto desejado (BURDEN e FAIRES, 2008). Conhecendo-se apenas alguns pontos avaliados por f , é possível se encontrar ξ que a aproxime em determinado domínio fazendo-se:

$$\xi(\chi_\eta) = f(\chi_\eta), \eta = 0, 1, \dots, p, \chi_\eta \in \Omega, \quad (2.27)$$

onde p é um número natural não-nulo que está relacionado com o grau do polinômio a ser obtido.

A Eq. (2.27) dá origem a um sistema de equações algébricas lineares, que é compatível e determinado devido à estrutura de sua matriz coeficientes (Matriz de Vandermonde). Isso garante a existência e unicidade do polinômio ξ que aproxima f em Ω (DAHLQUIST e BJORCK, 2008), conforme demonstrado na seção 2.4.2 para o caso de domínio bidimensional (o caso com domínio unidimensional pode ser demonstrado, de modo semelhante, e é detalhado em Burden e Faires (2008)).

Na prática existem vários métodos para obtenção de ξ ; tais métodos são denominados métodos de interpolação polinomial. Ao se considerar a aplicação desses métodos em problemas que requeiram grande precisão, é comum se considerar polinômios de ordem elevada.

No presente trabalho, considera-se a obtenção de funções contínuas a partir de um conjunto de pontos pertencentes a Ω . Nesse contexto, são empregados os métodos de interpolação polinomial em domínios uni e bidimensionais.

2.4.1 Abordagem Unidimensional

Sendo $a = a_0 < a_1 < \dots < a_p = a'$ um conjunto de $p+1$ valores reais distintos, e sendo f uma função cuja imagem é conhecida nesses pontos, busca-se um polinômio ξ , pertencente ao espaço vetorial P_p , dos polinômios de uma variável com grau menor ou igual que p , tal que

$$\xi(a_i) = \kappa_0 + \kappa_1 a_i + \kappa_2 a_i^2 + \dots + \kappa_p a_i^p = f(a_i), \quad i = 0, \dots, p, \quad (2.28)$$

onde $\kappa_j \in \mathfrak{R}$, $j = 0, \dots, p$.

O vetor $K = (\kappa_0, \kappa_1, \dots, \kappa_p)$ pode ser entendido como ‘coordenadas de ξ em P_p ’, com respeito à base de polinômios de potências, $\{1, x, \dots, x^p\}$, onde x corresponde à variável independente.

Dentre os métodos utilizados para se encontrar tais coordenadas, K , os mais utilizados são: Lagrange e Newton, sendo que na abordagem unidimensional adota-se a notação complementar (1D) para especificar o domínio unidimensional.

Considerando-se, então, a_0, a_1, \dots, a_p e f de acordo com a descrição anterior, o polinômio interpolador de Lagrange (1D) é determinado por:

$$\xi_p(x) = f(a_0)L_{p,0}(x) + f(a_1)L_{p,1}(x) + \dots + f(a_p)L_{p,p}(x), \quad (2.29)$$

onde

$$L_{p,k}(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^p \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}, \quad (2.30)$$

enquanto que o polinômio interpolador de Newton (1D) é construído a partir das diferenças divididas de Newton (1D), DDN (1D), determinadas por:

$$F(a_{i+1}; a_i) = \frac{f(a_{i+1}) - f(a_i)}{a_{i+1} - a_i}, \quad i = 0, \dots, p-1. \quad (2.31)$$

Mais especificamente, a Eq. (2.31) representa a DDN (1D) de primeira ordem, sendo que as DDN (1D) de ordem superior são calculadas recursivamente pela expressão:

$$F(a_{i+s}; \dots; a_{i+1}; a_i) = \frac{F(a_{i+s}; \dots; a_{i+1}; a_{i+1}) - F(a_{i+s-1}; \dots; a_{i+1}; a_i)}{a_{i+s} - a_i}, \quad i = 0, \dots, p-1, \quad (2.32)$$

em que $s > 1$ é um número inteiro.

Então, o polinômio interpolador de Newton (1D) fica determinado por:

$$\begin{aligned} \xi_p(x) &= f(a_0) + F(a_1; a_0)(x - a_0) + F(a_2; a_1; a_0)(x - a_0)(x - a_1) + \dots \\ &\quad + F(a_p; \dots; a_2; a_1; a_0)(x - a_0)(x - a_1) \dots (x - a_{p-1}) \\ &= f(a_0) + \sum_{i=1}^p F(a_i; \dots; a_1; a_0) \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Independentemente do método adotado, a menos dos efeitos de E_π , ξ_p é o mesmo (princípio da unicidade de ξ_p). E, ao se interpolar uma função f em $[a, a']$ por ξ_p comete-se um erro, que pode ser representado por

$$E_\xi(x) = f(x) - \xi_p(x), \quad \forall x \in [a, a']. \quad (2.34)$$

Sobre esse erro, de acordo com Steffensen (1950), tem-se que, se f é uma função com derivadas $(f^{(i)})$ até ordem $p + 1$, então para todo $x \in (a, a')$,

$$E_{\xi}(x) = f(x) - \xi(x) = (x - a_0) \cdot (x - a_1) \cdot (x - a_2) \cdot \dots \cdot (x - a_p) \cdot \frac{f^{(p+1)}(x^*)}{(p+1)!}, \quad (2.35)$$

onde $x^* \in (a, a')$.

Portanto, sobre a magnitude de $E_{\xi}(x)$ conclui-se que

$$\begin{aligned} |E_{\xi}(x)| &= \left| (x - a_0) \cdot (x - a_1) \cdot (x - a_2) \cdot \dots \cdot (x - a_p) \cdot \frac{f^{(p+1)}(x^*)}{(p+1)!} \right| \\ &\leq \left| (x - a_0) \cdot (x - a_1) \cdot (x - a_2) \cdot \dots \cdot (x - a_p) \right| \cdot \frac{M(f)}{(p+1)!}, \end{aligned} \quad (2.36)$$

onde $M(f) = \max |f^{(p+1)}(x)|$, $x \in [a, a']$; isto é, $M(f)$ corresponde à magnitude máxima de f no domínio estabelecido.

Se além das hipóteses anteriores, os pontos $a = a_0 < a_1 < \dots < a_p = a'$ forem igualmente espaçados, ou seja, $a_1 - a_0 = a_2 - a_1 = \dots = a_p - a_{p-1} = h \in \mathfrak{R}$, podem-se considerar alguns aspectos complementares e a Eq. (2.33) pode ser reescrita como:

$$\xi_p(x) = f(a_0) + \sum_{i=1}^p \left[\frac{\Delta^i f(a_0)}{i! h^i} \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) \right], \quad (2.37)$$

em que $\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$, $\Delta^k f(x) = \Delta^{k-1}(\Delta f(x))$, e com as Eqs. (2.31) e (2.32), considerando-se o Processo de Indução Finita (IEZZI e MURAKAMI, 2006),

$$F(a_i; \dots; a_1; a_0) = \frac{\Delta^i f(x_0)}{i! h^i}. \quad (2.38)$$

Nesse caso, pode-se considerar também (DAHLQUIST e BJORCK, 2008)

$$(x - a_0) \cdot (x - a_1) \dots (x - a_p) = O(h^{p+1}), \quad x \in [a, a'], \quad (2.39)$$

ou seja, esse produto resulta em um termo de ordem $p + 1$. Portanto, com a Eq. (2.36) conclui-se que

$$|E_\xi(x)| \leq O(h^{p+1}), \quad (2.40)$$

isto é, com o emprego de interpolação polinomial para obtenção de $\xi_p(x)$, em pontos igualmente espaçados, o erro cometido é, no mínimo, de ordem $p + 1$ (podendo ser de ordem mais elevada).

Neste trabalho, ao se considerar domínio unidimensional (1D), ambos os métodos (Lagrange e Newton) foram empregados com o objetivo de se garantir a implementação correta de $\xi_p(x)$, ou seja, de se verificar a unicidade do polinômio interpolador. Entretanto, sabe-se da literatura disponível que Newton (1D) apresenta vantagens sobre Lagrange (1D) com relação ao número de operações realizadas (BURDEN e FAIRES, 2008). Constatou-se, ainda, que Newton (1D) é menos sensível aos efeitos de E_π , ao se considerar $h \rightarrow 0$ (de acordo com os resultados obtidos).

2.4.2 Abordagem Bidimensional

As aproximações para as funções com mais do que uma variável independente são aproximações multidimensionais e, normalmente, apresentam maior dificuldade de implementação do que o caso unidimensional (DAHLQUIST e BJORCK, 2008). Em particular, considerando-se uma função $f(x, y)$ em que são conhecidos os valores $f(x_i, y_j)$ para $i = 0, 1, \dots, p$ e $j = 0, 1, \dots, p$, tem-se um polinômio de grau, no máximo, p em x e, no máximo, p em y que interpola esses valores. Tal polinômio tem a forma:

$$\xi_p(x, y) = \sum_{i=0}^p \sum_{j=0}^p \kappa_{i,j} x^i y^j, \quad (2.41)$$

onde os $(p+1)^2$ coeficientes $\kappa_{i,j}$ devem ser determinados a partir dos valores nodais $f(x_i, y_j)$, de acordo com o método estabelecido. Novamente, consideram-se os métodos: Lagrange e Newton, porém em abordagem bidimensional (2D).

Nesse enfoque, admite-se $\Omega \subset \mathfrak{R}^2$, delimitado por $[a, a'] \times [b, b']$, e os valores:

$$a = a_0 < a_1 < \dots < a_{p-1} < a_p = a', \quad (2.42)$$

$$b = b_0 < b_1 < \dots < b_{p-1} < b_p = b', \quad (2.43)$$

e, com isso, obtém-se o conjunto de pontos: $M_p = (a_i, b_j); i = 0, \dots, p; j = 0, \dots, p$.

Considerando-se, então, f uma função definida em Ω e cujas imagens são conhecidas em M_p , o polinômio interpolador de Lagrange (2D) associado a f é dado por (DAHLQUIST e BJORCK, 2008):

$$\xi_p(x, y) = \sum_{i=0}^p \sum_{j=0}^p f(a_i, b_j) l_i(x) l_j(y), \quad (2.44)$$

onde

$$l_i(x) = \prod_{k=0, k \neq i}^p \frac{x - a_k}{a_i - a_k}, \quad i = 1, \dots, p, \quad (2.45)$$

e

$$l_j(y) = \prod_{k=0, k \neq j}^p \frac{y - b_k}{b_j - b_k}, \quad j = 1, \dots, p. \quad (2.46)$$

A menos dos efeitos de E_π , o polinômio interpolador que satisfaz $\xi_p(a_i, b_j) = f(a_i, b_j)$, $i = 0, \dots, p$, $j = 0, \dots, p$ (Eq. (2.41)) existe e é único (DAHLQUIST e BJORCK, 2008). Essa afirmação pode ser verificada considerando-se a forma de Lagrange

(2D) (Eqs. (2.44) a (2.46)). Para isso, define-se: $l_{i,j}(x, y) = l_i(x)l_j(y)$, $i = 0, \dots, p$, $j = 0, \dots, p$, onde é possível se constatar que

$$l_{i,j}(a_k, b_t) = \begin{cases} 1, (i, j) = (k, t) \\ 0, (i, j) \neq (k, t) \end{cases}, \quad (2.47)$$

ou seja, o polinômio ξ satisfaz a condição de interpolação, o que garante a sua existência. Com relação a sua unicidade pode-se considerar, como artifício, um valor de y fixo, $b_t \in [b, b']$, e x variável na Eq. (2.41). Logo,

$$\xi_p(x, b_t) = \sum_{i=0}^p q_{i,t} x^i, \quad (2.48)$$

em que

$$q_{i,t} = \sum_{j=0}^p \kappa_{i,j} b_t^j. \quad (2.49)$$

E, das condições de interpolação, os coeficientes do polinômio interpolador devem satisfazer a equação

$$\sum_{i=0}^p q_{i,t} a_k^i = f(a_k, b_t), \quad k = 0, \dots, p, \quad (2.50)$$

ou seja,

$$\begin{bmatrix} 1 & a_0 & a_0^2 & a_0^3 & \dots & a_0^p \\ 1 & a_1 & a_1^2 & a_1^3 & \dots & a_1^p \\ 1 & a_2 & a_2^2 & a_2^3 & \dots & a_2^p \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & a_p & a_p^2 & a_p^3 & \dots & a_p^p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{0,t} \\ q_{1,t} \\ q_{2,t} \\ \vdots \\ q_{p,t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(a_0, b_t) \\ f(a_1, b_t) \\ f(a_2, b_t) \\ \vdots \\ f(a_p, b_t) \end{bmatrix}. \quad (2.51)$$

Como o determinante da matriz coeficiente (matriz de Vandermonde), na Eq. (2.51), não é nulo, o sistema é compatível e determinado. Portanto, para cada valor de t existe uma única solução $q_{i,t}$, para $i = 1, \dots, p$. Finalmente, os coeficientes $\kappa_{i,j}$ para $i = 0, \dots, p$ geram o sistema de equações

$$\sum_{j=0}^p \kappa_{i,j} b_t^j = q_{i,t}, \quad t = 0, \dots, p, \quad (2.52)$$

isto é, resultam na Eq. (2.53) que, analogamente, é um sistema possível e determinado,

$$\begin{bmatrix} 1 & b_0 & b_0^2 & b_0^3 & \dots & b_0^p \\ 1 & b_1 & b_1^2 & b_1^3 & \dots & b_1^p \\ 1 & b_2 & b_2^2 & b_2^3 & \dots & b_2^p \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & b_p & b_p^2 & b_p^3 & \dots & b_p^p \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \kappa_{i,0} \\ \kappa_{i,1} \\ \kappa_{i,2} \\ \vdots \\ \kappa_{i,p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{i,0} \\ q_{i,1} \\ q_{i,2} \\ \vdots \\ q_{i,p} \end{bmatrix}. \quad (2.53)$$

Verifica-se, com isso, a unicidade do polinômio interpolador.

Embora o método de Lagrange (2D) seja bastante útil do ponto de vista teórico, no estudo das propriedades dos polinômios interpoladores, em aplicações práticas tem seu uso limitado ao se considerar malhas muito refinadas ($h \rightarrow 0$), devido aos efeitos de E_π . Esses efeitos foram identificados nos testes numéricos realizados (conforme os resultados obtidos em teste preliminares).

Nesse sentido, o método de Newton (2D) representa uma alternativa viável. Considerando-se, então, as funções de duas variáveis, $f(x, y)$, denotam-se as DDN (2D) por:

$$F(a; a', b) = \frac{f(a', b) - f(a, b)}{a' - a}; \quad F(a, b; b') = \frac{f(a, b') - f(a, b)}{b' - b}. \quad (2.54)$$

Assume-se, por questão de simplicidade, que os dados nodais utilizados na interpolação seguem a representação adotada na Tab. 2.1,

Tabela 2.1: Dados nodais considerados na interpolação 2D.

x	$y = b_0$	$y = b_1$	$y = b_2$	\dots	$y = b_p$
a_0	$f(a_0, b_0)$	$f(a_0, b_1)$	$f(a_0, b_2)$	\dots	$f(a_0, b_p)$
a_1	$f(a_1, b_0)$	$f(a_1, b_1)$	$f(a_1, b_2)$	\dots	$f(a_1, b_p)$
a_2	$f(a_2, b_0)$	$f(a_2, b_1)$	$f(a_2, b_2)$	\dots	$f(a_2, b_p)$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
a_p	$f(a_p, b_0)$	$f(a_p, b_1)$	$f(a_p, b_2)$	\dots	$f(a_p, b_p)$

Em princípio, é intuitivo se admitir a interpolação de $f(x, y)$ a partir dos dados da Tab. 2.1, com um enfoque unidimensional, isto é, com um valor arbitrário de x (ou de y), interpolam-se sucessivamente:

$$f(x, b_0), f(x, b_1), f(x, b_2), \dots, f(x, b_p). \quad (2.55)$$

E, em cada uma dessas interpolações, consideram-se os dados de uma coluna (ou linha) específica da Tab. 2.1. Essas interpolações são, portanto, interpolações com uma variável, cuja ordem (p) é determinada pelo número de pontos.

Porém, esse conjunto de funções (Eq. (2.55)) diz respeito, evidentemente, à tabulação de uma única função $f(x, y)$, e não é considerada como uma função de x , com um y constante ou vice-versa, ou seja, como uma função de uma única variável. Em muitos casos, a interpolação de $f(x, y)$, com valores particulares de x e em seguida de y , tratados separadamente, não é satisfatória, pois, dessa forma, se incorre em uma análise univariada (de uma única variável). Nesse sentido, surge a necessidade da aplicação de interpolação em ambas as variáveis, concomitantemente.

Ao se considerar um enfoque bidimensional, os pontos utilizados para a interpolação não podem ser escolhidos arbitrariamente. Mas, como já foi considerado na Tab. 2.1, pertencem a dois sistemas de linhas paralelas (malha estruturada, ortogonal e preferencialmente uniforme) das quais, uma é paralela ao eixo das abscissas, e a outra paralela ao eixo das ordenadas, em um sistema de coordenadas cartesianas. Observa-se, contudo, que ambas devem ser tratadas simultaneamente, porém as distâncias entre essas paralelas podem ser arbitrária (h quaisquer).

Se uma tabulação para $f(x, y)$ é dada, as DDN (2D) baseadas na Eq. (2.54) podem ser formadas com relação a x e a y . Tais DDN (2D) com respeito a x , são formadas com os argumentos a_0, a_1, \dots, a_p , e com respeito a y com os argumentos b_0, b_1, \dots, b_p . Adota-se, então, a notação $F_{v,t} = F(a_0; \dots; a_v, b_0; \dots; b_t)$, onde $v \leq p$ e $t \leq p$, e para o seu cálculo é mantido padrão estabelecido na Eq. (2.54) e na Tab. 2.1, ou seja:

$$F_{0,0} = f(a_0, b_0);$$

$$F_{1,0} = F(a_0; a_1, b_0) = \frac{f(a_1, b_0) - f(a_0, b_0)}{a_1 - a_0}; \quad F_{0,1} = F(a_0, b_0; b_1) = \frac{f(a_0, b_1) - f(a_0, b_0)}{b_1 - b_0};$$

$$F(a_1; a_2, b_0) = \frac{f(a_2, b_0) - f(a_1, b_0)}{a_2 - a_1}; \quad F(a_0, b_1; b_2) = \frac{f(a_0, b_2) - f(a_0, b_1)}{b_2 - b_1};$$

$$F_{2,0} = F(a_0; a_1; a_2, b_0) = \frac{F(a_1; a_2, b_0) - F(a_0; a_1, b_0)}{a_2 - a_0};$$

$$F_{0,2} = F(a_0, b_0; b_1; b_2) = \frac{F(a_0, b_1; b_2) - F(a_0, b_0; b_1)}{b_2 - b_0};$$

e assim por diante,

$$F_{p,0} = F(a_0; a_1; a_2; \dots; a_p, b_0) = \frac{F(a_1; a_2; \dots; a_p, b_0) - F(a_0; \dots; a_{p-1}, b_0)}{a_p - a_0}; \quad (2.56)$$

$$F_{0,p} = F(a_0, b_0; b_1; b_2; \dots; b_p) = \frac{F(a_0, b_1; b_2; \dots; b_p) - F(a_0, b_0; \dots; b_{p-1})}{b_p - b_0}. \quad (2.57)$$

As DDN (2D) são representadas esquematicamente na Tab. 2.2, para a_1, \dots, a_p e b_1, \dots, b_p .

Tabela 2.2: Diferenças Divididas de Newton, enfoque bidimensional.

$F_{0,0} = f(a_0, b_0)$	$F_{0,1} = F(a_0, b_0; b_1)$...	$F_{0,p} = F(a_0, b_0; b_1; \dots; b_p)$
$F_{1,0} = F(a_0; a_1, b_0)$	$F_{1,1} = F(a_0; a_1, b_0; b_1)$...	$F_{1,p} = F(a_0; a_1, b_0; b_1; \dots; b_p)$
$F_{2,0} = F(a_0; a_1; a_2, b_0)$	$F_{2,1} = F(a_0; a_1; a_2, b_0; b_1)$...	$F_{2,p} = F(a_0; a_1; a_2, b_0; b_1; \dots; b_p)$
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
$F_{p,0} = F(a_0; a_1; \dots; a_p, b_0)$	$F_{p,1} = F(a_0; a_1; \dots; a_p, b_0; b_1)$...	$F_{p,p} = F(a_0; a_1; \dots; a_p, b_0; b_1; \dots; b_p)$

Para obtenção das DDN (2D) deve-se adotar primeiramente o cálculo em x (ou em y), ou seja, devem-se abordar os dados tabulados percorrendo-se primeiramente as colunas, e em seguida as linhas (ou ao contrário). Neste trabalho propõe-se a obtenção de $F_{v,t}$ através do processo recursivo detalhado no Algoritmo I (Tab. 2.3), apresentado na sequência.

Tabela 2.3: Algoritmo I, Diferenças Divididas de Newton (2D)

<p>Entrada:</p> <p>$F_{i,j} = f(x_i, y_j); i = 0, \dots, p; j = 0, \dots, p;$</p> <p>para $m = 0, \dots, p-1;$</p> <p style="padding-left: 40px;">para $k = 1, 2, \dots, p-m;$</p> <p style="padding-left: 80px;">$v = k + m;$</p> <p style="padding-left: 80px;">para $t = 1, \dots, p;$</p> <p style="padding-left: 120px;">$F_{v,t} = \frac{F_{v,t-1} - F_{v-1,t-1}}{x_v - x_{k-1}};$</p> <p>para $m = 0, \dots, p-1;$</p> <p style="padding-left: 40px;">para $l = 1, 2, \dots, p-m;$</p> <p style="padding-left: 80px;">$t = l + m;$</p> <p style="padding-left: 120px;">para $v = 1, \dots, p; F_{v,t} = \frac{F_{v-1,t} - F_{v-1,t-1}}{y_t - y_{l-1}}.$</p>
--

E, por questão de simplificação de notação, para representação da forma interpoladora de Newton (2D) consideram-se:

$$x_0 = 1; x_v = (x - a_0) \cdot (x - a_1) \cdot \dots \cdot (x - a_{v-1}); \quad (2.58)$$

$$y_0 = 1; \quad y_t = (y - b_0) \cdot (y - b_1) \cdot \dots \cdot (y - b_{t-1}). \quad (2.59)$$

Então, através das DDN (2D), o polinômio que interpola $f(x, y)$ em $x \in [a_0, a_p]$ e $y \in [b_0, b_p]$ fica determinado pela expressão:

$$\begin{aligned} \xi_p(x, y) &= \sum_{v=0}^p \sum_{t=0}^p F_{v,t} \cdot x_v \cdot y_t \\ &= F_{0,0} + \sum_{v=1}^p \sum_{t=1}^p F_{v,t} \cdot \prod_{i=0}^{v-1} (x - a_i) \cdot \prod_{j=0}^{t-1} (y - b_j). \end{aligned} \quad (2.60)$$

A análise sobre a ordem do erro do polinômio interpolador para o caso 2D é similar à considerada na Eq. (2.42), sendo consideradas ambas as dimensões.

2.5 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO

Como mencionado anteriormente, em CFD, pode ocorrer a necessidade de se avaliar determinada variável de interesse em uma localização não nodal. Nesse caso, o emprego de interpolação polinomial, para obtenção de ξ , é recomendado. Entretanto, pode ser necessária ainda a obtenção de um ponto extremo (ponto de máximo ou de mínimo). Como exemplo: a obtenção da velocidade máxima ou da pressão mínima, em determinado campo de variação. Se tal ponto procurado pertence à região do domínio de cálculo na qual ξ está definida, surge uma demanda que envolve o emprego de métodos de otimização.

O problema de otimização pode ser posto, genericamente, da seguinte forma: seja $\Omega \subset \mathfrak{R}^n$, $\xi : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}$ busca-se o valor máximo de $\xi(\chi)$ (ou o valor mínimo de $\xi(\chi)$ em Ω) / $\chi \in \Omega$ e denota-se por $\max_{\chi \in \Omega} \xi(\chi)$ (ou $\min_{\chi \in \Omega} \xi(\chi)$). Os problemas que serão considerados neste trabalho são os de maximização (ou minimização) irrestrita (cuja função objetivo não está sujeita a restrições) não linear diferenciável, definidos em um conjunto convexo (BAZARAA *et al.*, 2006). Como ξ considerada é uma **função polinomial** definida em $\Omega = [a, a'] \times [b, b']$ convexo, ela caracteriza uma função convexa (ou côncava), e tem-se a garantia da existência e unicidade do seu ponto de mínimo (ou de máximo) global (BAZARAA *et al.*, 2006). Nesses casos os métodos do tipo Gradiente podem ser empregados satisfatoriamente.

O método do Gradiente Ótimo é uma técnica de otimização irrestrita (BAZARAA *et al.*, 2006). Em particular, limita-se à aplicação desse método de otimização devido às características das funções obtidas, isto é, funções polinomiais em que a expressão analítica para o gradiente pode ser obtida facilmente. A abordagem considerada é do tipo sequencial, ou seja, é gerada uma sequência de pontos $\{\chi^{(I)}\} \in \Omega$ onde $\chi^{(I)}$ é o ponto obtido na iteração I ,

$$\chi^{(I)} = \chi^{(I-1)} + \delta^{(I)} d^{(I)}, \quad (2.61)$$

com $\delta^{(I)} \in (0,1)$ sendo o passo tomado na I -ésima iteração e $d^{(I)}$ a direção de subida (ou descida), isto é, $d^{(I)} = \pm \nabla \xi(\chi^{(I-1)})$ (gradiente de ξ avaliado em $\chi^{(I-1)}$). Os pontos $\chi^{(I)}$ são gerados de forma que $\xi(\chi^{(I)})$ é uma sequência crescente (ou decrescente) de números reais. Nesse sentido, para I suficientemente grande, $\chi^{(I)}$ é uma ‘boa’ aproximação para a solução procurada (ponto de max ou min).

No enfoque unidimensional, $\chi = x \in \Omega \subset \mathfrak{R}$, a Eq. (2.61) pode ser abordada através do método de Newton para funções não lineares (BURDEN e FAIRES, 2008) fazendo-se $g(x) = \nabla \xi(x) = \xi'(x)$, isto é

$$x^{(I)} = x^{(I-1)} \pm \nabla g(x^{(I-1)})^{-1} g(x^{(I-1)}). \quad (2.62)$$

Já no enfoque bidimensional, na Eq. (2.61) deve-se utilizar um critério para determinação de $\delta^{(I)}$. Dentre os critérios disponíveis na literatura, a busca linear de Armijo (BAZARAA *et al.*, 2006) é bastante conhecida pela sua eficiência e simplicidade de implementação. A regra de Armijo conta essencialmente com a escolha dos escalares $0 < \beta < 1$ e $\theta > 1$; e então se faz $\delta^{(I)} = 1/\theta^m$ onde m é o primeiro inteiro, não negativo, para o qual se verifica, no caso de maximização:

$$\xi(\chi^{(I)}) \geq (\chi^{(I-1)}) + \beta \delta^{(I)} \chi^{(I-1)} d^{(I)}; \quad (2.63)$$

e deve-se considerar a relação \leq para o caso de minimização.

Resumidamente, a abordagem para esse processo de otimização (considerado no presente trabalho) é detalhada no Algoritmo II (Tab. 2.4), apresentado na sequência.

Tabela 2.4: Algoritmo II, Método do Gradiente.

Para ξ determinado a partir de $Mp = (a_i, b_j); i = 0, \dots, p; j = 0, \dots, p$ (Algoritmo I).

Inicialização: I_{max} (inteiro); $I = 1$; $\chi^{(I-1)} = (a_{p^*}, b_{p^*})$; $\beta \approx 10^{-1}$; $\theta \approx 2$; $\varepsilon \approx 0$; $\|\nabla\| = 1$;

$p^* = p/2$ ou $p^* = (p+1)/2$; para p par ou ímpar, respectivamente.

Enquanto $I \leq I_{max}$ e $\|\nabla\| > \varepsilon \geq 0$:

$m = 0$;

inicializar as variáveis auxiliares k_0 e k_1 , com $k_0 > k_1$ (ou $k_0 < k_1$ para minimização);

calcular $d^{(I)} = \nabla = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x}(\chi^{(I-1)}), \frac{\partial \xi}{\partial y}(\chi^{(I-1)}) \right)$ ($d^{(I)} = -\nabla$, para minimização);

$$\|\nabla\| = \sqrt{\left(\frac{\partial \xi}{\partial x}(\chi^{(I-1)}) \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y}(\chi^{(I-1)}) \right)^2};$$

enquanto $k_0 > k_1$ (ou $k_0 < k_1$ para minimização):

$$\delta = 1/\theta^m;$$

$$\chi^{(I)} = \chi^{(I-1)} + \delta d^{(I)};$$

$$k_0 = \xi(\chi^{(I-1)}) + \beta \delta \chi^{(I-1)} d^{(I)};$$

$$k_1 = \xi(\chi^{(I)});$$

$$m = m + 1;$$

$$I = I + 1.$$

2.6 EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

A metodologia denominada **extrapolação de Richardson (ER)** pode ser empregada sempre que se saiba que uma técnica de aproximação tenha um termo indicativo de erro de forma previsível, isto é, uma forma que dependa de um parâmetro real (como é o caso de h) (BURDEN e FAIRES, 2008).

Em princípio, o objetivo da ER (RICHARDSON, 1910; RICHARDSON e GAUNT, 1927) era combinar aproximações de modo a se aumentar a ordem de acurácia resultante, considerando-se, exclusivamente, $p_0 = 2$, $p_1 = 4$ e $r = 2$ (razão de refino). Tal procedimento foi denominado extrapolação de Richardson padrão (OBERKAMPF e ROY, 2010).

Posteriormente a ER passou a ser considerada com valores gerais p_0 , p_1 , e r e, então, denominada extrapolação de Richardson generalizada (OBERKAMPF e ROY, 2010). Desta forma, geram-se fórmulas que combinam resultados de $\phi(h)$ para diferentes malhas Ω^h , levando-se em consideração a razão de refino r .

Considera-se que, para cada valor $h \neq 0$ é dada uma $\phi(h)$ que aproxima o valor desconhecido Φ pela expressão:

$$\Phi = \phi(h) + k_0 h^{p_0} + k_1 h^{p_1} + k_2 h^{p_2} + k_3 h^{p_3} + \dots, \quad (2.64)$$

para uma coleção de constantes reais desconhecidas $k_0, k_1, k_2, k_3, \dots$, e números inteiros $1 \leq p_0 < p_1 < p_2 < p_3 < \dots$.

Para $h \rightarrow 0$, a Eq. (2.64) pode ser reescrita como:

$$\phi(h) = \Phi + c_0 h^{p_0} + O(h^{p_1}), \quad (2.65)$$

onde $O(h^{p_1})$ representa um termo indicativo de erro de ordem p_1 , e $c_0 = -k_0$.

Considerando-se, ainda, o número racional (razão de refino) $r > 1$, pode-se fazer:

$$\phi(rh) = \Phi + c_0 (rh)^{p_0} + O(h^{p_1}) = \Phi + c_0 r^{p_0} h^{p_0} + O(h^{p_1}). \quad (2.66)$$

Então, ao se adotar uma combinação linear sobre $\phi(h)$ e $\phi(rh)$, com as Eqs. (2.65) e (2.66), é possível se obter uma aproximação cujo erro apresenta ordem p_1 , ou seja, fazendo-se

$$\phi(h) - \phi(rh) = c_0(h^{p_0} - r^{p_0}h^{p_0}) \Rightarrow c_0h^{p_0} = \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{1 - r^{p_0}}, \quad (2.67)$$

e substituindo-se na Eq. (2.67) o resultado obtido na Eq. (2.67), obtém-se:

$$\phi(h) = \Phi + \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{1 - r^{p_0}} + O(h^{p_1}) \Rightarrow \Phi = \phi(h) + \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_0} - 1} + O(h^{p_1}), \quad (2.68)$$

de onde se considera

$$\Phi = \phi_\infty + O(h^{p_1}). \quad (2.69)$$

No enfoque considerado, $\phi(h)$ e $\phi(rh)$ correspondem aos valores de ϕ obtidos nas malhas Ω^h e Ω^{rh} , respectivamente; $\phi_\infty = \phi(h, rh)$ diz respeito a uma combinação entre $\phi(h)$ e $\phi(rh)$, de modo que se tenha uma aproximação com $O(h^{p_1})$, isto é, um termo indicativo de erro de ordem p_1 .

Como $p_1 > p_0$, a solução ϕ_∞ possui p_A mais elevada do que $\phi(h)$ e $\phi(rh)$ e, conseqüentemente, proporciona a obtenção de um resultado mais acurado. A solução ϕ_∞ diz respeito à solução extrapolada para Φ com base em ER, ou seja,

$$\phi_\infty = \phi(h) + \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_0} - 1}. \quad (2.70)$$

Além da obtenção de ϕ_∞ , a ER pode ser abordada na perspectiva de estimador do Eh envolvido no cálculo de $\phi(h)$. Nesse enfoque, sobre a composição do erro numérico, quando apenas os efeitos de truncamento são considerados, Eh pode ser mensurado por:

$$Eh = \Phi - \phi(h). \quad (2.71)$$

Segundo Brezinski e Zaglia (2002), nessa equação, quando Φ não é conhecida ela pode ser aproximada considerando-se uma estimativa para solução analítica, que pode ser obtida com o emprego de métodos de extrapolação. Assim, com as Eqs. (2.70) e (2.71), pode-se obter a estimativa para Eh inerente a $\phi(h)$, denotada por Uh :

$$Uh = \phi_{\infty} - \phi(h) \Leftrightarrow Uh = \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_0} - 1}. \quad (2.72)$$

Uh , obtida com a Eq. (2.74), caracteriza o estimador Richardson e fornece além da magnitude da estimativa de Eh , o seu sinal, isto é, se ϕ_{∞} é maior ou menor que $\phi(h)$ (MARCHI, 2001). Observa-se, nesse caso, que o cálculo de Uh considera o valor de p_0 . Entretanto, pode-se admitir o seu cálculo com base no valor de p_U , ao invés de p_0 .

Segundo Marchi (2001), o estimador Richardson é confiável: se $p_U \rightarrow p_0$ de modo superconvergente e Uh é calculada com p_0 ; ou, se $p_U \rightarrow p_0$ de modo subconvergente e Uh é calculada com p_U . Os termos superconvergente e subconvergente, no presente contexto, referem-se à ocorrência de convergência monotônica, quando $h \rightarrow 0$, de p_U com valores superiores ou inferiores a p_0 , respectivamente.

2.7 MULTIEXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

De acordo com a definição apresentada anteriormente (Capítulo 1), MER consiste da aplicação recursiva da ER com o objetivo de se elevar a p_A de Eh . Nesse sentido, são considerados os valores de p_V e, com base nas Eqs. (2.64) e (2.65) escreve-se

$$\phi(h) = \Phi + c_0 h^{p_0} + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + \dots + c_{m-1} h^{p_{m-1}} + c_m h^{p_m} + \dots, \quad (2.73)$$

com $1 \leq p_0 < p_1 < p_2 < \dots < p_{m-1} < p_m < \dots$.

O processo de recursividade é concebido a partir da Eq. (2.70), isto é, considera-se

$$\begin{aligned}\phi_0(h_g) &= \phi(h_g), \quad g = 1, 2, \dots; \\ \phi_1(h_{g+1}) &= \phi_0(h_{g+1}) + \frac{\phi_0(h_{g+1}) - \phi_0(h_g)}{r^{p_0} - 1}, \quad g = 1, 2, \dots;\end{aligned}\tag{2.74}$$

com $h_{g+1} = h_g / r$, em que $h > 0$ e $r > 1$ representam parâmetros genéricos, ou números reais, que respeitam as definições apresentadas anteriormente. A partir disso, consideram-se os níveis m , indicando a extrapolação, e g indicando a malha Ω^{h_g} , com m e g sendo números naturais não nulos,

$$\phi_m(h_g) = \phi_{m-1}(h_g) + \frac{\phi_{m-1}(h_g) - \phi_{m-1}(h_{g-1})}{r^{p_{m-1}} - 1}; \quad m = 1, 2, \dots; g = m + 1, \dots.\tag{2.75}$$

Do ponto de vista teórico, a Eq. (2.75) pode ser repetida infinitamente. Entretanto, em aplicações práticas considera-se um valor limite para g , isto é, $g = G$, onde G é um número inteiro positivo. Pode-se, então, associar os valores h_g ao espaçamento entre os pontos nodais de um conjunto com $g = 1, \dots, G$ malhas arbitrárias. Entretanto, MER torna-se especialmente simples no caso em que são consideradas diversas malhas, com $h_1, h_2, h_3, \dots, h_g, \dots$, representando uma sequência geométrica (DAHLQUIST e BJORK, 2008), ou seja, é ideal se admitir razão de refino constante, $r = h_{g-1}/h_g, g = 1, \dots, G$, para a geração de G malhas distintas ($\Omega^{h_1}, \Omega^{h_2}, \dots, \Omega^{h_g}, \dots, \Omega^{h_G}$), isto é, para geração das malhas Ω^{h_1} (grossa), Ω^{h_2} (fina), e assim por diante até Ω^{h_G} .

Presume-se que o emprego desse processo recursivo (Eq. (2.75)) proporcione a elevação progressiva de p_A de Eh , percorrendo os valores de p_V . Tal efeito pode ser analisado considerando-se uma malha Ω^h , com $h = h_G$, cuja solução numérica é obtida com diferentes níveis de extrapolação, $0, \dots, m$. Então, com a Eq. (2.72) admite-se a seguinte representação:

$$\begin{aligned}\phi_0(h) &= \Phi + c_0^{(0)}h^{p_0} + c_1^{(0)}h^{p_1} + c_2^{(0)}h^{p_2} + \dots + c_{m-1}^{(0)}h^{p_{m-1}} + c_m^{(0)}h^{p_m} + \dots, \\ \phi_m(h) &= \Phi + c_0^{(m)}h^{p_0} + c_1^{(m)}h^{p_1} + c_2^{(m)}h^{p_2} + \dots + c_{m-1}^{(m)}h^{p_{m-1}} + c_m^{(m)}h^{p_m} + \dots,\end{aligned}\tag{2.76}$$

em que os índices subscritos, $0, \dots, m, \dots$, dos coeficientes constantes ‘ c ’ representam a posição do termo na série analítica que descreve o erro numérico, ou seja, correspondem ao termo de ordem p_0, \dots, p_m, \dots ; e o índice sobrescrito (m) corresponde ao número de vezes em que se considera o emprego da Eq. (2.75), isto é, ao número de extrapolações realizadas. Em outras palavras, para cada nível de extrapolação (m) a série que descreve o termo indicativo de erro para $\phi_m(h)$ sofre alteração em seus coeficientes. E essa distinção dos coeficientes, com a variação de m , é denotada pelo índice sobrescrito entre parênteses.

De acordo com a explanação apresentada na seção anterior (Eqs. (2.65) e (2.69)), $\phi_0(h)$ e $\phi_1(h)$ possuem $O(h^{p_0})$ e $O(h^{p_1})$, respectivamente. Portanto, na Eq. (2.76) para $m = 1$, obrigatoriamente, deve-se ter $c_0^{(1)} = 0$.

Como a Eq. (2.76) corresponde a uma forma geral para expressão do erro cometido ao se aproximar o valor Φ por $\phi_m(h)$, é intuitivo se esperar que $c_0^{(m)} = c_1^{(m)} = \dots = c_{m-1}^{(m)} = 0$, isto é, que $\phi_m(h)$ tenha $O(h^{p_m})$.

Surge, então, a proposição:

$$\phi_m(h) = \Phi + O(h^{p_m}), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.77)$$

A validade dessa proposição pode ser demonstrada pelo Princípio da Indução Finita (IEZZI e MURAKAMI, 2006):

i) Primeiramente considera-se $m - 1 = 0 \Rightarrow m = 1$,

$$\phi_1(h) = \Phi + c_0^{(1)}h^{p_0} + c_1^{(1)}h^{p_1} + c_2^{(1)}h^{p_2} + \dots,$$

Com base na Eq. (2.74), tem-se

$$\begin{aligned} c_0^{(1)}h^{p_0} &= c_0^{(0)}h^{p_0} + \frac{c_0^{(0)}h^{p_0} - c_0^{(0)}(rh)^{p_0}}{r^{p_0} - 1} \\ &= c_0^{(0)}h^{p_0} + \frac{c_0^{(0)}h^{p_0}(1 - r^{p_0})}{r^{p_0} - 1} \\ &= c_0^{(0)}h^{p_0} - c_0^{(0)}h^{p_0}. \end{aligned}$$

Como $h \neq 0$, $c_0^{(1)}h^{p_0} = 0 \Rightarrow c_0^{(1)} = 0$. Portanto, $\phi_1(h)$ possui $O(h^{p_1})$.

ii) Admite-se que $\phi_{m-1}(h)$ tenha $O(h^{p_{m-1}})$ e verifica-se a extensão dessa proposição para $\phi_m(h)$, ou seja, verifica-se se realmente $\phi_m(h)$ possui um termo indicativo de erro de $O(h^{p_m})$. Para isso, basta provar que $c_{m-1}^{(m)} = 0$.

Sabe-se que,

$$\begin{aligned} c_{m-1}^{(m)}h^{p_m} &= c_{m-1}^{(m-1)}h^{p_{m-1}} + \frac{c_{m-1}^{(m-1)}h^{p_{m-1}} - c_{m-1}^{(m-1)}(rh)^{p_{m-1}}}{r^{p_{m-1}} - 1} \\ &= c_{m-1}^{(m-1)}h^{p_{m-1}} - c_{m-1}^{(m-1)}h^{p_{m-1}}. \\ &= c_{m-1}^{(m-1)}h^{p_{m-1}} + \frac{c_{m-1}^{(m-1)}h^{p_{m-1}}(1 - r^{p_{m-1}})}{r^{p_{m-1}} - 1} \\ c_{m-1}^{(m)}h^{p_m} &= 0 \Rightarrow c_{m-1}^{(m)} = 0. \text{ Logo, } \phi_m(h) \text{ tem } O(h^{p_m}). \end{aligned}$$

Como (i) e (ii) foram verificadas, conclui-se que: $\phi_m(h) = \Phi + O(h^{p_m})$, $m = 1, 2, \dots$.

De modo geral, pode-se dizer que o processo de MER (em inglês, *Repeated Richardson Extrapolation*, RRE), é obtido pela aplicação repetida da ER, onde: p_0 é considerada apenas na primeira aplicação de ER ou primeiro nível de extrapolação; nos demais níveis, consideram-se os valores sequenciais das próximas ordens verdadeiras ($p_1, p_2, p_3, \dots, p_m$) para obtenção de $\phi_m(h)$ com $O(h^{p_m})$.

Embora a expressão apresentada na Eq. (2.75) seja apropriada para o estudo das propriedades de MER, ao se considerar, entretanto, o seu emprego em aplicações computacionais a notação adotada por Marchi *et al.* (2008; 2013) torna-se mais adequada. Nesse enfoque, a solução numérica (ϕ) em uma malha Ω^{h_g} , onde g indica o nível de malha, com m aplicações de ER é dada por (MARCHI *et al.*, 2008; 2013):

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1}. \quad (2.78)$$

A Eq. (2.78) é válida para $g = 2, \dots, G$ e $m = 1, \dots, g - 1$. Em qualquer malha Ω^{h_g} , $\phi_{g,0}$ representa a solução numérica (ϕ) sem o emprego da ER. O emprego de MER, sobre a variável ϕ , é detalhado no Algoritmo III (Tab. 2.5), apresentado na sequência.

Tabela 2.5: Algoritmo III, aplicação de MER.

Obter soluções numéricas para a variável de interesse ϕ em G malhas

distintas: $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_G$.

Fazer: $\phi_{1,0} = \phi_1, \phi_{2,0} = \phi_2, \phi_{2,0} = \phi_2, \dots, \phi_{G,0} = \phi_G$.

Para $m = 1, \dots, G - 1$

Para $g = m + 1, \dots, G$

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1}.$$

De acordo com a definição apresentada anteriormente, os valores de p_v formam uma progressão aritmética. Com o emprego de MER, esse comportamento teórico pode ser confirmado, *a posteriori*, considerando-se os cálculos de p_E , quando a solução analítica (Φ) é conhecida, e de p_U que, generalizadas para MER, são representadas nas Eqs. (2.79) e (2.80), respectivamente. Teoricamente, à medida que $h \rightarrow 0$, os valores de $(p_E)_{g,m}$ e $(p_U)_{g,m}$ devem tender aos valores de p_v do respectivo nível de extrapolação (m), ou seja, p_m (MARCHI *et al.*, 2008; 2013).

$$(p_E)_{g,m} = \frac{\log \left[\frac{Eh_{g-1,m}}{Eh_{g,m}} \right]}{\log(r)} = \frac{\log \left[\frac{\Phi - \phi_{g-1,m}}{\Phi - \phi_{g,m}} \right]}{\log(r)}, \quad (2.79)$$

$$(p_U)_{g,m} = \frac{\log \left[\frac{\phi_{g-1,m} - \phi_{g-2,m}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}} \right]}{\log(r)}. \quad (2.80)$$

A Eq. (2.79) é válida para $g = 2, \dots, G$ e $m = 1, \dots, g - 1$, enquanto que a Eq. (2.80) é válida, somente, para $g = 3, \dots, G$ e $m = 1, \dots, \text{Int}((g-3)/2)$, onde $\text{Int}(\tau)$ corresponde à parte inteira do número real τ .

Analogamente ao emprego da ER, nos casos em que não se conhece a solução analítica (Φ) e as ordens verdadeiras (p_V) é possível se empregar a Eq. (2.78) considerando-se $(p_U)_{g,m-1}$ no lugar de p_{m-1} .

Ao se considerar a Eq. (2.78) (e o Algoritmo III, Tab. 2.5), nota-se que a solução numérica com MER diz respeito à solução $\phi_{g,m}$ envolvendo diversos níveis de malhas e de extrapolação. Teoricamente, quanto maior o valor de m mais próximo $\phi_{g,m}$ estará de Φ (maior o nível de acurácia).

Nessa perspectiva, emprega-se o maior valor de m permitido. Entretanto, em cada malha específica, o maior valor de m possível está, sobretudo, condicionado ao número de malhas disponíveis. Por exemplo: para $m=1$ e $m=2$ são necessárias, respectivamente, as soluções numéricas ϕ em duas e três malhas distintas, como pode ser verificado na Tab. 2.6.

Portanto, é intuitivo se admitir que o valor máximo de m permitido na malha Ω^{h_s} seja $m = g - 1$. Considera-se, então, como foco a sequência: $\phi_M = \{\phi_{2,1}, \phi_{3,2}, \dots, \phi_{g,g-1}, \dots, \phi_{G,G-1}\}$ (Tab. 2.6) onde os índices subscritos correspondem, respectivamente, ao nível de malha (g) e ao nível de extrapolação (máximo em cada malha) ($m = g - 1$).

Tabela 2.6: Representação esquemática do emprego de MER.

$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$...	$m = G - 2$	$m = G - 1$
$\phi_{1,0} = \phi_1$					
$\phi_{2,0} = \phi_2$	$\phi_{2,1}$				
$\phi_{3,0} = \phi_3$	$\phi_{3,1}$	$\phi_{3,2}$			
...		
$\phi_{G-1,0} = \phi_{G-1}$	$\phi_{G-1,1}$	$\phi_{G-1,2}$...	$\phi_{G-1,G-2}$	
$\phi_{G,0} = \phi_G$	$\phi_{G,1}$	$\phi_{G,2}$...	$\phi_{G,G-2}$	$\phi_{G,G-1}$

A acurácia das soluções numéricas ϕ_M pode ser analisada considerando-se a obtenção de p_A , *a posteriori*. Certamente, tal análise pode ser conduzida com base nos conceitos de p_E e p_U . No entanto, as expressões para $(p_E)_{g,m}$ e $(p_U)_{g,m}$, Eqs. (2.79) e (2.80) envolvem as soluções $\phi_{g,m}$ em um mesmo nível de extrapolação, ou seja, não envolvem soluções em níveis (m) distintos de extrapolação e, portanto, não fornecem estimativas para p_A de ϕ_M .

Dessa necessidade, e por analogia às definições de p_E e p_U , determinam-se para o caso específico em que $m = g - 1$:

$$(p_{E,M})_g = \frac{\log \left[\frac{\Phi - \phi_{g-1,m-1}}{\Phi - \phi_{g,m}} \right]}{\log(r)}, \quad (2.81)$$

para $g = 2, \dots, G$; e

$$(p_{U,M})_g = \frac{\log[(\psi_M)_g]}{\log(r)}, \text{ onde } (\psi_M)_g = \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}, \quad (2.82)$$

para $g = 3, \dots, G$.

Então, com as Eqs. (2.81) (quando a solução analítica é conhecida) ou (2.82) é possível se analisar, *a posteriori* das soluções numéricas ϕ_M ($m = g - 1$), o valor da sua ordem de acurácia. Geometricamente, $(p_{E,M})_g$ corresponde à inclinação local média entre duas malhas ($\Omega^{h_{g-1}}$ e Ω^{h_g}), em escala bilogarítmica, do gráfico envolvendo o erro de discretização associado a ϕ_M , e denotado por Em , *versus* h . Analogamente, $(p_{U,M})_g$ corresponde à inclinação local média entre três malhas ($\Omega^{h_{g-2}}$, $\Omega^{h_{g-1}}$ e Ω^{h_g}), (em escala bilogarítmica) do gráfico envolvendo a estimativa para Em , denotada por Um , *versus* h .

2.8 RESUMO DO CAPÍTULO 2

Neste capítulo foram abordados os conceitos de erro de discretização e de sua estimativa, e os conceitos de ordem de acurácia *a priori* (ordens verdadeiras) e *a posteriori* (ordens efetiva e aparente) de uma solução numérica. Foram descritos os métodos numéricos utilizados, bem como a forma de se tratar o erro de discretização em cada caso. Foram discutidos aspectos inerentes à resolução de sistemas de equações algébricas em CFD, considerando-se como focos os métodos iterativos básicos, o erro de iteração e o emprego de métodos *multigrid*. Em seguida, foram apresentados os métodos de interpolação polinomial e de otimização, em domínios uni e bidimensional, que atendem às necessidades do problema definido no presente trabalho. Ao final, foram abordados aspectos teóricos e computacionais

sobre ER e MER, e definiu-se ϕ_M como sendo a solução obtida com o emprego de MER, com o maior nível de acurácia possível. Foram definidos, também, Em e Um como sendo o erro de discretização e a sua estimativa associados a ϕ_M , respectivamente. A partir disso, considera-se a aplicação de MER com o maior número de extrapolações permitido, em cada malha.

3 METODOLOGIA PARA O EMPREGO DE MER

Este capítulo tem o seguinte aspecto principal: **o emprego de MER requer a obtenção de soluções numéricas, para determinada variável de interesse, em uma coleção de malhas distintas.** Nesse cenário, inicialmente são apresentados os diferentes tipos de variáveis, que são classificadas de acordo com a sua localização. A partir disso, propõe-se um conjunto de procedimentos para a aplicação efetiva de MER.

3.1 CLASSIFICAÇÃO DAS VARIÁVEIS

A classificação adotada no presente estudo é motivada pelo problema descrito na seção 1.1. Nessa situação, percebe-se que o desempenho de MER é totalmente prejudicado no caso de variáveis que apresentam alteração de coordenadas, ao se considerar a sua resolução em malhas distintas. Então, com o objetivo de abranger diversos casos que podem ocorrer ao se aplicar MER, são considerados cinco tipos de variáveis. Cabe ressaltar que tal classificação leva em conta o processo de refinamento de malha.

Inicialmente, por questão didática, busca-se ilustrar os tipos de variáveis identificadas com uma abordagem unidimensional, nas Figs. 3.1 a 3.5. Nessas figuras, ϕ_1 com coordenada a_1 , ϕ_2 com coordenada a_2 , e ϕ_3 com coordenada a_3 , correspondem, respectivamente, às soluções numéricas obtidas nas malhas Ω^{h_1} (grossa), Ω^{h_2} (fina) e Ω^{h_3} (superfina); com $r = h_1/h_2 = h_2/h_3$ (razão de refino constante). Porém, a classificação adotada é extensiva a domínios multidimensionais. Em seguida são abordados, separadamente, os aspectos que caracterizam cada tipo de variável.

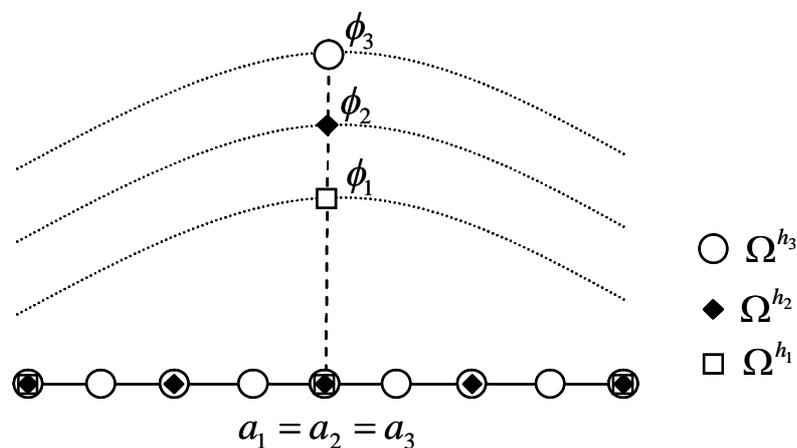


Figura 3.1: Variável com mesma localização nodal em malhas distintas.

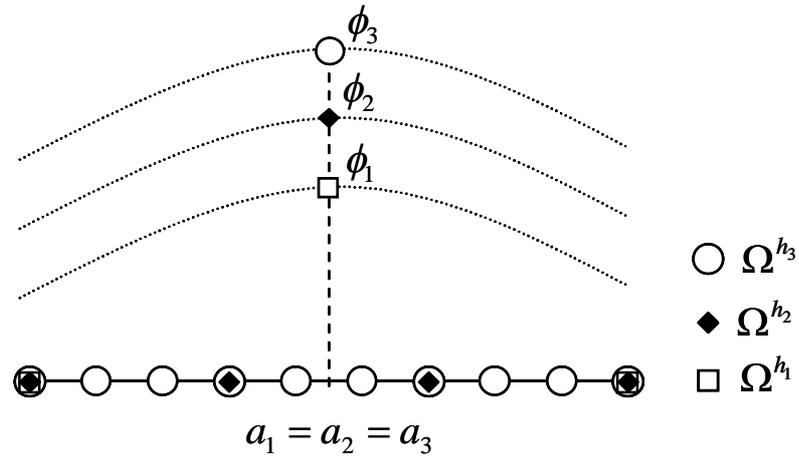


Figura 3.2: Variável com localização pré-estabelecida, e situada no ponto médio entre pontos nodais em malhas distintas.

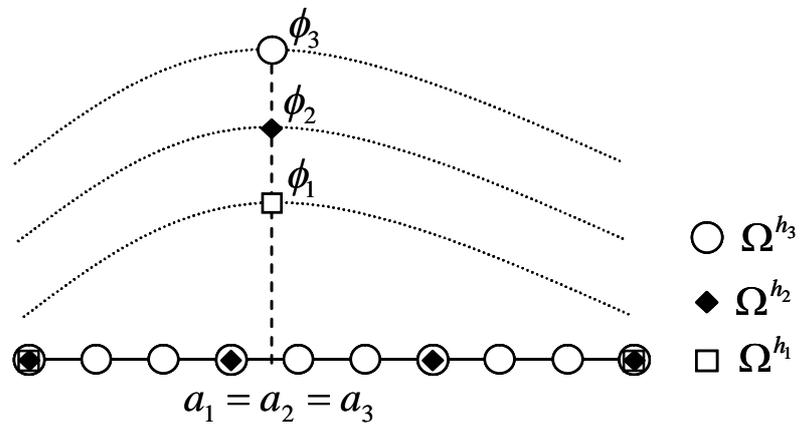


Figura 3.3: Variável com localização pré-estabelecida, porém não situada em um nó específico ou no ponto médio entre pontos nodais em malhas distintas.

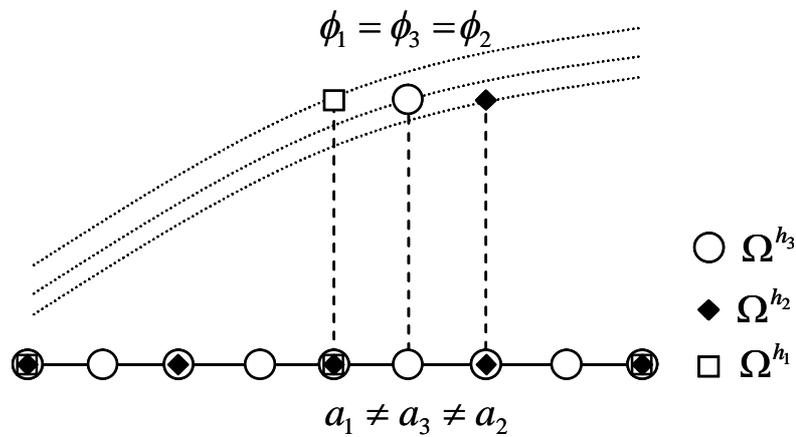


Figura 3.4: Variável com valor pré-estabelecido e com localização dependente da malha adotada.

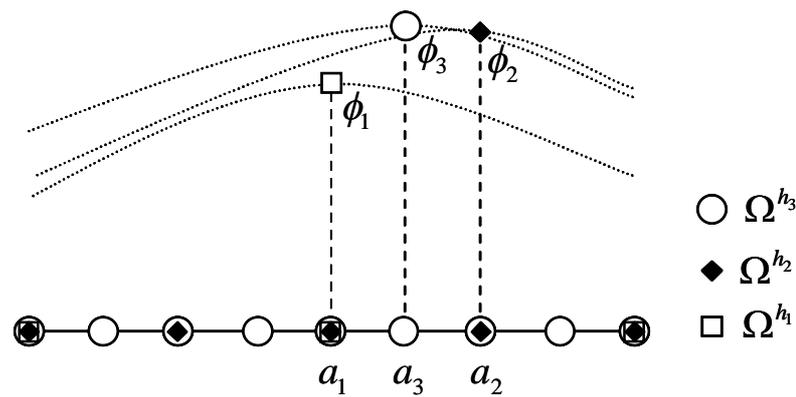


Figura 3.5: Variável com localização indeterminada e que apresenta alteração de coordenadas ao se considerar malhas distintas.

3.1.1 Variável do tipo I

A classe denominada **tipo I** consiste de variáveis locais, cuja localização coordenada (a) é mantida em todas as malhas (Ω^h) consideradas e coincide com um ponto nodal (Fig. 3.1) ou, ainda, é caracterizada por uma variável global.

3.1.2 Variável do tipo II

O **tipo II** é constituído por variáveis locais em que a situa-se no ponto médio entre pontos nodais de Ω^h , ou seja, suas coordenadas coincidem com a média aritmética das coordenadas dos pontos nodais vizinhos (Fig. 3.2).

3.1.3 Variável do tipo III

As variáveis do **tipo III** são variáveis locais onde a não é dada por um ponto nodal de Ω^h , nem coincide com o ponto médio entre nós vizinhos; entretanto, possui uma localização fixa pré-estabelecida (Fig. 3.3). Como exemplo, cita-se uma variável com coordenada irracional, cuja localização não coincide com pontos nodais nem com a média aritmética das coordenadas de pontos nodais vizinhos.

3.1.4 Variável do tipo IV

O **tipo IV** é caracterizado basicamente pela identificação de a para um valor específico de ϕ ($\phi = \varphi$, $\varphi \in \mathfrak{R}$), ou seja, pela localização coordenada de variáveis cujos valores são estabelecidos previamente. Essa classe de variáveis envolve grandezas locais cujo valor é conhecido e busca-se identificar a sua localização (Fig. 3.4). Como exemplo: em um

escoamento objetiva-se encontrar a coordenada onde se tem o número de Mach com valor unitário (Mach crítico).

3.1.5 Variável do tipo V

As variáveis do **tipo V** representam a principal motivação para o desenvolvimento do presente trabalho. Nesse âmbito, ϕ corresponde a variáveis locais em que a não é conhecida previamente e sua determinação depende da malha adotada, isto é, são variáveis que podem apresentar mudança de coordenadas em malhas distintas (Fig. 3.5). Como exemplo desse tipo de variável tem-se: a obtenção de pontos extremos (ponto de máximo ou de mínimo). Nesse caso, ao se empregar MER sobre as ϕ obtidas em malhas distintas, o seu desempenho pode ser totalmente prejudicado devido ao efeito de alteração de coordenadas, com o refinamento de malha (conforme ilustrado na seção 1.1).

3.2 PROCEDIMENTOS PARA O EMPREGO DE MER

De acordo com a classificação apresentada na seção anterior, são tratados na sequência os procedimentos para o emprego de MER em cada caso.

3.2.1 MER em variável do tipo I

Em variáveis do tipo I o emprego de MER ocorre diretamente, isto é, através da Eq. (2.78) e da sequência de passos apresentada no Algoritmo III (seção 2.7). Dessa forma, pode-se obter ϕ_M e Em (quando Φ é conhecida).

3.2.2 MER em variável do tipo II

Ao se considerar uma variável do tipo II, MER não pode ser aplicada diretamente como no caso anterior. Como a localização da variável de interesse não é coincidente com as coordenadas nodais, torna-se necessário o emprego de um método que possibilite o seu cálculo, previamente à aplicação de MER.

Então, com o objetivo de identificar a metodologia mais adequada para essa finalidade, a partir dos valores nodais obtidos, considerou-se o emprego de diversas técnicas de aproximação (Mínimos Quadrados e Transformada de Fourier, com várias ordens, interpolação por *Spline* Cúbica e interpolação polinomial 1D, conforme abordado na seção 2.4.1, com $p = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8$ e 10 (Eq. (2.33)) e detalhado no Apêndice A. O melhor

resultado, enfim, foi obtido com interpolação polinomial, com $p = 1$ (interpolação linear). Tal resultado pode ser atribuído à localização da variável de interesse (ponto médio entre coordenadas nodais).

Portanto, para esse tipo de variável indica-se, primeiramente, o emprego de interpolação linear no caso unidimensional (Eq. (2.33), com $p = 1$) ou bilinear no caso bidimensional (Eq. (2.60), com $p = 1$, Algoritmo I da seção 2.4.2). Dessa forma é possível se obter ϕ em malhas distintas e, de modo análogo ao cálculo de Eh (Eq. (2.71)), obtém-se o erro numérico denotado por Ep (quando Φ é conhecida).

A partir desses valores obtidos para ϕ , aplica-se MER como no caso anterior (Eq. (2.78), Algoritmo III da seção 2.7). Denota-se, então, a solução equivalente à ϕ_M por ϕ_{pM} , devido ao emprego de interpolação polinomial. Analogamente, denota-se por Epm o erro numérico que equivale à definição de Em (quando Φ é conhecida).

3.2.3 MER em variável do tipo III

Assim como no caso anterior, para a avaliação de variáveis do tipo III foram considerados vários métodos. Dentre esses métodos, ao se considerar o emprego de MER como pós-processamento, os resultados mais promissores foram obtidos com interpolação polinomial. Considerou-se, então, para o caso unidimensional, a Eq. (2.33) com $p = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8$ e 10 (detalhes apresentados no Apêndice A); e para o caso bidimensional a Eq. (2.60) com $p = 1, 2, 3, 4$ e 6 (detalhes apresentados no Apêndice C). Em seguida, calculou-se ϕ_{pM} , de modo semelhante a ϕ_M , com a Eq. (2.78). Observou-se, assim, que ϕ_{pM} apresentou resultados mais acurados (menor magnitude para Epm) com $p = 10$, no caso unidimensional, e com $p = 6$, no caso bidimensional.

Para esse tipo de variável indica-se, portanto, o emprego de interpolação polinomial 1D (Eq. (2.33)) ou 2D (Eq. (2.60)) com o maior valor de p (p_{max}) que esteja disponível (no presente trabalho $p = 10, 1D$; e $p = 6, 2D$) para obtenção de ϕ em malhas distintas.

Em seguida, sobre os valores obtidos para ϕ , considera-se o emprego de MER (Eq. (2.78)), ou seja, analogamente à notação empregada na seção anterior, obtém-se ϕ_{pM} e Epm (quando Φ é conhecida).

3.2.4 MER em variável do tipo IV

No caso de variáveis do tipo IV, em que a variável de interesse consiste na determinação da localização para um valor funcional conhecido (φ), a interpolação polinomial com grau $p = p_{\max}$ (análogo ao caso anterior) caracteriza o procedimento mais adequado, dentre os diversos métodos analisados. Então, primeiramente deve-se determinar o polinômio interpolador com o maior grau possível, com base nos valores nodais que se situam nas proximidades de φ (estabelecido *a priori*).

Em seguida, considerando-se esse valor e o polinômio obtido, calcula-se a solução que corresponde à resolução da equação polinomial obtida (resolução considerando-se o método de Newton (Eq. (2.62))) (detalhes apresentados no Apêndice B), isto é, resolve-se $\xi_p = \varphi$. Enfim, com os valores obtidos em cada malha aplica-se MER (Eq. (2.78)) e obtém-se ϕ_{pM} (analogamente aos casos anteriores) e E_{pm} (quando Φ é conhecida).

3.2.5 MER em variável do tipo V

Em uma variável do tipo V a obtenção de ϕ deve ser considerada de modo que o efeito de alteração de coordenadas em malhas distintas seja minimizado, ou inexistente. Com esse propósito, dentre os métodos analisados, a interpolação polinomial (detalhes apresentados nos apêndices A e C) seguida do emprego de métodos de otimização (detalhes apresentados nos apêndices B e D) apresentou resultados satisfatórios.

Nesse caso, os $p+1$ pontos nodais no caso unidimensional ou, os $(p+1)^2$ pontos nodais no caso bidimensional, considerados para obtenção de ξ_p localizam-se nas proximidades (vizinhanças) do ponto de máximo (ou de mínimo) discreto, ou seja, do maior (ou do menor) valor nodal obtido na malha Ω^h . E, como ξ_p caracteriza uma função convexa, tem-se a garantia de existência e unicidade do seu ponto de máximo (ou de mínimo) no intervalo determinado por tais pontos.

Portanto, em se tratando de variáveis do tipo V, para obtenção de ϕ em malhas distintas indica-se: primeiramente, o emprego de interpolação polinomial com $p = p_{\max}$ (assim como na seção anterior); em seguida, a busca do ponto ótimo de ξ_p , $\max \xi_p$ (ou $\min \xi_p$) de acordo com o procedimento descrito no Algoritmo II da seção 2.5 e ilustrado nos apêndices B e D; ao final, com esses valores de ϕ (em malhas distintas), a aplicação de MER

é considerada (Eq. (2.78)) e, analogamente (casos anteriores), obtêm-se ϕ_{pM} e E_{pm} (quando Φ é conhecida).

3.3 ALGORITMO GERAL PARA O EMPREGO DE MER

De modo geral, ao se considerar a utilização de MER sobre determinada variável de interesse indica-se a adoção do procedimento descrito a seguir.

Primeiramente, deve-se classificar a variável considerada de acordo com um dos cinco tipos descritos anteriormente e, então:

- para variáveis do **tipo I** obtêm-se ϕ em cada malha e emprega-se MER diretamente com a Eq. (2.78);
- para variáveis do **tipo II** emprega-se a interpolação polinomial com $p = 1$ (Eqs. (2.37) ou (2.60)) para obtenção de ϕ através de ξ_p em cada malha, e em seguida emprega-se MER (Eq. (2.78));
- para variáveis do **tipo III** considera-se a interpolação polinomial com grau $p \max (\xi_p$ com as Eqs. (2.37) ou (2.60)), para obtenção de ϕ em cada malha, e na sequência aplica-se MER (Eq. (2.78));
- para variáveis do **tipo IV** emprega-se interpolação polinomial com grau $p \max (\xi_p$ com as Eqs. (2.37) ou (2.60)), resolve-se a equação polinomial obtida considerando-se a igualdade entre ξ_p e o valor real estabelecido *a priori* (Eq. (2.62), $\xi_p = \varphi$), para obtenção de ϕ em cada malha e, então, emprega-se MER (Eq. (2.78)) sobre esses valores;
- para variáveis do **tipo V**, analogamente, emprega-se interpolação polinomial com $p \max$ (Eqs. (2.37) ou (2.60)) e, na sequência, busca-se o seu ponto ótimo (Algoritmo II, Tab. 2.4) para a determinação de ϕ em cada malha; finalmente, considera-se o emprego de MER (Eq. (2.78));

Esse conjunto de procedimentos é representado, esquematicamente, na Fig. 3.6.

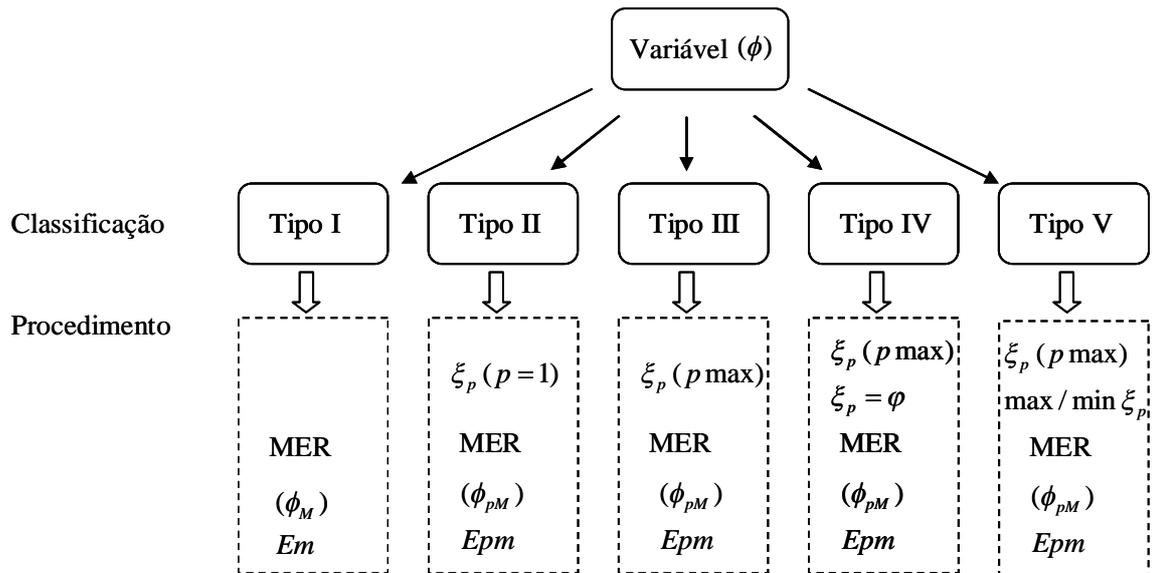


Figura 3.6: Metodologia para o emprego de MER.

3.4 RESUMO DO CAPÍTULO 3

Neste capítulo, inicialmente foram estabelecidos cinco tipos de variáveis com base no processo de refinamento de malha, ou seja, de acordo com a localização da variável de interesse em um conjunto de malhas distintas (estabelecidas por refinamento). A partir dessa classificação foram apresentados os procedimentos específicos para o emprego efetivo de MER, em cada caso. Tais procedimentos envolvem a aplicação de interpolação polinomial e de métodos de otimização. Desse modo, para variáveis dos tipos II a V, determinam-se: ϕ_{pM} e E_{pm} que equivalem a ϕ_M e E_m , descritos no capítulo 2 desta tese.

4 ESTIMATIVA PARA O ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Neste capítulo são tratados aspectos referentes à obtenção de estimativa para o erro de discretização, considerando-se o emprego de MER. Nesse sentido, inicialmente são abordados dois estimadores disponíveis na literatura sendo que suas expressões são adaptadas para MER, e em seguida são apresentados os estimadores propostos nesta tese.

4.1 ESTIMADOR DELTA

Em duas malhas, fina e grossa, Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g-1}}$, respectivamente, são obtidas as soluções numéricas ϕ_g e ϕ_{g-1} . A partir disso, o estimador *delta*, denotado por U_Δ , fornece uma estimativa para Eh correspondente à ϕ_g , dada pela expressão:

$$U_\Delta(\phi_g) = |\phi_g - \phi_{g-1}|. \quad (4.1)$$

A estimativa de Eh , calculada com a Eq. (4.1) representa uma banda ou intervalo em torno da solução numérica ϕ_g . Esse estimador foi usado por Demirdzic *et al.* (1992), citado por Marchi (2001, p. 60), e não leva em conta a razão de refino (r) entre as malhas ou o valor de p_0 .

Nessa perspectiva, ao se considerar as soluções numéricas obtidas com o emprego de MER, a partir de um conjunto de G malhas distintas, Marchi *et al.* (2009) propõem a estimativa para Em na malha mais fina adotada (Ω^{h_G}) da seguinte forma:

$$U_\Delta(\phi_{G,m}) = |\phi_{G,m-1} - \phi_{G-1,m-1}|. \quad (4.2)$$

Nesse caso, $m = G - 1$ representa o último nível de extrapolação considerado e $m - 1$ o nível imediatamente anterior. Assim, o cálculo de $U_\Delta(\phi_{G,m})$ fornece uma estimativa para Em associado à $\phi_{G,m}$ com base nos valores $\phi_{G,m-1}$ e $\phi_{G-1,m-1}$ obtidos (Tab. 4.1). Considera-se, então, a magnitude da diferença entre os valores calculados com um nível a menos de extrapolação, para a malha atual (fina, Ω^{h_G}) e a malha imediatamente mais grossa ($\Omega^{h_{G-1}}$).

Tabela 4.1: Representação esquemática do emprego de $U_{\Delta}(\phi_{G,m})$.

Nível de extrapolação		
Malha	$m-1$	m
$\Omega^{h_{G-1}}$	$\phi_{G-1,m-1}$	
Ω^{h_G}	$\phi_{G,m-1}$	$U_{\Delta}(\phi_{G,m}) = \phi_{G,m-1} - \phi_{G-1,m-1} $

4.2 ESTIMADOR *PM*

De acordo com a teoria explanada na seção 2.6, a ER pode ser empregada sempre que se tenha um termo indicativo de erro que dependa de h . Com esse enfoque, a estimativa para o Eh associado, denotada por U_{Ri} , com o estimador Richardson é dada por

$$U_{Ri}(\phi_g) = \frac{\phi_g - \phi_{g-1}}{r^{p_0} - 1}, \quad (4.3)$$

em que ϕ_g e ϕ_{g-1} seguem as definições apresentadas anteriormente.

Além da magnitude da estimativa de Eh , U_{Ri} fornece o seu sinal (MARCHI, 2001), e pode ser empregado em diversos níveis de malha, isto é, para Ω^{h_g} com $g = 2, \dots, G$. Marchi *et al.* (2008; 2013) propõem a extensão desse estimador para soluções numéricas obtidas com o emprego de MER, através da expressão

$$U_{pm}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}{r^{p_m} - 1}. \quad (4.4)$$

A simbologia U_{pm} , adotada neste trabalho, indica a aplicação do estimador Richardson, com base em $p_v = \{p_m, m = 0, 1, 2, \dots\}$, sobre as soluções obtidas com o emprego de MER, e então denominado estimador *pm*. A Eq. (4.4) é válida para $m = [0, G-2]$ e $g = [m+2, G]$, onde g e m seguem as definições apresentadas anteriormente. Na Tab. 4.2 busca-se ilustrar o emprego de U_{pm} em um nível de extrapolação m (qualquer).

Tabela 4.2: Representação esquemática do emprego de U_{pm} .

Malha	Nível de extrapolação m
$\Omega^{h_{g-1}}$	$\phi_{g-1,m}$
Ω^{h_g}	$\phi_{g,m}$
$U_{pm}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}{r^{p_m} - 1}$	

4.3 ESTIMADOR PM CORRIGIDO

Pode-se constatar na Eq. (4.4) e na Tab. 4.2 que U_{pm} não é capaz de estimar Em , isto é, U_{pm} não é apropriado para se estimar o erro de discretização associado à $\phi_M = \{\phi_{2,1}, \phi_{3,2}, \dots, \phi_{g,g-1}, \dots, \phi_{G,G-1}\}$. Entretanto, é aplicável às soluções com um nível a menos de extrapolação, ou seja, U_{pm} é empregado para o nível de extrapolação $m = g - 2$, $\{\phi_{2,0}, \phi_{3,1}, \dots, \phi_{g,g-2}, \dots, \phi_{G,G-2}\}$, cujo erro de discretização é denotado por $Em2$.

Dado que ϕ_M caracteriza a solução numérica com o maior nível de acurácia, obtida com emprego de MER (conforme detalhado na seção 2.7), para se estimar Em considerando-se a concepção de U_{pm} , torna-se necessária a identificação de uma relação entre Em e $Em2$. Nessa perspectiva, considera-se o termo de ordem p_m na série que descreve o erro de discretização associado a ϕ obtida com o emprego de MER (Eq. 2.77), com m níveis de extrapolação. Assim, ao se considerar $h \rightarrow 0$, o termo dominante do erro de discretização associado às soluções numéricas de $O(h^{pm})$, com $m = g - 1$, nas malhas Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$ resultam em $c_m h_g^{pm}$ e $c_m h_{g+1}^{pm}$, respectivamente, conforme detalhado na seção 2.7 e ilustrado na Fig. 4.1 (caso unidimensional).

Ao se considerar, então, $c_m h_{g+1}^{pm} \neq 0$, pode-se fazer

$$\frac{c_m h_g^{pm}}{c_m h_{g+1}^{pm}} = \left(\frac{h_g}{h_{g+1}} \right)^{pm} = r^{pm}. \quad (4.5)$$

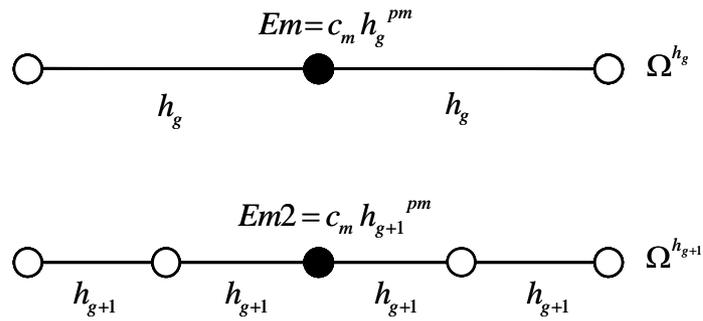


Figura 4.1: Erro de discretização com $O(h^{pm})$, para $m = g - 1$, nas malhas Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$, em perspectiva monocoeficiente.

Portanto,

$$\frac{Em}{Em2} = r^{pm} \Leftrightarrow Em = r^{pm} Em2. \quad (4.6)$$

Seguindo esse raciocínio, como U_{pm} (Eq. 4.4) estima $Em2$, considera-se o seu cálculo com o fator de correção r^{pm} , e denota-se U_{pmc} como sendo a estimativa para Em dada por

$$U_{pmc}(\phi_{g,m}) = r^{pm} U_{pm}(\phi_{g+1,m}), \quad (4.7)$$

em que $m = g - 1$. Devido ao emprego de r^{pm} (fator de correção), U_{pmc} é denominado nesta tese de estimador pmc , ou estimador pm corrigido. No apêndice E são apresentados alguns testes numéricos nos quais foram obtidos resultados para U_{pmc} , com níveis de acurácia mais elevados do que para U_{pm} .

4.4 ESTIMADOR *PSI*

Além da teoria apresentada na seção 2.6, uma outra abordagem para ER considera a série de Richardson, denotada por R_∞ . Nesse enfoque, as limitações do emprego da ER podem ser exploradas considerando-se o texto de Marchi e Silva (2002), onde

$$R_\infty = \frac{1}{\psi} + \frac{1}{\psi^2} + \frac{1}{\psi^3} + \frac{1}{\psi^4} + \dots, \quad (4.8)$$

em que $\psi \in \mathfrak{R}$ é denominada razão de convergência da série.

Nota-se que R_∞ (Eq. 4.8) corresponde a uma série geométrica e, com isso, para $|\psi| > 1$, tem-se

$$R_\infty = \frac{1}{\psi - 1}. \quad (4.9)$$

Admitindo-se os números reais positivos r e P , pode-se definir $|\psi| = r^P$, de modo que

$$R_\infty = \begin{cases} \frac{1}{r^P - 1}, & \text{se } \psi > 1; \\ \frac{1}{-r^P - 1}, & \text{se } \psi < -1. \end{cases} \quad (4.10)$$

Dessa forma, e considerando-se $P = p_0$, a Eq. (2.70) pode ser reescrita como

$$\phi_\infty = \phi_g + R_\infty (\phi_g - \phi_{g-1}), \quad (4.11)$$

em que ϕ_{g-1} e ϕ_g correspondem às soluções obtidas nas malhas $\Omega^{h_{g-1}}$ (grossa) e Ω^{h_g} (fina), respectivamente.

Portanto, de modo análogo à Eq. (2.72), com a Eq. (4.11) pode-se escrever

$$U_\psi(\phi_g) = \phi_\infty - \phi_g = R_\infty (\phi_g - \phi_{g-1}),$$

$$U_\psi(\phi_g) = \frac{\phi_g - \phi_{g-1}}{\psi - 1}, \quad (4.12)$$

ou seja, admite-se a existência de um estimador baseado no valor de ψ correspondente à malha Ω^{h_g} .

Ao se considerar as soluções numéricas ϕ_M , a Eq. (4.12) pode ser empregada a partir da Eq. (2.81), isto é, considera-se a razão de convergência de ϕ_M para se estimar Em da seguinte forma:

$$U_\psi(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi - 1}, \text{ onde } \psi = (\psi_M)_g = \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}; \quad (4.13)$$

sendo possível se considerar $g = 3, \dots, G$ (de acordo com a Eq. 2.83) malhas distintas. A Tab. 4.3 ilustra o emprego desse estimador para Em ($m = g - 1$).

Tabela 4.3: Representação esquemática do emprego de U_ψ .

Nível de extrapolação			
Malha	$m - 2$	$m - 1$	m
$\Omega^{h_{g-2}}$	$\phi_{g-2,m-2}$	$\phi_{g-1,m-1}$	$\phi_{g,m}$
$\Omega^{h_{g-1}}$	$\phi_{g-1,m-2}$		
Ω^{h_g}	$\phi_{g,m-2}$	$\phi_{g,m-1}$	

$\Rightarrow U_\psi(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi - 1}$

De acordo com a explanação anterior (Eqs. 4.8 a 4.10), R_∞ converge quando $|\psi| > 1$. Em decorrência disso, para ψ calculado com a Eq. (4.13), $|\psi| > 1$ acarreta a convergência de ϕ_M . Sob esse aspecto, é coerente se admitir o emprego de U_ψ , na malha Ω^{h_g} , somente para $\psi < -1$ ou $\psi > 1$, isto é, quando ϕ_M converge e, conseqüentemente, ocorre a redução da magnitude de Em . Nesse contexto, o estimador U_ψ é denominado estimador *psi* e fornece uma estimativa para Em .

4.4.1 Critério para o emprego efetivo de MER

Do ponto de vista prático, nos casos em que a solução analítica Φ não é conhecida, torna-se extremamente importante o estabelecimento de um critério para o emprego efetivo de MER, em uma malha qualquer Ω^{h_g} , visto que a sua ação destina-se, exclusivamente, à redução de Em . Entretanto, ao se considerar o processo de refinamento de malha, quando

$h \rightarrow 0$, a obtenção de $\phi_{g,m}$ (Eq. 2.79) pode sofrer influência de E_π e, por esse motivo é recomendável que tal efeito seja monitorado. Ao se definir esse monitoramento busca-se, sobretudo, garantir a redução da magnitude do erro numérico, mediante a convergência de ϕ_M . Nesse enfoque, pode-se dizer que a condição $|\psi| > 1$ está diretamente relacionada ao emprego efetivo de MER.

Nas simulações numéricas realizadas, em problemas-teste com Φ conhecida (Apêndice E), Em apresenta aumento de sua magnitude com $h \rightarrow 0$ a partir do momento (malha Ω^{h_s}) em que $(p_{U,M})_g \leq 0$ (Eq. 2.83). Esse comportamento é compatível com a condição apresentada no parágrafo anterior, pois de acordo com o argumento proposto nas Eqs. (4.10) e (4.13),

$$|\psi| \leq 1 \Rightarrow \left| \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}} \right| \leq 1 \Rightarrow (p_{U,M})_g \leq 0. \quad (4.14)$$

A Eq. (4.14) caracteriza, especialmente, o momento em que a aplicação de MER perde a sua eficácia sobre a redução do erro numérico ($h \rightarrow 0$). A partir desse momento, a componente dominante no erro numérico não é mais Eh , mas sim E_π , sobre o qual MER não possui qualquer efeito. Portanto, ao se obter $(p_{U,M})_g \leq 0$, $\phi_{g-1,m-1}$ (com o nível de extrapolação imediatamente anterior) é a solução numérica com maior nível de acurácia, que pode ser alcançada com o emprego de MER. Em outras palavras, MER é eficaz na redução do erro numérico somente enquanto a condição $|\psi| > 1$ for satisfeita.

4.5 ESTIMADOR *PSI* CORRIGIDO

De acordo com a Eq. (2.81), $(p_{U,M})_g$ corresponde à ordem aparente atribuída à estimativa de Em na malha Ω^{h_s} . Porém, percebe-se que o seu cálculo envolve as soluções numéricas obtidas em três malhas distintas, estabelecidas por refinamento. Logo, ao se considerar o conceito de ordem aparente (seção 2.5.1), é natural se admitir que o seu valor corresponda a uma **inclinação média** para o gráfico da estimativa de Em , nessas malhas.

Com essa abordagem, propõe-se que o resultado do cálculo da razão de convergência de ϕ_M ($m = g - 1$) seja atribuído à malha intermediária do trio $\Omega^{h_{g-1}}$, Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$, com $r = h_{g-1}/h_g = h_g/h_{g+1}$, ou seja, admite-se

$$\psi^* = \begin{cases} \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\phi_{g+1,m+1} - \phi_{g,m}}, & g = 2, 3, \dots, G-1; \\ \frac{(\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2})^2}{(\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1})(\phi_{g-2,m-2} - \phi_{g-3,m-3})}, & g = G; \end{cases} \quad (4.15)$$

em que ψ^* corresponde à razão de convergência média, e G ao número total de malhas consideradas. Para $g = 2, 3, \dots, G-1$ o cálculo de ψ^* (Eq. 4.15) envolve os valores de ϕ em $\Omega^{h_{g-1}}$, Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$, e o resultado obtido é atribuído à Ω^{h_g} ; no entanto, para $g = G$ (na malha mais fina adotada) a solução numérica na malha $\Omega^{h_{g+1}}$ não está disponível para a obtenção de ψ^* , com a mesma expressão. A partir dessa necessidade, busca-se estabelecer uma relação entre os valores obtidos para ψ com $g = 3, 4, \dots, G$ (Eq. 4.13) e ψ^* com $g = 2, 3, \dots, G-1$ (Eq. 4.15). Então, com esse enfoque, para $g = G$ na Eq. (4.15) considera-se a obtenção de ψ^* através da razão entre o quadrado de ψ para $g = G$ e o seu valor para $g = G-1$, na Eq. (4.13).

Com a determinação de ψ^* (Eq. 4.15), e por analogia a U_ψ (Eq. 4.13) considera-se o cálculo da estimativa do erro numérico associado a ϕ_M ,

$$U_{\psi^*}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi^* - 1}, \quad g = 2, \dots, G. \quad (4.16)$$

Nos testes numéricos realizados (Apêndice E), verificou-se que U_{ψ^*} , denominado estimador *psi* corrigido, apresenta um nível de acurácia mais elevado do que U_ψ .

4.6 ESTIMADOR *GCI*

O estimador *GCI* (*Grid Convergence Index*) foi concebido, inicialmente, por Roache (1994) através da expressão

$$U_{GCI}(\phi_g) = FS \frac{|\phi_g - \phi_{g-1}|}{r^P - 1}, \quad (4.17)$$

onde se sugere a adoção do fator de segurança, $FS = 3$, e $P = p_0$. Dessa forma, U_{GCI} pode ser aplicado em diversas malhas, que são representadas pelo índice subscrito g , com $r = h_{g-1} / h_g$, e se admite a variação $g = 2, \dots, G$. Assim como U_{Δ} , a estimativa calculada com U_{GCI} representa uma banda ou intervalo em torno da solução numérica.

Posteriormente, sobre a Eq. (4.17), Roache (2009) propõe a utilização de $FS = 1,25$ quando $p_U \rightarrow p_0$, ou seja, quando for identificado um comportamento convergente e monotônico para p_U ($h \rightarrow 0$, $p_U \rightarrow p_0$). Nessa situação, sob a Eq. (4.17) propõe o valor $P = \min\{p_0, p_U\}$, isto é, P determinado pelo menor valor entre p_0 e p_U .

Com base na teoria apresentada por Roache (1994; 2009), e por analogia aos estimadores para *Em* apresentados anteriormente, propõe-se o emprego de U_{GCI} a partir de soluções numéricas obtidas com o emprego de MER (Eq. 4.18 e Tab. 4.4). Nesse enfoque, considera-se

$$U_{GCI}(\phi_{g,m}) = FS \frac{|\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}|}{r^P - 1}, \quad g = 2, \dots, G; m = g - 1; \quad (4.18)$$

em que $P = \min\{p_m, (p_{U,M})_g\}$, ou seja, P corresponde ao menor valor entre a ordem de acurácia prática (Eq. 2.83) e teórica ($p_V = \{p_m, m = 0, 1, \dots\}$) de $\phi_{g,m}$. A expressão apresentada na Eq. (4.18) não é uma generalização pura da Eq. (4.17), ela se constitui em uma modificação, pois leva em consideração as soluções numéricas obtidas para malhas e níveis de extrapolação distintos.

Tabela 4.4: Representação esquemática do emprego de U_{GCI} sobre $\phi_{g,m}$.

Nível de extrapolação				
Malha	$m = 0$	$m = 1$... $m = g - 1$	
Ω^{h_1}	$\phi_{1,0}$			
Ω^{h_2}	$\phi_{2,0}$	$\phi_{2,1}$		$\Rightarrow U_{GCI}(\phi_{2,1}) = 3 \frac{ \phi_{2,1} - \phi_{1,0} }{r^{p_0} - 1}$
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
Ω^{h_g}	$\phi_{g,0}$	$\phi_{g,1}$	$\phi_{g,m}$	$\Rightarrow U_{GCI}(\phi_{g \geq 3, m}) = 1,25 \frac{ \phi_{g,m} - \phi_{g-1, m-1} }{r^p - 1}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	

4.7 ESTIMADOR MULTICOEFICIENTE

Nesse caso, em particular, considera-se a obtenção de estimativa para Eh com o estimador multicoeficiente (U_{mc}) (MARCHI, 2001) através das soluções obtidas com o emprego de MER (Eq. 2.79). A concepção de U_{mc} possui semelhança com a adotada em U_{Ri} , entretanto, considera-se que a estimativa é composta por $m - 1$ termos, isto é,

$$U_{mc} = c_0 h^{p_0} + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + \dots + c_{m-2} h^{p_{m-2}}, \quad (4.19)$$

onde $c_0, c_1, c_2, \dots, c_{m-2}$ são os $m - 1$ coeficientes da estimativa de Eh , e $p_0, p_1, p_2, \dots, p_{m-2}$ são as $m - 1$ primeiras ordens verdadeiras de Eh .

Considerando-se, então, as Eqs. (2.71), (2.72) e (4.19) aplicadas em m malhas distintas Ω^{h_g} , $g = 1, \dots, m$, geradas através da razão de refino r , tem-se

$$\begin{cases} \phi_\infty - \phi_1 = c_0 h_1^{p_0} + c_1 h_1^{p_1} + c_2 h_1^{p_2} + \dots + c_{m-2} h_1^{p_{m-2}} \\ \phi_\infty - \phi_2 = c_0 h_2^{p_0} + c_1 h_2^{p_1} + c_2 h_2^{p_2} + \dots + c_{m-2} h_2^{p_{m-2}} \\ \phi_\infty - \phi_3 = c_0 h_3^{p_0} + c_1 h_3^{p_1} + c_2 h_3^{p_2} + \dots + c_{m-2} h_3^{p_{m-2}} \\ \vdots = \vdots \\ \phi_\infty - \phi_m = c_0 h_m^{p_0} + c_1 h_m^{p_1} + c_2 h_m^{p_2} + \dots + c_{m-2} h_m^{p_{m-2}} \end{cases} \quad (4.20)$$

em que são conhecidas as respectivas soluções numéricas $\phi_g, g = 1, \dots, m$. Assim, os dados do sistema de equações representado na Eq. (4.20) são: $h_1, h_2, \dots, h_m; \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m; p_0, p_1, p_2, \dots, p_{m-2}$; e as incógnitas são $\phi_\infty, c_0, c_1, c_2, \dots, c_{m-2}$.

Então, através da resolução do sistema de equações representado pela Eq. (4.20), a Eq. (4.19) proporciona a obtenção de uma estimativa (U_{mc}), para Eh , que tem a sua acurácia elevada com o aumento de m . Por outro lado, o valor admitido para m pode comprometer a resolução da Eq. (4.20) que corresponde a um sistema de equações $m \times m$ mal condicionado; e, dessa forma, com a redução de h ocorre a propagação de E_π sobre a solução obtida.

Contudo, uma alternativa para o emprego deste estimador (proposta nesta tese) consiste em se considerar ϕ_M , isto é, em aplicar MER (Eq. 2.79) com o maior valor de m permitido em cada malha Ω^{h_g} para se determinar ϕ_∞ (estimar Φ), no lado esquerdo da Eq. (4.20) (com $m \geq 2$). Assim: para $g = 2$ tem-se $m = 1$ e a estimativa de Eh possui apenas um termo, $\phi_{2,1} - \phi_2 = c_0 h_2^{p_0}$ (estimativa monocoefficiente); para $g = 3$ tem-se $m = 2$ e a estimativa de Eh possui dois termos, $\phi_{3,2} - \phi_3 = c_0 h_3^{p_0} + c_1 h_3^{p_1}$ (estimativa bicoefficiente); para $g = 4$ tem-se $m = 3$ e a estimativa de Eh possui três termos, $\phi_{4,3} - \phi_4 = c_0 h_4^{p_0} + c_1 h_4^{p_1} + c_2 h_4^{p_2}$ (estimativa tricoefficiente); e assim por diante.

Portanto, de modo geral, a estimativa para Eh inerente ao cálculo de ϕ_g (na malha Ω^{h_g}), pode ser obtida pela diferença entre a solução analítica estimada ($\Phi \approx \phi_\infty = \phi_{g,m}$), com o número máximo de extrapolações permitidas, e a solução numérica sem extrapolação (ϕ_g), isto é,

$$U_{mc}(\phi_g) = \phi_{g,m} - \phi_g, \quad (4.21)$$

em que $m = g - 1$; e admite-se um conjunto de G malhas distintas, de modo que $g = 2, \dots, G$.

Quanto maior o valor de m , mais próximo $\phi_{g,m}$ estará de Φ , já que o seu Eh possui $O(h^{p_m})$, e conseqüentemente, mais acurada será a sua estimativa calculada. Ainda, de acordo com a concepção do estimador multicoefficiente, busca-se uma estimativa para Eh que contemple o maior número de termos possível na série que descreve o Eh correspondente.

Enfim, nesta proposta as soluções obtidas em G malhas distintas, com e sem MER, são substituídas na Eq. (4.21) para obtenção de $U_{mc}(\phi_g)$.

4.8 EFETIVIDADE DE UMA ESTIMATIVA DE ERRO

De modo geral, a qualidade de uma estimativa (U) para o erro numérico (E), pode ser avaliada através de sua efetividade ($\theta(U)$), que é definida pela razão entre U e E (Zhu e Zienkiewicz, 1990):

$$\theta(U) = \frac{U}{E}. \quad (4.22)$$

Uma estimativa de erro ideal é aquela em que $\theta(U) = 1$, isto é, quando $U = E$. Além disso, U é considerada confiável quando $\theta(U) \geq 1 \Rightarrow U \geq E$; e acurada quando $\theta(U) \approx 1 \Rightarrow U \approx E$ (MARCHI, 2001).

4.9 RESUMO DO CAPÍTULO 4

Neste capítulo, inicialmente foram apresentadas duas propostas para obtenção da estimativa do erro numérico de soluções obtidas com o emprego de MER: os estimadores U_{Δ} e U_{pm} , disponíveis na literatura. Com a mesma finalidade, na sequência foram descritos os estimadores propostos nesta tese: U_{pmc} , U_{ψ} , e U_{ψ^*} ; bem como se formulou uma adaptação para o emprego de U_{GCI} (estimador GCI). Através do cálculo da razão de convergência, ψ , definiu-se um critério para identificação do emprego efetivo de MER. Propôs-se, também, o emprego do estimador multicoeficiente a partir das soluções numéricas obtidas com o emprego de MER, para estimativa de Eh . Ao final, foram apresentadas as características desejáveis para uma estimativa de erro numérico.

5 PROBLEMAS-TESTE

Neste capítulo são definidos os problemas considerados para a avaliação da metodologia proposta nos capítulos 3 e 4. Primeiramente são descritos os modelos matemáticos adotados, e em seguida são detalhados os procedimentos numéricos realizados.

5.1 MODELOS MATEMÁTICOS

Com o intuito de abranger os efeitos difusivos e advectivos, bem como a ocorrência de não linearidade nos coeficientes da equação a ser resolvida, são considerados três modelos matemáticos – casos 1 a 3 detalhados na sequência. Tais modelos possuem solução analítica conhecida; essa opção está relacionada com o objetivo de se analisar a acurácia e a confiabilidade das estimativas para o erro numérico, ou seja, com a possibilidade de comparação entre as estimativas para o erro numérico e o seu valor verdadeiro.

5.1.1 Caso 1: Poisson 1D

No primeiro caso considera-se a difusão unidimensional com geração de calor, o que resulta em uma equação de Poisson, que é uma equação diferencial linear. Adota-se a representação nas variáveis temperatura T (dependente) e coordenada espacial x (independente). O modelo matemático que determina o caso 1 é obtido a partir da equação da energia, considerando-se: meio contínuo, ausência de escoamento, condução de calor unidimensional, regime permanente e propriedades constantes; isto é,

$$k^* \frac{d^2 T^*}{dx^{*2}} = S^*(x^*), \quad (5.1)$$

em que, nesta seção, o asterisco (*) sobrescrito representa o efeito da dimensão do problema (equação dimensional), k associado à condutividade térmica do material e S ao termo fonte. O domínio é determinado (genericamente) por $\Omega^* = [0, L^*]$, onde são atribuídas as condições de contorno de Dirichlet: $T^*(0) = T_0^*$ e $T^*(L^*) = T_L^*$.

Para se facilitar a análise dos resultados, nas simulações numéricas, considera-se a seguinte adimensionalização para as variáveis dependente e independente:

$$T = \frac{T^* - T_0^*}{T_L^* - T_0^*}, \quad (5.2)$$

$$x = \frac{x^*}{L^*}. \quad (5.3)$$

E, então, com a substituição dos resultados das Eqs. (5.2) e (5.3) na Eq. (5.1) obtém-se:

$$\frac{d^2T}{dx^2} = S, \quad (5.4)$$

onde $S = \frac{S^*(x^*)(L^*)^2}{k^*(T_L^* - T_0^*)}$, e o domínio adotado passa a ser $\Omega = [0,1]$ (TANNEHILL *et al.*, 1997).

Com o intento de se analisar várias possibilidades, quanto à localização do ponto de máximo da solução do problema em questão, propõe-se a seguinte solução analítica (fabricada) para a Eq. (5.4)

$$T(x) = \text{sen}[(\pi + \delta)x], \quad (5.5)$$

em que δ é um escalar real, representado em radianos. Dessa forma, a coordenada x do ponto de máximo depende do valor atribuído à δ . As condições impostas nos contornos para a Eq. (5.4) são, agora, representadas por: $T(0) = 0$ e $T(1) = \text{sen}(\pi + \delta)$.

A partir da Eq. (5.5), o termo fonte para a Eq. (5.4) torna-se

$$S = S(x) = -(\pi + \delta)^2 \text{sen}[(\pi + \delta)x]. \quad (5.6)$$

Nesse caso, as variáveis de interesse consideradas são: a temperatura máxima (T_{\max}), a sua coordenada correspondente (x_{\max}), e a temperatura no ponto central de Ω (T_c), cujas soluções analíticas são obtidas da Eq. (5.5), isto é,

$$x_{\max} = \frac{\pi}{2(\pi + \delta)}, \quad (5.7)$$

$$T_{\max} = \text{sen}[(\pi + \delta)(x_{\max})] = 1, \quad (5.8)$$

$$T_c = \text{sen}[(\pi + \delta)/2]. \quad (5.9)$$

Além disso, considera-se a obtenção de T em outros pontos específicos de Ω , $T(3/4)$ e $T(2/3)$ o que, juntamente com as Eqs. (5.7) a (5.9), permite a análise de variáveis dos diferentes tipos, estabelecidos na seção 3.1.

De modo semelhante, sobre a Eq. (5.4), adota-se também o emprego da solução analítica (fabricada)

$$T(x) = -\frac{1}{5}e^{3x} + 3x + 2, \quad (5.10)$$

que acarreta em

$$S = S(x) = -\frac{9}{5}e^{3x}, \quad (5.11)$$

com as condições de contorno: $T(0) = 9/5$ e $T(1) = -e^3/5 + 5$. Com isso, obtêm-se as seguintes soluções analíticas para as variáveis de interesse estabelecidas: $x_{\max} = \ln 5/3$, $T_{\max} = \ln 5 + 1$, $T_c = -e^{3/2}/5 + 7/2$ e, analogamente à solução analítica considerada anteriormente para $T(x)$, $T(3/4)$ e $T(2/3)$ são calculadas com a Eq. (5.10).

5.1.2 Caso 2: Advecção-difusão 1D

No segundo caso considera-se o modelo matemático de conservação da energia térmica, para um escoamento unidimensional permanente de fluido incompressível, sem geração de calor nem dissipação viscosa, e com propriedades e velocidades constantes em meio contínuo. Com essa perspectiva e considerando-se a adimensionalização em que Pe é o número de Peclet ($Pe = LV/\alpha$; onde V e L indicam a velocidade e o comprimento de referência, $\alpha = k/\rho c_p$, em que k é a condutividade térmica, ρ a densidade e c_p é a capacidade térmica do material). (INCROPERA e DEWITT, 1996), obtêm-se:

$$Pe \frac{dT}{dx} = \frac{d^2T}{dx^2}, \quad (5.12)$$

onde x e T seguem as definições apresentadas no caso anterior e, analogamente, considera-se $\Omega = [0,1]$ (adimensional).

As condições de contorno aplicadas (condições de Dirichlet) são: $T(0) = 0$ e $T(1) = 1$. Assim, a solução analítica para a Eq. (5.12) pode ser descrita como

$$T(x) = \frac{e^{Pe x} - 1}{e^{Pe} - 1}. \quad (5.13)$$

Nesse caso, como variáveis de interesse, são investigados os valores de T obtidos em pontos distintos de Ω , isto é: $T(1/2)$, $T(2/3)$ e $T(3/4)$, cujas soluções analíticas são obtidas através da Eq. (5.13). Com essas variáveis, conforme descrito na seção 5.2.2, é possível se obter ϕ com coordenadas nodais e não nodais, em malhas distintas (de acordo com a classificação estabelecida na seção 3.1).

5.1.3 Caso 3: Burgers 2D

O terceiro caso diz respeito ao problema, clássico em CFD, do escoamento laminar ($Re < 2000$) no interior de uma cavidade quadrada gerado pelo movimento de sua tampa. A abordagem considerada consiste de uma adaptação ao trabalho de Shih *et al.* (1989) – escoamento recirculante de fluido incompressível com propriedades constantes, em domínio bidimensional (Fig. 5.1). Nesse enfoque, considera-se que a parede superior se movimenta com velocidade variável conhecida e admite-se a existência de um termo fonte que atua sobre o escoamento.

A representação matemática adotada, aqui, é dada pelas equações de Burgers 2D, que correspondem às equações de conservação de quantidade de movimento linear (QML) nas direções coordenadas x e y , ou seja,

$$\frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = -\frac{\partial \dot{p}}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial \dot{p}}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - S(x, y, Re), \quad (5.15)$$

em que u e v representam as componentes do vetor velocidade nas direções x e y , respectivamente, S é o termo fonte, \dot{p} é a pressão estática (conhecida analiticamente), Re é o número de Reynolds ($Re = u_\infty l / \nu_c$; onde u_∞ e l indicam a velocidade e o comprimento de referência, ν_c corresponde à viscosidade cinemática, dada por $\nu_c = \mu / \rho$, em que ρ é a massa específica e μ é a viscosidade absoluta do fluido).

Com a proposição de solução analítica para o problema abordado, Shih *et al.* (1989) apresentam o campo de pressões $\dot{p}(x, y, Re)$ (Eq. (5.17)) analítico (para efeito de comparações/estudos), e o termo fonte $S(x, y, Re)$ (Eq. (5.16))

$$S(x, y, Re) = -\frac{8}{Re} [24F + 2f'g'' + f'''g] - 64[F_2G_1 - ff'F_1], \quad (5.16)$$

$$\dot{p}(x, y, Re) = \frac{8}{Re} [Fg''' + f'g'] + 64F_2[gg'' - (g')^2], \quad (5.17)$$

em que:

$$f = f(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 \Rightarrow f' = 4x^3 - 6x^2 + 2x \Rightarrow f'' = 12x^2 - 12x + 2 \Rightarrow f''' = 24x - 12,$$

$$F = \int f(x) dx, F_1 = f(x)f''(x) - [f'(x)]^2 = -4x^6 + 12x^5 - 14x^4 + 8x^3 - 2x^2,$$

$$F_2 = \int f(x) f'(x) dx = 1/2(x^4 - 2x^3 + x^2)^2,$$

$$g = g(y) = y^4 - y^2 \Rightarrow g' = 4y^3 - 2y \Rightarrow g'' = 12y^2 - 2 \Rightarrow g''' = 24y,$$

$$G_1 = g(y)g'''(y) - g'(y)g''(y) = -24y^5 + 8x^3 - 4y.$$

As condições de contorno impostas para u e v são do tipo Dirichlet (Eqs. (5.18), (5.19) e Fig. 5.1), e correspondem à velocidade nula nos contornos exceto no contorno superior, sobre o domínio bidimensional (quadrado de lado unitário) $\Omega = (x, y) \in R^2 : \{0 \leq x \leq 1 \text{ e } 0 \leq y \leq 1\}$, ou seja,

$$u(x,0) = u(0,y) = u(1,y) = v(x,0) = v(0,y) = v(1,y) = v(x,1) = 0, \quad (5.18)$$

$$u(x,1) = 16(x^4 - 2x^3 + x^2). \quad (5.19)$$

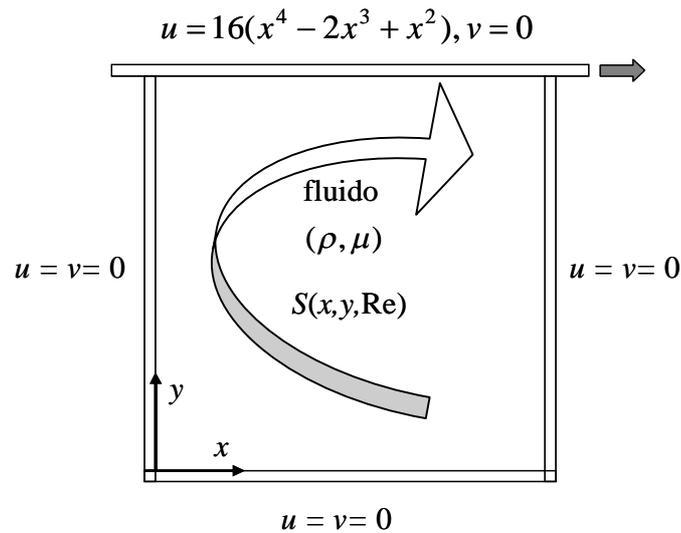


Figura 5.1: Problema do escoamento na cavidade quadrada com tampa móvel (adaptado de Marchi *et al.* (2009)).

As soluções analíticas para as variáveis dependentes primárias, u e v (SHIH *et al.*, 1989), são descritas nas Eqs. (5.20) e (5.21) e representadas graficamente nas Figs. 5.2 e 5.3, respectivamente.

$$u(x, y) = 8f(x)g'(y) = 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(4y^3 - 2y), \quad (5.20)$$

$$v(x, y) = -8f'(x)g(y) = -8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(y^4 - y^2). \quad (5.21)$$

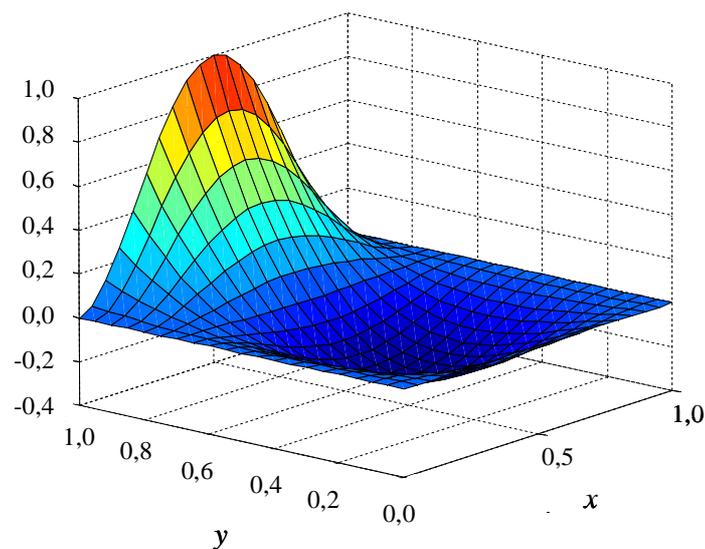


Figura 5.2: Função $u(x, y)$, $(x, y) \in \Omega$.

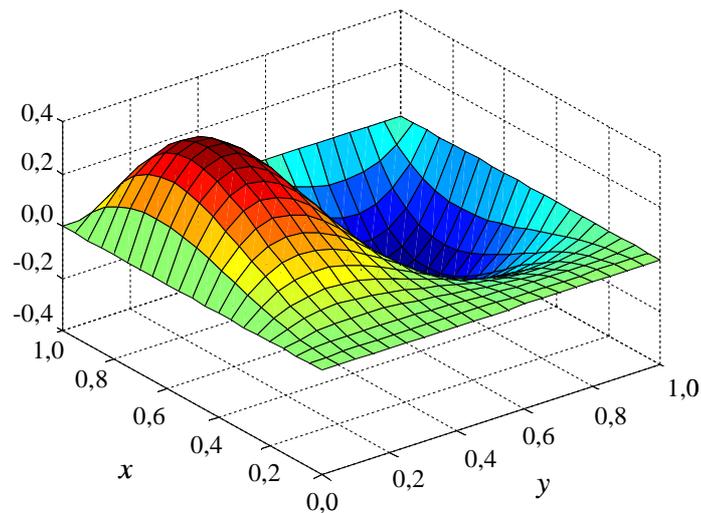


Figura 5.3: Função $v(x, y)$, $(x, y) \in \Omega$.

A partir dessas funções definem-se as seguintes variáveis de interesse:

- (1) componente na direção horizontal do vetor velocidade no ponto central de Ω (uc);
- (2) componente na direção vertical do vetor velocidade no ponto central de Ω (vc);
- (3) fluxo de massa que escoia entre as coordenadas $x = 0$ e $x = 1/2$, sobre o eixo (reta) $y = 1/2$ (fm);
- (4) força de arrasto viscoso que a parede inferior (sul) da cavidade exerce sobre o fluido (Fs);
- (5) força de arrasto viscoso que a parede superior (norte) da cavidade exerce sobre o fluido (Fn);
- (6) valor mínimo da componente na direção horizontal do vetor velocidade sobre o eixo (reta) $x = 1/2$ ($u \min 1D$);
- (7) ordenada (coordenada y) correspondente à variável (6) ($y(u \min 1D)$);
- (8) valor mínimo da componente na direção vertical do vetor velocidade sobre o eixo (reta) $y = 1/2$ ($v \min 1D$);
- (9) abscissa (coordenada x) correspondente à variável (8) ($x(v \min 1D)$);
- (10) valor máximo da componente na direção vertical do vetor velocidade sobre o eixo $y = 1/2$ ($v \max 1D$);
- (11) abscissa correspondente à variável (10) ($x(v \max 1D)$);
- (12) valor mínimo da função de corrente em Ω ($\Psi \min$) (detalhes no apêndice F);
- (13) abscissa correspondente à variável (12) ($x(\Psi \min)$);

- (14) ordenada correspondente à variável (12) ($y(\Psi \min)$);
- (15) valor mínimo da componente na direção horizontal do vetor velocidade em Ω ($u \min 2D$);
- (16) abscissa correspondente à variável (15) ($x(u \min 2D)$);
- (17) ordenada correspondente à variável (15) ($y(u \min 2D)$);
- (18) valor mínimo da componente na direção vertical do vetor velocidade em Ω ($v \min 2D$);
- (19) abscissa correspondente à variável (18) ($x(v \min 2D)$);
- (20) ordenada correspondente à variável (18) ($y(v \min 2D)$);
- (21) valor máximo da componente na direção vertical do vetor velocidade em Ω ($v \max 2D$);
- (22) abscissa correspondente à variável (21) ($x(v \max 2D)$);
- (23) ordenada correspondente à variável (21) ($y(v \max 2D)$);
- (24) componente na direção vertical do vetor velocidade no ponto de coordenadas específicas não nodais $x = 1/2 - \sqrt{3}/6$ e $y = \sqrt{2}/2$ (vm).

A notação empregada para cada uma dessas variáveis, bem como a solução analítica correspondente são apresentadas na Tab. 5.1. Os detalhes sobre a formulação e obtenção dessas soluções analíticas (Tab. 5.1) estão disponíveis no apêndice F. Através do estudo dessas variáveis estabelecidas, no problema em questão, é possível se contemplar todas as classes descritas na seção 3.1. E, dessa forma, torna-se possível a realização de uma investigação sobre o comportamento de MER em cada tipo de variável.

Então, com as ϕ obtidas, a metodologia descrita nos capítulos 3 e 4 é empregada com o objetivo de se garantir um desempenho efetivo de MER sobre a redução de Eh , bem como a realização de estimativas, confiáveis e acuradas, para o erro numérico envolvido. Tais resultados (obtidos com base nos modelos numéricos descritos na próxima seção) são apresentados no capítulo 6.

Tabela 5.1: Variáveis de interesse consideradas no caso 3.

Número	Sigla	Descrição	Solução analítica
(1)	uc	$u(1/2, 1/2)$, Eq. (5.20)	$-1/4$
(2)	vc	$v(1/2, 1/2)$, Eq. (5.21)	0
(3)	fm	$\int_0^{1/2} \rho v_{y=1/2} z dx$ ($\rho = 1, z = 1$)	$3/32$
(4)	Fs	$\int_0^1 \mu (\partial u / \partial y)_{y=0} z dx$ ($\mu = 1, z = 1$)	$-8/15$
(5)	Fn	$\int_0^1 \mu (\partial u / \partial y)_{y=1} z dx$ ($\mu = 1, z = 1$)	$8/3$
(6)	$u \min 1D$	$\min u(x = 1/2, y), 0 \leq y \leq 1$	$-\sqrt{6}/9$
(7)	$y(u \min 1D)$	$y; u \min 1D = \min u(x = 1/2, y)$	$\sqrt{6}/6$
(8)	$v \min 1D$	$\min v(x, y = 1/2), 0 \leq x \leq 1$	$-\sqrt{3}/6$
(9)	$x(v \min 1D)$	$x; v \min 1D = \min v(x, y = 1/2)$	$(3 + \sqrt{3})/6$
(10)	$v \max 1D$	$\max v(x, y = 1/2), 0 \leq x \leq 1$	$\sqrt{3}/6$
(11)	$x(v \max 1D)$	$x; v \max 1D = \max v(x, y = 1/2)$	$(3 - \sqrt{3})/6$
(12)	$\Psi \min$	$\min \Psi(x, y), (x, y) \in \Omega$	$-1/8$
(13)	$x(\Psi \min)$	$x; \Psi \min = \min \Psi(x, y)$	$1/2$
(14)	$y(\Psi \min)$	$y; \Psi \min = \min \Psi(x, y)$	$\sqrt{2}/2$
(15)	$u \min 2D$	$\min u(x, y), (x, y) \in \Omega$	$-\sqrt{6}/9$
(16)	$x(u \min 2D)$	$x; u \min 2D = \min u(x, y)$	$1/2$
(17)	$y(u \min 2D)$	$y; u \min 2D = \min u(x, y)$	$\sqrt{6}/6$
(18)	$v \min 2D$	$\min v(x, y), (x, y) \in \Omega$	$-2\sqrt{3}/9$
(19)	$x(v \min 2D)$	$x; v \min 2D = \min v(x, y)$	$1/2 + \sqrt{3}/6$
(20)	$y(v \min 2D)$	$y; v \min 2D = \min v(x, y)$	$\sqrt{2}/2$
(21)	$v \max 2D$	$\max v(x, y), (x, y) \in \Omega$	$2\sqrt{3}/9$
(22)	$x(v \max 2D)$	$x; v \max 2D = \max v(x, y)$	$1/2 - \sqrt{3}/6$
(23)	$y(v \max 2D)$	$y; v \max 2D = \max v(x, y)$	$\sqrt{2}/2$

$$(24) \quad vm \quad v(1/2 - \sqrt{3}/6, \sqrt{2}/2), \text{ Eq. (5.21)} \quad 2\sqrt{3}/9$$

5.2 MODELOS NUMÉRICOS

Os métodos numéricos empregados neste trabalho consistem do emprego dos métodos de Diferenças Finitas (MDF) e Volumes Finitos (MVF). Nesse âmbito, são descritos na sequência os procedimentos adotados em cada caso (definidos anteriormente).

5.2.1 Resolução numérica do caso 1

No caso 1, adota-se o emprego do MDF (FERZIGER e PERIC, 2002) primeiramente com a aproximação numérica CDS-2 (conforme a descrição apresentada na seção 2.2.1) em malha uniforme (Fig. 2.1). Considera-se então a Eq. (5.4), e sobre o ponto nodal i (genérico) obtém-se a equação discretizada

$$\frac{T_{i-1} + T_{i+1} - 2T_i}{h^2} = S_i \Leftrightarrow 2T_i = T_{i-1} + T_{i+1} - S_i h^2, \quad (5.22)$$

para $i = 1, \dots, M-1$, em que $S_i = S(x_i)$, $x_i = ih$, e S segue a definição apresentada na seção 5.1.1. O número total de pontos (ou nós) adotados em Ω^h é $M+1$ e considera-se $h = 1/M$. Para o contorno esquerdo ($i = 0$) impõe-se $T_0 = T(0)$, e para o contorno direito ($i = M$) $T_M = T(1)$, de acordo com a proposição de solução analítica para T (Eqs. (5.5) e (5.10)).

Com base em expressões semelhantes às Eqs. (5.4) e (5.22) e na definição de Eh , explicitada na Eq. (2.13) para CDS-2, Pulino e Torres (2006) propõem um esquema compacto de quarta ordem ($p_A = p_0 = 4$) para a resolução numérica da equação de Poisson. Com esse enfoque, considera-se

$$\left(\frac{d^2 T}{dx^2}\right)_i = \frac{T_{i-1} + T_{i+1} - 2T_i}{h^2} - \left(\frac{d^4 T}{dx^4}\right)_i \frac{h^2}{12} - \left(\frac{d^6 T}{dx^6}\right)_i \frac{h^4}{360} - \left(\frac{d^8 T}{dx^8}\right)_i \frac{h^6}{20160} - \dots, \quad (5.23)$$

e admite-se que $T \in C_4$ e $S \in C_2$, isto é, T e S sendo funções continuamente diferenciáveis até as ordens quatro e dois, respectivamente. Assim,

$$\frac{d^2 T}{dx^2} = S \Rightarrow \frac{d^4 T}{dx^4} = \frac{d^2 S}{dx^2}. \quad (5.24)$$

E, de modo análogo à Eq. (5.23), considera-se

$$\left(\frac{d^2 S}{dx^2} \right)_i = \frac{S_{i-1} + S_{i+1} - 2S_i}{h^2} - \left(\frac{d^4 S}{dx^4} \right)_i \frac{h^2}{12} + O(h^4). \quad (5.25)$$

Então, com os resultados obtidos nas Eqs. (5.24) e (5.25), a Eq. (5.23) pode ser reescrita como

$$\left(\frac{d^2 T}{dx^2} \right)_i = \frac{T_{i-1} + T_{i+1} - 2T_i}{h^2} - \frac{S_{i-1} + S_{i+1} - 2S_i}{12} + O(h^4). \quad (5.26)$$

Nessa perspectiva, a equação algébrica resultante do processo de discretização torna-se

$$\frac{T_{i-1} + T_{i+1} - 2T_i}{h^2} = \frac{S_{i-1} + S_{i+1} + 10S_i}{12} \Leftrightarrow 2T_i = T_{i-1} + T_{i+1} - \left(\frac{S_{i-1} + S_{i+1} + 10S_i}{12} \right) h^2, \quad (5.27)$$

que corresponde ao esquema compacto com $p_A = 4$ adotado para a resolução da Eq. (5.4).

A resolução dos sistemas de equações algébricas, resultantes da discretização com $p_A = 2$ e 4, representados nas Eqs. (5.22) e (5.27), é obtida com o emprego do método direto TDMA (*Tridiagonal Matrix Algorithm*) (FORTUNA, 2000); dessa forma, não há influência de E_l sobre o cálculo de T .

Após a obtenção das soluções numéricas, $T_i = T(x_i)$, torna-se possível a análise das variáveis de interesse descritas na seção 5.1.1. Essa análise está, sobretudo, condicionada ao h adotado; pois, como exemplo, $T(3/4)$ e $T(2/3)$ podem estar, ou não, localizadas em um ponto nodal de Ω^h . Com relação ao ponto de máximo para T em Ω^h , busca-se: $T_{\max} = \max\{T_i, i = 0, \dots, M\}$, cuja determinação também depende do h adotado.

5.2.2 Resolução numérica do caso 2

Analogamente ao caso 1, considera-se a aplicação do MDF (FERZIGER e PERIC, 2002) em malha uniforme (Fig. 2.1). Neste caso, primeiramente adota-se um esquema de ordem (p_A) mista, ou seja, são empregadas as aproximações CDS-2 ($p_0 = 2$), sobre o termo difusivo e UDS-1 (*Upwind Differencing Scheme*) ($p_0 = 1$) sobre o termo advectivo. Então, a partir da Eq. (5.12) para o ponto nodal i , obtém-se a equação discretizada

$$Pe \left(\frac{T_i - T_{i-1}}{h} \right) = \frac{T_{i-1} + T_{i+1} - 2T_i}{h^2} \Leftrightarrow (2 + Pe h)T_i = (1 + Pe h)T_{i-1} + T_{i+1}, \quad (5.28)$$

para $i = 1, \dots, M - 1$. No contorno esquerdo ($i = 0$) adota-se $T_0 = T(0)$, e no contorno direito ($i = M$) $T_M = T(1)$, obtidos com a Eq. (5.13). Esse esquema UDS/CDS pode ser visto em Tannehill *et al.* (1997).

De modo semelhante, considera-se também o emprego de um esquema numérico com $p_A = 2$, isto é, aproxima-se com CDS-2 ($p_0 = 2$) tanto o termo difusivo como o termo advectivo o que permite o seguinte equacionamento para o ponto nodal i ,

$$Pe \left(\frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2h} \right) = \frac{T_{i-1} + T_{i+1} - 2T_i}{h^2} \Leftrightarrow 4T_i = (2 + Pe h)T_{i-1} + (2 - Pe h)T_{i+1}. \quad (5.29)$$

Os sistemas de equações algébricas resultantes, Eqs. (5.28) e (5.29), são então resolvidos com o método direto TDMA (como no caso anterior) (FORTUNA, 2000); e a partir desses valores obtidos, as variáveis de interesse estabelecidas na seção 5.1.2 são determinadas.

5.2.3 Resolução numérica do caso 3

A solução numérica do caso 3 é obtida com o emprego do MVF (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007) sobre as Eqs. (5.14) e (5.15), nas quais os termos difusivos são aproximados com CDS-2 e os termos advectivos são abordados de duas maneiras distintas (dois esquemas numéricos). Primeiramente considera-se o emprego da aproximação UDS-1 sobre os termos advectivos, o que corresponde a um esquema numérico com $p_0 = 1$. O segundo esquema adotado é obtido por meio de diferença central através de correção adiada sobre o UDS-1, isto é, os coeficientes para os termos advectivos, nas equações algébricas, são

deduzidos com UDS-1, porém são adaptados para o formato CDS-2 ($p_0 = 2$), e a diferença é transportada para o termo do lado direito das equações algébricas resultantes (no formato adotado (Eq. (5.33)) os coeficientes a_w, a_e, a_n e a_s são mantidos à direita da igualdade).

Então, para o emprego das aproximações numéricas sobre as Eqs. (5.14) e (5.15) considera-se a seguinte representação:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) = \dot{p}^\phi + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S^\phi, \quad (5.30)$$

onde ϕ (variável dependente (de interesse)), \dot{p}^ϕ e S^ϕ (a partir das Eqs. (5.16) e (5.17)) são explicitados na Tab. 5.2.

Tabela 5.2: Símbolos empregados na Eq. (5.30) para resolução do caso 3.

Equação	ϕ	\dot{p}^ϕ	S^ϕ
(5.14)	u	$-\partial \dot{p} / \partial x$	0
(5.15)	v	$-\partial \dot{p} / \partial y$	$-S(x, y, \text{Re})$

Para implementação do MVF sobre a Eq. (5.30) considera-se o volume de controle genérico P e suas faces. A malha adotada é representada na Fig. 5.4 para um volume (genérico) P e seus vizinhos: norte (N), sul (S), leste (E) e oeste (W), e suas respectivas faces (n, s, e e w).

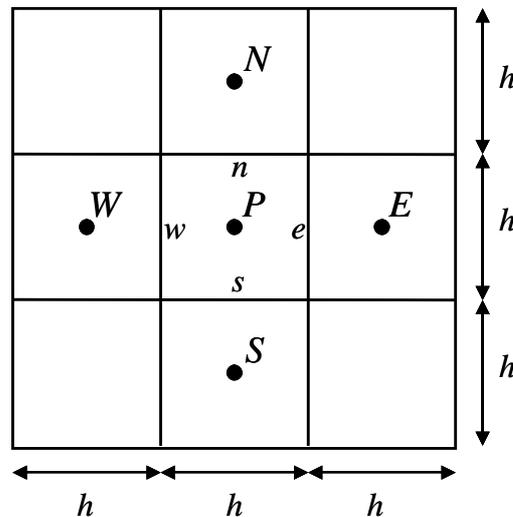


Figura 5.4: Malha bidimensional uniforme, sob a representação do volume de controle P .

Nessa malha as faces são determinadas pelas mediatrizes dos segmentos que unem os centros geométricos de volumes adjacentes. E, as ϕ são calculadas mediante a avaliação de expressões algébricas sobre essas faces, e representadas (armazenadas) nos centros dos volumes de controle.

Com esse enfoque, considera-se a integração da Eq. (5.30) sobre P (Fig. 5.4) que resulta em

$$\begin{aligned} [(\rho u\phi)_e - (\rho u\phi)_w]h + [(\rho v\phi)_n - (\rho v\phi)_s]h = L[\dot{p}^\phi]_p h^2 + \left[\left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] h \\ + \left[\left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] h + L[S^\phi]_p h^2, \end{aligned} \quad (5.31)$$

em que $L[p^\phi]_p$ e $L[S^\phi]_p$ simbolizam as aproximações numéricas para \dot{p}^ϕ e S^ϕ sobre o volume de controle P . E, então, adota-se a representação \dot{M} para o fluxo de massa em cada direção (n, s, e, w), isto é: $\dot{M}_n = \rho v_n h$; $\dot{M}_s = \rho v_s h$; $\dot{M}_e = \rho u_e h$; e $\dot{M}_w = \rho u_w h$; e, substituindo-se esses resultados na Eq. (5.31) obtém-se

$$\begin{aligned} \dot{M}_e \phi_e - \dot{M}_w \phi_w + \dot{M}_n \phi_n - \dot{M}_s \phi_s = L[\dot{p}^\phi]_p h^2 + \left[\left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] h \\ + \left[\left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] h + L[S^\phi]_p h^2; \end{aligned} \quad (5.32)$$

então, com a aplicação das aproximações numéricas (CDS-2/UDS-1), chega-se a

$$a_p \phi_p = a_w \phi_w + a_e \phi_e + a_s \phi_s + a_n \phi_n + b_p^\phi, \quad (5.33)$$

em que: $a_p = a_w + a_e + a_s + a_n$; $a_w = (1/2 + \text{sign}(u_w)/2)\dot{M}_w + \mu$; $a_e = -(1/2 - \text{sign}(u_e)/2)\dot{M}_e + \mu$; $a_s = (1/2 + \text{sign}(v_s)/2)\dot{M}_s + \mu$; $a_n = -(1/2 - \text{sign}(v_n)/2)\dot{M}_n + \mu$; e a função $\text{sign}(\cdot)$ retorna o sinal do número avaliado. As velocidades nas faces dos volumes de controle são

calculadas através das expressões: $\phi_w = (\phi_P + \phi_W)/2$; $\phi_e = (\phi_P + \phi_E)/2$; $\phi_s = (\phi_P + \phi_S)/2$ e $\phi_n = (\phi_P + \phi_N)/2$.

Quanto ao termo b_P^ϕ : para $\phi = u$ tem-se $b_P^\phi = -(p_e - p_w)(h/2)$; e para $\phi = v$ tem-se $b_P^\phi = -(p_n - p_s)(h/2) - S_P h^2$ (S_P calculado pela Eq. (5.16)). Para obtenção de $p_A = 2$ (segundo esquema) ambos os termos fonte são atualizados pela técnica de correção adiada (FERZIGER e PERIC, 2002): $b_P^\phi = b_P^\phi + \phi_w \text{sign}(\phi_w)(\hat{\phi}_P - \hat{\phi}_w)h - \phi_e \text{sign}(\phi_e)(\hat{\phi}_e - \hat{\phi}_P)h + \phi_w \text{sign}(\phi_w)(\hat{\phi}_P - \hat{\phi}_w)h - \phi_e \text{sign}(\phi_e)(\hat{\phi}_e - \hat{\phi}_P)h + \phi_e \text{sign}(\phi_e)(\hat{\phi}_e - \hat{\phi}_P)$, em que o símbolo $\hat{}$ representa o resultado obtido na iteração imediatamente anterior.

As equações referentes aos volumes que estão nas fronteiras de Ω requerem uma formulação diferenciada, devido à aplicação das condições (de contorno) sobre as faces que se encontram nos contornos. Existem diversas formas para a aplicação das condições de contorno, ao se considerar o MVF. Uma delas se dá pelo uso de volumes fictícios, que é caracterizado por respeitar os princípios de conservação, no domínio de cálculo (MALISKA, 2004). Nesse enfoque, todos os volumes do domínio, inclusive os de fronteira, são interpretados como internos ou volumes reais; e são criados volumes fictícios (P) em todos os contornos, ou fronteiras (Fig. 5.5).

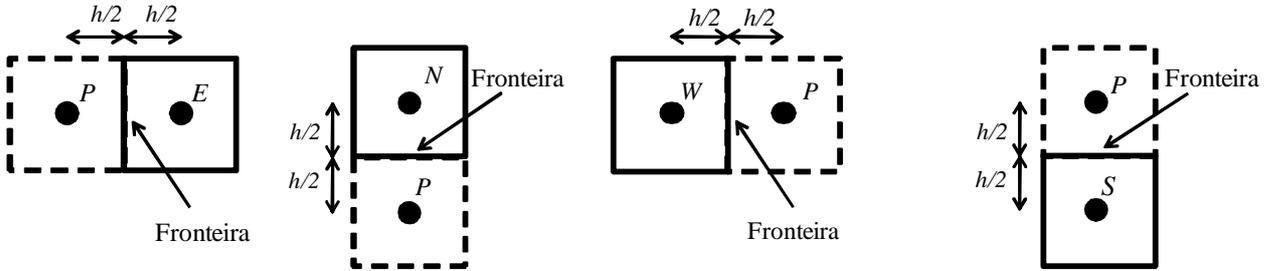


Figura 5.5: Representação do volume fictício P , nos contornos.

Então, as condições de contorno são consideradas a partir de equações algébricas envolvendo esses novos volumes (fictícios). No presente caso, as expressões que correspondem ao cálculo (numérico) das variáveis u e v , nos contornos (Eqs. (5.18) e (5.19) e Fig. 5.1), são apresentadas nas Eqs. (5.34) a (5.38):

$$u(0, y) = v(0, y) = 0 \Rightarrow \frac{u_P + u_E}{2} = \frac{v_P + v_E}{2} = 0; \quad (5.34)$$

$$u(1, y) = v(1, y) = 0 \Rightarrow \frac{u_P + u_W}{2} = \frac{v_P + v_W}{2} = 0; \quad (5.35)$$

$$u(x, 0) = v(x, 0) = 0 \Rightarrow \frac{u_P + u_N}{2} = \frac{v_P + v_N}{2} = 0; \quad (5.36)$$

$$v(x, 1) = 0 \Rightarrow \frac{v_P + v_S}{2} = 0; \quad (5.37)$$

$$u(x, 1) = 16(x^4 - 2x^3 + x^2) \Rightarrow \frac{u_P + u_S}{2} = 16(x_P^4 - 2x_P^3 + x_P^2); \quad (5.38)$$

em que x_p indica a abscissa do centro geométrico do volume fictício P .

O número total de nós é M^2 (centros dos volumes, Fig. 5.4), em malha uniforme $M \times M$, onde as soluções numéricas são obtidas; em que se considera M pontos na direção x e M pontos na direção y . Tais soluções são obtidas através da resolução do sistema de equações algébricas resultante (Eqs. (5.33) a (5.38)). Esse sistema é resolvido pelo método iterativo Gauss-Seidel lexicográfico, associado ao método *multigrid* geométrico com o esquema de aproximação completa (em inglês, *Full Approximation Scheme* – FAS), restrição por ponderação completa, prolongação por interpolação bilinear e acelerado com *Full multigrid* (FMG) (BRIGGS *et al.*, 2000); cujos parâmetros ótimos foram obtidos no estudo de Gonçalves (2013).

Após a obtenção das soluções numéricas (nodais) para u e v , são calculadas as variáveis de interesse listadas na Tab. 5.1; cujo detalhamento é apresentado no apêndice F.

5.3 DADOS DAS SIMULAÇÕES

As simulações numéricas foram realizadas considerando-se linguagem Fortran 2003, e compilador Fortran Intel 11.1. Os computadores utilizados fazem parte do Laboratório de Experimentação Numérica 1 (LENA-1) da UFPR, mais especificamente: (1) CFD-16, com processador AMD Athlon Dual Core, 2.20 GHz, 2GB RAM e sistema operacional Windows XP com 64 bits; e (2) CFD-21, com dois processadores Intel Xeon X5690 (6 core), 3.47 GHz, 192 GB RAM e sistema operacional Windows 7 com 64 bits.

Os efeitos de E_π foram minimizados pelo emprego de precisão quádrupla. O controle E_{pr} foi realizado com base nos testes de coerência estabelecidos no protocolo de Marchi (2007). Ao se considerar a aplicação de métodos iterativos, para resolução de sistemas de equações algébricas, o controle de E_l foi realizado através da condução do número de iterações até que o erro de máquina fosse atingido; isto é, até o alcance de uma variação no menor número possível de algarismos significativos para resíduo, R , de acordo com o detalhamento apresentado na seção 2.3. Nesse sentido, como parâmetro de controle, utilizou-se a razão entre a norma l_1 do resíduo em uma dada iteração it ($R^{(it)}$) e a norma l_1 do resíduo na iteração inicial ($R^{(0)}$), em símbolos, $\|R^{(it)}\|_1 / \|R^{(0)}\|_1 \leq \varepsilon$, onde $\varepsilon = 10^{-32}$.

Em todas as simulações desenvolvidas foram adotados: sistema de coordenadas cartesianas ortogonais e, malhas estruturadas ortogonais e uniformes. O processo de refinamento de malha foi realizado considerando-se o emprego de razão de refino (r) constante.

Finalmente, as soluções analíticas para as variáveis de interesse consideradas foram obtidas com o uso do *software* Maple 10.0 com 32 casas decimais.

5.4 RESUMO DO CAPÍTULO 5

Neste capítulo foram descritos os procedimentos adotados para a realização das simulações numéricas, utilizadas no presente estudo. Inicialmente foram apresentados os modelos matemáticos considerados: caso 1 – Poisson 1D, caso 2 – Advecção-difusão 1D, e caso 3 – Burgers 2D; bem como foram definidas as variáveis de interesse. Em seguida foram detalhados os métodos numéricos empregados, e ao final foram especificados os parâmetros computacionais utilizados.

6 RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos com o emprego da metodologia proposta nos capítulos 3 e 4, sobre os problemas-modelo definidos no capítulo 5. Dessa forma, MER é abordada sob a perspectiva de redução e estimativa do erro numérico em variáveis que apresentam diferentes características, com relação ao modelo matemático adotado e ao processo de refinamento de malha.

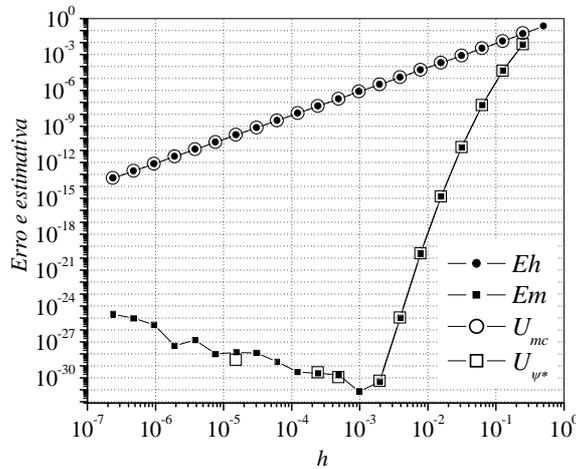
6.1 RESULTADOS PARA O CASO 1: POISSON 1D

No caso 1 primeiramente os cálculos (seção 5.2.1) foram realizados em malhas (Ω^h) distintas, considerando-se as razões de refino $r = 2$ e $r = 3$. Ao se adotar $r = 2$, a Ω^h mais grossa possui $M = 3$ pontos nodais, e a mais refinada $M = 16.777.217$, totalizando assim 23 malhas. Para $r = 3$, a Ω^h mais grossa possui $M = 3$ pontos nodais e a mais refinada $M = 9.565.937$, o que corresponde a 15 malhas.

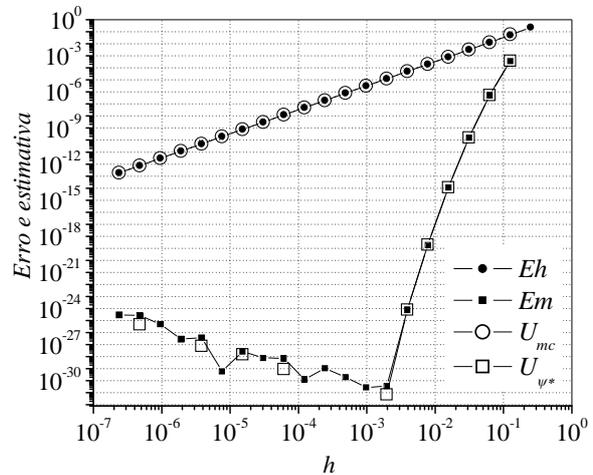
De acordo com a classificação estabelecida na seção 3.1 e com os procedimentos descritos na seção 3.2, no presente contexto as variáveis do tipo I caracterizam-se principalmente pelo emprego direto de MER (Eq. (2.78)). Consideram-se, então, como representantes desse tipo de variável os resultados obtidos em Poisson 1D com: $T_c = T(1/2)$ com $\delta = 0$, cuja solução analítica (fabricada) para T é do tipo senoidal (Eq. (5.5)); e $T(3/4)$ ao se considerar o emprego de solução analítica (fabricada) do tipo exponencial (Eq. (5.10)). Ao se considerar $r = 2$ ambas as coordenadas ($x = 1/2$ e $3/4$) coincidem com um ponto nodal, em todas as Ω^h adotadas. Para as ϕ obtidas desse modo os resultados para Eh e Em , bem como as respectivas estimativas calculadas com os estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} , são representados na Fig. 6.1 sendo que: (a) refere-se à variável $T(1/2)$; e (b) à variável $T(3/4)$.

Nota-se na Fig. 6.1 e na Tab. 6.1 que, no presente caso, em precisão quádrupla $Em \approx 0$ ($Em < 10^{-30}$) com $h \approx 10^{-3}$ através dos níveis: $m = 9$ (extrapolações) e $g = 10$ (malhas) para $\phi = T(1/2)$; bem como $m = 8$ e $g = 9$ para $\phi = T(3/4)$. Para ambas as variáveis, percebe-se que no próximo nível de extrapolação considerado (última linha da Tab. 6.1) Em tem a sua magnitude aumentada, e verifica-se a ocorrência simultânea de $|\psi| < 1$

(para $h \cong 4,88 \times 10^{-4}$), isto é, a condição apresentada na seção 4.4.1 para o emprego efetivo de MER é corroborada.



(a) $T(1/2)$, $r = 2$



(b) $T(3/4)$, $r = 2$

Figura 6.1: Eh , Em e suas respectivas estimativas; para ϕ do tipo I em Poisson 1D.

Tabela 6.1: Em e ψ para ϕ do tipo I em Poisson 1D.

h	$\phi = T(1/2)$, $r = 2$		$\phi = T(3/4)$, $r = 2$	
	Em	ψ	Em	ψ
5,000E-01				
2,500E-01	7,194467E-03			
1,250E-01	-4,361310E-05	3,328162E+01	3,735669E-04	
6,250E-02	5,842820E-08	1,657391E+02	5,222246E-07	1,413945E+02
3,125E-02	-1,819494E-11	7,472065E+02	1,608981E-10	7,145579E+02
1,563E-02	1,351763E-15	3,211995E+03	1,149070E-14	3,244918E+03
7,813E-03	-2,431387E-20	1,346092E+04	1,954125E-19	1,400170E+04
3,906E-03	1,068251E-25	5,559712E+04	8,036211E-25	5,880153E+04
1,953E-03	-4,737788E-31	2,276045E+05	3,485933E-31	2,431641E+05
9,766E-04	7,405201E-32	1,949974E+05	2,784895E-31	1,146329E+07
4,883E-04	-1,769737E-30	2,971223E-01	-1,999886E-30	3,076923E-02

Nessa perspectiva, portanto, considera-se a representação dos resultados numéricos na Tab. 6.2 para as Ω^h correspondentes, ou seja, para $h \geq 4,883 \times 10^{-4}$. Então, através do cálculo da efetividade ($\theta = U/E$), são apresentados os resultados obtidos com os estimadores U_Δ , U_{pmc} , U_ψ , U_{ψ^*} e U_{GCI} , para $\phi = T(1/2)$. Com base nesses resultados (Tab. 6.2), observa-se que os estimadores analisados mostraram-se confiáveis ($\theta \geq 1$), de modo geral; entretanto os

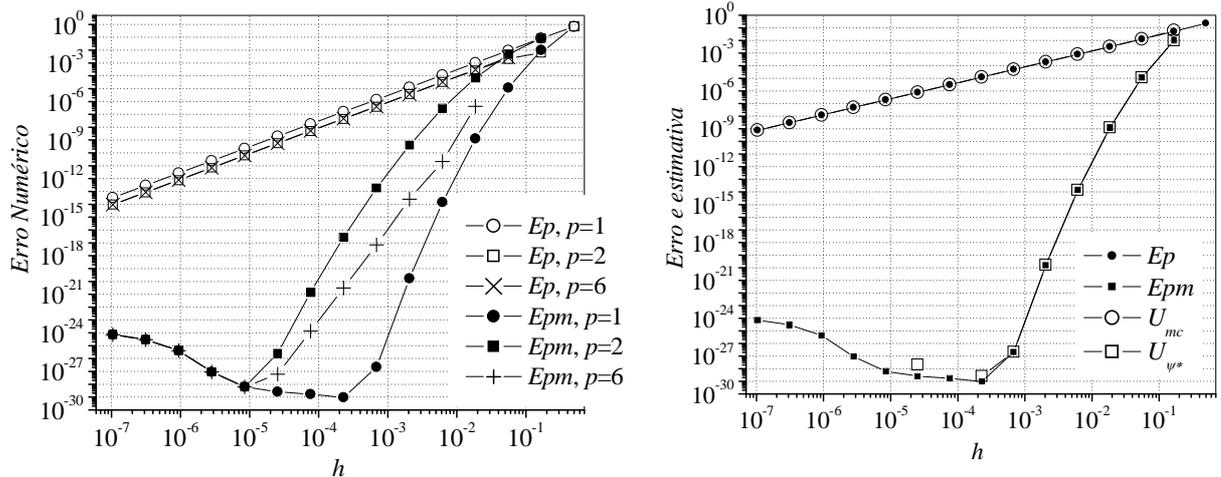
resultados mais acurados ($\theta \cong 1$) foram alcançados com o emprego de U_{pmc} e U_{ψ^*} . Os resultados obtidos com esses estimadores durante o cálculo de $\phi = T(3/4)$ possuem comportamento semelhante.

Tabela 6.2: Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} para Em associado ao cálculo de $T(1/2)$, $r = 2$ (ϕ tipo I) em Poisson 1D.

h	U_{Δ} / Em	U_{pmc} / Em	U_{ψ} / Em	U_{ψ^*} / Em	U_{GCI} / Em
5,000E-01					
2,500E-01	2,511253E+01	1,006062E+00		9,767151E-01	1,395141E+01
1,250E-01	1,058976E+02	1,001340E+00	4,841112E+00	1,005715E+00	1,383010E+01
6,250E-02	6,696916E+02	1,000311E+00	4,482687E+00	1,001093E+00	1,483014E+01
3,125E-02	3,193988E+03	1,000074E+00	4,293244E+00	1,000237E+00	1,574624E+01
1,563E-02	1,394677E+04	1,000018E+00	4,189599E+00	1,000054E+00	1,644814E+01
7,813E-03	5,874386E+04	1,000004E+00	4,129974E+00	1,000013E+00	1,697111E+01
3,906E-03	2,431046E+05	1,000004E+00	4,093762E+00	1,000004E+00	1,736598E+01
1,953E-03	2,305184E+06	1,156305E+00	9,906425E-01	2,011050E+00	4,300672E+00
9,766E-04	2,517289E-01	2,489859E+01	3,793836E-05		4,742295E-05
4,883E-04	1,139253E+00	3,887257E-01		1,126354E+00	1,003995E+00

No presente caso, como variável do tipo II considera-se a obtenção de $\phi = T(3/4)$ nas Ω^h geradas com $r = 3$. Assim, a coordenada $x = 3/4$ situa-se exatamente no ponto médio entre as coordenadas nodais em todas as Ω^h adotadas. Então, para obtenção dessa ϕ torna-se necessário o emprego de interpolação polinomial, e verifica-se na Fig. 6.2 (a) que, ao se empregar MER, o melhor resultado foi alcançado com interpolação linear (grau $p = 1$). Julga-se que essa ocorrência esteja relacionada com o posicionamento da ϕ em questão, isto é, ao ponto médio entre os pontos nodais. A partir desse resultado, são apresentadas na Fig. 6.2 (b) as estimativas para Ep (Eh com interpolação) e Epm (Eh com interpolação e com MER), respectivamente, obtidas com os estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} .

Com esse enfoque, na Tab. 6.3 considera-se a representação dos resultados numéricos para os estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} , até a Ω^h onde se tem $Epm \approx 0$ ($< 10^{-30}$), $h \approx 10^{-4}$. Nessa tabela é possível se verificar a qualidade dessas estimativas obtidas para Epm com $p = 1$, para a variável do tipo II considerada, no presente caso. Tais resultados possuem semelhança com os obtidos para as variáveis do tipo I analisadas (Tab. 6.2), isto é, as estimativas mais acuradas foram determinadas pelo cálculo de U_{pmc} e U_{ψ^*} ($U_{pmc} / Em \approx 1$ e $U_{\psi^*} / Em \approx 1$). Entretanto, desses apenas U_{ψ^*} mostrou-se confiável ($U_{\psi^*} / Em > 1$).



(a) Eh com interpolação, com e sem MER

(b) E_p e E_{pm} ($p = 1$) e suas estimativas

Figura 6.2: E_p , E_{pm} e suas estimativas; para $T(3/4)$, $r = 3$ (ϕ tipo II) em Poisson 1D.

Tabela 6.3: Efetividade dos estimadores U_Δ , U_{pmc} , U_ψ , U_{ψ^*} e U_{GCI} , para E_{pm} , $p = 1$ associado ao cálculo de $T(3/4)$, $r = 3$ (ϕ tipo II) em Poisson 1D.

h	U_Δ / E_{pm}	U_{pmc} / E_{pm}	U_ψ / E_{pm}	U_{ψ^*} / E_{pm}	U_{GCI} / E_{pm}
5,000E-01					
1,667E-01	5,778298E+01	9,988408E-01		1,014428E+00	5,085625E+01
5,556E-02	8,510499E+02	9,998903E-01	1,344679E+01	1,001052E+00	1,680849E+01
1,852E-02	9,099034E+03	9,999888E-01	1,058517E+01	1,000099E+00	1,564480E+01
6,173E-03	8,925065E+04	9,999988E-01	9,797809E+00	1,000010E+00	1,700920E+01
2,058E-03	8,457358E+05	9,999999E-01	9,474773E+00	1,000001E+00	1,790387E+01
6,859E-04	7,883828E+06	1,004434E+00	9,321727E+00	1,004434E+00	1,854359E+01
2,286E-04	2,265254E+02	2,781137E+00	2,886028E-05	2,747406E+00	5,920107E-05
7,621E-05	1,561439E+00	2,539862E+00	1,893786E-02		2,367232E-02

Além disso, o critério para o emprego efetivo de MER também foi confirmado, pois de acordo com a Eq. (4.14) a aplicação MER é eficaz na redução do erro numérico quando $|\psi| > 1 \Rightarrow (p_{U,M})_g > 0$. Isto pode ser verificado pelos comportamentos de E_{pm} , $p = 1$ na Fig. 6.2 e de $(p_{U,M})_g$ (correspondente) na Fig. 6.3. Outro aspecto importante que pode ser observado na Fig. 6.3 diz respeito à convergência $p_E, p_U \rightarrow 2$ e ao aumento progressivo de $(p_{E,M})_g$ e $(p_{U,M})_g$, com o refinamento de Ω^h , o que é compatível com o método de segunda ordem empregado ($p_A = p_0 = 2$, CDS-2) e com os valores $p_V = \{2, 4, 6, \dots\}$.

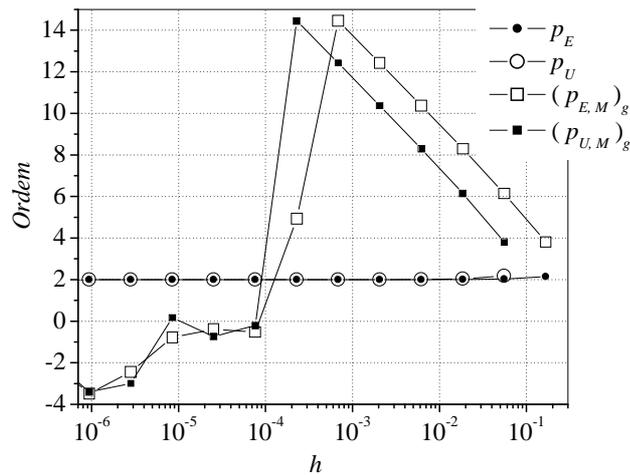
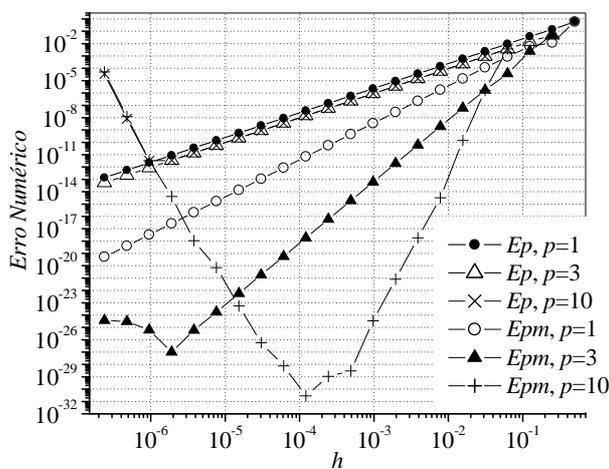
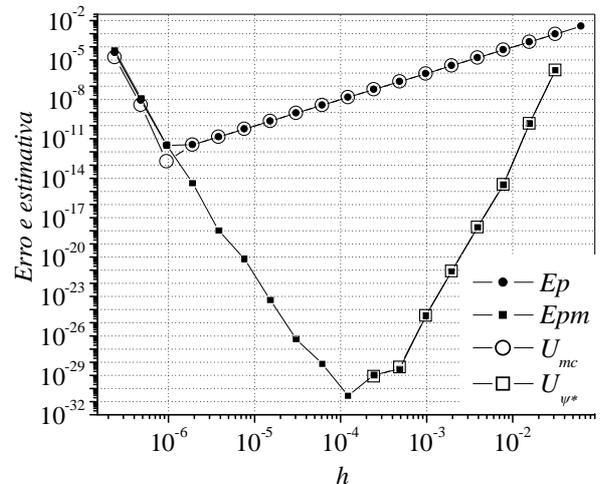


Figura 6.3: Ordem de acurácia associada ao cálculo de $T(3/4)$, $r = 3$ (ϕ tipo II) em Poisson 1D, com e sem MER.

Para as variáveis do tipo III, por sua vez, consideram-se os resultados obtidos através do cálculo de $T(2/3)$ nas Ω^h geradas com $r = 2$. Nesse caso, a coordenada $x = 2/3$ situa-se entre as coordenadas nodais em todas as Ω^h consideradas, porém não está localizada no ponto médio entre esses nós. Logo, o cálculo dessa ϕ requer o emprego de interpolação polinomial, a partir dos resultados nodais obtidos para T . Dessa forma, verifica-se na Fig. 6.4 (a) que os resultados do emprego de MER (para ϕ do tipo III) são melhorados com o aumento do grau (p) do polinômio interpolador, isto é, Epm tem a sua magnitude reduzida com a elevação de p . Com isso, portanto, considera-se $p = 10$ e são apresentadas na Fig. 6.4 (b) as estimativas para Ep e Epm , respectivamente, com U_{mc} e U_{ψ^*} .



(a) Eh com interpolação, com e sem MER



(b) Ep e Epm ($p = 10$) e suas estimativas

Figura 6.4: Ep , Epm e suas estimativas; para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) em Poisson 1D.

Com relação ao critério para o emprego efetivo de MER observa-se na Tab. 6.4 que, novamente, a ocorrência de $|\psi| < 1$ está relacionada com a elevação da magnitude do erro numérico inerente à solução resultante do emprego de MER. Nessa tabela é possível observar, também, o efeito significativo do emprego de MER (Epm) sobre a redução da magnitude do erro numérico (Ep).

Tabela 6.4: Ep , Epm ($p=10$) e ψ para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III), em Poisson 1D.

h	Ep	Epm	ψ
6,250E-02	3,705185E-03		
3,125E-02	9,275174E-04	1,628278E-06	
1,562E-02	2,319558E-04	1,419573E-10	2,274722E+03
7,812E-03	5,799372E-05	3,275177E-15	1,146946E+04
3,906E-03	1,449873E-05	-1,841166E-18	4,331805E+04
1,953E-03	3,624701E-06	8,263761E-22	1,779061E+03
9,766E-04	9,061764E-07	3,410865E-25	2,229921E+03
4,883E-04	2,265442E-07	2,990854E-29	2,421988E+03
2,441E-04	5,663605E-08	-1,069353E-29	8,399981E+03
1,221E-04	1,415901E-08	-2,846524E-31	3,900714E+00
6,104E-05	3,539753E-09	7,628416E-29	1,359415E-01

Então, nessas Ω^h em que $\psi > 1$ (Tab. 6.4), são representados na Tab. 6.5 os resultados para a efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} . Assim é possível se analisar a qualidade dessas estimativas obtidas para Epm com $p = 10$, inerente a ϕ do tipo III no caso em questão. Tal análise remete a uma conclusão semelhante às obtidas anteriormente, ou seja, em relação aos demais estimadores (para Em/Epm) testados, U_{ψ^*} apresenta um nível de acurácia e confiabilidade mais elevado.

Tabela 6.5: Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} , para Epm , $p = 10$ associado ao cálculo de $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) em Poisson 1D.

h	U_{Δ} / Epm	U_{pmc} / Epm	U_{ψ} / Epm	U_{ψ^*} / Epm	U_{GCI} / Epm
6,250E-02					
3,125E-02	1,705893E+03	9,999128E-01		1,000353E+00	9,477181E+02
1,562E-02	1,075237E+04	9,999769E-01	5,044238E+00	1,000064E+00	9,557662E+02
7,812E-03	4,266518E+04	1,000562E+00	3,779270E+00	1,000585E+00	8,599684E+02
3,906E-03	1,772907E+03	1,000449E+00	4,108912E-02	1,000132E+00	8,724803E+00
1,953E-03	2,226824E+03	9,995873E-01	1,252204E+00	1,000217E+00	2,723608E+00
9,766E-04	2,421184E+03	9,999123E-01	1,085550E+00	1,000325E+00	1,356937E+00
4,883E-04	1,140262E+04	1,357536E+00	4,710192E+00	1,357703E+00	5,887741E+00
2,441E-04	3,796809E+00	9,733846E-01	4,520645E-04	9,747607E-01	5,650806E-04
1,221E-04	3,656698E+01	2,689908E+02	7,461562E+00		9,326952E+00

Os resultados apresentados até o momento têm como base o Eh associado ao emprego da aproximação CDS-2 ($p_0 = 2$) em Poisson 1D. Entretanto, ao se considerar o emprego do esquema compacto de quarta ordem ($p_0 = 4$), descrito na seção 5.2.1, os resultados do emprego de MER com e sem interpolação polinomial são (qualitativamente) semelhantes. Como exemplo: considera-se ϕ do tipo III dada por $T(2/3)$, $r = 2$ obtida com $p_0 = 4$; a partir dessas soluções emprega-se, então, a interpolação polinomial com diversos valores de p (obtenção de Ep) e, também, aplica-se MER (obtenção de Epm). Sobre essa proposta, observa-se na Fig. 6.5 que, analogamente aos resultados obtidos anteriormente, para ϕ do tipo III o aumento de p (com $p_0 = 4$) reduz significativamente a magnitude de Epm (Fig. 6.5 (a)). Além disso, as respectivas estimativas para Ep e Epm , obtidas com os estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} , mantêm as características identificadas anteriormente (acurácia e confiabilidade) (Fig. 6.5 (b)).

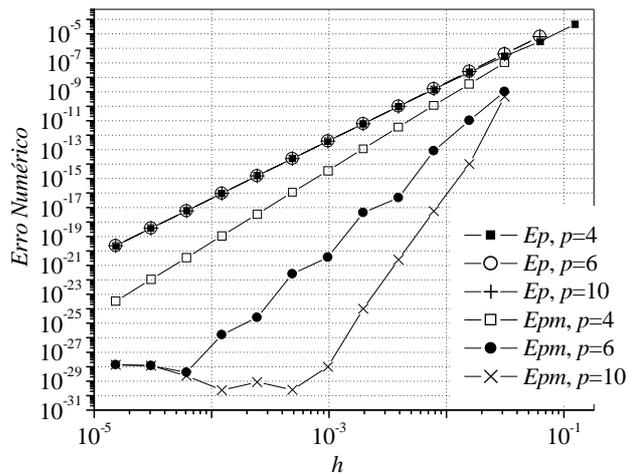
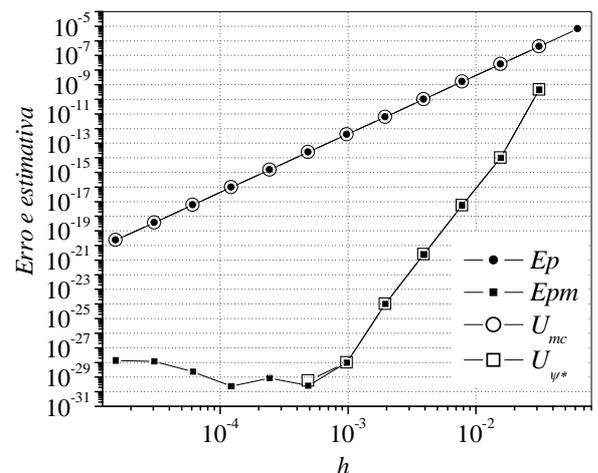
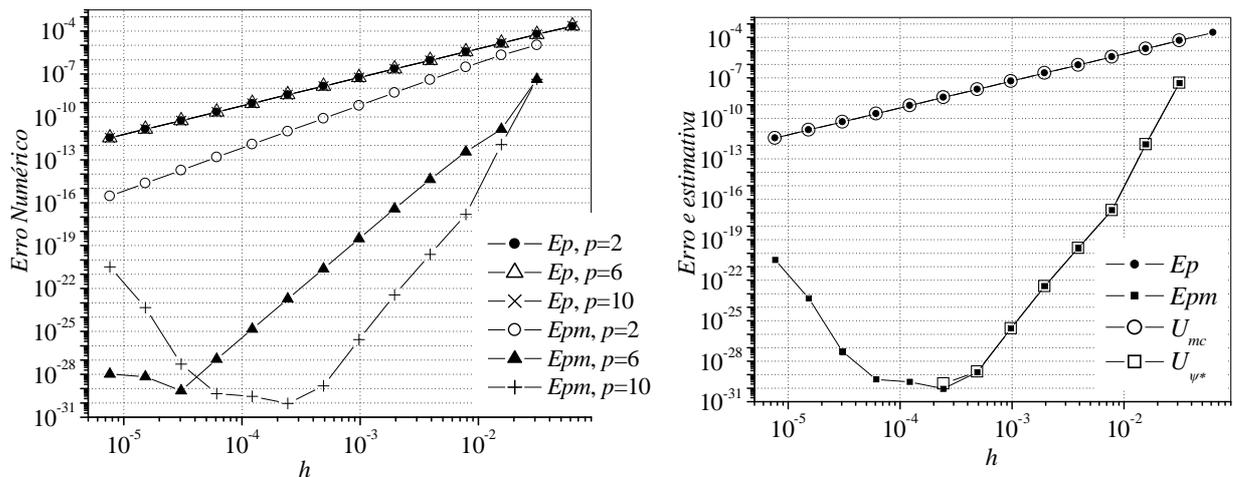
(a) Eh com interpolação, com e sem MER(b) Ep e Epm ($p = 10$) e suas estimativas

Figura 6.5: Ep , Epm e suas estimativas; para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) com $p_0 = 4$ em Poisson 1D.

De acordo com as definições apresentadas na seção 3.1, a próxima classe de variáveis diz respeito a ϕ do tipo IV. No presente caso consideram-se os resultados obtidos para a localização coordenada (x) correspondente a $T = \varphi = 1$ (valor estabelecido para variável dependente primária), ao se adotar $\delta = -\pi/4$ sobre o termo fonte apresentado na Eq. (5.6) (solução senoidal). Com esse enfoque, em todas as Ω^h geradas com $r = 2$, realiza-se a interpolação polinomial a partir dos valores nodais obtidos para T . E, então se calcula o valor de x (variável independente) associado a $T = 1$ (variável dependente) através da resolução da

equação polinomial resultante (conforme a descrição apresentada na seção 3.2, $T(x) = \xi_p(x) = \varphi = 1$). Em seguida, sobre esses valores (de x) obtidos nas diversas Ω^h , emprega-se MER (em ϕ do tipo IV).

A partir disso, os resultados obtidos possuem semelhança com os descritos anteriormente, isto é, E_{pm} tem a sua magnitude reduzida com o aumento do grau (p) do polinômio interpolador (Fig. 6.6 (a)), e as estimativas para E_p e E_{pm} com U_{mc} e U_{ψ^*} (Fig. 6.6 (b)), respectivamente, possuem níveis de acurácia e confiabilidade expressivos. Novamente, a ocorrência de $|\psi| < 1$ está associada à elevação da magnitude de E_{pm} ; para $p = 10$ e $m = 9$ tem-se $\psi \approx 10^{-1}$, e E_{pm} passa de $\approx 10^{-31}$ para $\approx 10^{-30}$ (Fig. 6.6 (a)) o que corresponde, também, ao cálculo efetivo (de maneira confiável e acurada) de U_{ψ^*} até a Ω^h em questão (Fig. 6.6 (b)). A partir de então (malhas mais refinadas) o desempenho de MER é afetado por E_π (para E_{pm} , $p = 10$), isto é, para $m = g - 1 \geq 9$.



(a) Eh com interpolação, com e sem MER

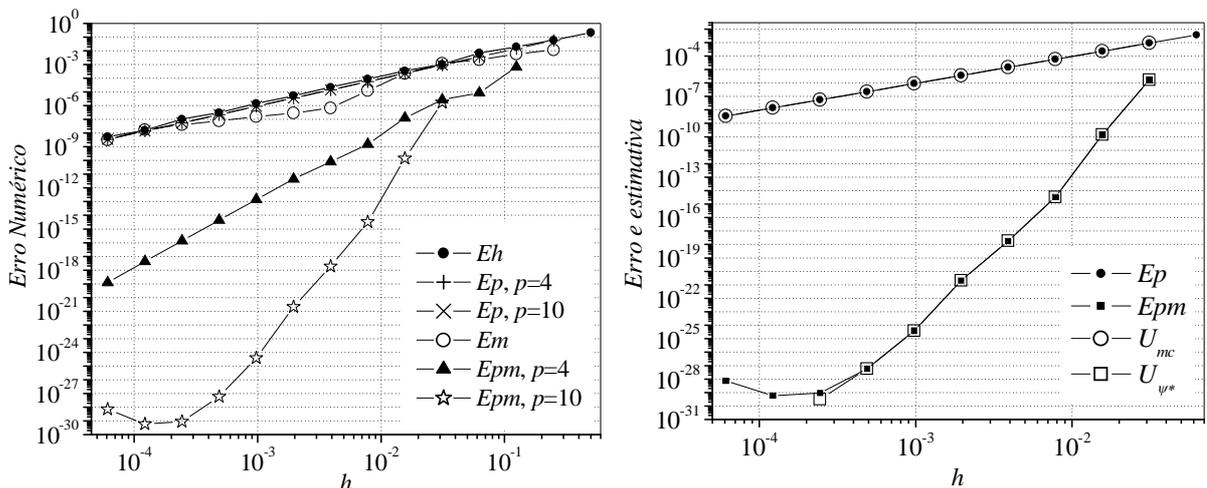
(b) E_p e E_{pm} ($p = 10$) e suas estimativas

Figura 6.6: E_p , E_{pm} e suas estimativas; x inerente a $T = 1$, $r = 2$ (ϕ tipo IV), Poisson 1D.

A última variável de interesse abordada (neste caso) refere-se à obtenção de ϕ do tipo V, determinada pelo cálculo de T_{\max} (definida na seção 5.1.1). Para representação dos resultados obtidos considera-se o termo fonte estabelecido na Eq. 5.11 (exponencial), e nessa perspectiva são abordadas as Ω^h geradas com $r = 2$. Então, primeiramente a partir dos dados nodais obtidos para T determinam-se o valor máximo (nodal) e o seu respectivo Eh , que corresponde à diferença entre a solução analítica para T_{\max} e o seu valor numérico (nodal).

Com essas ϕ nodais emprega-se MER e obtém-se ϕ_M e o seu respectivo erro numérico, Em . Para esses resultados, através dos gráficos de Eh e Em , verifica-se na Fig. 6.7 (a) que MER não é eficaz na redução da magnitude do erro numérico. Tal situação é devida à mudança de coordenada de ϕ em Ω^h distintas, ou seja, nesse caso a T_{\max} nodal tem a sua localização alterada com o processo de refinamento adotado. Isto acarreta em um comportamento não assintótico para p_E com $h \rightarrow 0$ (Fig. 6.8), e prejudicial ao desempenho de MER (Em na Fig. 6.7 (a)).

Como alternativa, de acordo com a metodologia apresentada no capítulo 3, sobre os valores nodais obtidos (vizinhos do ponto de máximo nodal) considera-se o emprego de interpolação polinomial de grau p , e a partir desse polinômio, através do cálculo do seu valor máximo, determina-se T_{\max} (valor máximo de ξ_p). Então, com essas ϕ resultantes (ponto de máximo de ξ_p obtido em cada Ω^h) obtém-se Ep de maneira equivalente a Eh . Em seguida, aplica-se MER e calcula-se Epm analogamente a Em . Enfim, os resultados obtidos apresentam semelhança com os já descritos, isto é: Epm tem a sua magnitude reduzida com a elevação de p (Fig. 6.7 (a)); U_{mc} e U_{ψ^*} (Fig. 6.7 (b)) retratam níveis de acurácia e confiabilidade significativos; e $|\psi| > 1$ garante a redução da magnitude de Epm .



(a) Eh com interpolação, com e sem MER

(b) Ep e Epm ($p = 10$) e suas estimativas

Figura 6.7: Eh , Em , Ep e Epm para T_{\max} (ϕ tipo V) em Poisson 1D.

Além dos valores de p já apresentados, a análise de outros valores também implica em algumas percepções sobre a p_A (ordem de acurácia) resultante: a Fig. 6.8 representa o comportamento de p_A a posteriori da obtenção de ϕ , para Eh com CDS-2 ($p_0 = 2$) e para

Epm correspondente com $p = 3, 4$ e 5 . Observa-se nessa figura que o resultado final de p_A (com a metodologia proposta) é, no mínimo (podendo ser maior), o valor $p + 1$ (uma unidade a mais que o grau do polinômio interpolado); esse comportamento corrobora o pressuposto teórico apresentado na Eq. (2.40).

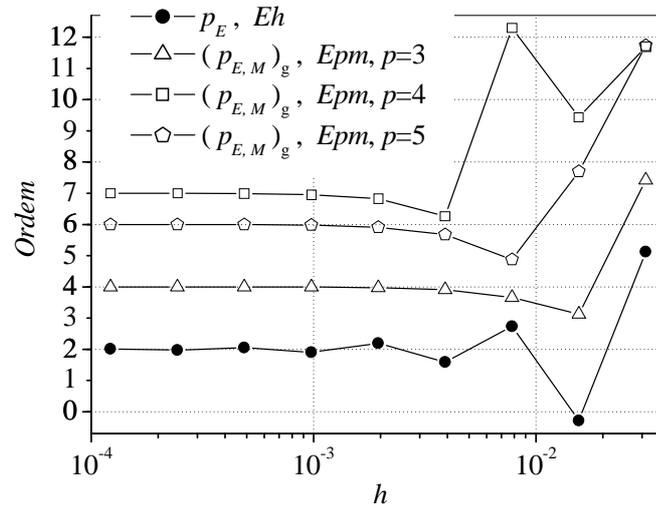


Figura 6.8: p_A inerente ao erro numérico de $T \max$ (ϕ tipo V), em Poisson 1D.

Ainda sobre $T \max$, na Fig. 6.9 percebe-se a ocorrência de uma degeneração sobre a p_A de Eh resultante da aproximação numérica com $p_0 = 4$, isto é, os resultados possuem magnitude equivalente aos obtidos com $p_0 = 2$ (segunda ordem). Essa degeneração de ordem está, provavelmente, relacionada com a mudança de coordenadas da variável de interesse, em Ω^h distintas; o que caracteriza uma outra fonte de erro (associado à posição de ϕ) que compromete a ordem do esquema numérico adotado. Nessa figura pode-se notar, entretanto que: embora a ordem de Eh seja degenerada ao se adotar $p_0 = 4$, Epm apresenta melhores resultados ao se considerar $p_0 = 4$ ao invés de $p_0 = 2$ (CDS-2).

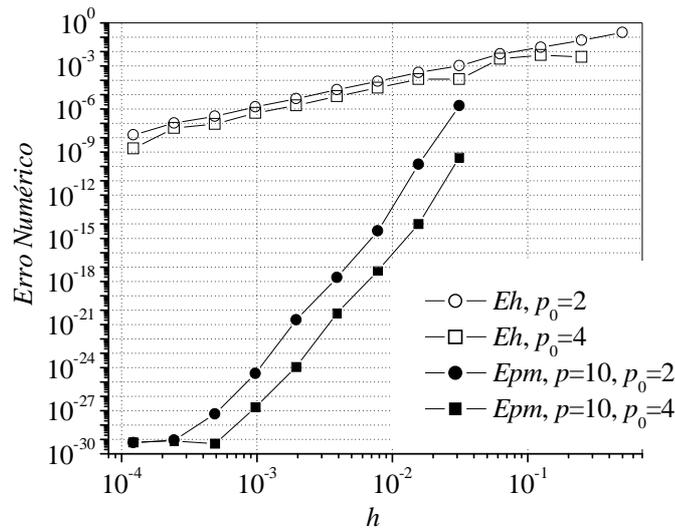


Figura 6.9: Eh e Epm para T_{\max} (ϕ tipo V) em Poisson 1D, com $p_0 = 4$ e 2 .

6.2 RESULTADOS PARA O CASO 2: ADVECÇÃO-DIFUSÃO 1D

No caso 2 as soluções numéricas foram obtidas a partir do modelo matemático representado na Eq. (5.12) considerando-se $Pe = 10$. As Ω^h consideradas foram as mesmas adotadas no caso anterior, ou seja, com os mesmos números de pontos nodais e geradas com $r = 2$ e 3 .

Como primeiro tipo de variável, sobre os resultados obtidos em Advecção-difusão 1D, considera-se: $T(3/4)$, cuja solução analítica é calculada com a Eq. (5.13), em que as ϕ são obtidas nas Ω^h geradas com $r = 2$; dessa forma a coordenada $x = 3/4$ localiza-se exatamente em um ponto nodal (em todas as Ω^h adotadas).

Para essa variável (do tipo I), os resultados para Eh e Em , bem como para as suas respectivas estimativas calculadas com os estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} são representados na Fig. 6.10 (a). Nota-se nessa figura que $Em \approx 0$ em precisão quádrupla ($< 10^{-30}$) com $g = 15$ e $m = 14$. Com as Figs. 6.10 (a) e (b) é possível se ilustrar a validade do critério descrito na seção 4.4.1 (emprego efetivo de MER), isto é, a magnitude de Em pode ser reduzida enquanto a condição $(p_{U,M})_g > 0$ for satisfeita (ou $\psi > 1$). Ainda, nessas figuras observa-se a redução expressiva de Em concomitantemente com o aumento progressivo da sua ordem de acurácia (p_A).

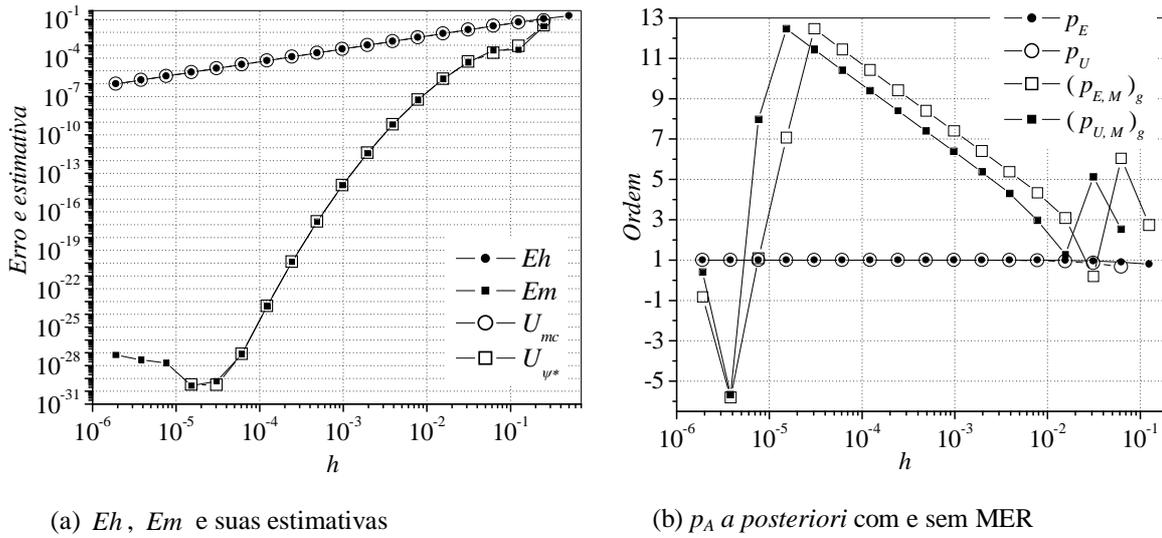


Figura 6.10: Erro numérico com e sem MER e suas respectivas estimativas e ordens, para variável do tipo I ($T(3/4)$, $r = 2$) em Advecção-difusão 1D, com UDS/CDS.

Nesse caso (Fig. 6.10 (b)), $h \rightarrow 0 \Rightarrow p_E, p_U \rightarrow 1$, o que é compatível com o esquema UDS/CDS descrito na seção 5.2.2, ou seja, em um esquema numérico de ordem mista ($p_0 = 1$ e $p_1 = 2$) prevalece a menor ordem (p_0) envolvida no cálculo de ϕ . Entretanto, nota-se que $(p_{E,M})_g$ e $(p_{U,M})_g$ apresentam um comportamento oscilatório para os m iniciais (nas Ω^h menos refinadas), o que caracteriza um impedimento para a obtenção dos valores (teóricos) $p_V = \{1, 2, 3, \dots\}$, com a variação inicial de m . Como tal ocorrência não foi identificada no primeiro caso (para ϕ do tipo I), cogita-se que isso possa representar uma influência do efeito advectivo (do modelo matemático) sobre o desempenho de MER; ou ainda, em problemas envolvendo advecção MER deve ser empregada a partir de certo nível de refinamento de Ω^h .

Sobre esse aspecto, do ponto de vista prático, deve-se sobretudo determinar essa Ω^h (inicial) em que MER possa ser aplicada sem que haja prejuízo em seu desempenho. Isso pode ser realizado com base no monitoramento dos valores calculados para p_E e/ou p_U , ou seja, é desejável que tais parâmetros apresentem um comportamento convergente e monotônico, com a redução de h . Observa-se na Tab. 6.6 que, no presente caso, p_U satisfaz essa exigência para $h \leq 1,563 \times 10^{-2}$, isto é, a partir de $g = 5$. Tal resultado concorda com o aumento progressivo de $(p_{U,M})_g$ (a partir da quinta malha), até a Ω^{h_g} que $Em \approx 0$ ($g = 15$ ou $h = 1,526 \times 10^{-5}$).

Nessa tabela (Tab. 6.6) verifica-se, novamente, que $(p_{U,M})_g < 0$ corresponde à Ω^{h_g} em que Em tem a sua magnitude elevada, ou seja, ao momento em que MER perde o seu efeito sobre a redução do erro numérico e, portanto, o processo recursivo $(\phi_{g,m})$ gerado deve ser suspenso nesse instante. Então, nessa situação, a solução com maior nível de acurácia é inerente à Ω^h imediatamente mais grossa ($\Omega^{h_{g-1}}$), isto é, à ϕ_M obtida com $h = 7,629 \times 10^{-6}$ e que possui $Em = 2,810197 \times 10^{-30}$.

Para essa mesma ϕ do tipo I, são apresentados na Tab. 6.7 os resultados obtidos com o emprego dos estimadores de Em analisados. Nesse sentido nota-se que, como no caso anterior, os estimadores U_{pmc} e U_{ψ^*} são relativamente acurados, entretanto U_{ψ^*} destaca-se (sobre os demais estimadores) pela sua confiabilidade.

Tabela 6.6: Eh , Em , e suas ordens para $T(3/4)$, $r = 2$ (ϕ tipo I), em Advecção-difusão 1D, com o esquema UDS/CDS.

h	Eh	Em	p_U	$(p_{U,M})_g$
2,500E-01	1,988791E-01			
1,250E-01	1,142640E-01	2,964883E-02		
6,250E-02	6,100653E-02	4,491735E-04	6,679327E-01	2,534965E+00
3,125E-02	3,136406E-02	3,928160E-04	9,453176E-01	5,116005E+00
1,563E-02	1,586133E-02	4,671271E-05	9,351426E-01	1,282600E+00
7,813E-03	7,968462E-03	2,300369E-06	9,739022E-01	2,962170E+00
3,906E-03	3,992582E-03	5,507420E-08	9,892746E-01	4,305984E+00
1,953E-03	1,998225E-03	6,557246E-10	9,953505E-01	5,366665E+00
9,766E-04	9,995755E-04	3,890832E-12	9,978737E-01	6,383449E+00
4,883E-04	4,999009E-04	1,150997E-14	9,989892E-01	7,392556E+00
2,441E-04	2,499784E-04	1,696925E-17	9,995081E-01	8,398905E+00
1,221E-04	1,249962E-04	1,243530E-20	9,997575E-01	9,404675E+00
6,104E-05	6,249981E-05	4,499993E-24	9,998796E-01	1,041373E+01
3,052E-05	3,125034E-05	7,948829E-28	9,999400E-01	1,143196E+01
1,526E-05	1,562528E-05	5,969384E-30	9,999701E-01	1,245584E+01
7,629E-06	7,812665E-06	2,810197E-30	9,999850E-01	7,985839E+00
3,815E-06	3,906339E-06	1,584939E-28	9,999925E-01	-5,674086E+00

Ainda, em se tratando de ϕ do tipo I em Advecção-difusão 1D, para $T(1/2)$ nas Ω^h geradas com $r = 2$ os resultados obtidos são qualitativamente semelhantes aos apresentados nas Tabs. 6.6 e 6.7, isto é, são válidas as mesmas considerações realizadas anteriormente para $T(3/4)$, $r = 2$.

Tabela 6.7: Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} , para Em associado ao cálculo de $T(3/4)$, $r = 2$ (ϕ tipo I) em Advecção-difusão 1D, com UDS/CDS.

h	U_{Δ} / Em	U_{pmc} / Em	U_{ψ} / Em	U_{ψ^*} / Em	U_{GCI} / Em
2,500E-01					
1,250E-01	2,853912E+00	9,848502E-01		1,190214E+00	2,682247E+00
6,250E-02	4,875564E+01	1,874531E+00	1,355559E+01	1,930189E+00	2,708647E+01
3,125E-02	1,875537E+00	8,810825E-01	6,364345E-02	6,244143E-01	3,827626E-01
1,563E-02	6,946114E+00	9,507550E-01	2,158371E+00	1,090717E+00	2,697963E+00
7,813E-03	1,870328E+01	9,760585E-01	2,842153E+00	1,028031E+00	3,552692E+00
3,906E-03	4,013154E+01	9,880938E-01	2,170828E+00	1,012637E+00	2,713535E+00
1,953E-03	8,234148E+01	9,940664E-01	2,061358E+00	1,006118E+00	2,576697E+00
9,766E-04	1,668763E+02	9,970418E-01	2,031039E+00	1,003011E+00	2,538799E+00
4,883E-04	3,363818E+02	9,985257E-01	2,017869E+00	1,001493E+00	2,522336E+00
2,441E-04	6,766226E+02	9,992672E-01	2,012505E+00	1,000744E+00	2,515632E+00
1,221E-04	1,362938E+03	9,996381E-01	2,014838E+00	1,000371E+00	2,518547E+00
6,104E-05	2,761729E+03	9,998234E-01	2,026564E+00	1,000185E+00	2,533205E+00
3,052E-05	5,659512E+03	1,007510E+00	2,049393E+00	1,007689E+00	2,561742E+00
1,526E-05	1,341518E+02	5,292317E-01	2,388457E-02	9,271522E-01	2,985571E-02
7,629E-06	1,124153E+00	5,739957E+01	4,417248E-03		5,521560E-03

No presente caso, como ϕ do tipo II considera-se o cálculo de $T(3/4)$ nas Ω^h geradas com $r = 3$. Dessa forma (como descrito no caso anterior), a coordenada $x = 3/4$ situa-se exatamente no ponto médio entre pontos nodais, e faz-se necessário o emprego de interpolação polinomial para a avaliação de ϕ (em todas as Ω^h adotadas).

Com esse enfoque, os erros numéricos inerentes a $\phi = T(3/4)$ ($r = 3$), com (E_{pm}) e sem MER (E_p) são representados na Fig. 6.11 (a). Nessa figura é possível perceber que: o grau $p = 1$ proporciona melhores resultados para E_{pm} ; e o grau $p = 10$ acarreta em resultados para E_{pm} que sofrem forte influência de E_{π} , ao se considerar $h \rightarrow 0$, ou seja, para $h < 10^{-5}$ o erro numérico é dominado por essa fonte de erro. Nesse âmbito E_{π} representa um aspecto importante e, de certo modo, preocupante; visto que E_{pm} calculado com $p = 10$ não atinge o nível de erro de máquina (em precisão quádrupla), e alcança a magnitude mínima de $\approx 10^{-20}$ (esse efeito será discutido posteriormente).

Contudo, de acordo com a metodologia apresentada no capítulo 3, nesta classe de ϕ o foco é direcionado ao E_{pm} com $p = 1$. Assim, na Fig. 6.11 (b) são representados os comportamentos dos estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} (em ϕ tipo II e Advecção-difusão 1D) para E_p e E_{pm} , respectivamente, o que corrobora os resultados já obtidos (apresentados anteriormente) para tais estimativas.

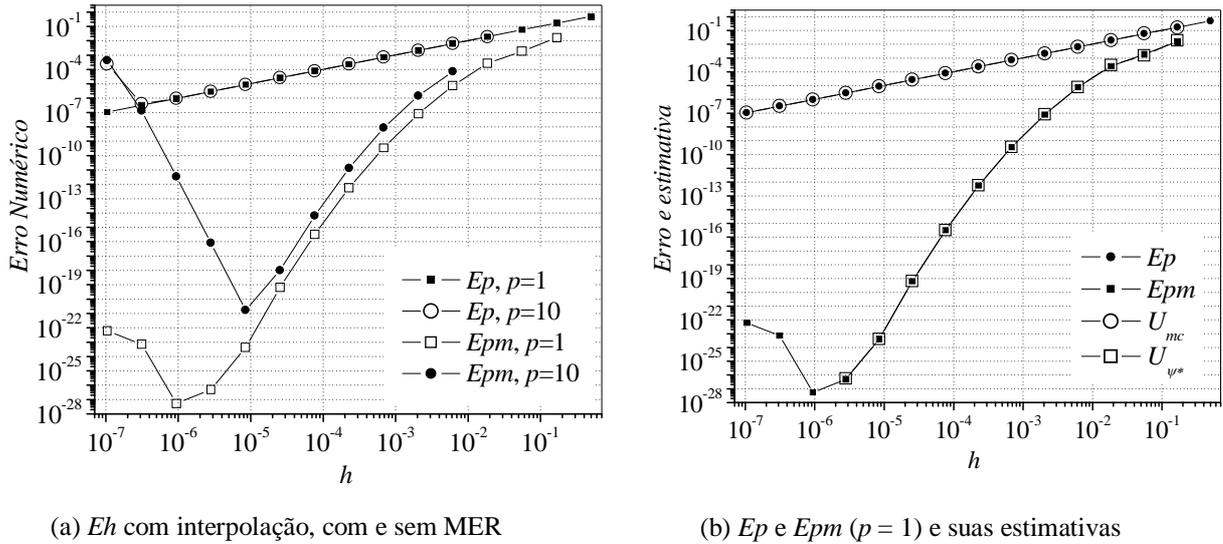


Figura 6.11: E_p e E_{pm} para $T(3/4)$, $r = 3$ (ϕ tipo II) e suas estimativas em Advecção-difusão 1D, com o esquema UDS/CDS.

Para ϕ do tipo III, por sua vez, considera-se $T(2/3)$ obtida nas Ω^h geradas com $r = 2$. Assim (como no caso I), a coordenada $x = 2/3$ localiza-se entre dois pontos nodais, porém não corresponde ao ponto médio entre eles, e a determinação de ϕ depende da aplicação de interpolação polinomial (a partir dos dados nodais). Com essa perspectiva, os erros numéricos obtidos com e sem MER são representados na Fig. 6.12 (a). Essa ilustração corresponde aos resultados obtidos, no sentido em que: a elevação de p proporciona uma redução mais significativa de E_{pm} , no entanto a influência de E_π deve ser monitorada ao se refinar Ω^h .

Em comparação com o caso anterior (Poisson 1D), esse efeito mais acentuado de E_π pode ser atribuído, em princípio, ao efeito advectivo do modelo matemático (Eq. 5.12); e/ou ao emprego de um esquema numérico de ordem mista (UDS/CDS). Tal ocorrência de E_π também pode ser vislumbrada ao se comparar os resultados de E_{pm} com $p = 10$ (Fig. 6.11 (a)) e com $p = 8$ (Fig. 6.12 (a)), isto é, devido ao maior número de operações envolvidas no cálculo dos coeficientes do polinômio interpolador com $p = 10$ (Apêndice A), E_π é ainda mais evidenciado.

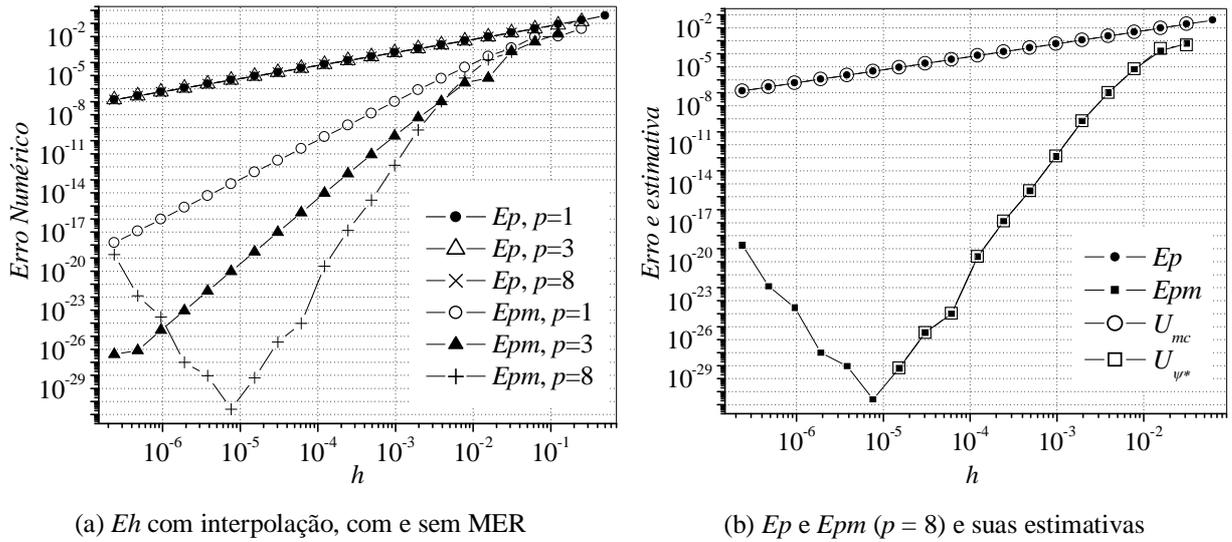


Figura 6.12: E_p , E_{pm} e suas estimativas; para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) em Advecção-difusão 1D, com o esquema UDS/CDS.

A consequência do esquema de ordem mista (UDS/CDS) (Figs. 6.11 e 6.12), sobre o desempenho de MER (neste caso), pode ser comparada com a resultante da aplicação do esquema CDS/CDS (Fig. 6.13), ou seja, em que tanto o termo advectivo quanto o difusivo (do modelo matemático) são calculados com o emprego da aproximação CDS-2, sobre a Eq. (5.12). Dessa forma obtém-se $p_0 = 2$, e os resultados obtidos com o emprego de MER precedida da interpolação polinomial (com $p = 8$ e 10) para o cálculo de $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) são apresentados na Fig. 6.13 (a).

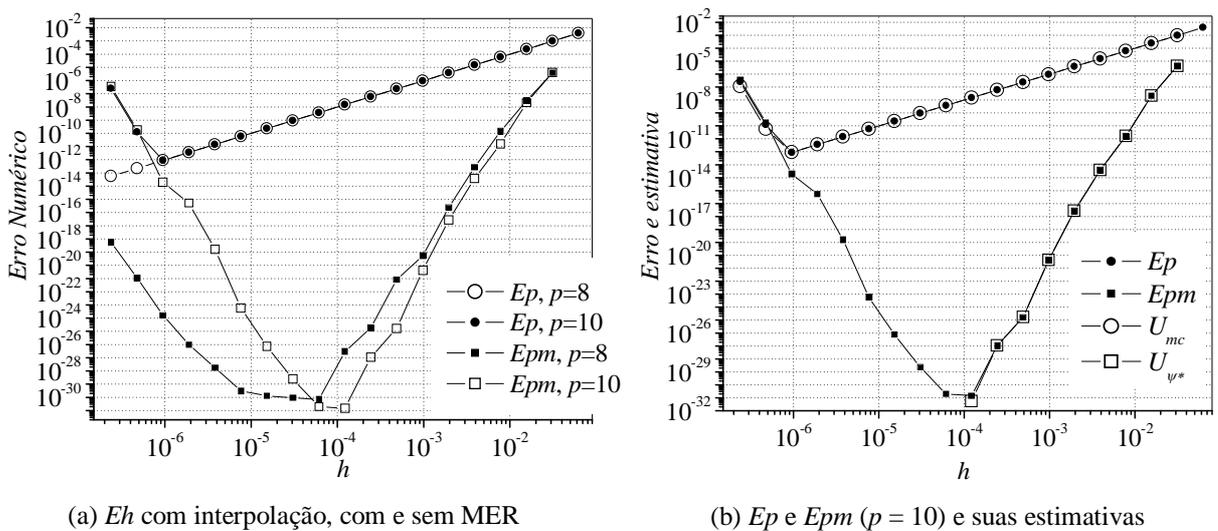


Figura 6.13: E_p , E_{pm} e suas estimativas; para $T(2/3)$, $r = 2$ (ϕ tipo III) em Advecção-difusão 1D, com o esquema CDS/CDS.

Então, com a comparação das Figs. 6.12 (a) e 6.13 (a) nota-se que o desempenho de MER é mais significativo ao se adotar $p_0 = 2$ (CDS/CDS), ao invés de $p_0 = 1$ (UDS/CDS), pois nessa situação $Em \approx 0$ com cinco níveis a menos de extrapolação e com um h dez vezes maior. Além disso, percebe-se que a ação de E_π torna-se menos prejudicial à redução da magnitude de Epm , haja vista que para $h \approx 10^{-4}$ Epm com $p = 10$ é $\approx 10^{-31}$ (magnitude não alcançada com $p_0 = 1$).

As características identificadas para ϕ do tipo III em Advecção-difusão 1D, com relação ao emprego de MER aliada à interpolação polinomial, possuem semelhança com as constatações verificadas no caso anterior; ou seja, resumidamente pode-se dizer que o aumento do grau p do polinômio interpolador acarreta na elevação da ordem de acurácia de Epm . Entretanto, os efeitos de E_π devem ser monitorados.

Sobre o desempenho dos estimadores analisados e do critério para o emprego efetivo de MER, as percepções detectadas no caso I permanecem válidas; isto é, U_{mc} e U_{ψ^*} mostraram-se confiáveis e acurados (Figs. 6.11 a 6.13 (b)), e a condição $\psi > 1$ caracteriza a redução da magnitude de Epm .

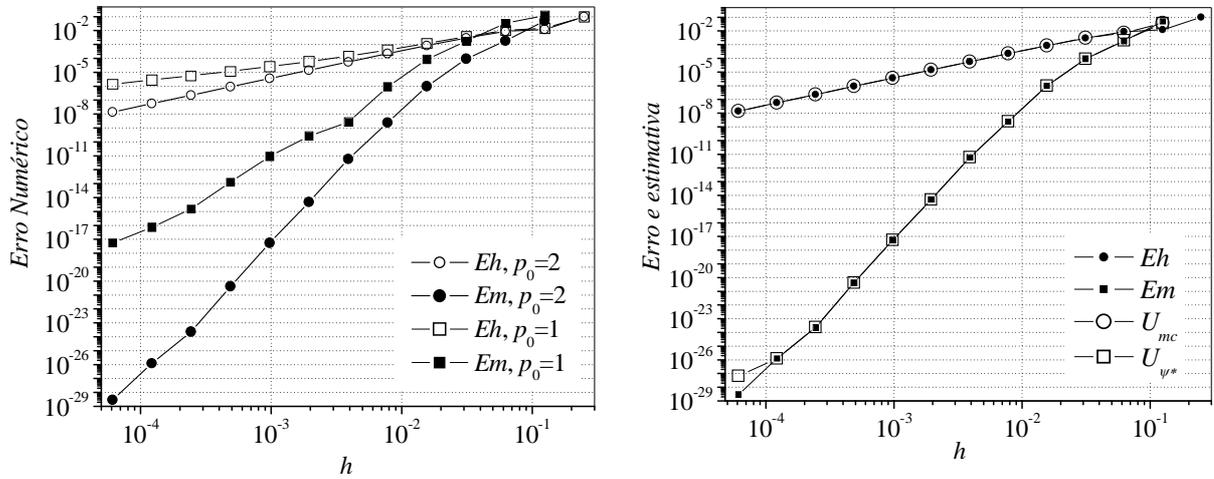
6.3 RESULTADOS PARA O CASO 3: BURGERS 2D

A resolução numérica do caso 3 foi realizada a partir do modelo matemático referente às Eqs. (5.14) e (5.15), considerando-se $Re = 1$; e de acordo com o detalhamento apresentado na seção 5.2.3. Com esse enfoque, os cálculos foram desenvolvidos em 13 Ω^h distintas, estabelecidas com $r = 2$. Dessas malhas, a mais grossa com $M \times M = 4 \times 4$, e a mais fina com $M \times M = 16.384 \times 16.384$ pontos nodais.

No caso em questão, para a representação dos resultados obtidos em ϕ do tipo I considera-se a variável global Fs (definida na seção 5.1.3, Tab. 5.1). O desempenho de MER sobre essa variável é ilustrado na Fig. 6.14 (a), através das aproximações com $p_0 = 1$ e com $p_0 = 2$ (descritas na seção 5.2.3). Tais resultados, apresentados nessa figura, já estão disponíveis na literatura (MARCHI *et al.*, 2009) para variável do tipo I, e servem de referência para o desempenho de MER nessa situação.

Na Fig. 6.14 (b) são representadas as estimativas para Eh e Em com os estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} , respectivamente (para ϕ do tipo I em Burgers 2D). De modo geral, tais

estimativas são condizentes com os erros verdadeiros, ou seja, apresentam níveis de acurácia e confiabilidade significativos.



(a) Erro numérico com e sem MER

(b) Eh e Em com $p_0 = 2$, e suas estimativas

Figura 6.14: Eh , Em e suas estimativas; para Fs , $r = 2$ (ϕ tipo I) em Burgers 2D.

Entretanto, pode-se observar na Tab. 6.8 que esses níveis estão relacionados com o comportamento de p_A obtida *a posteriori* de ϕ .

Mais especificamente, através do cálculo de p_U , a obtenção de $p_U \rightarrow p_0$ monotonicamente com a redução de h é desejável. Quanto a p_A de Em , embora não seja atingido o comportamento teórico esperado (aumento progressivo de ordem), mediante o cálculo de $(p_{U,M})_g$ percebe-se a sua superioridade em relação aos valores de p_U e p_0 (Tab. 6.8).

Dentre os estimadores para Em (apresentados no capítulo 4) analisados, os melhores resultados são decorrentes do emprego de U_{ψ^*} , isto é, as conclusões obtidas nos casos anteriores (1 e 2) são corroboradas ao se considerar ϕ do tipo I em Burgers 2D.

Tabela 6.8: Efetividade de U_{mc} e U_{ψ^*} , e suas ordens aparentes, para Fs (ϕ do tipo I) em Burgers 2D, com $p_0 = 2$.

h	U_{mc} / Eh	U_{ψ^*} / Em	p_U	$(p_{U,M})_g$
2,500E-01				
1,250E-01	-2,997344E+00	7,285412E-01		
6,250E-02	7,916531E-01	1,095344E+00	2,998563E+00	1,640115E+00
3,125E-02	1,031353E+00	9,447830E-01	8,029230E-01	4,602312E+00
1,562E-02	1,001170E+00	1,013282E+00	1,472129E+00	4,400657E+00
7,812E-03	9,999888E-01	9,951069E-01	1,796796E+00	6,556473E+00
3,906E-03	9,999999E-01	1,001582E+00	1,909485E+00	8,641399E+00
1,953E-03	1,000000E+00	9,997129E-01	1,957184E+00	8,699827E+00
9,766E-04	1,000000E+00	1,000338E+00	1,979168E+00	1,024137E+01
4,883E-04	1,000000E+00	1,000224E+00	1,989724E+00	9,810914E+00
2,441E-04	1,000000E+00	1,005864E+00	1,994897E+00	1,033231E+01
1,221E-04	1,000000E+00	9,923733E-01	1,997457E+00	1,081602E+01
6,104E-05	1,000000E+00	2,184929E+01	1,998731E+00	7,569329E+00

No presente caso as variáveis do tipo II estabelecidas dizem respeito a: $uc = u(1/2, 1/2)$; e $vc = v(1/2, 1/2)$ (Tab. 5.1). A localização dessas variáveis corresponde, exatamente, ao ponto médio entre os quatro pontos nodais centrais, em todas as Ω^h adotadas. Com isso, de acordo com a metodologia apresentada no capítulo 3, para obtenção de ϕ considera-se o emprego de interpolação polinomial (2D) com $p = 1$ (interpolação bilinear), e em seguida calcula-se ϕ_{pM} (com o emprego de MER). Dessa forma, os resultados para Ep e Epm inerentes a uc são representados na Fig. 6.15 (a) (os resultados obtidos para vc possuem comportamento análogo). Nota-se que o efeito de MER sobre a redução do erro numérico nessa situação (Fig. 15 (a)) é bastante semelhante ao alcançado em ϕ do tipo I (Fig. 6.14 (a)), o que estimula o emprego da metodologia em questão (para ϕ do tipo II).

Com relação às estimativas para Eh e Em mediante o emprego de U_{mc} e U_{ψ^*} (Fig. 15 (b)), durante o cálculo ϕ do tipo II em Burgers 2D, os resultados identificam-se com os encontrados em ϕ do tipo I (Fig. 14 (b)), e portanto correspondem ao detalhamento apresentado anteriormente. Essa analogia é válida, também, para o desempenho dos estimadores para Em/Epm investigados (U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI}), isto é, dentre esses U_{ψ^*} destacou-se quanto à acurácia e confiabilidade.

Em se tratando dos valores de p_A atingidos durante o cálculo de uc , observa-se na Tab. 6.9 que, assim como nos casos anteriores, Ep tem p_A equivalente à ordem do esquema

numérico adotado. Nota-se ainda que, para Epm ocorre um aumento de p_A com a diminuição de h em ambos os esquemas numéricos analisados ($p_0 = 1$ e $p_0 = 2$).

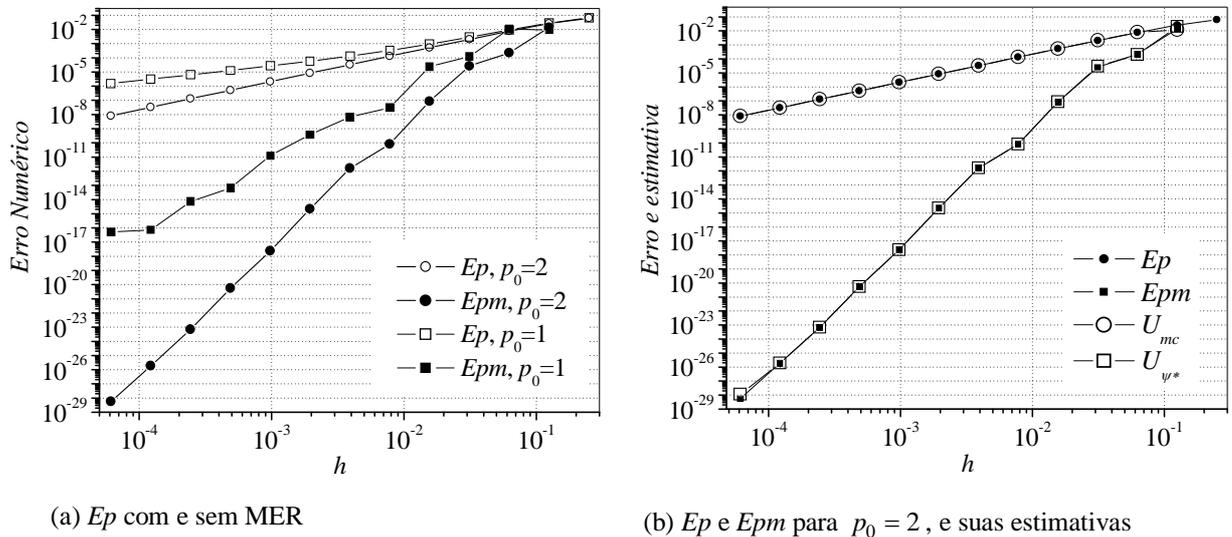


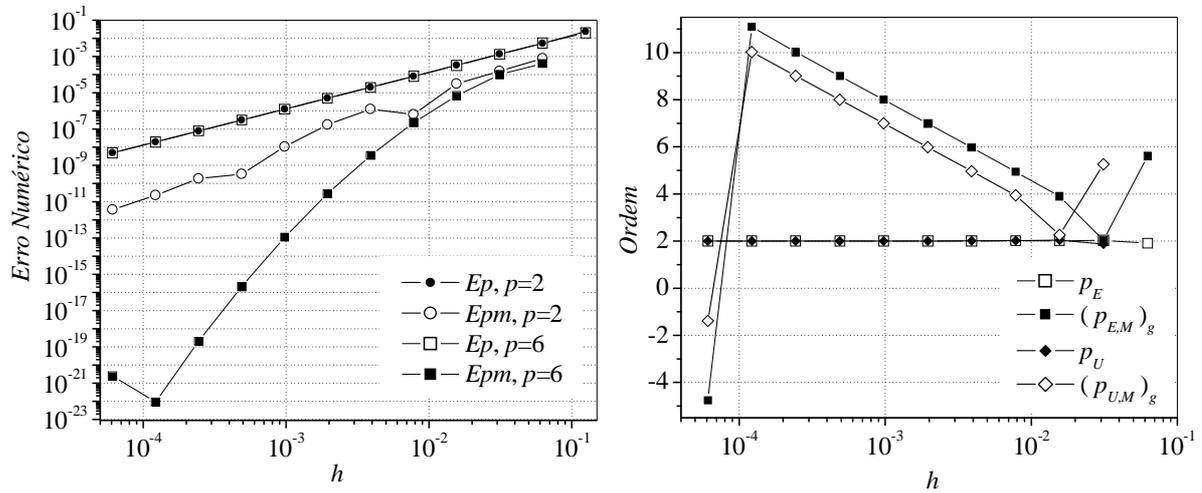
Figura 6.15: Ep , Epm e suas estimativas; para $uc = u(1/2, 1/2)$ (ϕ tipo II) com interpolação bilinear, em Burgers 2D.

Tabela 6.9: Ordens obtidas para ϕ do tipo II; uc , com interpolação bilinear, em Burgers 2D.

Ω^h	32×32	512×512	4096×4096
h	3,13E-02	1,95E-03	2,44E-04
p_A para Ep , $p_0 = 2$	1,91E+00	2,00E+00	2,00E+00
p_A para Epm , $p_0 = 2$	3,12E+00	9,53E+00	9,64E+00
p_A para Ep , $p_0 = 1$	1,62E+00	1,19E+00	1,03E+00
p_A para Epm , $p_0 = 1$	2,43E+00	4,11E+00	6,64E+00

Para ilustração dos resultados encontrados durante o cálculo de variáveis do tipo III, em Burgers 2D, considera-se vm (Tab. 5.1) obtida com $p_0 = 2$, cuja solução analítica é determinada a partir da Eq. (5.21). Essa variável possui localização fixa, porém não coincide com nenhum ponto nodal em qualquer Ω^h adotada (coordenadas irracionais, $x = 1/2 - \sqrt{3}/6$, $y = \sqrt{2}/2$). Além disso, não está situada no ponto médio entre pontos nodais. Assim, para determinação de ϕ torna-se necessário o emprego de interpolação polinomial 2D. Consideram-se, então, os polinômios 2D com graus $p = 2$ e 6 ; e os resultados para Ep e Epm são representados na Fig. 6.16 (a).

Nessa situação, apesar de não se atingir o comportamento apresentado na Fig. 6.14 (referência), percebe-se uma redução significativa sobre o erro numérico (Fig. 6.16 (a)) assim como uma elevação progressiva de p_A (Fig. 6.16 (b)). Desse modo, os melhores resultados foram obtidos com $p = 6$.



(a) E_p e E_{pm} com a abordagem 2D

(b) p_A a posteriori para E_p e E_{pm} , $p = 6$

Figura 6.16: Erro numérico com interpolação polinomial, com e sem MER e suas ordens, para ϕ do tipo III (vm) em Burgers 2D, com $p_0 = 2$.

A magnitude de E_{pm} obtido a partir dos esquemas com $p_0 = 1$ e $p_0 = 2$ pode ser observada/comparada na Tab. 6.10, em três Ω^h distintas. Ainda nessa tabela, com relação aos valores de p_A alcançados, nota-se que na Ω^h com $h \cong 1,22 \times 10^{-4}$: para E_{pm} com $p_0 = 2$ tem-se $p_A \approx 11$; e para E_{pm} com $p_0 = 1$ tem-se $p_A \approx 5,7$. Esses valores corroboram os resultados obtidos na seção 6.1 (caso 1, Fig. 6.9) sobre efeito da ordem (p_0) do esquema numérico empregado. Essa constatação também é estendida às outras Ω^h consideradas, isto é, o valor de p_A resultante do emprego de MER com interpolação polinomial também depende da ordem do método de discretização adotado.

No que diz respeito às estimativas para E_h e E_{pm} , durante o cálculo ϕ do tipo III em Burgers 2D (com $p_0 = 1$ e 2), constatou-se que U_{mc} e U_{ψ^*} fornecem resultados expressivos, isto é, relativamente acurados e confiáveis na maioria das Ω^h analisadas (Tab. 6.11). Assim como nos casos anteriores, U_{ψ^*} apresenta uma correlação mais elevada com E_{pm} em comparação aos demais estimadores investigados (U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{GCI}).

Tabela 6.10: Ordem e magnitude do erro numérico (com MER) obtido para ϕ do tipo III, vm , com interpolação polinomial 2D, em Burgers 2D.

Ω^h	32×32	128×128	8192×8192
h	3,13E-02	7,81E-03	1,22E-04
$ Epm, p = 6, p_0 = 1 $	3,60E-04	2,28E-06	3,38E-13
$ Epm, p = 6, p_0 = 2 $	1,02E-04	2,23E-07	9,34E-23
$p_A; Epm, p = 6, p_0 = 1 $	1,83E+00	3,24E+00	5,76E+00
$p_A; Epm, p = 6, p_0 = 2 $	2,04E+00	4,94E+00	1,11E+01

Tabela 6.11: Efetividade de U_{mc} e U_{ψ^*} para ϕ do tipo III, vm , com interpolação polinomial 2D, $p = 6$, em Burgers 2D.

h	Esquema com $p_0 = 1$		Esquema com $p_0 = 2$	
	U_{mc} / Eh	U_{ψ^*} / Epm	U_{mc} / Eh	U_{ψ^*} / Epm
1,250E-01				
6,250E-02	3,952889E+00	7,436890E-01	9,224579E-01	1,243073E+00
3,125E-02	4,642232E-00	1,028414E+00	1,076964E+00	1,067178E+00
1,562E-02	2,302218E+00	1,040918E+00	9,791034E-01	1,032635E+00
7,812E-03	1,027928E+00	1,028106E+00	1,002742E+00	1,015916E+00
3,906E-03	9,947702E-01	1,040531E+00	9,998250E-01	1,007884E+00
1,953E-03	1,001736E+00	9,571497E-01	1,000006E+00	1,003910E+00
9,766E-04	9,995692E-01	9,488679E-01	9,999999E-01	1,001944E+00
4,883E-04	1,000056E+00	9,693754E-01	1,000001E+00	1,000960E+00
2,441E-04	9,999993E-01	9,518084E-01	1,000000E+00	1,000458E+00
1,221E-04	9,999999E-01	1,488678E+00	1,000000E+00	1,612817E+00
6,104E-05	9,999990E-01		1,000000E+00	

No presente caso, uma análise envolvendo ϕ do tipo IV (conforme descrito na seção 3.1) pode ser conduzida através da localização de vm (Tab. 5.1). Com essa perspectiva, admite-se a identificação das coordenadas de $vm = v(x, y) = \varphi = \sqrt{2}/2$, ou seja, para o valor real (constante $\varphi = \sqrt{2}/2$) atribuído à variável dependente (v) busca-se a sua correspondência sob as variáveis independentes (x e y). Desse modo, para ilustração dos resultados, considera-se então o emprego de interpolação polinomial 2D com grau $p = 6$ para a obtenção da sua ordenada ($y(vm)$) correspondente. Com isso, na Fig. 5.17 (a) são representados os resultados para o erro numérico e suas estimativas, sem e com o emprego de MER, bem como para a p_A resultante (Fig. 6.17 (b)). Novamente, dentre os estimadores para Em investigados, U_{ψ^*} apresentou índices mais elevados de acurácia e confiabilidade; e U_{mc} mantém as características (desejáveis) descritas anteriormente.

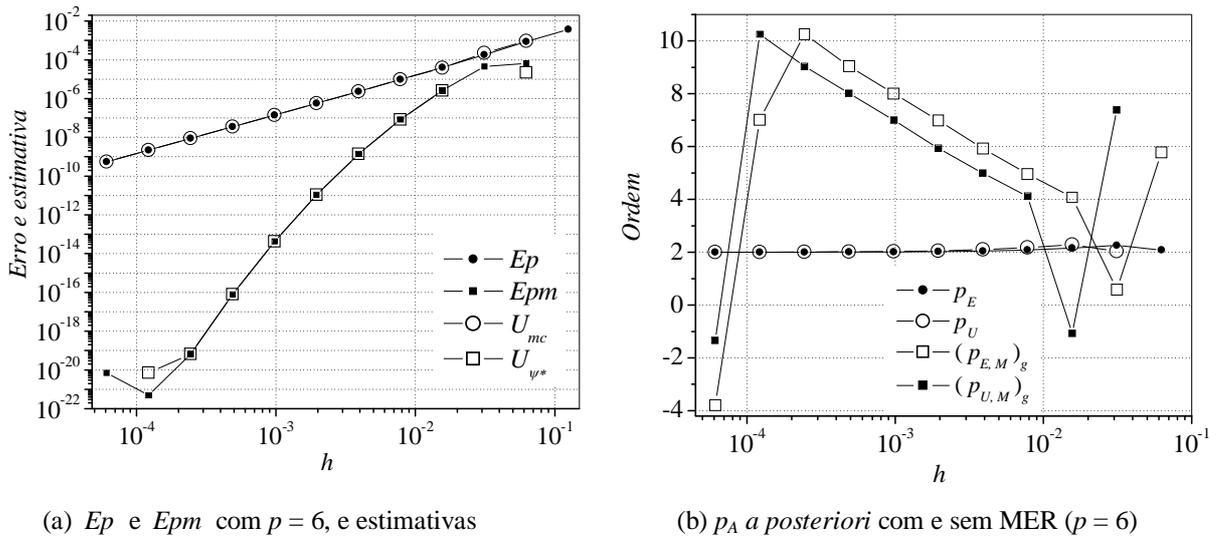


Figura 6.17: Erro numérico com e sem MER e suas respectivas estimativas e ordens, para ϕ do tipo IV ($y(vm)$) em Burgers 2D; esquema com $p_0 = 2$.

Finalmente, para a representação dos resultados obtidos em ϕ do tipo V, no presente caso considera-se a determinação de Ψ_{\min} (Tab. 5.1). Para essa variável, observa-se na Fig. 6.18 (a) o efeito do emprego de MER aliado à interpolação polinomial (2D) e ao método de otimização (minimização), sobre a redução do erro numérico. Nessa figura são consideradas as aproximações numéricas com $p_0 = 1$ e 2, e os polinômios com $p = 2$ e 6. Dessa forma, novamente, é notável a influência de dois aspectos sobre o desempenho da metodologia proposta (E_{pm}): a ordem de acurácia ($p_A = p_0$) do método de discretização empregado; e o grau (p) do polinômio interpolador adotado. Nesse sentido, para ϕ do tipo V, os acréscimos de p_0 e p proporcionam uma elevação da acurácia dos resultados obtidos.

Na Fig. 6.18 (b) e na Tab. 6.12 são representados os desempenhos dos estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} , nessa situação. A avaliação dos estimadores para Em (descritos no capítulo 4) durante o cálculo de Ψ_{\min} corrobora as conclusões descritas anteriormente, ou seja, dentre tais estimadores U_{ψ^*} destaca-se por seus níveis de acurácia e confiabilidade.

Nota-se, ainda, na Tab. 6.12 o comportamento convergente e monotônico (desejável) obtido para p_U (com a redução de h) inerente ao cálculo de Ψ_{\min} com $p = 6$ e $p_0 = 2$. Assim, torna-se possível a elevação progressiva de $(p_{U,M})_g$ com o emprego de MER. Além disso, com a determinação de $(p_{U,M})_g$ o critério para o emprego efetivo de MER (seção 4.4.1) é corroborado, isto é, a ocorrência de $(p_{U,M})_g < 0$ indica a elevação da magnitude de E_{pm} ; bem como representa um impedimento para o cálculo de U_{ψ^*} ($\psi < 1$).

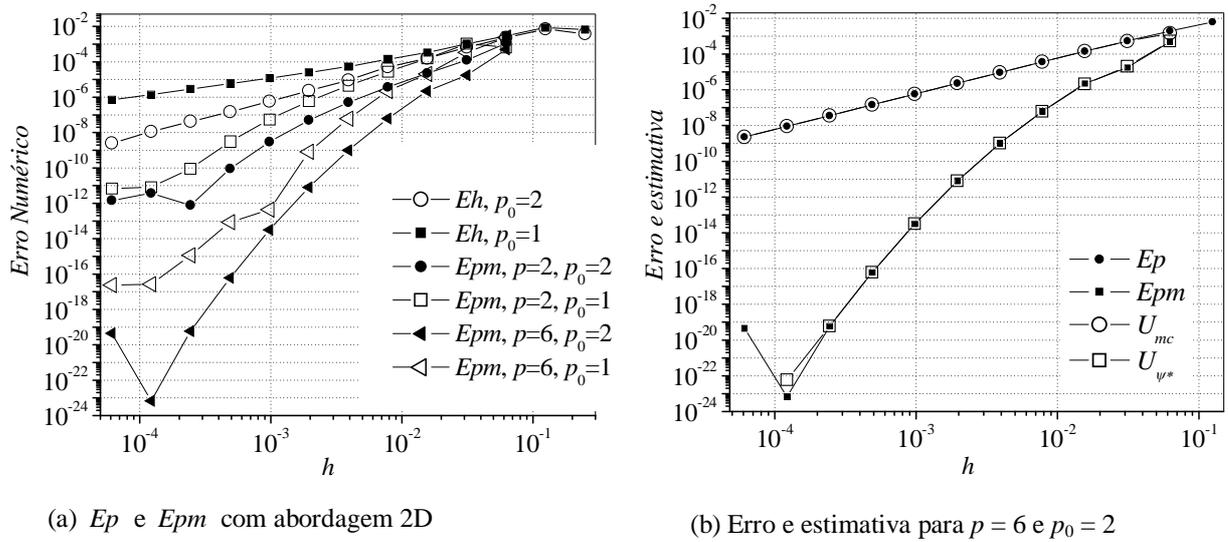


Figura 6.18: Erro numérico com e sem MER aliado a interpolação polinomial e suas estimativas, para ϕ do tipo V (Ψ_{\min}) em Burgers 2D.

Tabela 6.12: Efetividade de U_{mc} e U_{ψ^*} , e suas ordens aparentes, Ψ_{\min} (ϕ do tipo V) em Burgers 2D, com $p = 6$ e $p_0 = 2$.

h	U_{mc} / E_p	U_{ψ^*} / E_{pm}	p_U	$(p_{U,M})_g$
1,250E-01				
6,250E-02	7,423481E-01	1,178493E+00		
3,125E-02	9,680204E-01	1,130518E+00	1,629125E+00	3,577709E+00
1,563E-02	1,015922E+00	1,027474E+00	1,800942E+00	4,618515E+00
7,813E-03	9,982875E-01	1,016285E+00	1,918496E+00	3,075559E+00
3,906E-03	1,000110E+00	1,007873E+00	1,963342E+00	5,201567E+00
1,953E-03	9,999965E-01	1,003922E+00	1,982659E+00	5,952308E+00
9,766E-04	1,000000E+00	1,001958E+00	1,991573E+00	6,994467E+00
4,883E-04	1,000000E+00	1,000981E+00	1,995847E+00	7,997082E+00
2,441E-04	1,000000E+00	1,000113E+00	1,997939E+00	8,997620E+00
1,221E-04	1,000000E+00	8,688341E+00	1,998973E+00	9,995028E+00
6,104E-05	1,000000E+00		1,999487E+00	-1,340705E+00

De acordo com a metodologia apresentada no capítulo 3, o emprego de MER em ϕ do tipo V, com a abordagem 2D, caracteriza o procedimento mais complexo dentre os casos analisados. Essa complexidade está relacionada com a indicação de aumento do grau (p) do polinômio interpolador, e com o emprego do processo de otimização para a determinação do valor máximo ou mínimo desse polinômio. Nesse âmbito, para o caso mais dispendioso em termos de tempo e memória computacionais, são relacionados na Fig. 6.19 os valores obtidos para a magnitude do erro numérico *versus* o tempo de processamento (em segundos) envolvido. Nessa figura, considera-se a representação dos resultados com (E_{pm}) e sem (E_h) a metodologia proposta nesta tese.

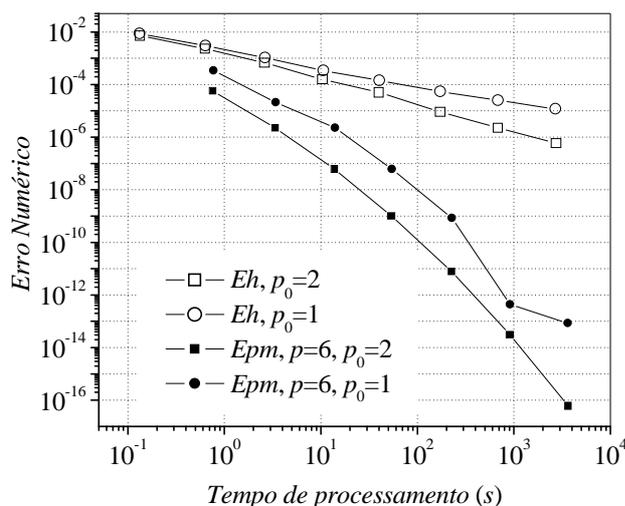


Figura 6.19: Comparação entre o tempo de processamento para a obtenção de Eh e Epm com interpolação polinomial 2D, para ϕ do tipo V (Ψ min em Burgers 2D).

Na Fig. 6.19 é possível observar que Eh apresenta uma redução linear (inclinação constante) com o aumento do tempo de processamento. Enquanto que Epm possui uma redução bem mais expressiva, isto é, possui um gráfico decrescente com um aumento de inclinação (declividade).

No presente caso, os níveis de redução de magnitude do erro numérico alcançados com Epm não podem ser atingidos com Eh devido às limitações computacionais (nos computadores utilizados). Além disso, para uma dada magnitude de erro, o tempo de processamento com Epm é muito menor do que com Eh . Por exemplo, para o nível de erro de 10^{-5} , com $p_0 = 2$ a solução com a metodologia proposta é obtida com um tempo de 200 vezes menor do que sem o seu emprego; e para $p_0 = 1$ a solução com a metodologia proposta é obtida com um tempo de 100 vezes menor. Outro exemplo: para o nível de erro de 10^{-8} Eh só é atingível com $p_0 = 2$ (Fig. 6.18 (a)) e leva 56.674,92 segundos; para esse mesmo nível de erro Epm é obtido com o tempo de 21,07 segundos, isto é, com um tempo 2.690 vezes menor. Assim, em termos de tempo de processamento, pode-se dizer que a eficiência da metodologia proposta é evidenciada ao se considerar um nível mais elevado de acurácia (menor magnitude do erro numérico).

Outro aspecto relevante sobre a utilização da metodologia em questão diz respeito ao refinamento de malha, isto é, à obtenção de ϕ em Ω^h distintas (estabelecidas por r). Isso pode, em princípio, ser considerado (primariamente) como um fator restritivo. Entretanto, tal procedimento é comumente adotado ao se analisar a convergência de soluções (durante a verificação numérica).

A partir disso, o método proposto para determinação de ϕ do tipo V envolve: i) interpolação polinomial sobre os valores nodais obtidos, e obtenção de ϕ considerando-se o processo de otimização (min/max) (em cada Ω^h), o que caracteriza um pós-processamento que, no caso mais dispendioso ($p=6$, 2D) requer, adicionalmente, aproximados 10^{-4} segundos e 2,8Kb de memória RAM, independentemente da Ω^h adotada; ii) emprego de MER (Eq. (2.78)) o que requer, adicionalmente, aproximados 10^{-4} segundos e 6,1Kb de memória RAM ao se considerar as ϕ advindas de 13 Ω^h distintas.

Enfim, cabe ressaltar que o tempo de processamento para obtenção de E_{pm} (Fig. 6.19) em uma dada Ω^h é obtido pela soma dos tempos envolvidos nos cálculos (soluções nodais, interpolação polinomial e método de otimização) de todas as Ω^h mais grossas, uma vez que suas soluções são necessárias para o emprego de MER (Eq. (2.78)). Por exemplo (com $r=2$), o tempo de processamento necessário para se obter E_{pm} na malha 128×128 também inclui o tempo de cálculo envolvido nas malhas: 64×64 , 32×32 , 16×16 e 8×8 ; ou seja, em 5 Ω^h distintas. Contudo, conforme ilustrado na Fig. 6.19, o método proposto apresenta vantagens em relação ao esforço computacional despendido na redução do erro numérico de ϕ .

6.4 SÍNTESE DO CAPÍTULO 6

Neste capítulo foram apresentados os resultados obtidos com o emprego da metodologia proposta nesta tese, sobre os casos 1 a 3. Com esse enfoque foram descritas as principais constatações e/ou conclusões sobre a redução do erro numérico, bem como a sua estimativa. De modo geral, no que se refere à redução de E_h , constatou-se que os procedimentos descritos no capítulo 3 requerem baixíssimo esforço computacional e permitem aumentar consideravelmente a acurácia de ϕ . Com relação às estimativas para E_h e E_m/E_{pm} (capítulo 4) com os estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} , respectivamente, verificou-se a ocorrência de níveis de acurácia e confiabilidade significativos. Nesse sentido U_{ψ^*} destaca-se positivamente em relação aos demais estimadores para E_m analisados (U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{GCI}). Outro aspecto constatado refere-se à validade do critério para o emprego efetivo de MER (seção 4.4.1); tal critério foi corroborado nos casos analisados, isto é, o emprego de MER é indicado para a redução do erro numérico quando: $|\psi| > 1 \Rightarrow (p_{U,M})_g > 0$.

7 CONCLUSÃO

O presente capítulo está dividido em quatro seções: escopo do trabalho, conclusão geral, contribuições e trabalhos futuros; descritas a seguir.

7.1 ESCOPO DO TRABALHO

A partir de relatos disponíveis na literatura sobre o baixo desempenho de MER na redução de Eh inerente à solução numérica de algumas variáveis de interesse (ϕ), neste trabalho foram definidos cinco tipos de ϕ . Tal classificação foi estabelecida com base na localização de ϕ , em malhas distintas. Analisou-se, então, o desempenho de MER sobre essas variáveis em três problemas teste: equação de Poisson 1D; equação de Advecção-difusão 1D; e equações de Burgers 2D. A resolução desses problemas foi realizada através de aproximações numéricas com diversas ordens, em Diferenças Finitas e Volumes Finitos, considerando-se: malhas com milhões de nós; o emprego do método *multigrid*; precisão quádrupla; e vários níveis de extrapolação.

Foram apresentadas alternativas para a obtenção de estimativas de Eh em soluções numéricas obtidas com e sem o emprego de MER. Nesse sentido, analisou-se o desempenho de alguns estimadores disponíveis na literatura – U_{Δ} , U_{GCI} , U_{pm} e U_{mc} – sendo que as suas expressões foram adaptadas para MER. Um novo estimador para MER foi apresentado, U_{ψ^*} ; essa abordagem tem como base a razão de convergência ψ , calculada *a posteriori* das soluções numéricas. Através do cálculo de ψ foi estabelecido um critério para o emprego efetivo de MER sobre a redução de Eh .

7.2 CONCLUSÃO GERAL

De acordo com os resultados obtidos conclui-se que, para se empregar MER deve-se primeiramente enquadrar a variável de interesse em um dos cinco tipos estabelecidos neste trabalho. A partir disso, identifica-se o procedimento mais adequado para a redução de Eh com MER.

1) Em variáveis globais ou locais que têm localização fixa e coincidente com um ponto nodal em cada malha considerada, MER é aplicada diretamente e tem seu melhor desempenho – comportamento teórico esperado.

2) Para o caso de variáveis localizadas em pontos médios de coordenadas nodais, deve-se considerar interpolação linear (ou bilinear) para então se aplicar MER.

3) Para variáveis que possuem localização fixa, porém não nodal e não situada em pontos médios de coordenadas nodais deve-se considerar interpolação polinomial condizente com o número de dimensões do problema estudado, com o grau mais alto possível, antes do emprego de MER.

4) Em variáveis cujo valor é preestabelecido, porém com localização indeterminada, analogamente deve-se considerar interpolação polinomial com o grau mais alto possível, e em seguida determinar a resolução da equação polinomial associada; somente então se procede ao emprego de MER.

5) Para o caso de variáveis que envolvem valores extremos, cuja coordenada pode ser alterada com o refinamento de malha, deve-se considerar também interpolação polinomial (condizente com o número de dimensões do problema estudado) com o grau mais alto possível, seguida da utilização das técnicas de otimização abordadas neste texto, antes do emprego de MER.

De modo geral, essa metodologia permite reduzir expressivamente o Eh inclusive nos casos em que MER é considerada ineficiente; e caracteriza um pós-processamento que apresenta baixo custo computacional.

Com relação ao exercício de estimativas para o erro numérico, os resultados obtidos indicam que: i) em soluções numéricas obtidas sem o emprego de MER, U_{mc} apresenta níveis de acurácia e confiabilidade significativos; ii) para soluções numéricas obtidas com o emprego de MER, U_{ψ^*} é recomendado por destacar-se com relação a acurácia e confiabilidade, sobre os demais estimadores analisados.

Ao se empregar MER, a avaliação do seu desempenho sobre a redução de Eh pode ser realizada com base nos valores obtidos para a razão de convergência, ψ , da solução numérica em questão. De acordo com o critério estabelecido no presente trabalho, pode-se dizer que MER é eficaz na redução de Eh , desde que $|\psi| > 1$.

7.3 CONTRIBUIÇÕES

As contribuições desta tese podem ser resumidas nos seguintes pontos.

1) Classificação de variáveis de interesse, visando o emprego de MER, com relação à sua localização coordenada em malhas distintas.

2) Desenvolvimento de metodologia apropriada para o emprego de MER em variáveis que apresentam diferentes características, de acordo com a classificação estabelecida.

3) Adaptação do estimador multicoeficiente (MARCHI, 2001) para se estimar Eh , com base na diferença entre as soluções numéricas obtidas com e sem o emprego de MER.

4) Adequação dos estimadores U_{Δ} , U_{GCI} e U_{pm} (disponíveis na literatura) para realização de estimativas inerentes ao erro numérico resultante do emprego de MER.

5) Introdução do estimador U_{ψ^*} , para o erro numérico resultante do emprego de MER; que se mostrou, de modo geral, confiável e acurado nos testes efetuados.

6) Estabelecimento de um critério para identificação do desempenho efetivo de MER, sobre a redução de Eh .

7.4 TRABALHOS FUTUROS

A continuação do presente trabalho pode ser desenvolvida considerando-se dois temas norteadores denominados dimensões e aplicações.

No primeiro tema, dimensões, sugere-se a extensão da metodologia proposta no presente trabalho para os casos de domínio tridimensional (espacial) e eventualmente a dimensão temporal. Nesse âmbito, caberia o emprego de interpolação polinomial 3D o que corresponde ao aumento de uma componente de dimensão na obtenção das Diferenças Divididas de Newton (DDN), ao se considerar o método de Newton. Entretanto, com relação ao critério para o emprego efetivo de MER e ao emprego dos estimadores propostos nesta tese, não há necessidade de alteração de procedimento.

No segundo tema, aplicações, a sugestão é ampliar o número de casos com o emprego da metodologia proposta nesta tese. Para esse encaixe, pode-se considerar como base o desenvolvimento apresentado nos capítulos 5 e 6, e propõe-se como etapa subsequente a abordagem do mesmo problema definido no caso 3 (cavidade quadrada com tampa móvel). Porém, com as seguintes modificações: o campo de pressões (\dot{p}) não é fornecido (analiticamente); a ocorrência de velocidade constante para a parede superior; e a ausência do

termo fonte S , que atua sobre o escoamento. Tal problema é abordado (sem solução analítica conhecida) por Kawaguti (1961). Com esse enfoque o modelo matemático é formulado com base nas leis da Conservação de Massa e da Conservação da Quantidade de Movimento Linear (QML) (equações de Navier-Stokes). Além disso, outros casos envolvendo algumas das principais dificuldades encontradas na resolução numérica de problemas em CFD, como o emprego de outros tipos de condições de contorno, a abordagem de propriedades dependentes da variável de interesse, o tratamento do acoplamento pressão-velocidade e da ocorrência de não-linearidades nos coeficientes do modelo matemático, podem ser considerados. Sugere-se também a extensão da metodologia proposta para: modelos matemáticos inerentes a problemas, com domínio unidimensional, envolvendo congelamento (transiente) e escoamento interno em tubeira com e sem a ocorrência de ondas de choque; e a abordagem de modelos numéricos envolvendo malhas não uniformes, não estruturadas e não ortogonais. Dessa forma, o emprego de MER pode ser consolidado como uma técnica eficiente para a obtenção de métodos (de discretização) de alta ordem; tornando-se assim comparável ao emprego de métodos *multigrid* (envolvendo diversas malhas) no âmbito da aceleração de convergência de processos iterativos.

REFERÊNCIAS

ALVES, A. C. **Verificação de soluções numéricas da equação de Laplace 2D com malhas triangulares e múltiplas extrapolações de Richardson**. Tese de doutorado em Engenharia Mecânica. Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, 2010.

ANDERSON Jr., J. D. **Modern compressible flow: with historical perspective**. 3^a ed., New York: McGraw-Hill, 2007.

ASHRAF, M., SYED, K. S., KAMAL, M. A.. Numerical simulation of flow of micropolar fluids in a channel with a porous wall. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 66, p. 906-918, 2011.

ASME. Standard for verification and validation in computational fluid dynamics and heat transfer. **ASME V&V**, v. 20, 2009.

BAZARAA, M. S., SHERALI, H. D., SHETTY, C. M. **Nonlinear programming: theory and algorithms**. 3^a ed., New York: Wiley & Sons, 2006.

BOTELLA, O., PEYRET, R. Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow. **Computers & Fluids**, v. 27, p. 421 - 433, 1998.

BRANDT, A., **Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems, Mathematics of Computation**, v. 31, p. 333 - 390, 1977.

BREZINSKI, C.; ZAGLIA, M. R. **Extrapolation methods: theory and practice**. Amsterdam: Elsevier, 2002.

BREZINSKI, C., ZAGLIA, M. R. A Review of vector convergence acceleration methods, with applications to linear algebra problems. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 109, p. 1631 - 1639, 2009.

BRIGGS, W. L., HENSON, V. E., MCCORMICK, S. F. **A multigrid tutorial**. 2^a ed., Philadelphia: SIAM, 2000.

BURDEN, R. L., FAIRES, J. D. **Análise numérica**. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2008.

BURG, C., ERWIN, T. Application of Richardson extrapolation to the numerical solution of partial differential equations. **Numerical Methods for Partial Differential Equations**, v. 25, p. 810-832, 2009.

CASTIGLIONE, T., STERN, F., BOVA, S., KANDASAMY, M. Numerical investigation of the seakeeping behavior of a catamaran advancing in regular head waves. **Ocean Engineering**, v.38, p. 1806-1822, 2011.

CHANG, C. C., LIN, J. B., TSAI, W. C., WANG, Y. H., Using Richardson extrapolation techniques to price American options with alternative stochastic processes. **Review of Quantitative Finance and Accounting**, v. 37, p. 477 - 507, 2011.

CHRISTIANSEN, E., PETERSEN, H. G. Estimation of convergence orders in repeated Richardson extrapolation. **BIT Numerical Mathematics**, v. 29, p. 48 - 59, 1989.

CHU, K. T. Boosting the accuracy of finite difference schemes via optimal time step selection and non-iterative defect correction. **Applied Mathematics and Computation**, v. 218, p. 3596-3614, 2011.

DAHLQUIST, G., BJORCK, A. **Numerical methods in scientific computing**. v. 1, Philadelphia: SIAM, 2008.

DEVORE, J. L. **Probabilidade e estatística: para engenharia e ciências**. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006.

DUMBSER, M., ENAUX, C., TORO E. Finite volume schemes of very high order of accuracy for stiff hyperbolic balance laws. **Journal of Computational Physics**, v. 227, p. 3971 - 4001, 2008.

ERLANGGA, Y. Advances in iterative methods and preconditioners for the Helmholtz equation. **Archive of Computational Methods in Engineering**, v. 15, p. 37 - 66, 2008.

ERTUK, E., CORKE, T. C., GOKÇOL, C. Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 48, p. 747 - 774, 2005.

FALCÃO, J. A. C., FERREIRA, P. J. A., BOSSCHERS, J. A verification study on low-order three-dimensional potential-based panel codes. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 61 - 73, 2006.

FARAGÓ, I., HAVASI, A. ZLATEV, Z. The convergence of diagonally implicit Runge–Kutta methods combined with Richardson extrapolation. **Computers and Mathematics with Applications**, n. 65, p. 395 - 401, 2013.

FENG X., LI, Z., Simplified immersed interface methods for elliptic interface problems with straight interfaces. **Numerical Methods for Partial Differential Equations**, v. 28, p. 189 - 203, 2010.

FERZIGER, J. H., PERIC, M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3^a ed., New York: Springer, 2002.

FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**. São Paulo: Edusp, 2000.

GONÇALVES, S. F. T. **Estudo de parâmetros do método multigrid geométrico para equações 2D e volumes finitos**. Tese de doutorado em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, 2013.

HILDEBRANDT, F. B. **Introduction to Numerical Analysis**. New York: McGRAW-HILL, 1956.

IEZZI, G. MURAKAMI, C. **Fundamentos de Matemática Elementar: conjuntos, funções.** 8ª ed., São Paulo: Atual, 2004.

INCROPERA, F. P., DeWITT, D. P. **Fundamentos de transferência de calor e de massa.** 4ª ed., Rio de Janeiro: LTC, 1998.

JOYCE, D. C. Survey of extrapolation processes in numerical analysis. **SIAM Review**, v. 13, p. 435 - 490, 1971.

KARIMI, M., AKDOGAN, G., DELLIMORE, K. H., BRADSHAW, S. M. Quantification of Numerical Uncertainty in Computational Fluid Dynamics Modelling of Hydrocyclones. **Computers and Chemical Engineering**, 2012.

KAWAGUTI, M. Numerical solution of the Navier-Stokes equations for the flow in a two-dimensional cavity. **Journal of the Physical Society of Japan**, v.16, p. 2307 - 2315, 1961.

KREYSZIG, E. **Advanced engineering mathematics.** 8ª ed., New York: Wiley & Sons, 1999.

LEONENKOA, G. M., PHILLIPS, T. N. High-order approximation of Pearson diffusion processes. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 236, p. 2853 - 2868, 2012.

MA, Y., GE, Y. A high order finite difference method with Richardson extrapolation for 3D convection diffusion equation. **Applied Mathematics and Computation**, v. 215, p. 3408 - 3417, 2010.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional.** 2ª ed., Rio de Janeiro: LTC, 2004.

MARCHI, C. H. **Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos.** Tese de doutorado em Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, 2001.

MARCHI, C. H., ARAKI, L. K., ALVES, A. C., SUERO, R., GONÇALVES, S. F. T., PINTO, M. A. V. Repeated Richardson extrapolation applied to the two-dimensional Laplace equation using triangular and square grids. **Applied Mathematical Modelling** v. 37, n.1, p. 4661 - 4675, 2013.

MARCHI, C. H. **Protocolo para testes de coerência: versão 1.0 (2007).** Disponível em: <ftp://ftp.demec.ufpr.br/CFD/bibliografia/erros_numericos/>. Acesso em 13 de Jul. 2011.

MARCHI, C. H., GERMER, E. M. Verificação de esquemas advectivo-difusivo 1D com e sem múltiplas extrapolações de Richardson. **Proceedings of the XXX Iberian Latin American Congress on the Computational Methods in Engineering (CILAMCE)**, Armação dos Búzios, Brazil, 2009.

MARCHI, C. H., NOVAK, L. A., SANTIAGO, C. D. Múltiplas extrapolações de Richardson para reduzir e estimar o erro de discretização da equação de Laplace 2D. **Proceedings of the**

XXIX Iberian Latin American Congress on the Computational Methods in Engineering (CILAMCE), Maceió, Brazil, 2008.

MARCHI, C. H., SILVA, A. F. C. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 42, p. 167 - 188, 2002.

MARCHI, C. H., SILVA, A. F. C. Multidimensional discretization error estimation for convergent apparent order. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 27, p. 432 - 439, 2005.

MARCHI, C. H., SUERO, R., ARAKI, L. K. The lid-driven square cavity flow: numerical solution with a 1024 x 1024 grid. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 31, n. 3, p. 186 - 198, 2009.

MARIANI, M., PAOLI, R., GRASSO, F., PERIAUX, J., DESIDERI, J. A. Verification and validation in computational fluid dynamics: the FLOWNET database experience. **JSME International Journal**, v. 45, n. 1, p. 15 - 22, 2002.

MARTINS, M. A., MARCHI, C. H. Estimate of Iteration Errors in Computational Fluid Dynamics. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 53, p. 234 - 245, 2008.

MATHEOU, G., PANTANO, C., DIMOTAKIS, P. E. Verification of a fluid-dynamics solver using correlations with linear stability results. **Journal of Computational Physics**, n. 227, p. 5385 - 5396, 2008.

MUKHERJEE K., NATESAN, S. Richardson extrapolation technique for singularly perturbed parabolic convection–diffusion problems. **Computing**, v. 92, n. 1, p.1-32, 2011.

NONOMURA, T., MORIZAWA, S., TERASHIMA, H., OBAYASHI, S., FUJII, K. Numerical (error) issues on compressible multicomponent flows using a high-order differencing scheme: Weighted compact nonlinear scheme. **Journal of Computational Physics**, v. 231, p. 3181 - 3210, 2012.

NICOLAS, X., MEDALE, M., GLOCKNER, S., GOUNAND, S. Benchmark solution for a three-dimensional mixed-convection flow, part 1: reference solutions. **Numerical Heat Transfer, Part B**, n. 60, p. 325–345, 2011.

OLIVEIRA, F. **Efeito de malhas anisotrópicas bidimensionais sobre o desempenho do método multigrid geométrico**. Tese de doutorado em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, 2010.

OBERKAMPF, W. L., ROY, C. J. **Verification and validation in scientific computing**. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.

PAZ, R. R., NIGRO N. M., STORTI, M. A. On the efficiency and quality of numerical solutions in CFD problems. **International Journal of Numerical Methods in Fluids**, v. 52, p. 89 - 118, 2006.

POMERANZ, S. Richardson extrapolation applied to boundary element method results in a Dirichlet problem for the Laplace equation. **International Journal of Computer Mathematics**, v. 88, n. 11, p. 2306 - 2330, 2011.

PRANGE, M. D., DRUSKIN, V., JOHNSON, D. L., SCHWARTZ, L. M. Rapid simulation of the time-dependent diffusion coefficient in complex materials. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 44, n. 39, p. 1 - 23, 2011.

PULINO, P., TORRES, H. C. T., Esquemas compactos de diferenças finitas de alta ordem para problemas de Poisson: aplicativos para web. **Proceedings of the VII simpósio de mecânica computacional (SIMMEC)**, Araxá, Brazil, 2006.

RAHUL, K., BHATTACHARYYA, S. N. One-sided finite-difference approximations suitable for use with Richardson extrapolation. **Journal of Computational Physics**, n. 219, p. 13 - 20, 2006.

RICHARDSON, L. F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equation, with an application to the stresses in a masonry dam. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London**, Serial A, v. 210, p. 307 - 357, 1910.

RICHARDSON, L. F., GAUNT, J. A. The differed approach to the limit. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London**, Serial A, v. 226, p. 299 - 361, 1927.

ROACHE, P. J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 116, p. 405-413, 1994.

ROACHE, P. J. **Fundamentals of computational fluid dynamics**. Albuquerque: Hermosa Publishers, 1998.

ROACHE, P. J. Discussion: "Factors of Safety for Richardson Extrapolation" (Xing, T., and Stern, F., 2010, ASME J. Fluids Eng., 132). **Journal of Fluids Engineering**, v. 133, p. 1 - 4, 2011.

ROY, J. C. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, n. 205, p. 131 - 156, 2005.

ROY, J. C., BLOTTNER, F. G. Review and assessment of turbulence models for hypersonic flows. **Progress in Aerospace Sciences**, n. 42, p. 469 - 530, 2006.

ROY, J. C., OBERKAMPF, W. L. A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, n. 200, p. 2131 - 2144, 2011.

SHIH, T. M., TAN, C. H., HWANG, B. C. Effects of grid staggering on numerical scheme. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 9, p. 193 - 212, 1989.

SIDI, A. **Practical extrapolation methods - theory and applications**. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.

SIDI, A. Asymptotic analysis of a generalized Richardson extrapolation process on linear sequences. **Mathematics of Computation**, v. 79, n. 271, p. 1681 - 1695, 2010.

SIMONSEN, C. D., STERN, F. Verification and validation of RANS maneuvering simulation of Esso Osaka: effects of drift and rudder angle on forces and moments. **Computers & Fluids**, v. 32, p. 1325 - 1356, 2003.

SINGH, K. M., WILLIAMS, J. J. R. A parallel factitious domain multigrid preconditioner for the solution of Poisson's equation in complex geometries. **Computational Methods in Applied Mechanical Engineering**, v. 194, p. 4845 - 4860, 2005.

STEFFENSEN, J. F. **Interpolation**. 2 ed., New York: Chelsea Publishing Company, 1950.

SUERO, R. **Verificação de soluções numéricas de escoamentos bidimensionais laminares em malhas uniformes**. Dissertação de mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, 2006.

SZABÓ, B., BABUSKA, I. **Finite element analysis**. New York: Wiley & Sons, 1991.

TANNEHILL, J. C., ANDERSON, D. A., PLETCHER, R. H. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. Washington: Taylor & Francis, 1997.

TROTTEBERG, U., OOSTERLEE, C., SCHÜLLER, A., **Multigrid**, Academic Press, 2001.

VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics, the finite volume method**. 2 ed., England: Pearson/Prentice Hall, 2007.

WANG, L., YAO, F. Higher-order nondivergence elliptic and parabolic equations in Sobolev spaces and Orlicz spaces. **Journal of Functional Analysis**, v. 262, p. 3495 - 3517, 2012.

WANG, Y., HUA K., ZHANG J. Fast and high accuracy numerical methods for solving PDEs in computational finance. **Proceedings of the 2011 International Conference on Business Computing and Global Informatization**. Shanghai, China, 2011.

WANG, Y., ZHANG, J. Sixth order compact scheme combined with multigrid method and extrapolation technique for 2D Poisson equation. **Journal of Computational Physics**, n. 228, p. 137 - 146, 2009.

WANG, Y., ZHANG, J. Fast and robust sixth-order multigrid computation for the three-dimensional convection–diffusion equation. **Journal of Computational and Applied Mathematics**. n. 234, p. 3496 - 3506, 2010.

WESSELING, P.; OOSTERLEE, C. W., Geometric Multigrid with Applications to Computational Fluid Dynamics. **Journal of Computation and Applied Mathematics**, v. 128, p. 311 - 334, 2001.

XING, T., STERN, F. Factors of safety for Richardson extrapolation. **Journal of Fluids Engineering**, v. 132, p. 1 - 13, 2010.

XIU, D., HESTHAVEN, J. S. High-order collocation methods for differential equations with random inputs. **Society for Industrial and Applied Mathematics**. v. 27, n. 3, p. 1118 - 1139, 2005.

ZHANG, J. Acceleration of five-Point red-black Gauss-Seidel in multigrid for Poisson equation. **Applied Mathematics and Computation**, n. 80, p. 73 - 93, 1996.

ZHANG, J. Multigrid method and fourth-order compact scheme for 2D Poisson equation with unequal mesh-size discretization. **Journal of Computational Physics**, n. 179, p. 170 - 179, 2002.

ZHANG, H., LIANG, S., SONG, S., WANG, H. Truncation error calculation based on Richardson extrapolation for variable-step collaborative simulation. **Science China Information Science**, v. 45, p. 1238 – 1250, 2011.

ZHANG, X., SHU, C. W. Positivity-preserving high order finite difference WENO schemes for compressible Euler equations. **Journal of Computational Physics**, v. 231, p. 2245 - 2258, 2012.

ZLATEV, Z., DIMOV, I., FARAGÓ, I., GEORGIEV, K., HAVASI, A., OSTROMSKY, T. Richardson extrapolated numerical methods for treatment of one-dimensional advection equations. **Numerical Methods and Applications - Lecture Notes in Computer Science**, v. 6046, p. 198-206, 2011.

ZLATEV, Z., FARAGÓ, I., HAVASI, A. Stability of the Richardson Extrapolation applied together with the θ -method. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, n. 235, p. 507 - 517, 2010.

APÊNDICE A - IMPLEMENTAÇÃO DA INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL 1D.

Com base na descrição apresentada na seção 2.4.1, a estrutura adotada para obtenção do polinômio interpolador é descrita a seguir.

(i) Inicialmente determinam-se $p + 1$ valores nodais, dentre as soluções numéricas obtidas para variável primária, em cada malha. A partir desses dados considera-se a interpolação polinomial, como descrito no próximo item, isto é, obtém-se ξ_p , com ϕ_i , $i = 0, \dots, p$ e coordenadas χ_i , $i = 0, \dots, p$. O intervalo onde se define ξ_p é $\Omega = [\chi_0, \chi_p]$, em que se considera o ponto central χ_{p^*} com $p^* = p/2$, se p for par, ou $p^* = p/2 + 1$, se p for ímpar.

(ii) Cálculo dos coeficientes do polinômio interpolador:

Passo 1: entrada $p + 1$ pontos nodais.

Passo 2: Para $i = 0, 1, \dots, p$: $F_{i,0} = \phi_i$.

Passo 3: Para $i = 1, 2, \dots, p$

Para $j = 1, 2, \dots, i$

$$F_{i,j} = \frac{F_{i,j-1} - F_{i-1,j-1}}{\chi_i - \chi_{i-j}}$$

(Obs. $F_{i,i} = F[\chi_0, \chi_1, \dots, \chi_i]$, DDN – Diferença Dividida de Newton)

Por simplificação de notação, adota-se: $d_i = d(i) = F_{i-1,i-1}$, e o polinômio interpolador, em função DDN, se torna:

$$\xi_p(\chi) = d_1 + d_2(\chi - \chi_0) + d_3(\chi - \chi_0)(\chi - \chi_1) + \dots + d_{p+1}(\chi - \chi_0)\dots(\chi - \chi_{p-1})$$

Então, a partir dessa expressão são desenvolvidas as expressões dos polinômios interpoladores tendo como base os polinômios de potência (formato canônico). Essa forma é mais adequada ao emprego de métodos de otimização, devido à facilidade de obtenção da expressão analítica do gradiente de ξ_p .

Assim, para $p = 1$ tem-se:

$$\xi_1(\chi) = a_1\chi + a_0, \tag{A.1}$$

em que $a_1 = (\phi_p - \phi_{p-1})/(\chi_p - \chi_{p-1})$ e $a_0 = \phi_p - \chi_{p-1}a_1$.

Para $p = 2$, tem-se:

$$\xi_2(\chi) = a_2\chi^2 + a_1\chi + a_0, \quad (\text{A.2})$$

em que, no formato do código computacional adotado, com $\chi_{i-1} = Xi = xi, i = 1, \dots, p + 1$, $a_j = aj, j = 0, \dots, p$.

$$a_2 = a2 = d3; \quad a_1 = a1 = (d2-d3*x1-d3*x2); \quad e \quad a_0 = a0 = d1-d2*x1+d3*x1*x2.$$

Para $p = 3$, tem-se:

$$\xi_3(\chi) = a_0 + a_1\chi + a_2\chi^2 + a_3\chi^3, \quad (\text{A.3})$$

e adota-se a notação $a_j = aj, j = 0, 1, 2, 3$, onde os coeficientes são dados por (linguagem adotada no código computacional):

$$\begin{aligned} a_3 &= d4; & a_2 &= (d3-d4*x1-d4*x2-d4*x3); \\ a_1 &= (-d3*x1-d3*x2+d2+d4*x1*x2-(-d4*x1-d4*x2)*x3); \\ a_0 &= d1-d2*x1-d4*x1*x2*x3+d3*x1*x2. \end{aligned}$$

Para $p = 4$, tem-se:

$$\xi_4(\chi) = a_0 + a_1\chi + a_2\chi^2 + a_3\chi^3 + a_4\chi^4 \quad (\text{A.4})$$

com $a_j = aj, j = 0, 1, 2, 3, 4$, em que (linguagem adotada no código computacional):

$$\begin{aligned} a_4 &= d5; \\ a_3 &= (d4-d5*x1-d5*x2-d5*x3-d5*x4); \\ a_2 &= (d3-d4*x1-d4*x2-d4*x3+d5*x1*x2-(-d5*x1-d5*x2)*x3-(-d5*x1 \\ &\quad -d5*x2-d5*x3)*x4); \\ a_1 &= (-d3*x1-d3*x2+d4*x1*x2-(-d4*x1-d4*x2)*x3+d2-d5*x1*x2*x3 \\ &\quad -(-d5*x1*x2-(-d5*x1-d5*x2)*x3)*x4); \\ a_0 &= d1-d2*x1-d4*x1*x2*x3+d3*x1*x2+d5*x1*x2*x3*x4. \end{aligned}$$

Para $p = 5$, tem-se:

$$\xi_5(\chi) = a_0 + a_1 \chi + a_2 \chi^2 + a_3 \chi^3 + a_4 \chi^4 + a_5 \chi^5, \quad (\text{A.5})$$

para $a_j = aj$, $j = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, onde os coeficientes são dados por (linguagem adotada no código computacional):

$$\begin{aligned} a_5 &= d_6; \\ a_4 &= (d_5 - d_6 * x_1 - d_6 * x_2 - d_6 * x_3 - d_6 * x_4 - d_6 * x_5); \\ a_3 &= (d_4 + d_6 * x_1 * x_2 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2) * x_3 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2 - d_6 * x_3) * x_4 \\ &\quad - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2 - d_6 * x_3 - d_6 * x_4) * x_5 - d_5 * x_1 - d_5 * x_2 - d_5 * x_3 - d_5 * x_4); \\ a_2 &= (d_3 - d_6 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_6 * x_1 * x_2 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2) * x_3) * x_4 - (d_6 * x_1 * \\ &\quad x_2 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2) * x_3 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2 - d_6 * x_3) * x_4) * x_5 - d_4 * x_1 - \\ &\quad d_4 * x_2 - d_4 * x_3 + d_5 * x_1 * x_2 - (-d_5 * x_1 - d_5 * x_2) * x_3 - (-d_5 * x_1 - d_5 * x_2 - d_5 \\ &\quad * x_3) * x_4); \\ a_1 &= (-d_3 * x_1 - d_3 * x_2 + d_4 * x_1 * x_2 - (-d_4 * x_1 - d_4 * x_2) * x_3 + d_6 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 \\ &\quad - (-d_6 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_6 * x_1 * x_2 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2) * x_3) * x_4) * x_5 - d_5 * x_1 \\ &\quad * x_2 * x_3 - (d_5 * x_1 * x_2 - (-d_5 * x_1 - d_5 * x_2) * x_3) * x_4 + d_2); \\ a_0 &= d_1 - d_2 * x_1 - d_6 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 + d_3 * x_1 * x_2 - d_4 * x_1 * x_2 * x_3 + d_5 * x_1 * x_2 \\ &\quad * x_3 * x_4. \end{aligned}$$

Para $p = 6$, tem-se:

$$\xi_6(\chi) = a_0 + a_1 \chi + a_2 \chi^2 + a_3 \chi^3 + a_4 \chi^4 + a_5 \chi^5 + a_6 \chi^6, \quad (\text{A.6})$$

para $a_j = aj$, $j = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$, em que (na linguagem adotada no código computacional):

$$\begin{aligned} a_6 &= d_7; \\ a_5 &= (d_6 - d_7 * x_1 - d_7 * x_2 - d_7 * x_3 - d_7 * x_4 - d_7 * x_5 - d_7 * x_6); \\ a_4 &= (d_5 - d_6 * x_1 - d_6 * x_2 - d_6 * x_3 - d_6 * x_4 - d_6 * x_5 + d_7 * x_1 * x_2 - (-d_7 * x_1 - d_7 * x_2 \\ &\quad) * x_3 - (-d_7 * x_1 - d_7 * x_2 - d_7 * x_3) * x_4 - (-d_7 * x_1 - d_7 * x_2 - d_7 * x_3 - d_7 * x_4) * \\ &\quad x_5 - (-d_7 * x_1 - d_7 * x_2 - d_7 * x_3 - d_7 * x_4 - d_7 * x_5) * x_6); \\ a_3 &= (d_6 * x_1 * x_2 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2) * x_3 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2 - d_6 * x_3) * x_4 - (-d_6 \\ &\quad * x_1 - d_6 * x_2 - d_6 * x_3 - d_6 * x_4 - d_6 * x_5 - d_6 * x_6) * x_5 + d_5 * x_1 - d_5 * x_2 - d_5 * x_3 - \\ &\quad d_5 * x_4 - d_5 * x_5 - d_5 * x_6); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & *x1-d6*x2-d6*x3-d6*x4)*x5+d4-d7*x1*x2*x3-(d7*x1*x2-(-d7* \\ & x1-d7*x2)*x3)*x4-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3-(-d7*x1-d7* \\ & x2-d7*x3)*x4)*x5-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3-(-d7*x1-d7* \\ & x2-d7*x3)*x4-(-d7*x1-d7*x2-d7*x3-d7*x4)*x5)*x6-d5*x1-d5* \\ & x2-d5*x3-d5*x4); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_2 = & (d3-d6*x1*x2*x3-(d6*x1*x2-(-d6*x1-d6*x2)*x3)*x4-(d6*x1* \\ & x2-(-d6*x1-d6*x2)*x3-(-d6*x1-d6*x2-d6*x3)*x4)*x5+d5*x1* \\ & x2-(-d5*x1-d5*x2)*x3-(-d5*x1-d5*x2-d5*x3)*x4-d4*x1-d4*x2 \\ & -d4*x3+d7*x1*x2*x3*x4-(-d7*x1*x2*x3-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7 \\ & *x2)*x3)*x4)*x5-(-d7*x1*x2*x3-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)* \\ & x3)*x4-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3-(-d7*x1-d7*x2-d7*x3)* \\ & x4)*x5)*x6); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_1 = & (-d7*x1*x2*x3*x4*x5-(d7*x1*x2*x3*x4-(-d7*x1*x2*x3-(d7*x1 \\ & *x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3)*x4)*x5)*x6+d4*x1*x2-(-d4*x1-d4*x2 \\ &)*x3-d3*x1-d3*x2-d5*x1*x2*x3-(d5*x1*x2-(-d5*x1-d5*x2)*x3 \\ &)*x4+d6*x1*x2*x3*x4-(-d6*x1*x2*x3-(d6*x1*x2-(-d6*x1-d6* \\ & x2)*x3)*x4)*x5+d2); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_0 = & d1-d2*x1-d6*x1*x2*x3*x4*x5+d3*x1*x2+d7*x1*x2*x3*x4*x5*x6 \\ & -d4*x1*x2*x3+d5*x1*x2*x3*x4; \end{aligned}$$

Para $p = 8$, tem-se:

$$\xi_8(\chi) = a_0 + a_1 \chi + a_2 \chi^2 + a_3 \chi^3 + a_4 \chi^4 + a_5 \chi^5 + a_6 \chi^6 + a_7 \chi^7 + a_8 \chi^8, \quad (\text{A.7})$$

para $a_j = aj$, $j = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$, onde os coeficientes são dados por (linguagem adotada no código computacional):

$$\begin{aligned} a_8 = & d9; \\ a_7 = & (d8-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5-d9*x6-d9*x7-d9*x8); \\ a_6 = & (-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4-d8*x5-d8*x6-d8*x7+d7+d9*x1*x2 \\ & -(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9* \\ & x2-d9*x3-d9*x4)*x5-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5)*x6- \\ & (-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5-d9*x6)*x7-(-d9*x1-d9*x2 \end{aligned}$$

$$-d9*x3-d9*x4-d9*x5-d9*x6-d9*x7)*x8);$$

$$a5 = (-d7*x1-d7*x2-d7*x3-d7*x4-d7*x5-d7*x6+d6+d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4)*x5-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4-d8*x5)*x6-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4-d8*x5-d8*x6)*x7-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5)*x6-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5)*x6)*x7-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5)*x6-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5-d9*x6)*x7)*x8);$$

$$a4 = (-d6*x1-d6*x2-d6*x3-d6*x4-d6*x5+d5+d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4)*x5-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5)*x6-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x6)*x7-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5)*x6-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5)*x6)*x7)*x8-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4)*x5-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4)*x5)*x6-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4)*x5-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4-d8*x5)*x6)*x7+d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3-(-d7*x1-d7*x2-d7*x3)*x4-(-d7*x1-d7*x2-d7*x3-d7*x4)*x5-(-d7$$

$$*x1-d7*x2-d7*x3-d7*x4-d7*x5)*x6);$$

$$a3 = (d6*x1*x2-(-d6*x1-d6*x2)*x3-(-d6*x1-d6*x2-d6*x3)*x4-(-d6*x1-d6*x2-d6*x3-d6*x4)*x5+d4+d8*x1*x2*x3*x4-(-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4)*x5-(-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4)*x5)*x6-(-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4)*x5-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4)*x5)*x6)*x7-d9*x1*x2*x3*x4*x5-(-d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4)*x5)*x6-(d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4)*x5-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5)*x6-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5-(-d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5)*x6)*x7)*x8-d5*x1-d5*x2-d5*x3-d5*x4-d7*x1*x2*x3-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3)*x4-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3-(-d7*x1-d7*x2-d7*x3)*x4)*x5-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3-(-d7*x1-d7*x2-d7*x3)*x4-(-d7*x1-d7*x2-d7*x3-d7*x4)*x5)*x6);$$

$$a2 = (d3-d8*x1*x2*x3*x4*x5-(d8*x1*x2*x3*x4-(-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4)*x5)*x6-(d8*x1*x2*x3*x4-(-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4)*x5-(-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-d6*x1*x2*x3-(d6*x1*x2-(-d6*x1-d6*x2)*x3)*x4-(d6*x1*x2-(-d6*x1-d6*x2)*x3-(-d6*x1-d6*x2-d6*x3)*x4)*x5-d4*x1-d4*x2-d4*x3+d5*x1*x2-(-d5*x1-d5*x2)*x3-(-d5*x1-d5*x2-d5*x3)*x4+d9*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(-d9*x1*x2*x3*x4*x5-(-d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2$$

$$\begin{aligned}
& *x_3 - (d_9 * x_1 * x_2 - (-d_9 * x_1 - d_9 * x_2) * x_3) * x_4 * x_5 * x_6 * x_7 - (-d_9 * x_1 * \\
& x_2 * x_3 * x_4 * x_5 - (d_9 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 - (-d_9 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_9 * x_1 * x_2 - (-d_9 \\
& * x_1 - d_9 * x_2) * x_3) * x_4) * x_5) * x_6 - (d_9 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 - (-d_9 * x_1 * x_2 * x_3 - \\
& (d_9 * x_1 * x_2 - (-d_9 * x_1 - d_9 * x_2) * x_3) * x_4) * x_5 - (-d_9 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_9 * x_1 \\
& * x_2 - (-d_9 * x_1 - d_9 * x_2) * x_3) * x_4 - (d_9 * x_1 * x_2 - (-d_9 * x_1 - d_9 * x_2) * x_3 - (- \\
& d_9 * x_1 - d_9 * x_2 - d_9 * x_3) * x_4) * x_5) * x_6 * x_7) * x_8 + d_7 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 - (- \\
& d_7 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_7 * x_1 * x_2 - (-d_7 * x_1 - d_7 * x_2) * x_3) * x_4) * x_5 - (-d_7 * x_1 * \\
& x_2 * x_3 - (d_7 * x_1 * x_2 - (-d_7 * x_1 - d_7 * x_2) * x_3) * x_4 - (d_7 * x_1 * x_2 - (-d_7 * x_1 - \\
& d_7 * x_2) * x_3 - (-d_7 * x_1 - d_7 * x_2 - d_7 * x_3) * x_4) * x_5) * x_6);
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_1 = & (-d_7 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 - (d_7 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 - (-d_7 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_7 * x_1 \\
& * x_2 - (-d_7 * x_1 - d_7 * x_2) * x_3) * x_4) * x_5) * x_6 - d_3 * x_1 - d_3 * x_2 + d_8 * x_1 * x_2 * \\
& x_3 * x_4 * x_5 * x_6 - (-d_8 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 - (d_8 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 - (-d_8 * x_1 * \\
& x_2 * x_3 - (d_8 * x_1 * x_2 - (-d_8 * x_1 - d_8 * x_2) * x_3) * x_4) * x_5) * x_6) * x_7 + d_6 * x_1 * \\
& x_2 * x_3 * x_4 - (-d_6 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_6 * x_1 * x_2 - (-d_6 * x_1 - d_6 * x_2) * x_3) * x_4) * \\
& x_5 + d_4 * x_1 * x_2 - (-d_4 * x_1 - d_4 * x_2) * x_3 - d_9 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 * x_6 * x_7 - \\
& (d_9 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 * x_6 - (-d_9 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 - (d_9 * x_1 * x_2 * x_3 * \\
& x_4 - (-d_9 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_9 * x_1 * x_2 - (-d_9 * x_1 - d_9 * x_2) * x_3) * x_4) * x_5) * x_6 \\
&) * x_7) * x_8 - d_5 * x_1 * x_2 * x_3 - (d_5 * x_1 * x_2 - (-d_5 * x_1 - d_5 * x_2) * x_3) * x_4 + d_2);
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_0 = & d_1 - d_2 * x_1 - d_6 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 + d_3 * x_1 * x_2 + d_7 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 * x_6 \\
& - d_4 * x_1 * x_2 * x_3 - d_8 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 * x_6 * x_7 + d_5 * x_1 * x_2 * x_3 * x_4 + d_9 * \\
& x_1 * x_2 * x_3 * x_4 * x_5 * x_6 * x_7 * x_8;
\end{aligned}$$

E, para $p = 10$, tem-se:

$$\xi_{10}(\chi) = a_0 + a_1 \chi + a_2 \chi^2 + a_3 \chi^3 + a_4 \chi^4 + a_5 \chi^5 + a_6 \chi^6 + a_7 \chi^7 + a_8 \chi^8 + a_9 \chi^9 + a_{10} \chi^{10},$$

(A.8)

considerando-se $a_j = a_j$, $j = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$, em que (código computacional adotado):

$$a_{10} = d_{11};$$

$$\begin{aligned}
a_9 = & d_{10} - d_{11} * x_1 - d_{11} * x_2 - d_{11} * x_3 - d_{11} * x_4 - d_{11} * x_5 - d_{11} * x_6 - d_{11} * x_7 - d_{11} * x_8 - d_{11} * x_9 - \\
& d_{11} * x_{10};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_8 = & (-d_{10} * x_1 - d_{10} * x_2 - d_{10} * x_3 - d_{10} * x_4 - d_{10} * x_5 - d_{10} * x_6 - d_{10} * x_7 - d_{10} * x_8 - \\
& d_{10} * x_9 + d_9 + d_{11} * x_1 * x_2 - (-d_{11} * x_1 - d_{11} * x_2) * x_3 - (-d_{11} * x_1 - d_{11} * x_2 - d_{11} * x_3) * x_4 - (-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& d11*x2-d11*x3)*x4-(-d11*x1-d11*x2-d11*x3-d11*x4)*x5-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3-d11*x4-d11*x5)*x6)*x7-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3 \\
& -(-d11*x1-d11*x2-d11*x3)*x4-(-d11*x1-d11*x2-d11*x3-d11*x4)*x5-(- \\
& d11*x1-d11*x2-d11*x3-d11*x4-d11*x5)*x6-(-d11*x1-d11*x2-d11*x3-d11*x4- \\
& d11*x5-d11*x6)*x7)*x8-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3)*x4-(-d11*x1-d11*x2-d11*x3-d11*x4)*x5-(-d11*x1-d11*x2-d11*x3- \\
& d11*x4-d11*x5)*x6-(-d11*x1-d11*x2-d11*x3-d11*x4-d11*x5-d11*x6)*x7-(- \\
& d11*x1-d11*x2-d11*x3-d11*x4-d11*x5-d11*x6-d11*x7)*x8)*x9)*x10); \\
a5 = & (-d9*x1*x2*x3+d6-d7*x1-d7*x2-d7*x3-d7*x4-d7*x5-d7*x6-(-d8*x1- \\
& d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4)*x5-(- \\
& d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4-d8*x5)*x6+d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3- \\
& d8*x4-d8*x5-d8*x6)*x7-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(- \\
& d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5-(d9*x1*x2-(-d9*x1- \\
& d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5)*x6- \\
& (d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9*x2- \\
& d9*x3-d9*x4)*x5-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5)*x6)*x7-(d9*x1*x2-(- \\
& d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5- \\
& (-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5)*x6-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4-d9*x5- \\
& d9*x6)*x7)*x8-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)* \\
& x3)*x4)*x5+d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3)*x4-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2- \\
& d10*x3)*x4)*x5)*x6-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3)*x4- \\
& (d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3)*x4)*x5- \\
& (d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3)*x4-(-d10*x1- \\
& d10*x2-d10*x3-d10*x4)*x5)*x6)*x7-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3)*x4-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2- \\
& d10*x3)*x4)*x5-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2- \\
& d10*x3)*x4-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3-d10*x4)*x5)*x6-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3)*x4-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3- \\
& d10*x4)*x5-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3-d10*x4-d10*x5)*x6)*x7)*x8-(-d10*x1* \\
& x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3)*x4-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3)*x4)*x5-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3)*x4-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3- \\
& d10*x4)*x5)*x6-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-
\end{aligned}$$

$d_{10}x_3)x_4-(-d_{10}x_1-d_{10}x_2-d_{10}x_3-d_{10}x_4)x_5-(-d_{10}x_1-d_{10}x_2-d_{10}x_3-$
 $d_{10}x_4-d_{10}x_5)x_6)x_7-(d_{10}x_1x_2-(-d_{10}x_1-d_{10}x_2)x_3-(-d_{10}x_1-d_{10}x_2-$
 $d_{10}x_3)x_4-(-d_{10}x_1-d_{10}x_2-d_{10}x_3-d_{10}x_4)x_5-(-d_{10}x_1-d_{10}x_2-d_{10}x_3-$
 $d_{10}x_4-d_{10}x_5)x_6-(-d_{10}x_1-d_{10}x_2-d_{10}x_3-d_{10}x_4-d_{10}x_5-$
 $10x_6)x_7)x_8)x_9-(d_{11}x_1x_2x_3x_4-(-d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-$
 $d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5)x_6-d_{11}x_1x_2x_3x_4x_5-(d_{11}x_1x_2x_3x_4-$
 $x_4-(-d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5-(-$
 $d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3)x_4-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-$
 $d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3)x_4)x_5)x_6)x_7-(d_{11}x_1x_2x_3x_4-(-$
 $d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5-(-d_{11}x_1x_2x_3-$
 $(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3)x_4-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3-(-$
 $d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3)x_4)x_5)x_6-(-d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1$
 $-d_{11}x_2)x_3)x_4-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-$
 $d_{11}x_3)x_4)x_5-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-$
 $d_{11}x_3)x_4-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3-d_{11}x_4)x_5)x_6)x_7)x_8-$
 $(d_{11}x_1x_2x_3x_4-(-d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-$
 $d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5-(-d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3)x_4-$
 $(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3)x_4)x_5-(-$
 $d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3)x_4-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-$
 $d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3)x_4-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-$
 $d_{11}x_2-d_{11}x_3-d_{11}x_4)x_5)x_6-(-d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3-$
 $(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3)x_4)x_5-(-d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-$
 $d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3)x_4-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3-$
 $d_{11}x_4)x_5)x_6)x_7-(-d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3)x_4-$
 $(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3)x_4)x_5-$
 $(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-d_{11}x_3)x_4-(-d_{11}x_1-$
 $d_{11}x_2-d_{11}x_3-d_{11}x_4)x_5)x_6-(-d_{11}x_1x_2x_3-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-$
 $d_{11}x_2)x_3)x_4-(d_{11}x_1x_2-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2)x_3-(-d_{11}x_1-d_{11}x_2-$

$$\begin{aligned}
& d_{11}x_3x_4x_5 - (d_{11}x_1x_2 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - \\
& d_{11}x_3)x_4 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - d_{11}x_4)x_5)x_6 - (d_{11}x_1x_2 - (d_{11}x_1 - \\
& d_{11}x_2)x_3 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3)x_4 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - \\
& d_{11}x_4)x_5 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - d_{11}x_4 - d_{11}x_5)x_6)x_7)x_8 - (\\
& d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4 - (d_{11}x_1x_2 - (\\
& d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3)x_4)x_5 - (d_{11}x_1x_2 - (d_{11}x_1 - \\
& d_{11}x_2)x_3 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3)x_4 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - \\
& d_{11}x_4)x_5)x_6 - (d_{11}x_1x_2 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - \\
& d_{11}x_3)x_4 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - d_{11}x_4)x_5 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - \\
& d_{11}x_4 - d_{11}x_5)x_6)x_7 - (d_{11}x_1x_2 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - \\
& d_{11}x_3)x_4 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - d_{11}x_4)x_5 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - \\
& d_{11}x_4 - d_{11}x_5)x_6 - (d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3 - d_{11}x_4 - d_{11}x_5 - \\
& d_{11}x_6)x_7)x_8)x_9)x_{10};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_4 = & (d_7x_1x_2 - d_6x_2 - d_6x_1 + d_5 - d_6x_3 - d_6x_4 - d_6x_5 - (d_7x_1 - d_7x_2)x_3 - (\\
& d_7x_1 - d_7x_2 - d_7x_3)x_4 - (d_7x_1 - d_7x_2 - d_7x_3 - d_7x_4)x_5 - (d_7x_1 - d_7x_2 - \\
& d_7x_3 - d_7x_4 - d_7x_5)x_6 - (d_8x_1x_2 - (d_8x_1 - d_8x_2)x_3)x_4 - (d_8x_1x_2 - (\\
& d_8x_1 - d_8x_2)x_3 - (d_8x_1 - d_8x_2 - d_8x_3)x_4)x_5 - (d_8x_1x_2 - (d_8x_1 - \\
& d_8x_2)x_3 - (d_8x_1 - d_8x_2 - d_8x_3)x_4 - (d_8x_1 - d_8x_2 - d_8x_3 - d_8x_4)x_5) \\
& x_6 - d_8x_1x_2x_3 - (d_8x_1x_2 - (d_8x_1 - d_8x_2)x_3 - (d_8x_1 - d_8x_2 - d_8x_3)x_4 - \\
& (d_8x_1 - d_8x_2 - d_8x_3 - d_8x_4)x_5 - (d_8x_1 - d_8x_2 - d_8x_3 - d_8x_4 - d_8x_5)x_6) \\
& x_7 - (d_9x_1x_2x_3 - (d_9x_1x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3)x_4)x_5 - (d_9x_1x_2x_3 - \\
& (d_9x_1x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3)x_4 - (d_9x_1x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3 - (d_9x_1 - \\
& d_9x_2 - d_9x_3)x_4)x_5)x_6 - (d_9x_1x_2x_3 - (d_9x_1x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3) \\
& x_4 - (d_9x_1x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3)x_4)x_5 - (d_9x_1 \\
& x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3)x_4 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3 - \\
& d_9x_4)x_5)x_6)x_7 - (d_9x_1x_2x_3 - (d_9x_1x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3)x_4 - \\
& (d_9x_1x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3)x_4)x_5 - (d_9x_1x_2 - \\
& (d_9x_1 - d_9x_2)x_3 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3)x_4 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3 - \\
& d_9x_4)x_5)x_6 - (d_9x_1x_2 - (d_9x_1 - d_9x_2)x_3 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3) \\
& x_4 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3 - d_9x_4)x_5 - (d_9x_1 - d_9x_2 - d_9x_3 - d_9x_4 - \\
& d_9x_5)x_6)x_7)x_8 + d_9x_1x_2x_3x_4 - d_{10}x_1x_2x_3x_4x_5 - \\
& (d_{10}x_1x_2x_3x_4 - (d_{10}x_1x_2x_3 - (d_{10}x_1x_2 - (d_{10}x_1 - \\
& d_{10}x_2)x_3)x_4)x_5)x_6 - (d_{10}x_1x_2x_3x_4 - (d_{10}x_1x_2x_3 - (d_{10}x_1x_2 - (\\
& d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3)x_4)x_5 - (d_{10}x_1x_2x_3 - (d_{10}x_1x_2 - (d_{10}x_1 -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& d_{10}x_2x_3x_4 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - \\
& d_{10}x_3)x_4)x_5x_6x_7 - (d_{10}x_1x_2x_3x_4 - (-d_{10}x_1x_2x_3 - (d_{10}x_1x_2 - \\
& (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3)x_4)x_5 - (-d_{10}x_1x_2x_3 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - \\
& d_{10}x_2)x_3)x_4 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - \\
& d_{10}x_3)x_4)x_5x_6 - (-d_{10}x_1x_2x_3 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3)x_4 - \\
& (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3)x_4)x_5 - \\
& (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3)x_4 - (-d_{10}x_1 - \\
& d_{10}x_2 - d_{10}x_3 - d_{10}x_4)x_5)x_6x_7x_8 - (d_{10}x_1x_2x_3x_4 - (-d_{10}x_1x_2x_3 - \\
& (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3)x_4)x_5 - (-d_{10}x_1x_2x_3 - \\
& (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3)x_4 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (- \\
& d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3)x_4)x_5x_6 - (-d_{10}x_1x_2x_3 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - \\
& d_{10}x_2)x_3)x_4 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - \\
& d_{10}x_3)x_4)x_5 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - \\
& d_{10}x_3)x_4 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3 - d_{10}x_4)x_5)x_6x_7 - (-d_{10}x_1x_2x_3 - \\
& (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3)x_4 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (- \\
& d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3)x_4)x_5 - (d_{10}x_1x_2 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (-d_{10}x_1 - \\
& d_{10}x_2 - d_{10}x_3)x_4 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3 - d_{10}x_4)x_5)x_6 - (d_{10}x_1x_2 - (- \\
& d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3)x_4 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3 - \\
& d_{10}x_4)x_5 - (-d_{10}x_1 - d_{10}x_2 - d_{10}x_3 - d_{10}x_4 - d_{10}x_5)x_6x_7x_8 - \\
& x_8x_9 + d_{11}x_1x_2x_3x_4x_5x_6 - (-d_{11}x_1x_2x_3x_4x_5 - (d_{11}x_1x_2x_3x_4 - \\
& (-d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5)x_6x_7 - (- \\
& d_{11}x_1x_2x_3x_4x_5 - (d_{11}x_1x_2x_3x_4 - (-d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (- \\
& d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5)x_6 - (d_{11}x_1x_2x_3x_4 - (-d_{11}x_1x_2x_3 - \\
& (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5 - (-d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (- \\
& -d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4 - (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - \\
& d_{11}x_3)x_4)x_5)x_6x_7x_8 - (-d_{11}x_1x_2x_3x_4x_5 - (d_{11}x_1x_2x_3x_4 - (- \\
& d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5)x_6 - \\
& (d_{11}x_1x_2x_3x_4 - (-d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - \\
& d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5 - (-d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4 - \\
& (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3)x_4)x_5)x_6x_7 - \\
& (d_{11}x_1x_2x_3x_4 - (-d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - \\
& d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5 - (-d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4 - \\
& (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2 - d_{11}x_3)x_4)x_5)x_6 - \\
& (-d_{11}x_1x_2x_3 - (d_{11}x_1x_2 - (-d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4 - (d_{11}x_1x_2 - (-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3)^*x_4)^*x_5-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1- \\
& d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3)^*x_4-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3- \\
& d_{11}^*x_4)^*x_5)^*x_6)^*x_7)^*x_8)^*x_9-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3^* \\
& x_4^*x_5-(d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3^*x_4-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1- \\
& d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4)^*x_5)^*x_6-(d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3^*x_4-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(- \\
& d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4)^*x_5-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1- \\
& d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2- \\
& d_{11}^*x_3)^*x_4)^*x_5)^*x_6)^*x_7-(d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3^*x_4-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(- \\
& d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4)^*x_5-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1- \\
& d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2- \\
& d_{11}^*x_3)^*x_4)^*x_5)^*x_6-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4- \\
& (d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3)^*x_4)^*x_5- \\
& (d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3)^*x_4-(-d_{11}^*x_1- \\
& d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3-d_{11}^*x_4)^*x_5)^*x_6)^*x_7)^*x_8-(d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3^*x_4-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3- \\
& (d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4)^*x_5-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(- \\
& d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2- \\
& d_{11}^*x_3)^*x_4)^*x_5)^*x_6-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4- \\
& (d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3)^*x_4)^*x_5- \\
& (d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3)^*x_4-(-d_{11}^*x_1- \\
& d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3-d_{11}^*x_4)^*x_5)^*x_6)^*x_7-(-d_{11}^*x_1^*x_2^*x_3-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1- \\
& d_{11}^*x_2)^*x_3)^*x_4-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2- \\
& d_{11}^*x_3)^*x_4)^*x_5-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2- \\
& d_{11}^*x_3)^*x_4-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3-d_{11}^*x_4)^*x_5)^*x_6-(d_{11}^*x_1^*x_2-(-d_{11}^*x_1- \\
& d_{11}^*x_2)^*x_3-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3)^*x_4-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3-d_{11}^*x_4)^* \\
& x_5-(-d_{11}^*x_1-d_{11}^*x_2-d_{11}^*x_3-d_{11}^*x_4-d_{11}^*x_5)^*x_6)^*x_7)^*x_8)^*x_9)^*x_{10}); \\
a_3 = & (-d_7^*x_1^*x_2^*x_3-d_5^*x_1-d_5^*x_2-d_5^*x_3-d_5^*x_4+d_4+d_6^*x_1^*x_2-(-d_6^*x_1- \\
& d_6^*x_2)^*x_3-(-d_6^*x_1-d_6^*x_2-d_6^*x_3)^*x_4-(-d_6^*x_1-d_6^*x_2-d_6^*x_3-d_6^*x_4)^*x_5- \\
& (d_7^*x_1^*x_2-(-d_7^*x_1-d_7^*x_2)^*x_3)^*x_4-(d_7^*x_1^*x_2-(-d_7^*x_1-d_7^*x_2)^*x_3-(-d_7^*x_1- \\
& d_7^*x_2-d_7^*x_3)^*x_4)^*x_5-(d_7^*x_1^*x_2-(-d_7^*x_1-d_7^*x_2)^*x_3-(-d_7^*x_1-d_7^*x_2- \\
& d_7^*x_3)^*x_4-(-d_7^*x_1-d_7^*x_2-d_7^*x_3-d_7^*x_4)^*x_5)^*x_6-(-d_8^*x_1^*x_2^*x_3-(d_8^*x_1^*x_2-(- \\
& d_8^*x_1-d_8^*x_2)^*x_3)^*x_4)^*x_5-(-d_8^*x_1^*x_2^*x_3-(d_8^*x_1^*x_2-(-d_8^*x_1-d_8^*x_2)^*x_3)^*x_4- \\
& (d_8^*x_1^*x_2-(-d_8^*x_1-d_8^*x_2)^*x_3-(-d_8^*x_1-d_8^*x_2- \\
& d_8^*x_3)^*x_4)^*x_5)^*x_6+d_8^*x_1^*x_2^*x_3^*x_4-(- \\
& d_8^*x_1^*x_2^*x_3-(d_8^*x_1^*x_2-(-d_8^*x_1-d_8^*x_2)^*x_3)^*x_4-(d_8^*x_1^*x_2-(-d_8^*x_1-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& d8*x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4)*x5-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3-(- \\
& d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3-d8*x4)*x5)*x6)*x7- \\
& (d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4)*x5 \\
&)*x6-(d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1- \\
& d9*x2)*x3)*x4)*x5-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4- \\
& (d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5)*x6)*x7- \\
& (d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4) \\
& *x5-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1- \\
& d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5)*x6-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(- \\
& d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2- \\
& d9*x3)*x4)*x5-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4-(- \\
& d9*x1-d9*x2-d9*x3-d9*x4)*x5)*x6)*x7)*x8-d9*x1*x2*x3*x4* \\
& x5-(-d10*x1*x2*x3*x4*x5-(d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2- \\
& (-d10*x1-d10*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(-d10*x1*x2*x3*x4*x5- \\
& (d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3)*x4)*x5)*x6-(d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2- \\
& (-d10*x1-d10*x2)*x3)*x4)*x5-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3)*x4-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2- \\
& d10*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8-(-d10*x1*x2*x3*x4*x5-(d10*x1*x2*x3*x4-(- \\
& d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3)*x4)* \\
& x5)*x6-(d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3)*x4)*x5-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3)*x4- \\
& (d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3)*x4)*x5)*x6)*x7- \\
& (d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(- \\
& -d10*x1-d10*x2)*x3)*x4)*x5-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3)*x4-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2- \\
& d10*x3)*x4)*x5)*x6-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3)*x4- \\
& (d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3)*x4)*x5- \\
& (d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2-d10*x3)*x4-(-d10*x1- \\
& d10*x2-d10*x3-d10*x4)*x5)*x6)*x7)*x8)*x9+d10*x1*x2*x3*x4*x5*x6- \\
& (d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(-d11*x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(- \\
& d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8- \\
& (d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(-d11*x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(- \\
& d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(-d11*
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1- \\
& d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6-(d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(- \\
& d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1- \\
& d11*x2)*x3)*x4-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8)*x9-(d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(-d11*x1*x2* \\
& x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1- \\
& d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(-d11*x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(- \\
& d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6- \\
& (d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1- \\
& d11*x2)*x3)*x4)*x5-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3)*x4- \\
& (d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8-(-d11*x1*x2*x3*x4*x5-(\\
& d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1- \\
& d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6-(d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(- \\
& d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1- \\
& d11*x2)*x3)*x4-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(- \\
& d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1- \\
& d11*x2)*x3)*x4-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3)*x4)*x5)*x6-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11* \\
& x1-d11*x2)*x3)*x4-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3)*x4)*x5-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3)*x4-(-d11*x1-d11*x2-d11*x3-d11*x4)*x5)*x6)*x7)*x8)*x9)*x10- \\
& d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6*x7);
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a2 = & (-d6*x1*x2*x3-d4*x1-d4*x2-d4*x3-(-d5*x1-d5*x2)*x3-(-d5*x1-d5*x2- \\
& d5*x3)*x4+d3+d5*x1*x2-(d6*x1*x2-(-d6*x1-d6*x2)*x3)*x4-(d6*x1*x2-(- \\
& d6*x1-d6*x2)*x3-(-d6*x1-d6*x2-d6*x3)*x4)*x5-(-d7*x1*x2*x3-(d7*x1*x2-(- \\
& d7*x1-d7*x2)*x3)*x4)*x5-(-d7*x1*x2*x3-(d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3)*x4- \\
& (d7*x1*x2-(-d7*x1-d7*x2)*x3-(-d7*x1-d7*x2-d7*x3)*x4)*x5)*x6- \\
& (d8*x1*x2*x3*x4-(-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1- \\
& d8*x2)*x3)*x4)*x5)*x6+d7*x1*x2*x3*x4-d8*x1*x2*x3*x4*x5- \\
& (d8*x1*x2*x3*x4-(-d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4)*x5-(- \\
& d8*x1*x2*x3-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8*x2)*x3)*x4-(d8*x1*x2-(-d8*x1-d8 \\
& *x2)*x3-(-d8*x1-d8*x2-d8*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(-d9*x1*x2*x3*x4*x5-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1- \\
& d9*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(-d9*x1*x2*x3*x4*x5-(d9* \\
& x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4)*x5)*x6- \\
& (d9*x1*x2*x3*x4-(-d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4)*x5-(- \\
& d9*x1*x2*x3-(d9*x1*x2-(-d9*x1-d9*x2)*x3)*x4-(d9*x1*x2-(-d9*x1- \\
& d9*x2)*x3-(-d9*x1-d9*x2-d9*x3)*x4)*x5)*x6)*x7) \\
& *x8+d9*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(d10*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(- \\
& d10*x1*x2*x3*x4*x5-(d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(- \\
& d10*x1-d10*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8-(d10*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(- \\
& d10*x1*x2*x3*x4*x5-(d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(- \\
& d10*x1-d10*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(-d10*x1*x2*x3*x4*x5- \\
& (d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3)*x4)*x5)*x6-(d10*x1*x2*x3*x4-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(- \\
& d10*x1-d10*x2)*x3)*x4)*x5-(-d10*x1*x2*x3-(d10*x1*x2-(-d10*x1- \\
& d10*x2)*x3)*x4-(d10*x1*x2-(-d10*x1-d10*x2)*x3-(-d10*x1-d10*x2- \\
& d10*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8)*x9-d10*x1*x2*x3*x4*x5*x6*x7-(- \\
& d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6*x7-(d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(- \\
& d11*x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(- \\
& d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8)*x9-(-d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6*x7- \\
& (d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(-d11*x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(- \\
& d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8- \\
& (d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(-d11*x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4 \\
& -(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6)*x7-(- \\
& d11*x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(- \\
& d11*x1-d11*x2)*x3)*x4)*x5)*x6-(\\
& d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1- \\
& d11*x2)*x3)*x4)*x5-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3)*x4- \\
& (d11*x1*x2-(-d11*x1-d11*x2)*x3-(-d11*x1-d11*x2- \\
& d11*x3)*x4)*x5)*x6)*x7)*x8)*x9)*x10+d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6*x7*x8); \\
a1 = & (-d7*x1*x2*x3*x4*x5-(d7*x1*x2*x3*x4-(-d7*x1*x2*x3-(d7*x1*x2- \\
& (-d7*x1-d7*x2)*x3)*x4)*x5)*x6-d3*x1-d3*x2- \\
& d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6*x7*x8*x9-(d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6*x7*x8- \\
& (-d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6*x7-(d11*x1*x2*x3*x4*x5*x6-(- \\
& d11*x1*x2*x3*x4*x5-(d11*x1*x2*x3*x4-(-d11*x1*x2*x3-(d11*x1*x2-(-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& d_{11}x_1 - d_{11}x_2)x_3)x_4)x_5)x_6)x_7)x_8)x_9)x_{10} \\
& + d_8x_1x_2x_3x_4x_5x_6 - (-d_8x_1x_2x_3x_4x_5 - (d_8x_1x_2x_3x_4 - (- \\
& d_8x_1x_2x_3 - (d_8x_1x_2 - (-d_8x_1 - d_8x_2)x_3)x_4)x_5)x_6)x_7 + d_4x_1x_2 - (- \\
& d_4x_1 - d_4x_2)x_3 + d_{10}x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7x_8 - (- \\
& d_{10}x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7 - (d_{10}x_1x_2x_3x_4x_5x_6 - (- \\
& d_{10}x_1x_2x_3x_4x_5 - (d_{10}x_1x_2x_3x_4 - (-d_{10}x_1x_2x_3 - (d_{10}x_1x_2 - (- \\
& d_{10}x_1 - d_{10}x_2)x_3)x_4)x_5)x_6)x_7)x_8)x_9 + d_6x_1x_2x_3x_4 - (- \\
& d_6x_1x_2x_3 - (d_6x_1x_2 - (-d_6x_1 - d_6x_2)x_3)x_4)x_5 - d_5x_1x_2x_3 - \\
& (d_5x_1x_2 - (-d_5x_1 - d_5x_2)x_3)x_4 - d_9x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7 - \\
& (d_9x_1x_2x_3x_4x_5x_6 - (-d_9x_1x_2x_3x_4x_5 - (d_9x_1x_2x_3x_4 - (- \\
& d_9x_1x_2x_3 - (d_9x_1x_2 - (-d_9x_1 - d_9x_2)x_3)x_4)x_5)x_6)x_7)x_8 + d_2); \\
a_0 = & d_1 - d_2x_1 - d_6x_1x_2x_3x_4x_5 + d_3x_1x_2 + d_7x_1x_2x_3x_4x_5x_6 - \\
& d_{10}x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7x_8x_9 - d_4x_1x_2x_3 - \\
& d_8x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7 + d_{11}x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7x_8x_9x_{10} + d_5x_1x_2x_3x_4 + \\
& d_9x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7x_8;
\end{aligned}$$

APÊNDICE B - PARTICULARIDADES DO PROCESSO DE OTIMIZAÇÃO 1D.

Considera-se neste apêndice a resolução numérica de equações polinomiais e, em particular, a obtenção do ponto extremo global para o polinômio interpolador ξ_p caracterizado no apêndice A. Nessa perspectiva, são descritos na sequência os procedimentos adotados na abordagem unidimensional, para o polinômio de grau p . Para simplificação da notação adotada considera-se apenas o caso de maximização, sendo que o caso de minimização ocorre de modo semelhante.

Caso com $p = 2$.

Com o objetivo de se encontrar o ponto de máximo do polinômio quadrático interpolado busca-se seu ponto crítico. Entretanto, devido ao comportamento do polinômio (grau 2), o ponto crítico encontrado representa o ponto de máximo global do polinômio interpolado.

Como $\xi(\chi) = a_2\chi^2 + a_1\chi + a_0 \Rightarrow \xi'(X) = 2a_2\chi + a_1$. Assim, a abscissa do ponto de máximo pode ser encontrada por:

$$\xi'(\chi_{\max}) = 0 \Leftrightarrow 2a_2\chi + a_1 = 0 \Leftrightarrow \chi_{\max} = -\frac{a_1}{2a_2}. \quad (\text{B.1})$$

Com isso, ϕ_{\max} pode ser obtido por:

$$\phi_{\max} = \xi(\chi_{\max}) = a_2(\chi_{\max})^2 + a_1\chi_{\max} + a_0. \quad (\text{B.2})$$

Caso geral.

Como as funções ξ_p caracterizam funções convexas (ou côncavas), a coordenada χ_{\max} do ponto extremo para os demais polinômios interpoladores, com $p = 3, 4, 5, 6, 8$ e 10 , foi obtida considerando-se o conceito de ponto crítico. Assim, considerou-se a solução da equação obtida pela derivada do polinômio sendo igualada a zero,

$$\xi'(\chi) = 0 \Rightarrow \chi = \chi_{\max}. \quad (\text{B.3})$$

Com esse enfoque, para resolução da Eq. (B.3) adotaram-se os métodos: Newton e Newton modificado (BURDEN e FAIRES, 2008). De acordo com o método de Newton, sendo a função $\xi_p' \in C^2[\chi_0, \chi_p]$ pode-se considerar uma aproximação inicial $\chi^{(0)} = \chi_{p^*}$ para a raiz de ξ' em $[\chi_0, \chi_p]$ e gerar a sequência $\{\chi^{(it)}\}_{it=1}^{\infty}$,

$$\chi^{(it)} = \chi^{(it-1)} - \frac{\xi_p'(\chi^{(it-1)})}{\xi_p''(\chi^{(it-1)})}. \quad (\text{B.4})$$

Sobre esta equação, são considerados na sequência dois teoremas que caracterizam a sua solução.

Teorema 1 (BURDEN e FAIRES, 2008): seja χ^* uma solução da equação $\chi = \chi - g(\chi)$. Supondo que $g'(\chi^*) = 0$ e que g'' seja contínua, com $|g''(\chi)| \leq M < \infty$ em um intervalo I contendo χ^* . Então, existe um número $\delta > 0$ tal que, para $\chi^{(0)} \in [\chi^* - \delta, \chi^* + \delta]$, a sequência definida por $\chi^{(it)} = \chi^{(it-1)} - g(\chi^{(it-1)})$, quando $it \geq 1$, converge pelo menos quadraticamente para χ^* . Além disso:

$$|\chi^{(it)} - \chi^*| < \frac{M}{2} |\chi^{(it-1)} - \chi^*|^2, \quad 0 < M < \infty, \quad M \in \mathfrak{R}.$$

O método de Newton é um método de ponto fixo quadraticamente convergente. Entretanto, no método de Newton podem ocorrer algumas dificuldades se $\xi'(\chi^{(it)})$ e $\xi''(\chi^{(it)})$ tendem a zero simultaneamente.

Teorema 2 (BURDEN e FAIRES, 2008): a função $\xi \in C^p[\chi_0, \chi_p]$ tem um zero de multiplicidade m em χ^* no intervalo (χ_0, χ_p) se e somente se $\xi^{(i)}(\chi^*) = 0$ para todo $i \in \{0, 1, \dots, m-1\}$, mas $\xi^{(m)}(\chi^*) \neq 0$.

Um meio de tratar o problema de raízes múltiplas é definir: $\mu(X) = \frac{\xi(\chi)}{\xi'(\chi)}$ e se χ^* for um zero de ξ de multiplicidade m , então o método de Newton é aplicado à função μ de modo a fornecer o chamado método de Newton modificado.

Dessa forma, tem-se:

$$\chi^{(it)} = \chi^{(it-1)} - \frac{\xi_p'(\chi^{(it-1)}) \cdot \xi_p''(\chi^{(it-1)})}{(\xi_p''(\chi^{(it-1)}))^2 - \xi_p'(\chi^{(it-1)}) \cdot \xi_p'''(\chi^{(it-1)})} \quad (\text{B.5})$$

Como exemplo, se considera:

$$\xi_3(\chi) = a_0 + a_1 \chi + a_2 \chi^2 + a_3 \chi^3.$$

Devido às características de Ω ,

$$\xi_3'(\chi) = 0 \Rightarrow \chi = \chi_{\max}.$$

Dessa forma, para se resolver $\xi_3'(\chi) = 0$ adotam-se os métodos: Newton e Newton modificado.

Newton:

$$\chi^{(it)} = \chi^{(it-1)} - \frac{\xi_3'(\chi^{(it-1)})}{\xi_3''(\chi^{(it-1)})}.$$

Newton modificado:

$$\chi^{(it)} = \chi^{(it-1)} - \frac{\xi_3'(\chi^{(it-1)}) \cdot \xi_3''(\chi^{(it-1)})}{(\xi_3''(\chi^{(it-1)}))^2 - \xi_3'(\chi^{(it-1)}) \cdot \xi_3'''(\chi^{(it-1)})}.$$

$$\xi_3'(\chi) = a_1 + 2a_2 \chi + 3a_3 \chi^2;$$

$$\xi_3''(\chi) = 2a_2 + 6a_3 \chi;$$

$$\xi_3'''(\chi) = 6a_3;$$

$$\chi^{(0)} = \chi_{p^*} = \chi_{p/2+1}.$$

O critério de parada para o processo iterativo, adotado, foi: $|\chi^{(it)} - \chi^{(it-1)}| < 10^{-31}$ (nos casos analisados esse critério é satisfeito em, no máximo, 10 iterações para Newton e 5 iterações para Newton modificado).

Como são satisfeitas as condições de continuidade exigidas, o processo iterativo terá convergência quadrática, independentemente da multiplicidade de ξ_3' .

Obtém-se, então, um processo iterativo convergente e considera-se: $\chi_{\max} = \chi^{(it)}$ e

$$\phi_{\max} = \xi_3(\chi_{\max}).$$

APÊNDICE C - IMPLEMENTAÇÃO DA INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL 2D.

De acordo com a teoria apresentada na seção 2.4.2, a estrutura adotada para obtenção do polinômio interpolador com enfoque bidimensional é descrita a seguir.

(i) Inicialmente determinam-se os valores nodais, dentre as soluções numéricas obtidas para a variável primária, em cada malha. A partir desses dados realiza-se a interpolação polinomial, como descrito no próximo item, isto é, obtém-se ξ_p , considerando-se os valores de ϕ correspondentes aos pontos nodais (i, j) (Fig. C.1) com coordenadas (x_i, y_j) para $i = 0, 1, \dots, p$ e $j = 0, 1, \dots, p$. O intervalo onde se define ξ_p é $\Omega = [x_0, x_p] \times [y_0, y_p]$, em que se considera o ponto central (p^*, p^*) de coordenadas (x_{p^*}, y_{p^*}) com $p^* = p/2$, se p for par, ou $p^* = p/2 + 1$, se p for ímpar.

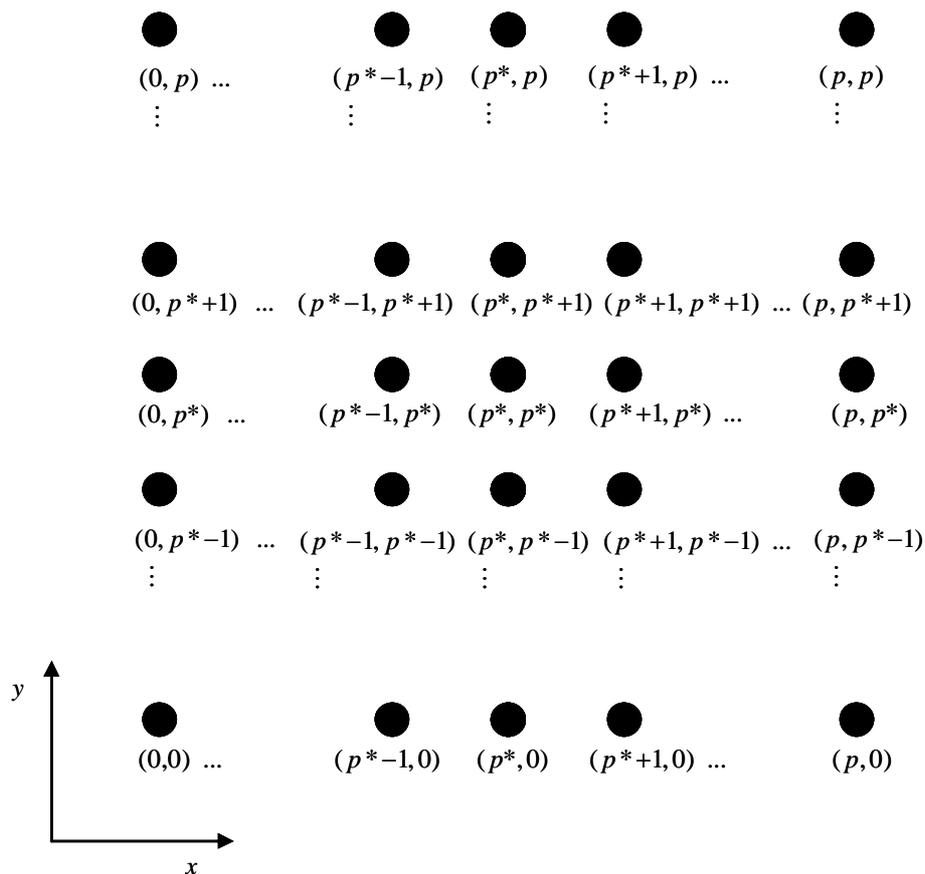


Figura C.1: Representação dos pontos, $(i, j) = (x_i, y_j)$; $i = 0, \dots, p$; $j = 0, \dots, p$; utilizados na obtenção de ξ_p .

(ii) Cálculo dos coeficientes do polinômio interpolador.

Passo 1: entrada $(p + 1)^2$ pontos nodais com valores: $\phi(x_i, y_j)$; $i = 0, \dots, p$; $j = 0, \dots, p$.

Passo 2: Para $i = 0, \dots, p$; $j = 0, \dots, p$: $F_{i,j} = \phi(x_i, y_j)$.

Passo 3: Para $m = 0, \dots, p - 1$;

para $k = 1, 2, \dots, p - m$;

$v = k + m$;

para $t = 1, \dots, p$;

$$F_{v,t} = \frac{F_{v,t-1} - F_{v-1,t-1}}{x_v - \chi_{k-1}}.$$

Passo 4: Para $m = 0, \dots, p - 1$;

para $l = 1, 2, \dots, p - m$;

$t = l + m$;

para $v = 1, \dots, p$;

$$F_{v,t} = \frac{F_{v-1,t} - F_{v-1,t-1}}{y_t - y_{l-1}} \quad (\text{DDN 2D})$$

(Obs. DDN 2D: Diferenças Divididas de Newton bidimensional)

Com esses valores obtidos para as DDN 2D, o polinômio interpolado (Newton 2D) se torna

$$\begin{aligned} \xi_p(\chi, y) = & F_{0,0} + F_{1,0}(x - x_0) + F_{0,1}(y - y_0) + F_{1,1}(x - x_0)(y - y_0) + \\ & F_{2,1}(x - x_0)(x - x_1)(y - y_0) + F_{1,2}(x - \chi_0)(y - y_0)(y - y_1) + \dots \\ & F_{p,p}(x - x_0) \dots (x - x_{p-1})(y - y_0) \dots (y - y_{p-1}). \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Entretanto, devido às particularidades definidas nesta tese, considera-se $\xi_p(x, y)$ no formato canônico, ou seja, adota-se a base de polinômios de potência. Tal formato é mais adequado ao emprego de métodos de otimização, devido à facilidade de obtenção da expressão analítica para o gradiente de $\xi_p(x, y)$.

Dessa forma, tem-se:

$$\begin{aligned}
\xi_p(x, y) = & \kappa_{p,p}x^p y^p + \kappa_{p,p-1}x^p y^{p-1} + \kappa_{p,p-2}x^p y^{p-2} + \dots + \kappa_{p,0}x^p + \\
& \kappa_{p-1,p}x^{p-1} y^p + \kappa_{p-1,p-1}x^{p-1} y^{p-1} + \kappa_{p-1,p-2}x^{p-1} y^{p-2} + \dots + \kappa_{p-1,0}x^{p-1} + \\
& \dots + \\
& \kappa_{0,p}y^p + \kappa_{0,p-1}y^{p-1} + \kappa_{0,p-2}y^{p-2} + \dots + \kappa_{0,0},
\end{aligned} \tag{C.2}$$

em que, os coeficientes $\kappa_{i,j} \in \mathfrak{R}$, $i = 0, \dots, p$, $j = 0, \dots, p$, são obtidos através do desenvolvimento algébrico da Eq. (C.1).

Como exemplo, considera-se o caso com $p = 2 \Rightarrow p^* = 1$, onde são adotados nove pontos nodais (Fig. C.2) para obtenção do polinômio interpolador

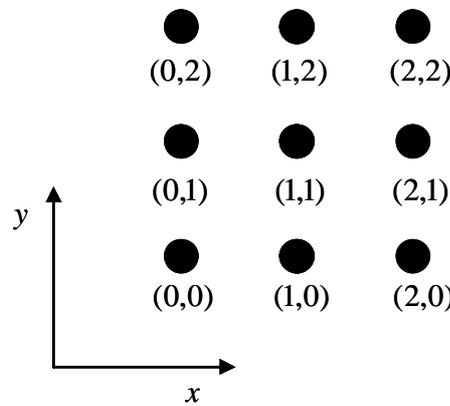


Figura C.2: Representação dos pontos, $(i, j) = (x_i, y_j)$; $i = 0, 1, 2$; $j = 0, 1, 2$; considerados na obtenção de $\xi_2(x, y)$.

Então, a partir desses pontos obtém-se:

$$\xi_2(x, y) = \kappa_{2,2}x^2 y^2 + \kappa_{2,1}x^2 y + \kappa_{2,0}x^2 + \kappa_{1,2}x y^2 + \kappa_{1,1}x y + \kappa_{1,0}x + \kappa_{0,2}y^2 + \kappa_{0,1}y + \kappa_{0,0},$$

em que, no código computacional desenvolvido, adota-se a notação:

$K(i+1, j+1) = \kappa_{i,j}$, $x(i+1) = x_i$, $y(j+1) = y_j$, $F(i+1, j+1) = F_{i,j}$, com $i = 0, 1, 2$; $j = 0, 1, 2$. E, $h = h = x_{i+1} - x_i = y_{j+1} - y_j$; $i = 0, 1$; $j = 0, 1$.

Assim, as expressões que determinam os coeficientes de $\xi_2(x, y)$ tornam-se (linguagem adotada no código computacional desenvolvido):

$$P2 = K(3,3)*((x^2)*(y^2)) + K(3,2)*((x^2)*(y)) + K(3,1)*(x^2) + \\ K(2,3)*((x)*(y^2)) + K(2,2)*((x)*(y)) + K(2,1)*(x) + K(1,3)*(y^2) + \\ K(1,2)*(y) + K(1,1);$$

$$K(3,3) = F(1,1)/(4*(h^4)) - F(1,2)/(2*(h^4)) + F(1,3)/(4*(h^4)) - F(2,1)/(2*(h^4)) + \\ F(2,2)/(h^4) - F(2,3)/(2*(h^4)) + F(3,1)/(4*(h^4)) - F(3,2)/(2*(h^4)) + \\ F(3,3)/(4*(h^4));$$

$$K(3,2) = -(y(2)+y(3))*F(1,1)/(4*(h^4)) + (y(1)+y(3))*F(1,2)/(2*(h^4)) - (y(1)+y(2))* \\ F(1,3)/(4*(h^4)) + (y(2)+y(3))*F(2,1)/(2*(h^4)) - (y(1)+y(3))*F(2,2)/(h^4) \\ + (y(1)+y(2))*F(2,3)/(2*(h^4)) - (y(2)+y(3))*F(3,1)/(4*(h^4)) + (y(1)+y(3))* \\ F(3,2)/(2*(h^4)) - (y(1)+y(2))*F(3,3)/(4*(h^4));$$

$$K(3,1) = (y(2)*y(3))*F(1,1)/(4*(h^4)) - (y(1)*y(3))*F(1,2)/(2*(h^4)) + (y(1)*y(2))* \\ F(1,3)/(4*(h^4)) - (y(2)*y(3))*F(2,1)/(2*(h^4)) + (y(1)*y(3))*F(2,2)/(h^4) - \\ (y(1)*y(2))*F(2,3)/(2*(h^4)) + (y(2)*y(3))*F(3,1)/(4*(h^4)) - (y(1)*y(3))* \\ F(3,2)/(2*(h^4)) + (y(1)*y(2))*F(3,3)/(4*(h^4));$$

$$K(2,3) = -(x(2)+x(3))*F(1,1)/(4*(h^4)) + (x(2)+x(3))*F(1,2)/(2*(h^4)) - (x(2)+x(3))* \\ F(1,3)/(4*(h^4)) + (x(1)+x(3))*F(2,1)/(2*(h^4)) - (x(1)+x(3))*F(2,2)/(h^4) \\ + (x(1)+x(3))*F(2,3)/(2*(h^4)) - (x(1)+x(2))*F(3,1)/(4*(h^4)) + (x(1)+x(2))* \\ F(3,2)/(2*(h^4)) - (x(1)+x(2))*F(3,3)/(4*(h^4));$$

$$K(2,2) = (x(2)+x(3))*(y(2)+y(3))*F(1,1)/(4*(h^4)) - (x(2)+x(3))*(y(1)+y(3))* \\ F(1,2)/(2*(h^4)) + (x(2)+x(3))*(y(1)+y(2))*F(1,3)/(4*(h^4)) - \\ (x(1)+x(3))*(y(2)+y(3))*F(2,1)/(2*(h^4)) + (x(1)+x(3))*(y(1)+y(3))* \\ F(2,2)/(h^4) - (x(1)+x(3))*(y(1)+y(2))*F(2,3)/(2*(h^4)) \\ + (x(1)+x(2))*(y(2)+y(3))*F(3,1)/(4*(h^4)) - (x(1)+x(2))*(y(1)+y(3))* \\ F(3,2)/(2*(h^4)) + (x(1)+x(2))*(y(1)+y(2))*F(3,3)/(4*(h^4));$$

$$K(2,1) = -(x(2)+x(3))*(y(2)*y(3))*F(1,1)/(4*(h^4)) - (x(2)+x(3))*(y(1)*y(3))* \\ F(1,2)/(2*(h^4)) + (x(2)+x(3))*(y(1)*y(2))*F(1,3)/(4*(h^4)) - \\ (x(1)+x(3))*(y(2)*y(3))*F(2,1)/(2*(h^4)) + (x(1)+x(3))*(y(1)*y(3))* \\ F(2,2)/(h^4) - (x(1)+x(3))*(y(1)*y(2))*F(2,3)/(2*(h^4)) \\ + (x(1)+x(2))*(y(2)*y(3))*F(3,1)/(4*(h^4)) - (x(1)+x(2))*(y(1)*y(3))* \\ F(3,2)/(2*(h^4)) + (x(1)+x(2))*(y(1)*y(2))*F(3,3)/(4*(h^4));$$

$$K(1,3) = (x(2)*x(3))*F(1,1)/(4*(h^4)) - (x(2)*x(3))*F(1,2)/(2*(h^4)) + (x(2)*x(3))* \\ F(1,3)/(4*(h^4)) - (x(1)*x(3))*F(2,1)/(2*(h^4)) + (x(1)*x(3))*F(2,2)/(h^4) - \\ (x(1)*x(3))*F(2,3)/(2*(h^4)) + (x(1)*x(2))*F(3,1)/(4*(h^4)) - (x(1)*x(2))*$$

$$\begin{aligned}
& F(3,2)/(2*(h^4)) + (x(1)*x(2))* F(3,3)/(4*(h^4)); \\
K(1,2) = & -((x(2)*x(3))*(y(2)+y(3))*F(1,1)/(4*(h^4)) - (x(2)*x(3))*(y(1)+y(3))* \\
& F(1,2)/(2*(h^4)) + (x(2)*x(3))*(y(1)+y(2))* F(1,3)/(4*(h^4)) - \\
& (x(1)*x(3))*(y(2)+y(3))* F(2,1)/(2*(h^4)) + (x(1)*x(3))*(y(1)+y(3))* \\
& F(2,2)/(h^4) - (x(1)*x(3))*(y(1)+y(2))* F(2,3)/(2*(h^4)) \\
& + (x(1)*x(2))*(y(2)+y(3))* F(3,1)/(4*(h^4)) - (x(1)*x(2))*(y(1)+y(3))* \\
& F(3,2)/(2*(h^4)) + (x(1)*x(2))*(y(1)+y(2))* F(3,3)/(4*(h^4))); \\
K(1,1) = & (x(2)*x(3))*(y(2)*y(3))*F(1,1)/(4*(h^4)) - (x(2)*x(3))*(y(1)*y(3))* \\
& F(1,2)/(2*(h^4)) + (x(2)*x(3))*(y(1)*y(2))* F(1,3)/(4*(h^4)) - \\
& (x(1)*x(3))*(y(2)*y(3))* F(2,1)/(2*(h^4)) + (x(1)*x(3))*(y(1)*y(3))* \\
& F(2,2)/(h^4) - (x(1)*x(3))*(y(1)*y(2))* F(2,3)/(2*(h^4)) \\
& + (x(1)*x(2))*(y(2)*y(3))* F(3,1)/(4*(h^4)) - (x(1)*x(2))*(y(1)*y(3))* \\
& F(3,2)/(2*(h^4)) + (x(1)*x(2))*(y(1)*y(2))* F(3,3)/(4*(h^4)).
\end{aligned}$$

De modo análogo ao desenvolvimento apresentado ($p = 2$), no presente trabalho foram considerados os polinômios interpoladores (2D) com graus $p = 3, 4$ e 6 .

APÊNDICE D - IMPLEMENTAÇÃO DO PROCESSO DE OTIMIZAÇÃO 2D.

De acordo com a teoria abordada na seção 2.5, neste apêndice são descritos os procedimentos adotados para obtenção do ponto extremo global do polinômio interpolador $\xi_p(x, y)$, caracterizado no apêndice C. Assim como no caso unidimensional considera-se, apenas, o caso de maximização, sendo que o caso de minimização ocorre de modo semelhante.

Sem perda de generalidade, considera-se o caso com $p = 2$. Então, para $\xi_2(x, y)$, a partir dos pontos $(i, j) = (x_i, y_j)$; $i = 0, 1, 2$; $j = 0, 1, 2$; $p^* = 1$ (explicitados no apêndice C), aplica-se o procedimento detalhado na sequência.

Passo 1: Inicialização.

a) Número máximo de iterações: $itmax = 1000$. Inicialização do contador: $it = 1$;

b) ponto de partida para o processo de busca do ponto extremo:

$$Pt^{(0)} = (x_{p^*}, y_{p^*}) \Rightarrow x^{(0)} = x_{p^*}; y^{(0)} = y_{p^*};$$

c) parâmetros escalares (números reais $0 < \beta < 1$, $\theta > 1$ e tolerância ε): $\beta = 10^{-1}$;

$\theta = 2$; $\varepsilon = 10^{-31}$;

d) inicialização do parâmetro de controle (norma do gradiente de $\xi_2(x, y)$) $\|\nabla\| = 1$.

Passo 2: Processo iterativo.

a) Primeira condição.

Enquanto $it \leq itmax$ e $\|\nabla\| > \varepsilon$:

b) inicialização das variáveis auxiliares $m = 0$; $k_0 = 1$; $k_1 = 2$;

c) determinação da direção (de crescimento) para a busca do próximo ponto ($Pt^{(it)}$) através do cálculo do gradiente de $\xi_2(x, y)$ e da norma l_2 correspondente;

$$d^{(it)} = \nabla = \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x}(Pt^{(it-1)}), \frac{\partial \xi_2}{\partial y}(Pt^{(it-1)}) \right), \text{ em que}$$

$$\frac{\partial \xi_2}{\partial x}(Pt^{(it-1)}) = 2\kappa_{2,2}x^{(it-1)}(y^{(it-1)})^2 + 2\kappa_{2,1}x^{(it-1)}y^{(it-1)} + 2\kappa_{2,0}x^{(it-1)} + \kappa_{1,2}(y^{(it-1)})^2 +$$

$$\kappa_{1,1}y^{(it-1)} + \kappa_{1,0};$$

$$\frac{\partial \xi_2}{\partial y}(Pt^{(it-1)}) = 2\kappa_{2,2}(x^{(it-1)})^2 y^{(it)} + \kappa_{2,1}(x^{(it-1)})^2 + 2\kappa_{1,2}x^{(it-1)} y^{(it-1)} + \kappa_{1,1}x^{(it-1)} +$$

$$2\kappa_{0,2}y^{(it-1)} + \kappa_{0,1};$$

d) segunda condição; enquanto $k_0 < k_1$;

cálculo da variável auxiliar δ , $\delta = 1/\theta^m$;

atualização de k_0 , $k_0 = \xi_2(Pt^{(it-1)}) + \beta \delta (Pt^{(it-1)} \cdot d^{(it)})$;

atualização de $Pt^{(it)}$, $Pt^{(it)} = Pt^{(it-1)} + \delta d^{(it)}$;

atualização de k_1 , $k_1 = \xi_2(Pt^{(it)})$;

e) atualização de m , $m = m + 1$;

f) atualização de it , $it = it + 1$.

Passo 3: Resultado.

Se $it < itmax$ e $\|\nabla\| \leq \varepsilon$, então $Pmax = Pt^{(it)}$.

Se $it = itmax$ e $\|\nabla\| \leq \varepsilon$, então $Pmax = Pt^{(it-1)}$.

Se $it = itmax$ e $\|\nabla\| > \varepsilon$, então não houve convergência.

Obs. em todos os casos analisados a convergência foi atingida com $it \leq 150$; de modo análogo ao desenvolvimento apresentado ($p = 2$), no presente trabalho considerou-se obtenção de pontos extremos para os polinômios interpoladores (2D) com graus $p = 3, 4$ e 6 .

APÊNDICE E - TESTES NUMÉRICOS COM CDS-2 E UDS-1.

De acordo com a teoria abordada na seção 2.2.1, neste apêndice são descritos os procedimentos adotados para a realização de testes elementares com os estimadores apresentados no capítulo 4. Com esse propósito, são considerados dois casos em que as soluções analíticas para a variável dependente e suas derivadas são conhecidas. Dessa forma, torna-se possível a comparação entre o erro numérico e a sua estimativa, através do cálculo da efetividade (θ).

Em cada caso, primeiramente são abordadas algumas deduções algébricas envolvendo a expressão analítica de Eh correspondente à solução numérica, ϕ , da variável de interesse adotada. Em seguida, considera-se o emprego de MER sobre os resultados obtidos em diversas malhas, bem como a obtenção de estimativas para Eh e Em .

Caso E1

No primeiro caso considera-se a variável secundária Λ'' , determinada pela derivada de 2ª ordem da função analítica $\Lambda = \Lambda(x)$, calculada com o emprego da aproximação numérica CDS-2 (*Central Differencing Scheme*).

Com base na série de Taylor, para a variável dependente Λ , é possível se obter a seguinte expressão analítica para Λ'' no ponto nodal j , denotada por Λ_j^{ii} :

$$\Lambda_j^{ii} = \frac{\Lambda_{j-1} - 2\Lambda_j + \Lambda_{j+1}}{h^2} - \frac{\Lambda_j^{iv}}{12}h^2 - \frac{\Lambda_j^{vi}}{360}h^4 - \frac{\Lambda_j^{viii}}{20160}h^6 - \frac{\Lambda_j^x}{1814400}h^8 - \frac{\Lambda_j^{xii}}{239500800}h^{10} - \frac{\Lambda_j^{xiv}}{43589145600}h^{12} - \dots, \quad (\text{E.1})$$

onde h corresponde ao espaçamento entre os pontos nodais; e Λ_j^{iv} , Λ_j^{vi} , Λ_j^{viii} , Λ_j^x , Λ_j^{xii} e Λ_j^{xiv} , são, respectivamente, as derivadas de 4ª, 6ª, 8ª, 10ª, 12ª e 14ª ordens da variável dependente Λ avaliadas no ponto nodal j .

A Eq. (E.1) pode ser representada como

$$\Lambda_j^{ii} = (\lambda_{CDS}^{ii})_j + Eh(\lambda_{CDS}^{ii})_j. \quad (\text{E.2})$$

Tem-se, então, a aproximação numérica para a derivada de segunda ordem considerando-se o esquema CDS-2 e o seu Eh correspondente, ou seja,

$$\left(\lambda_{CDS}^{ii}\right)_j = \frac{\Lambda_{j-1} - 2\Lambda_j + \Lambda_{j+1}}{h^2}, \quad (E.3)$$

$$Eh\left(\lambda_{CDS}^{ii}\right)_j = -\frac{\Lambda_j^{iv}}{12}h^2 - \frac{\Lambda_j^{vi}}{360}h^4 - \frac{\Lambda_j^{viii}}{20160}h^6 - \frac{\Lambda_j^x}{1814400}h^8 - \frac{\Lambda_j^{xii}}{239500800}h^{10} - \frac{\Lambda_j^{xiv}}{43589145600}h^{12} - \dots \quad (E.4)$$

De acordo com as definições apresentadas na seção 2.1.5, a Eq. (E.4) resulta em:

$$c_0 = -\frac{\Lambda_j^{iv}}{12}, c_1 = -\frac{\Lambda_j^{vi}}{360}, c_2 = -\frac{\Lambda_j^{viii}}{20160}, c_3 = -\frac{\Lambda_j^x}{1814400}, c_4 = -\frac{\Lambda_j^{xii}}{239500800}, \quad (E.5)$$

$$c_5 = -\frac{\Lambda_j^{xiv}}{43589145600}, \dots;$$

$$p_0 = 2, p_1 = 4, p_2 = 6, p_3 = 8, p_4 = 10, p_5 = 12, \dots; p_V = \{2, 4, 6, 8, 10, 12, \dots\}. \quad (E.6)$$

Com esse contexto, considera-se o caso específico (exemplo) para Eh associado a $\phi = \lambda_{CDS}^{ii}$, a partir da solução analítica para a variável dependente Λ , determinada pela função

$$\Lambda = x^{14}, \quad (E.7)$$

cujas derivadas são dadas por: $\Lambda^i = 14x^{13}$; $\Lambda^{ii} = 182x^{12}$; $\Lambda^{iii} = 2184x^{11}$; $\Lambda^{iv} = 24024x^{10}$;

$\Lambda^v = 240240x^9$; $\Lambda^{vi} = 2162160x^8$; $\Lambda^{vii} = 17297280x^7$; $\Lambda^{viii} = 121080960x^6$;

$\Lambda^{ix} = 726485760x^5$; $\Lambda^x = 3632428800x^4$; $\Lambda^{xi} = 14529715200x^3$; $\Lambda^{xii} = 43589145600x^2$;

$\Lambda^{xiii} = 87178291200x$; $\Lambda^{xiv} = 87178291200$; $\Lambda^{xv} = \Lambda^{xvi} = \dots = 0$.

Então, nesse caso a Eq. (E.4) se torna

$$Eh(\lambda_{CDS}^i)_j = -2002x_j^{10}h^2 - 6006x_j^8h^4 - 6006x_j^6h^6 - 2002x_j^4h^8 - 182x_j^2h^{10} - 2h^{12}, \quad (E.8)$$

e, portanto, $c_0 = -2002x_j^{10}$, $c_1 = -6006x_j^8$, $c_2 = -6006x_j^6$, $c_3 = -2002x_j^4$, $c_4 = -182x_j^2$, $c_5 = -2$, $c_6 = c_7 = \dots = 0$; $p_0 = 2$, $p_1 = 4$, $p_2 = 6$, $p_3 = 8$, $p_4 = 10$, $p_5 = 12$; isto é, $p_V = \{2, 4, 6, 8, 10, 12\}$.

Com isso, a relação entre a aproximação numérica e a solução analítica para variável de interesse considerada pode ser representada por

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{CDS}^i)_j - (2002x_j^{10}h^2 + 6006x_j^8h^4 + 6006x_j^6h^6 + 2002x_j^4h^8 + 182x_j^2h^{10} + 2h^{12});$$

$$(\lambda_{CDS}^i)_j = \Lambda_j^i + 2002x_j^{10}h^2 + 6006x_j^8h^4 + 6006x_j^6h^6 + 2002x_j^4h^8 + 182x_j^2h^{10} + 2h^{12}. \quad (E.9)$$

A solução analítica para a variável de interesse, $\phi = (\lambda_{CDS}^i)_j$, é dada por: $\Lambda^i = 182x^{12}$, com x sendo um número real qualquer pertencente ao domínio de Λ ; o que torna possível a determinação de Eh . Tomando-se, então, o ponto nodal $x_j = 1/2$, obtêm-se a solução analítica

$$\Phi = \Lambda_j^i = 182/4096 = 0,04443359375. \quad (E.10)$$

A solução numérica pode ser expressa analiticamente considerando-se as Eqs. (E.3) e (E.7), com $x_{j+1} = x_j + h$ e $x_{j-1} = x_j - h$, isto é,

$$(\lambda_{CDS}^i)_j = \frac{\Lambda_{j-1} - 2\Lambda_j + \Lambda_{j+1}}{h^2} = \frac{(x_j - h)^{14} - 2x_j^{14} + (x_j + h)^{14}}{h^2} \Leftrightarrow$$

$$(\lambda_{CDS}^i)_j = 182x_j^{12} + 2002x_j^{10}h^2 + 6006x_j^8h^4 + 6006x_j^6h^6 + 2002x_j^4h^8 + 182x_j^2h^{10} + 2h^{12}. \quad (E.11)$$

Assim, para $x_j = 1/2$,

$$\begin{aligned} (\lambda_{CDS}^{ii})_j = & 91/2048 + (1001/512)h^2 + (3003/128)h^4 + (3003/32)h^6 + \\ & (1001/8)h^8 + (91/2)h^{10} + 2h^{12}, \end{aligned} \quad (E.12)$$

$$\begin{aligned} Eh(\lambda_{CDS}^{ii})_j = & -(1001/512)h^2 - (3003/128)h^4 - (3003/32)h^6 - \\ & (1001/8)h^8 - (91/2)h^{10} - 2h^{12}. \end{aligned} \quad (E.13)$$

Na Tab. E.1 e na Fig. E.1 são apresentados os resultados numéricos obtidos (com a variação de h) para a variável de interesse considerada, o Eh correspondente, bem como a sua estimativa calculada com o estimador U_{mc} (seção 4.6).

Tabela E.1: Resultados para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$, Eh e U_{mc} em $x_j = 1/2$.

h	ϕ	Eh	U_{mc}	U_{mc} / Eh
5,0000E-01	3,999512E+00	-3,955078E+00		
2,5000E-01	2,831341E-01	-2,387005E-01	-1,238793E+00	5,189736E+00
1,2500E-01	8,107494E-02	-3,664135E-02	-2,727698E-03	7,444317E-02
6,2500E-02	5,243423E-02	-8,000632E-03	-8,134537E-03	1,016737E+00
3,1250E-02	4,636531E-02	-1,931718E-03	-1,931675E-03	9,999777E-01
1,5625E-02	4,491231E-02	-4,787137E-04	-4,787137E-04	1,000000E+00
7,8125E-03	4,455301E-02	-1,194159E-04	-1,194159E-04	1,000000E+00
3,9062E-03	4,446343E-02	-2,983759E-05	-2,983759E-05	1,000000E+00
1,9531E-03	4,444105E-02	-7,458373E-06	-7,458373E-06	1,000000E+00
9,7656E-04	4,443546E-02	-1,864529E-06	-1,864529E-06	1,000000E+00
4,8828E-04	4,443406E-02	-4,661283E-07	-4,661283E-07	1,000000E+00
2,4414E-04	4,443371E-02	-1,165318E-07	-1,165318E-07	1,000000E+00
1,2207E-04	4,443362E-02	-2,913294E-08	-2,913294E-08	1,000000E+00
6,1035E-05	4,443360E-02	-7,283234E-09	-7,283234E-09	1,000000E+00
3,0518E-05	4,443360E-02	-1,820808E-09	-1,820808E-09	1,000000E+00
1,5259E-05	4,443359E-02	-4,552021E-10	-4,552021E-10	1,000000E+00
7,6294E-06	4,443359E-02	-1,138005E-10	-1,138005E-10	1,000000E+00
3,8147E-06	4,443359E-02	-2,845013E-11	-2,845013E-11	1,000000E+00
1,9073E-06	4,443359E-02	-7,112533E-12	-7,112533E-12	1,000000E+00
9,5367E-07	4,443359E-02	-1,778133E-12	-1,778133E-12	1,000000E+00

A expressão obtida para Eh (Eq. E.13) possui seis termos, portanto o emprego de MER com $m = 6$ (seis níveis de extrapolação), nesse caso, deve propiciar $Em \cong 0$, ou seja, um erro numérico com nível de erro de máquina. Realmente, esse efeito pode ser verificado através dos resultados numéricos obtidos para Em , apresentados na Tab. E.2 e na Fig. E.2; onde pode-se, também, verificar o desempenho significativo de MER sobre a redução da magnitude de Eh e a elevação da sua ordem de acurácia (Tab. E2, Figs. E.2 e E.3). Sendo que, na Tab. E.2, $(p_{E,M})_g$ $(p_{U,M})_g$ são calculados para Em . Outro aspecto importante a ser observado nessa tabela diz respeito à aplicação do critério associado ao emprego efetivo de MER ($|\psi| > 1$), apresentado na seção 4.4.1, ou seja, do ponto de vista prático MER deveria ser empregado somente até a malha com $h = 0,0039062$. Nesse contexto, para valores

menores de h e mais níveis de extrapolação, os efeitos E_π são prejudiciais à redução da magnitude de Em .

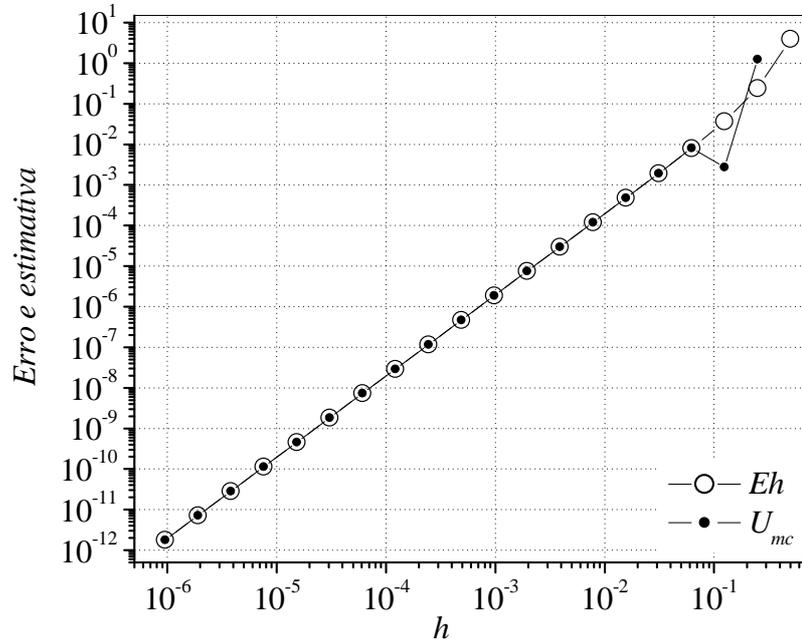


Figura E.1: Eh e U_{mc} para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$ em $x_j = 1/2$.

Tabela E.2: Erro de discretização, ordem e razão de convergência para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$ com o emprego de MER, em $x_j = 1/2$.

h	Em	$Em2$	$(p_{E,M})_g$	$(p_{U,M})_g$	ψ
5,0000E-01					
2,5000E-01	1,000092E+00		1,983573E+00		
1,2500E-01	-3,391365E-02	3,071170E-02	4,882123E+00	2,260690E+00	4,792208E+00
6,2500E-02	1,339048E-04	-3,980883E-04	7,984515E+00	4,924549E+00	3,036945E+01
3,1250E-02	-4,299545E-08	4,802380E-07	1,160474E+01	7,989737E+00	2,541853E+02
1,5625E-02	4,547474E-13	-4,153344E-11	1,652876E+01	1,160518E+01	3,115361E+03
7,8125E-03	-7,824090E-35	1,110223E-16	7,229956E+01	1,652877E+01	9,454900E+04
3,9062E-03	-4,814825E-35	-4,814825E-35	7,004397E-01	7,367807E+01	1,511157E+22
1,9531E-03	8,425944E-35	8,425944E-35	-8,073549E-01	-2,137504E+00	2,272727E-01
9,7656E-04	-6,018531E-36	-6,018531E-36	3,807355E+00	5,525410E-01	1,466667E+00
4,8828E-04	5,088066E-32	5,088066E-32	-1,304542E+01	-9,138698E+00	1,774098E-03
2,4414E-04	-1,694216E-32	-1,694216E-32	1,586499E+00	-4,144828E-01	7,502884E-01
1,2207E-04	-2,046722E-31	-2,046722E-31	-3,594625E+00	-1,468817E+00	3,612785E-01
6,1035E-05	1,036210E-31	1,036210E-31	9,819980E-01	-7,156439E-01	6,089333E-01
3,0518E-05	-1,611161E-32	-1,611161E-32	2,685145E+00	1,364487E+00	2,574847E+00
1,5259E-05	-3,952608E-29	-3,952608E-29	-1,126049E+01	-8,366256E+00	3,030442E-03
7,6294E-06	4,005494E-29	4,005494E-29	-1,917531E-02	-1,010208E+00	4,964748E-01
3,8147E-06	-9,418165E-30	-9,418165E-30	2,088462E+00	6,857800E-01	1,608571E+00
1,9073E-06	4,779015E-31	4,779015E-31	4,300661E+00	2,321718E+00	4,999270E+00
9,5367E-07	-9,385618E-27	-9,385618E-27	-1,426145E+01	-9,889454E+00	1,054333E-03

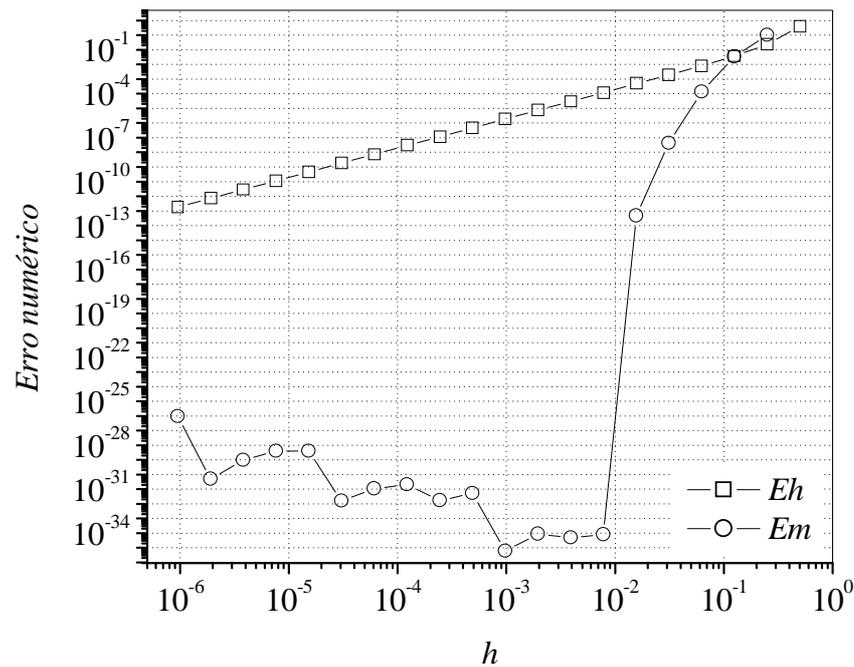


Figura E.2: Eh e Em para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$, em $x_j = 1/2$.

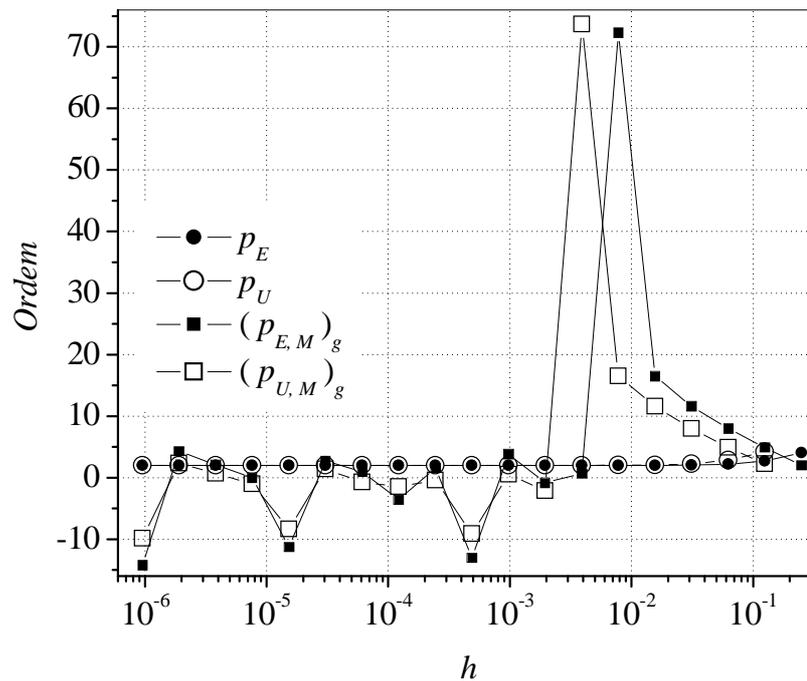


Figura E.3: Ordens efetiva e aparente para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$, em $x_j = 1/2$, com e sem o emprego de MER.

Na sequência, através do cálculo da efetividade ($\theta = E/U$) (Tab. E.3) e da representação gráfica para o erro numérico e sua estimativa associada (Fig. E.4), são apresentados os resultados obtidos com os estimadores U_Δ , U_{pm} , U_{pmc} , U_ψ e U_{ψ^*} ,

considerando-se as soluções numéricas obtidas com o emprego de MER. Nessa situação, embora o interesse principal esteja concentrado nas estimativas para o erro numérico obtidas com $m = 1, \dots, 6$ ($m > 6 \Rightarrow Em \cong 0$), o cálculo de Em e dos estimadores U_{Δ} , U_{pm} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{ψ^*} é considerado até $m = 19$ (20 malhas) e $h \approx 10^{-6}$, com o objetivo de se avaliar os efeitos de E_{π} . Entretanto, para se estimar Em com $m \leq 6$, observa-se que U_{pmc} e U_{ψ^*} apresentam níveis de acurácia mais significativos do que os demais estimadores analisados.

Tabela E.3: Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pm} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{ψ^*} , para $\phi = (\lambda_{CDs}^i)_j$, em $x_j = 1/2$.

h	U_{Δ} / Em	U_{pm} / Em^2	U_{pmc} / Em	U_{ψ} / Em	U_{ψ^*} / Em	U_{GCI} / Em
5,0000E-01						
2,5000E-01	3,716036E+00		1,033911E+00		8,554103E-01	3,427181E+00
1,2500E-01	2,858378E+01	2,104258E+00	1,003948E+00	5,263859E+00	9,719444E-01	6,579824E+00
6,2500E-02	2,502940E+02	1,336370E+00	1,000321E+00	8,105558E+00	9,964011E-01	1,013195E+01
3,1250E-02	3,103224E+03	1,089529E+00	1,000011E+00	1,220836E+01	9,996897E-01	1,526045E+01
1,5625E-02	9,445667E+04	1,010949E+00	1,000000E+00	3,033955E+01	9,999894E-01	1,155291E+02
7,8125E-03	5,810724E+21	1,000000E+00	3,846389E-01	6,147164E+16	3,846154E-01	1,774159E+18
3,9062E-03	6,250000E-01	3,814930E-05	2,750042E+00	-4,135903E-23		4,768663E-05
1,9531E-03	1,571429E+00	-2,397846E-05	1,071433E+00		6,370656E-01	2,542017E+00
9,7656E-04	1,500000E+01	-5,722068E-05	8,455008E+03	6,081081E+00		7,601351E+00
4,8828E-04	1,000118E+00	-9,537880E-07	1,332979E+00			1,247934E+00
2,4414E-04	4,003197E+00	-9,544368E-07	-1,108064E+01			2,858955E+00
1,2207E-04	9,172229E-01	-5,467075E-08	1,506278E+00			1,795037E+00
6,1035E-05	2,975199E+00	-4,433392E-08	1,155486E+00		8,322592E-01	2,311468E+00
3,0518E-05	7,431453E+00	-2,768432E-08	-2,452267E+03	2,078817E+00		2,598522E+00
1,5259E-05	9,995924E-01	-9,309430E-10	2,013380E+00			1,253288E+00
7,6294E-06	1,986797E+00	-4,625871E-10	1,235131E+00		7,616417E-01	1,659564E+00
3,8147E-06	5,252946E+00	-3,057617E-10	1,050743E+00	2,013725E+00	8,755975E-01	2,517156E+00
1,9073E-06	2,070734E+01	-3,013314E-10	1,964023E+04	3,451642E+00		4,314553E+00
9,5367E-07	1,000051E+00	-3,638164E-12				1,248747E+00

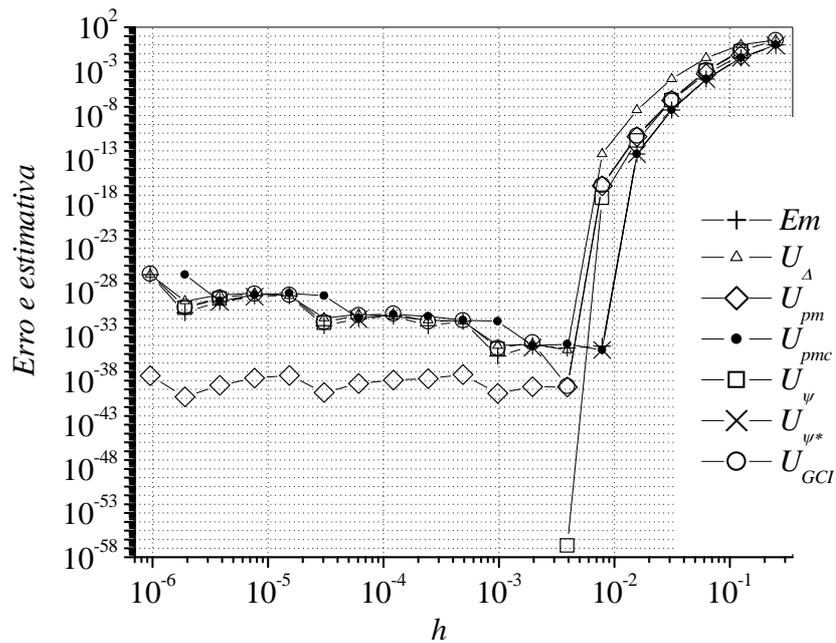


Figura E.4: Em e estimadores U_{Δ} , U_{pm} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{ψ^*} , para $\phi = (\lambda_{CDS}^{ii})_j$ em $x_j = 1/2$.

Caso E2

Nesse caso considera-se a variável secundária Λ' , determinada pela derivada de 1ª ordem da função analítica $\Lambda = \Lambda(x)$, sendo calculada com o emprego da aproximação numérica UDS-1 (*Upwind Differencing Scheme*). Então, com base na série de Taylor, para a variável dependente Λ , é possível se obter a seguinte expressão analítica para Λ' no ponto nodal j , representada por Λ_j^i :

$$\begin{aligned} \Lambda_j^i = & \frac{\Lambda_j - \Lambda_{j-1}}{h} + \frac{\Lambda_j^{ii}}{2} h - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6} h^2 + \frac{\Lambda_j^{iv}}{24} h^3 - \frac{\Lambda_j^v}{120} h^4 + \frac{\Lambda_j^{vi}}{720} h^5 - \frac{\Lambda_j^{vii}}{45040} h^6 \\ & + \frac{\Lambda_j^{viii}}{40320} h^7 - \dots, \end{aligned} \quad (\text{E.14})$$

em que h , Λ_j^{ii} , Λ_j^{iii} , Λ_j^{iv} , Λ_j^v , Λ_j^{vi} , Λ_j^{vii} e Λ_j^{viii} seguem as definições apresentadas anteriormente.

A Eq. (E.14) pode ser representada por

$$\Lambda_j^i = (\lambda_{UDS}^i)_j + Eh(\lambda_{UDS}^i)_j. \quad (E.15)$$

Tem-se, então, a aproximação numérica para derivada de primeira ordem considerando-se o esquema UDS-1 e o seu erro respectivo Eh ,

$$(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{\Lambda_j - \Lambda_{j-1}}{h}, \quad (E.16)$$

$$Eh(\lambda_{UDS}^i)_j = \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}h - \frac{\Lambda_j^{iii}}{6}h^2 + \frac{\Lambda_j^{iv}}{24}h^3 - \frac{\Lambda_j^v}{120}h^4 + \frac{\Lambda_j^{vi}}{720}h^5 - \frac{\Lambda_j^{vii}}{5040}h^6 + \frac{\Lambda_j^{viii}}{40320}h^7 - \dots \quad (E.17)$$

A partir da Eq. (E.17) e considerando-se a definição de Eh , obtêm-se

$$c_0 = \frac{\Lambda_j^{ii}}{2}, c_1 = -\frac{\Lambda_j^{iii}}{6}, c_2 = \frac{\Lambda_j^{iv}}{24}, c_3 = -\frac{\Lambda_j^v}{120}, c_4 = \frac{\Lambda_j^{vi}}{720}, c_5 = -\frac{\Lambda_j^{vii}}{5040}, c_6 = \frac{\Lambda_j^{viii}}{40320}, \dots; \quad (E.18)$$

$$p_V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots\}. \quad (E.19)$$

Com base nesses resultados (assim como no caso anterior) investiga-se a especificidade do Eh associado à variável de interesse adotada, isto é, analisa-se $Eh(\lambda_{UDS}^i)_j$ considerando-se a proposição de solução analítica para variável dependente primária (Λ); e nesse sentido define-se (o exemplo)

$$\Lambda = x^7, \quad (E.20)$$

em que as suas derivadas são determinadas por: $\Lambda^i = 7x^6$; $\Lambda^{ii} = 42x^5$; $\Lambda^{iii} = 210x^4$; $\Lambda^{iv} = 840x^3$; $\Lambda^v = 2520x^2$; $\Lambda^{vi} = 5040x$; $\Lambda^{vii} = 5040$; $\Lambda^{viii} = \Lambda^{ix} = \dots = 0$. Então, substituindo-se essas expressões na Eq. (E.17) obtém-se

$$Eh(\lambda_{UDS}^i)_j = 21x_j^5h - 35x_j^4h^2 + 35x_j^3h^3 - 21x_j^2h^4 + 7x_jh^5 - h^6, \quad (E.21)$$

ou ainda, $c_0 = 21x_j^5$, $c_1 = -35x_j^4$, $c_2 = 35x_j^3$, $c_3 = -21x_j^2$, $c_4 = 7x_j$, $c_5 = -1$, $c_6 = c_7 = \dots = 0$ na Eq. (E.18), e $p_V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Com isso, a relação entre a aproximação numérica e a solução analítica para variável de interesse considerada pode ser representada por

$$\phi = (\lambda_{UDS}^i)_j = \Lambda_j^i - (21x_j^5 h - 35x_j^4 h^2 + 35x_j^3 h^3 - 21x_j^2 h^4 + 7x_j h^5 - h^6). \quad (E.22)$$

Nesse caso $\Phi = \Lambda^i = 7x^6$, com x sendo um número real qualquer pertencente ao domínio de Λ . Ao se considerar o ponto nodal $x_j = 1/2$ obtém-se $\Lambda_j^i = 7/64 = 0,109375$. E, a solução numérica pode ser expressa analiticamente substituindo-se o resultado da Eq. (E.20) na Eq. (E.16), com $x_{j-1} = x_j - h$, isto é,

$$\begin{aligned} (\lambda_{UDS}^i)_j &= \frac{\Lambda_j - \Lambda_{j-1}}{h} = \frac{x_j^7 - (x_j - h)^7}{h} \\ &= 7x_j^6 - 21x_j^5 h + 35x_j^4 h^2 - 35x_j^3 h^3 + 21x_j^2 h^4 - 7x_j h^5 + h^6. \end{aligned} \quad (E.23)$$

Assim, para $x_j = 1/2$

$$(\lambda_{UDS}^i)_j = 7/64 - (21/32)h + (35/16)h^2 - (35/8)h^3 + (21/4)h^4 - (7/2)h^5 + h^6. \quad (E.24)$$

Na Tab. E.4 e na Fig. E.5 são apresentados os resultados numéricos obtidos para a variável de interesse considerada, o seu Eh correspondente, e a sua estimativa calculada com o estimador U_{mc} .

Analogamente ao primeiro caso, na Eq. (E.21) Eh possui uma expressão analítica com seis termos, assim, teoricamente o emprego de MER com $m = 6$ deve acarretar em $Em \cong 0$. Na Tab. E.5 e na Fig. E.6 são apresentados os resultados numéricos obtidos para Em , que corroboram essa afirmação.

Tabela E.4: Resultados para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)$, Eh e U_{mc} em $x_j = 1/2$.

h	ϕ	Eh	U_{mc}	U_{mc} / Eh
5,0000E-01	1,562500E-02	9,375000E-02		
2,5000E-01	3,100586E-02	7,836914E-02	1,538086E-02	1,962617E-01
1,2500E-01	5,415726E-02	5,521774E-02	3,345871E-02	6,059413E-01
6,2500E-02	7,591301E-02	3,346199E-02	3,094810E-02	9,248734E-01
3,1250E-02	9,087481E-02	1,850019E-02	1,842295E-02	9,958245E-01
1,5625E-02	9,963877E-02	9,736228E-03	9,735751E-03	9,999510E-01
7,8125E-03	1,043795E-01	4,995505E-03	4,995505E-03	1,000000E+00
3,9062E-03	1,068446E-01	2,530358E-03	2,530358E-03	1,000000E+00
1,9531E-03	1,081016E-01	1,273426E-03	1,273426E-03	1,000000E+00
9,7656E-04	1,087362E-01	6,387870E-04	6,387870E-04	1,000000E+00
4,8828E-04	1,090551E-01	3,199135E-04	3,199135E-04	1,000000E+00
2,4414E-04	1,092149E-01	1,600870E-04	1,600870E-04	1,000000E+00
1,2207E-04	1,092949E-01	8,007605E-05	8,007605E-05	1,000000E+00
6,1035E-05	1,093350E-01	4,004617E-05	4,004617E-05	1,000000E+00
3,0518E-05	1,093550E-01	2,002512E-05	2,002512E-05	1,000000E+00
1,5259E-05	1,093650E-01	1,001307E-05	1,001307E-05	1,000000E+00
7,6294E-06	1,093700E-01	5,006663E-06	5,006663E-06	1,000000E+00
3,8147E-06	1,093725E-01	2,503363E-06	2,503363E-06	1,000000E+00
1,9073E-06	1,093737E-01	1,251690E-06	1,251690E-06	1,000000E+00
9,5367E-07	1,093744E-01	6,258468E-07	6,258468E-07	1,000000E+00

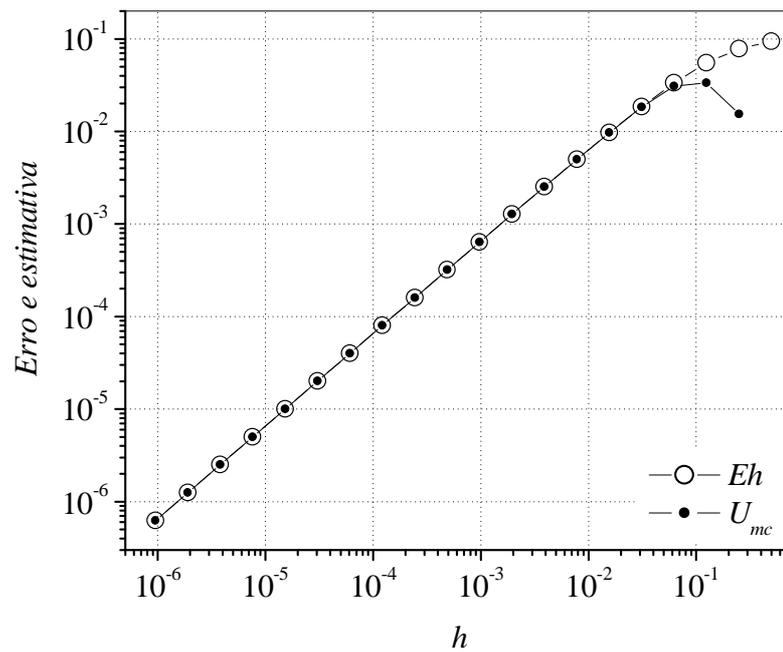


Figura E.5: Eh e U_{mc} para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)$ em $x_j = 1/2$.

Tabela E.5: Erro de discretização, ordem e razão de convergência para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)$ com o emprego de MER, em $x_j = 1/2$.

h	Em	$Em2$	$(p_{E,M})_g$	$(p_{U,M})_g$	ψ
5,0000E-01					
2,5000E-01	6,298828E-02		5,737352E-01		
1,2500E-01	2,175903E-02	3,206635E-02	1,533469E+00	4,225320E-01	1,340278E+00
6,2500E-02	2,513885E-03	4,919529E-03	3,113624E+00	1,099173E+00	2,142319E+00
3,1250E-02	7,724762E-05	2,295375E-04	5,024285E+00	2,981531E+00	7,898239E+00
1,5625E-02	4,768372E-07	2,875924E-06	7,339850E+00	4,988191E+00	3,173913E+01
7,8125E-03	1,239817E-33	7,450581E-09	8,831350E+01	7,330917E+00	1,610000E+02
3,9062E-03	-5,296307E-34	-5,175937E-34	1,227069E+00	8,780033E+01	2,694835E+26
1,9531E-03	8,907426E-34	8,907426E-34	-7,500217E-01	3,170293E-01	1,245763E+00
9,7656E-04	6,018531E-35	6,018531E-35	3,887525E+00	7,741186E-01	1,710145E+00
4,8828E-04	-2,371301E-33	-2,371301E-33	-5,300124E+00	-1,549687E+00	3,415842E-01
2,4414E-04	3,731489E-34	3,731489E-34	2,667856E+00	-1,746785E-01	8,859649E-01
1,2207E-04	2,443524E-33	2,443524E-33	-2,711140E+00	4,066253E-01	1,325581E+00
6,1035E-05	-3,189821E-33	-3,189821E-33	-3,845126E-01	-1,444100E+00	3,675214E-01
3,0518E-05	2,876858E-33	2,876858E-33	1,489817E-01	-1,069152E-01	9,285714E-01
1,5259E-05	-2,575931E-33	-2,575931E-33	1,593998E-01	1,539127E-01	1,112583E+00
7,6294E-06	5,657419E-34	5,657419E-34	2,186878E+00	7,954612E-01	1,735632E+00
3,8147E-06	1,092965E-32	1,092965E-32	-4,271960E+00	-1,721963E+00	3,031359E-01
1,9073E-06	-8,895389E-33	-8,895389E-33	2,971179E-01	-9,357554E-01	5,227687E-01
9,5367E-07	-1,364245E-30	-1,364245E-30	-7,260829E+00	-6,095197E+00	1,462726E-02

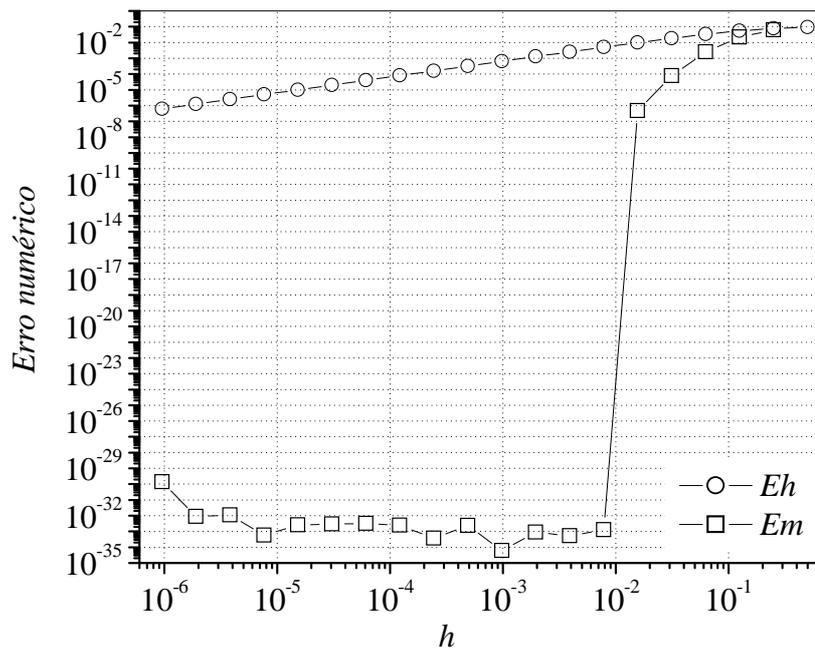


Figura E.6: Eh e Em para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)$, em $x_j = 1/2$.

Nota-se na Tab. E.5 e na Fig. E.7 que até o alcance do nível de erro de máquina com Em (em precisão quádrupla) $(p_{E,M})_g$ e $(p_{U,M})_g$ (ordem de acurácia prática calculada para Em) apresentaram um comportamento progressivo, relativamente compatível com o comportamento de p_V (ordem de acurácia teórica). Observa-se, também, na Tab. E.5 que

$|\psi| \leq 1$ na malha com $h = 0,00048828$ e, a magnitude de Em correspondente à malha imediatamente anterior (mais grossa) diz respeito à solução numérica com o melhor nível de acurácia obtido com o emprego de MER. Novamente, o critério associado ao emprego efetivo de MER ($|\psi| > 1$), apresentado na seção 4.4.1 é confirmado.

Na Tab. E.6 e na Fig. E.8 são apresentados os resultados obtidos com os estimadores U_Δ , U_{pm} , U_{pmc} , U_ψ e U_{ψ^*} . Dentre esses, ao se considerar $m \leq 6$, U_{pmc} e U_{ψ^*} apresentaram os resultados mais acurados. Assim como no primeiro caso, o cálculo de Em e dos estimadores analisados é considerado até $m = 19$ (20 malhas) e $h \approx 10^{-6}$, com o intuito de se avaliar os efeitos de E_π sob as soluções numéricas obtidas com o emprego de MER.

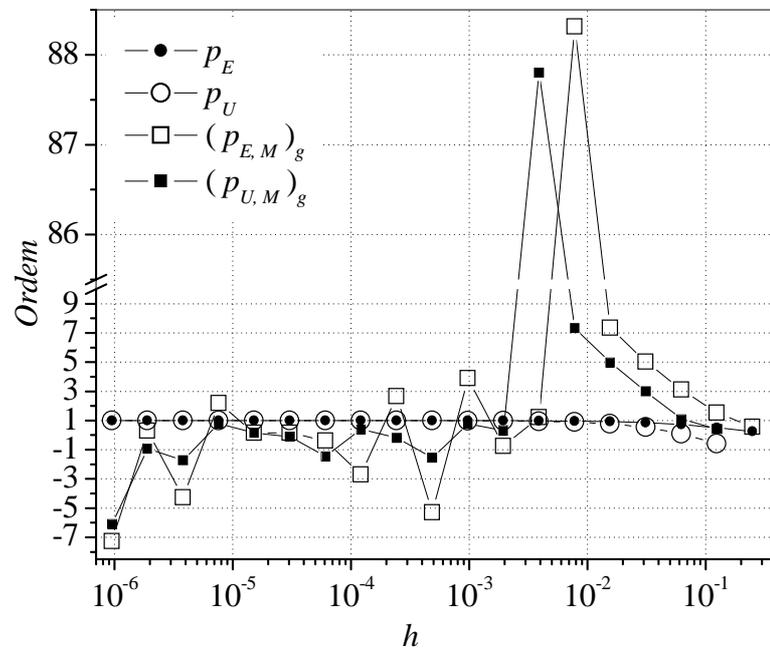


Figura E.7: Ordens efetiva e aparente para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)$, em $x_j = 1/2$, com e sem o emprego de MER.

Tabela E.6: Efetividade dos estimadores U_{Δ} , U_{pm} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{ψ^*} , para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)$, em $x_j = 1/2$.

h	U_{Δ} / Em	U_{pm} / Em	U_{pmc} / Em	U_{ψ} / Em	U_{ψ^*} / Em	U_{GCI} / Em
5,0000E-01						
2,5000E-01	2,441860E-01		6,545543E-01		1,435216E+00	1,240623E+00
1,2500E-01	1,421108E+00	3,214371E-01	8,844670E-01	5,568423E+00	1,658740E+00	9,329042E+00
6,2500E-02	6,698596E+00	4,889987E-01	9,692716E-01	6,701751E+00	1,109782E+00	8,377189E+00
3,1250E-02	2,957176E+01	6,634640E-01	9,938272E-01	4,572647E+00	1,026158E+00	5,715809E+00
1,5625E-02	1,559688E+02	8,341969E-01	1,000000E+00	5,237624E+00	1,006250E+00	6,547030E+00
7,8125E-03	3,785933E+26	1,000000E+00	1,428637E+00	2,403767E+24	1,427184E+00	7,631007E+24
3,9062E-03	3,318182E+00	-2,673503E-02	2,692335E+00	-1,239745E-06		3,288296E-02
1,9531E-03	1,594595E+00	-6,253312E-03	9,342572E-01		5,883798E-01	8,875574E-01
9,7656E-04	1,380000E+01	2,700587E-02	4,043949E+01	-5,091979E+00		6,364973E+00
4,8828E-04	1,025381E+00	-1,002327E-03	1,157926E+00			1,946681E+00
2,4414E-04	7,354839E+00	-3,592984E-03	-5,549742E+00			4,874719E+00
1,2207E-04	8,472906E-01	-2,069086E-04	2,305700E+00			3,252991E+00
6,1035E-05	1,766038E+00	-2,156071E-04	1,902003E+00		0,000000E+00	1,614269E+00
3,0518E-05	2,108787E+00	-1,287180E-04	1,895455E+00	0,000000E+00		1,366806E+00
1,5259E-05	2,116822E+00	-6,460227E-05	1,219645E+00			1,252509E+00
7,6294E-06	5,553191E+00	-8,473627E-05	-1,831929E+01		0,000000E+00	2,537435E+00
3,8147E-06	9,482379E-01	-7,234536E-06	1,813884E+00	0,000000E+00	0,000000E+00	1,700902E+00
1,9073E-06	2,228687E+00	-8,501800E-06	-1,523656E+02	0,000000E+00		1,829470E+00
9,5367E-07	9,934796E-01	-1,894916E-06				1,260284E+00

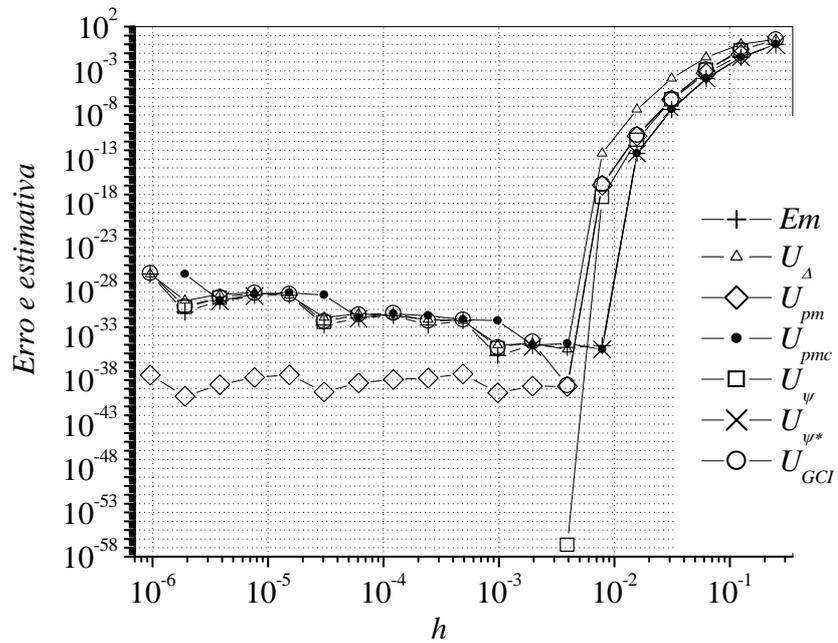


Figura E.8: Em e estimadores U_{Δ} , U_{pm} , U_{pmc} , U_{ψ} e U_{ψ^*} , para $\phi = (\lambda_{UDS}^i)$ em $x_j = 1/2$.

APÊNDICE F - DETERMINAÇÃO DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE DO CASO 3: BURGERS 2D

De acordo com a explanação apresentada nas seções 5.1.3 e 5.2.3, neste apêndice são descritos os procedimentos analíticos e numéricos adotados para a determinação das variáveis de interesse consideradas no caso 3 – Burgers 2D – e listadas na Tab. 5.1.

Nesse caso foram consideradas 23 variáveis de interesse, sendo essas tipicamente variáveis secundárias, ou seja, calculadas a partir dos valores obtidos para u e v (variáveis primárias); e, portanto, as suas soluções numéricas dependem dos valores nodais $u_{i,j}$ e $v_{i,j}$, com $i = 1, \dots, M$ e $j = 1, \dots, M$, obtidos em malhas uniformes (Ω^h) $M \times M$, de acordo com as definições:

(1) uc , componente na direção horizontal do vetor velocidade no centro do domínio; cuja solução analítica é obtida pela substituição de valores na Eq. (5.18), isto é,

$$uc = u(1/2, 1/2) = 8[(1/2)^4 - 2(1/2)^3 + (1/2)^2][4(1/2)^3 - 2(1/2)],$$

$$uc = u(1/2, 1/2) = -1/4;$$

e com a solução numérica calculada pela média aritmética das soluções (numéricas) encontradas para u , obtidas nos quatro nós centrais,

$$uc = (1/4) \left(\sum_{j=M/2-1}^{M/2} \sum_{i=M/2-1}^{M/2} u_{i,j} \right);$$

(2) vc , componente na direção vertical do vetor velocidade no centro do domínio; em que a solução analítica é obtida pela substituição de valores na Eq. (5.19), ou seja,

$$vc = v(1/2, 1/2) = -8[4(1/2)^3 - 6(1/2)^2 + 2(1/2)][(1/2)^4 - (1/2)^2],$$

$$vc = v(1/2, 1/2) = 0;$$

e a sua solução numérica é calculada através da média aritmética das soluções (numéricas) para v , nos quatro nós centrais,

$$vc = (1/4) \left(\sum_{j=N/2-1}^{M/2} \sum_{i=N/2-1}^{M/2} v_{i,j} \right);$$

(3) fm , fluxo de massa que escoia entre $x = 0$ e $1/2$ na linha $y = 1/2$; com a solução analítica determinada por

$$fm = \int_0^{1/2} \rho v_{y=1/2} z dx \quad (\rho = 1, z = 1),$$

$$fm = \int_0^{1/2} v(x, y = 1/2) dx,$$

$$fm = \int_0^{1/2} [-8(4x^3 - 6x^2 + 2x)((1/2)^4 - (1/2)^2)] dx,$$

$$fm = \frac{3}{2} (x^4 - 2x^3 + x^2) \Big|_0^{1/2} = \frac{3}{32};$$

e com a solução numérica calculada pela integral retângulo (BURDEN e FAIRES, 2008)

$$fm = z\rho h \sum_{i=1}^{M/2} v_{n,i,y=1/2} = h \sum_{i=1}^{M/2} v_{n,i,y=1/2},$$

em que v_n corresponde à velocidade v na face norte de cada volume de controle, calculada pela média aritmética entre os valores nodais (P e N), ou seja, $v_n = (v_P + v_N)/2$, e P referencia o nó (genérico) situado na linha (imediatamente) abaixo de $y = 1/2$ a uma distância $h/2$ (metade do espaçamento entre os nós) e, N refere-se ao nó situado na linha imediatamente acima de $y = 1/2$, a uma distância $h/2$; nesse cálculo os volumes fictícios são desconsiderados;

(4) F_s , força de arrasto viscoso que a parede inferior da cavidade exerce sobre o fluido, cuja solução analítica é dada por

$$F_s = \int_0^1 \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0} z dx \quad (\mu = 1, z = 1),$$

$$F_s = \int_0^1 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(12y^2 - 2) \Big|_{y=0} dx,$$

$$Fs = \int_0^1 -16(x^4 - 2x^3 + x^2) dx,$$

$$Fs = -16(x^5/5 - x^4/2 + x^3/3) \Big|_0^1 = -8/15,$$

e com a solução numérica calculada através da integral retângulo sob a aproximação DDS-1 (*Downstream Differencing Scheme*) (FERZIGER e PERIC, 2002), isto é,

$$Fs = \mu \left(\frac{\Delta x / 2}{\Delta y} \right) \sum_{i=1}^M (u_{i,1} - u_{i,0}) = \sum_{i=1}^{N_x} \left(\frac{u_{i,1} - u_{i,0}}{2} \right), \Delta x = \Delta y = h,$$

u ainda, de modo equivalente pode-se fazer:

$$Fs = \mu \frac{\Delta x}{\Delta y} \sum_{i=1}^M (u_{i,1} - u_i^{\ddot{}}) = \sum_{i=1}^{N_x} (u_{i,1} - u_i^{\ddot{}}), \Delta x = \Delta y = h,$$

em que $u_{i,1}$ representa a velocidade u , nodal, na primeira linha horizontal de Ω^h (volumes reais), e $u_i^{\ddot{}}$ o correspondente volume fictício, a sul, na posição $x_i = ih$;

(5) F_n , força de arrasto viscoso que a parede superior da cavidade exerce sobre o fluido; com a solução analítica

$$F_n = \int_0^1 \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=1} z dx \quad (\mu = 1, z = 1),$$

$$F_n = \int_0^1 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(12y^2 - 2) \Big|_{y=1} dx,$$

$$F_n = \int_0^1 80(x^4 - 2x^3 + x^2) dx,$$

$$F_n = 80(x^5/5 - x^4/2 + x^3/3) \Big|_0^1 = \frac{8}{3};$$

e com a solução numérica obtida de modo semelhante à variável anterior (4), ou seja,

$$F_n = \mu \frac{\Delta x / 2}{\Delta y} \sum_{i=1}^M (u_{i,M} - u_{i,M-1}) = \sum_{i=1}^{N_x} \left(\frac{u_{i,M} - u_{i,M-1}}{2} \right),$$

que, de modo equivalente, também pode ser calculado pela expressão,

$$Fn = \mu \frac{\Delta x}{\Delta y} \sum_{i=1}^M (u_i^{\cdot\cdot} - u_{i,M}) = \sum_{i=1}^M (u_i^{\cdot\cdot} - u_{i,M}),$$

em que $\Delta x = \Delta y = h$, $u_{i,M}$ representa a velocidade u , nodal, na última linha horizontal de Ω^h (volumes reais), e $u_i^{\cdot\cdot}$ o correspondente volume fictício (situado a norte);

(6) $u \min 1D$, valor mínimo da componente na direção horizontal do vetor velocidade na linha $x = 1/2$ (Fig. F.1),

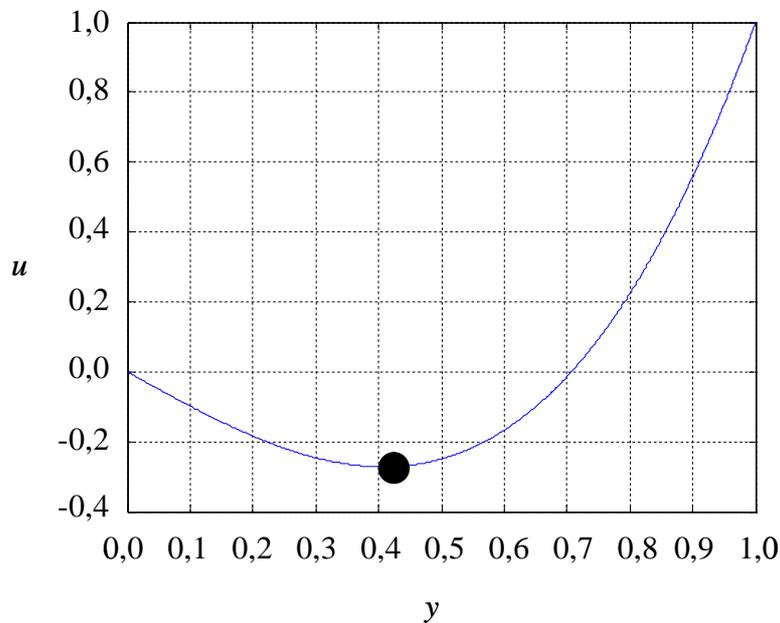


Figura F.1: Variação de u sobre o eixo $x = 1/2$, $u(x = 1/2, y)$, e $u \min 1D$

em que a solução analítica para $u \min 1D$ é obtida através do desenvolvimento

$$u(x = 1/2, y) = 8[(1/2)^4 - 2(1/2)^3 + (1/2)^2][4y^3 - 2y],$$

$$u(x = 1/2, y) = -y + 2y^3,$$

$$\Rightarrow u'(x = 1/2, y) = -1 + 6y^2,$$

$$\Rightarrow u'(x = 1/2, y) = 0 \Rightarrow y(u \min 1D) = \sqrt{6}/6,$$

$$\Rightarrow u \min 1D = u(x = 1/2, y = \sqrt{6}/6) = -\sqrt{6}/9,$$

e, para obtenção da sua solução numérica são considerados os valores nodais posicionados sobre o eixo $x = 1/2$, entretanto, essa localização corresponde às faces entre os volumes P e E situados, respectivamente, (imediatamente) à esquerda e à direita de $x = 1/2$; assim, considera-se a média aritmética entre tais valores nodais (P e E),

$$u_{x=1/2} = u_e = (u_P + u_E) / 2,$$

em que P referencia os nós situados na linha à esquerda de $x = 1/2$, a uma distância $h/2$ (metade do espaçamento entre os nós), e E refere-se aos nós situados a direita de $x = 1/2$, a uma distância $h/2$; a partir disso, obtém-se o resultado numérico

$$u \min 1D = \min_{j=1, \dots, M} \{ u_{x=1/2, j} \};$$

(7) $y(u \min 1D)$, coordenada y correspondente a $u \min 1D$, cuja solução analítica segue o desenvolvimento anterior (6) e resulta em

$$y(u \min 1D) = \sqrt{6} / 6,$$

e a solução numérica corresponde à coordenada y de $u \min 1d = \min_{j=1, \dots, M} \{ u_{x=1/2, j} \}$ (como especificado na variável 6);

(8) $v \min 1D$, valor mínimo da componente na direção vertical do vetor velocidade sobre o eixo $x = 1/2$ (Fig. F.2), em que a solução analítica para $v \min 1D$ é obtida por

$$v(x, y = 1/2) = -8(4x^3 - 6x^2 + 2x) \left((1/2)^4 - (1/2)^2 \right),$$

$$v(x, y = 1/2) = 6x^3 - 9x^2 + 3x,$$

$$\Rightarrow v'(x, y = 1/2) = 18x^2 - 18x + 3,$$

$$\Rightarrow v'(x, y = 1/2) = 0 \Rightarrow x = (3 \pm \sqrt{3}) / 6,$$

$$\Rightarrow v \min 1D = v(x = (3 + \sqrt{3}) / 6, y = 1/2) = -\sqrt{3} / 6,$$

e para a obtenção da solução numérica para $v \min 1D$ são considerados os valores nodais localizados nas proximidades do eixo $y = 1/2$; novamente, como não existem valores nodais

sobre esse eixo, são consideradas as soluções das faces entre os volumes P e N dessa região da malha, ou seja, nesse caso considera-se a média aritmética entre os valores nodais (P e N) que estão a sul e a norte do eixo $y = 1/2$, assim,

$$v_{y=1/2} = v_n = (v_P + v_N) / 2,$$

em que P referencia os nós situados na linha imediatamente abaixo (sul) de $y = 1/2$, a uma distância $h/2$, e N refere-se aos nós situados na linha imediatamente acima (norte) de $y = 1/2$, também a uma distância $h/2$; então, com esse enfoque obtém-se

$$v \min 1D = \min_{i=1, \dots, M} \{v_{i, y=1/2}\};$$

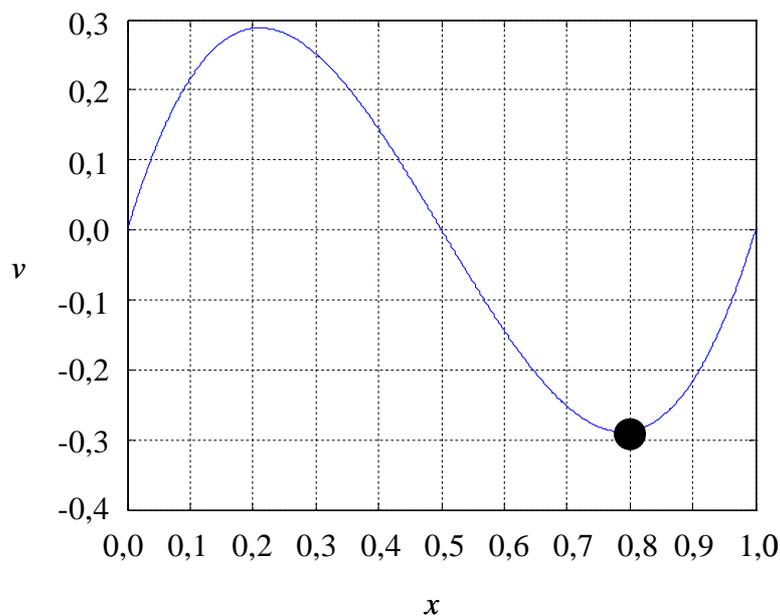


Figura F.2: Variação de v sobre o eixo $y = 1/2$, $v(x, y = 1/2)$, e $v \min 1D$

(9) $x(v \min 1D)$, coordenada x correspondente a $v \min 1D$, em que sua solução analítica segue o desenvolvimento anterior (solução analítica de $v \min 1D$) e resulta em

$$x(v \min 1D) = (3 + \sqrt{3}) / 6,$$

e a sua solução numérica corresponde à coordenada x de $v \min 1D = \min_{i=1, \dots, M} \{v_{i, y=1/2}\};$

(10) $v \max 1D$, valor máximo da componente na direção vertical do vetor velocidade sobre o eixo $x = 1/2$ (Fig. F.2), cuja solução analítica é obtida de modo semelhante à de $v \min 1D$, e resulta em

$$v \max 1D = v(x = (3 - \sqrt{3})/6, y = 1/2) = \sqrt{3}/6,$$

e a sua solução numérica é determinada por

$$v \max 1D = \max_{i=1, \dots, M} \{v_{i, y=1/2}\},$$

onde $v_{i, y=1/2}$ é especificado anteriormente (na variável 8);

(11) $x(v \max 1D)$, coordenada x correspondente a $v \max 1D$, em que a sua solução analítica segue o desenvolvimento anterior (solução analítica de $v \max 1D$) e resulta em

$$x(v \max 1D) = (3 - \sqrt{3})/6,$$

e a sua solução numérica corresponde à coordenada x de $v \max 1D = \max_{i=1, \dots, M} \{v_{i, y=1/2}\}$;

(12) $\Psi \min$, valor mínimo da função de corrente (Ψ) em Ω (Fig. F.3), em que a solução analítica para $\Psi \min$ é obtida considerando-se o desenvolvimento

$$\begin{aligned} u(x, y) &= \frac{\partial \Psi}{\partial y} \Rightarrow \Psi(x, y) = \int u(x, y) dy, \\ \Rightarrow \Psi(x, y) &= 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(y^4 - y^2), \\ \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= 8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(y^4 - y^2) = -v(x, y), \\ \frac{\partial \Psi}{\partial y} &= 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(4y^3 - 2y) = u(x, y), \\ \frac{\partial \Psi}{\partial x} = 0 \text{ e } \frac{\partial \Psi}{\partial y} = 0 &\Rightarrow x = 1/2, y = \sqrt{2}/2, \\ \Psi \min &= \Psi(1/2, \sqrt{2}/2) = -1/8, \end{aligned}$$

e a solução numérica é obtida com a integral retângulo (BURDEN e FAIRES, 2008), considerando-se o cálculo de $\Psi(x, y) = \int u(x, y) dy$, isto é, são calculadas as áreas referentes

aos retângulos obtidos a partir dos valores de u armazenados nos volumes de cálculo em cada linha vertical da malha – somam-se a área do volume P com a área dos volumes situados ao sul (na linha vertical); mais especificamente, o cálculo (numérico) de Ψ é obtido com base no produto, por $\Delta y = h$, do valor de u armazenado na face leste (u_e) de cada volume P e, então, soma-se a área dos volumes situados abaixo (sul) (calculados de maneira análoga); ao se representar o valor de Ψ armazenado em cada ponto P por $\Psi(i, J)$ tem-se

$$\Psi_{i,J} = \Psi(i, J) = \Delta y \sum_{j=1}^J u_e(i, j); \quad i = 1, \dots, M; \quad J = 1, \dots, M;$$

onde u_e corresponde à velocidade u na face leste de cada volume de controle, em que se considera a média aritmética entre os valores nodais (P e E), ou seja, $u_e = (u_p + u_E) / 2$, e na sequência busca-se o menor valor armazenado no campo de valores, através da expressão

$$\Psi \min = \min_{\substack{i=1, \dots, M \\ J=1, \dots, M}} \{ \Psi_{i,J} \};$$

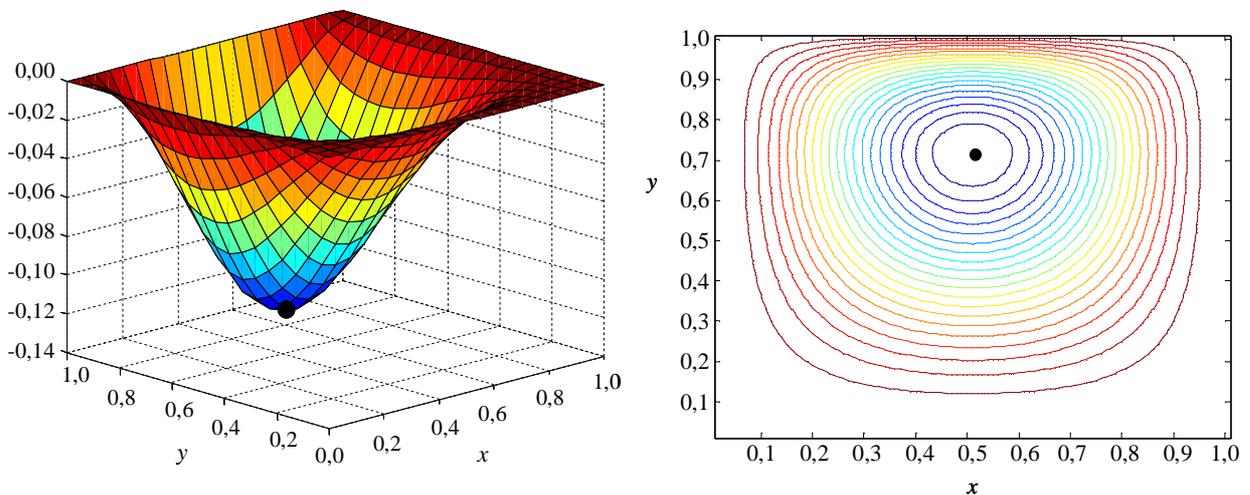


Figura F.3: Variação de $\Psi(x, y)$ sobre Ω e $\Psi \min$

(13) $x(\Psi \min)$, abscissa de $\Psi \min$, cuja solução analítica corresponde a

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0 \end{cases} \Rightarrow x(\Psi \min) = 1/2,$$

e com a solução numérica determinada pela coordenada nodal x_i de $\Psi \min = \min_{\substack{i=1,\dots,M \\ J=1,\dots,M}} \{\Psi_{i,J}\}$;

(14) $y(\Psi \min)$, ordenada de $\Psi \min$, com solução analítica obtida por

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0 \end{cases} \Rightarrow y(\Psi \min) = \sqrt{2}/2,$$

e cuja solução numérica corresponde à coordenada nodal y_j de $\Psi \min = \min_{\substack{i=1,\dots,M \\ J=1,\dots,M}} \{\Psi_{i,J}\}$;

(15) $u \min 2D$, valor mínimo da componente na direção horizontal do vetor velocidade em Ω (Fig. F.4),

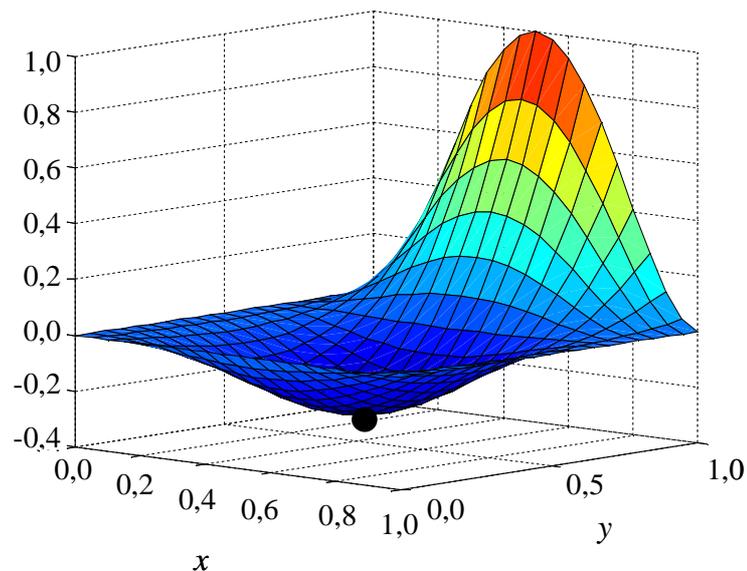


Figura F.4: Variação de $u(x, y)$ sobre Ω , e $u \min 2D$

cuja solução analítica é determinada pelo desenvolvimento algébrico

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(4y^3 - 2y),$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(12y^2 - 2),$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \text{ e } \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \Rightarrow x = 1/2, y = \sqrt{6}/6,$$

$$u \min 2D = u\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{6}}{6}\right) = -\sqrt{6}/9,$$

e a sua solução numérica é obtida por $u \min 2D = \min_{\substack{i=1,\dots,M \\ j=1,\dots,M}} \{u_{i,j}\}$;

(16) $x(u \min 2D)$, abscissa de $u \min 2D$, em que a sua solução analítica é obtida anteriormente no cálculo de $u \min 2D$, ou seja, $x(u \min 2D) = 1/2$, e a sua solução numérica corresponde à coordenada x_i do valor nodal $u \min 2D = \min_{\substack{i=1,\dots,M \\ j=1,\dots,M}} \{u_{i,j}\}$;

(17) $y(u \min 2D)$, ordenada de $u \min 2D$, cuja solução é obtida de modo análogo à variável 16, isto é, no cálculo de $u \min 2D$, em que o desenvolvimento analítico resulta em $y(u \min 2D) = \sqrt{6}/6$, e a solução numérica corresponde à coordenada y_i do valor nodal $u \min 2D = \min_{\substack{i=1,\dots,M \\ j=1,\dots,M}} \{u_{i,j}\}$;

(18) $v \min 2D$, valor mínimo da componente na direção vertical do vetor velocidade em Ω (Fig. F.5), com solução analítica determinada por

$$\frac{\partial v}{\partial x} = -8(12x^2 - 12x + 2)(y^4 - y^2),$$

$$\frac{\partial v}{\partial y} = -8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(4y^3 - 2y),$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0 \text{ e } \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow x = 1/2 \pm \sqrt{3}/6; y = \sqrt{2}/2,$$

$$\Rightarrow v \min 2d = v\left(1/2 + \sqrt{3}/6, \sqrt{2}/2\right) = -2\sqrt{3}/9,$$

e com solução numérica obtida por $v \min 2D = \min_{\substack{i=1,\dots,M \\ j=1,\dots,M}} \{v_{i,j}\}$;

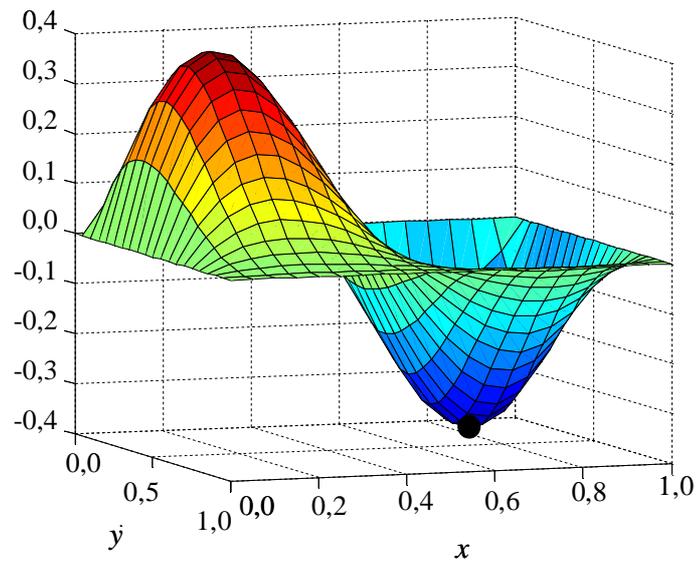


Figura F.5: Variação de $v(x, y)$ sobre Ω , e $v \min 2D$

(19) $x(v \min 2D)$, abscissa de $v \min 2D$, com a sua solução analítica obtida anteriormente no cálculo de $v \min 2D$, isto é, $x(v \min 2D) = 1/2 + \sqrt{3}/6$, e com a solução numérica determinada pela coordenada x_i do valor nodal $\min_{\substack{i=1,\dots,M \\ j=1,\dots,M}} \{v_{i,j}\}$;

(20) $y(v \min 2D)$, ordenada de $v \min 2D$, em que a solução é obtida analogamente à variável 19, ou seja, no cálculo de $v \min 2D$, com o resultado $y(v \min 2D) = \sqrt{2}/2$, e a solução numérica é dada pela coordenada y_i do valor nodal $\min_{\substack{i=1,\dots,M \\ j=1,\dots,M}} \{v_{i,j}\}$;

(21) $v \max 2D$, valor máximo da componente na direção vertical do vetor velocidade em Ω (Fig. F.6), cuja solução analítica é obtida de modo semelhante à variável 18 e resulta em $v \max 2d = v(1/2 - \sqrt{3}/6, \sqrt{2}/2) = 2\sqrt{3}/9$, e a sua solução numérica é determinada pela expressão $v \max 2D = \max_{\substack{i=1,\dots,M \\ j=1,\dots,M}} \{v_{i,j}\}$;

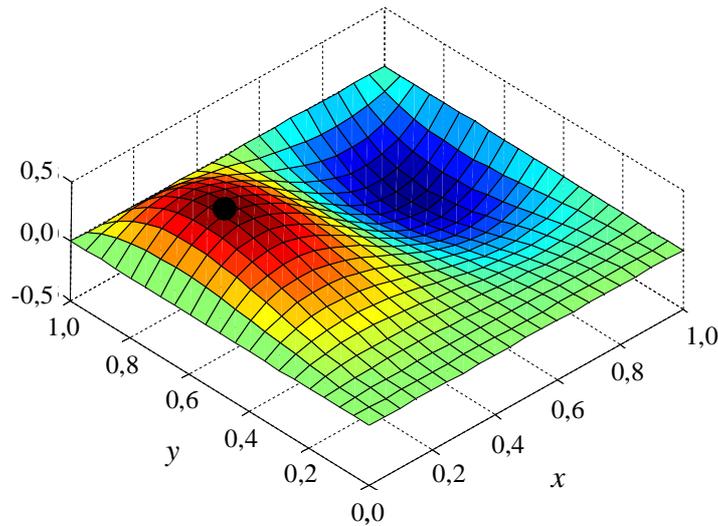


Figura F.6: Variação de $v(x, y)$ sobre Ω , e $v \max 2D$

(22) $x(v \max 2D)$, abscissa de $v \max 2D$, em que a sua solução analítica é obtida no cálculo de $v \max 2D$, isto é, $x(v \max 2D) = 1/2 - \sqrt{3}/6$, e cuja solução numérica é determinada pela coordenada x_i do valor nodal $\max_{\substack{i=1, \dots, M \\ j=1, \dots, M}} \{v_{i,j}\}$;

(23) $y(v \max 2D)$, ordenada de $v \max 2D$, em que a sua solução também é apresentada no cálculo de $v \max 2D$, desse modo obtém-se $y(v \max 2D) = \sqrt{2}/2$, e a solução numérica é dada pela coordenada y_i do valor nodal $\max_{\substack{i=1, \dots, M \\ j=1, \dots, M}} \{v_{i,j}\}$.

(24) vm , componente na direção vertical do vetor velocidade no ponto de coordenadas (não nodais) $(x = 1/2 - \sqrt{3}/6, y = \sqrt{2}/2)$; em que a solução analítica é calculada pela substituição de valores na Eq. (5.19), ou seja,

$$vm = v(1/2 - \sqrt{3}/6, \sqrt{2}/2) = 2\sqrt{3}/9;$$

e a sua solução numérica é obtida com o emprego de interpolação polinomial (2D) a partir dos pontos nodais situados nas proximidades de $x = 1/2 - \sqrt{3}/6$ e $y = \sqrt{2}/2$.