Esquema compacto de diferenças finitas de alta ordem em malhas hierárquicas

Ellen Thais Alves Cerciliar

DISSERTAÇÃO APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
MESTRE EM CIÊNCIAS

Programa: Matemática Aplicada
Orientador: Prof. Dr. Alexandre Roma

Durante o desenvolvimento deste trabalho o autor recebeu auxílio financeiro do CNPq

São Paulo, Dezembro de 2017

Esquema compacto de diferenças finitas de alta ordem em malhas hierárquicas

Esta versão da dissertação contém as correções e alterações sugeridas pela Comissão Julgadora durante a defesa da versão original do trabalho, realizada em 21/12/2017. Uma cópia da versão original está disponível no Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.

Comissão Julgadora:

- Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma (orientador) - IME-USP
- Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto - FEMEC - UFU
- Prof. Dr. Pedro da Silva Peixoto - IME - USP

Agradecimentos

À Deus, o único digno de toda honra e toda glória!

Ao Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma, meu orientador, agradeço pelos ensinamentos, paciência e por exigir sempre que o melhor fosse feito.

À minha família, meus pais Belkiss e Salmista, pelo amor incondicional, pela educação, apoio e exemplo, ao meu esposo José Elias pelo carinho, companheirismo e incentivo, à minha irmã Mara pelo apoio e por sempre me ouvir nos momentos difíceis.

Ao Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto (FEMEC-UFU) por disponibilizar os recursos do MFLab durante a escrita dessa dissertação.

Ao Prof. Dr. Santos Alberto Enriquez Remigio (FAMAT-UFU), pela amizade, pelas ricas sugestões e disposição em ajudar, transmitindo os seus conhecimentos e incentivando minhas conquistas.

Aos membros da banca, agradeço por aceitarem o convite e por todas as considerações, críticas, sugestões e pareceres.

Agradeço igualmente à todos meus queridos amigos e companheiros de estudo, em especial aos que se fizeram mais presentes nessa caminhada, Carla, Rosângela e Nils pelo apoio e torcida pelo meu sucesso.

A todos os professores, funcionários e alunos do IME-USP pela boa convivência e pelo apoio durante a realização desse mestrado.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro para a realização desse projeto de pesquisa.

Agradeço à todos que passaram pela minha vida e contribuíram para a construção de quem sou hoje.

*"Divide as dificuldades que tenhas de examinar em tantas partes quantas for possível, para uma
melhor solução."*

— RENÉ DESCARTES

Resumo

CERCILIAR, E. T. A. **Esquema compacto de diferenças finitas de alta ordem em malhas hierárquicas**. 2017. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017.

Este trabalho propõe um esquema de diferenças finitas compacta de alta ordem para resolver problemas elípticos com coeficientes variáveis em malhas composta. São apresentados a formulação matemática e a dedução do método compacto de quarta ordem aplicado à problemas elípticos bidimensionais, em malha regular e composta. Foi adotado o uso da biblioteca PETSc com os seus pré-condicionadores e métodos numéricos para resolver os sistemas lineares resultantes da discretização do problema. Por fim, testes visando verificar o código foram feitos, utilizando o método de soluções manufaturadas, para mostrar alta eficiência e acurácia do método desenvolvido.

Palavras-chave: Equações elípticas, método das diferenças finitas compacta, malhas hierárquicas.

Abstract

CERCILIAR, E. T. A. **Higher-order finite-difference schemes for hierarchical meshes.** 2017. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017.

This paper proposes a scheme of compact finite difference higher order for solve elliptic problems with variable coefficients in composite meshes. we present the mathematical formulation and the deduction of the compact method of fourth order applied to two-dimensional elliptic problems in regular and composite mesh . It was adopted using the PETSc library with its pre- conditioners and numerical methods for solving linear systems resulting from discretization of the problem. Finally , tests to verify the code were made using the method of manufactured solutions to show high efficiency and accuracy of the method developed .

Keywords: Elliptic equations , Compact finite difference methods, Hierarchical meshes.

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xi
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Métodos Numéricos de Alta Ordem	2
1.3 Objetivos	5
2 Estrutura HiGTree	7
2.1 Malhas hierárquicas	7
2.2 Diferenças finitas generalizadas	7
2.3 Interpolações	10
2.3.1 Aproximação polinomial	10
2.3.2 Aproximação pelo Método dos Mínimos Quadrados	11
2.3.3 Cálculo dos coeficientes	12
2.3.4 Diferenças Finitas Generalizadas	13
3 Metodologia numérica	15
3.1 Modelagem Matemática	15
3.2 Equações Diferenciais Parciais	15
3.3 Equação de Poisson no Método de Projeção	17
3.3.1 Um método explícito de primeira ordem no tempo	17
3.4 Formulação de métodos	18
3.5 Esquema compacto de diferenças finitas	18
3.6 Equação elíptica 2D	19
3.6.1 Formulação do esquema compacto de alta ordem	19
4 Resultados e discussões	25
4.1 Normas e análise de convergência numérica em malhas regulares e em malhas compostas	25
4.2 Representação matricial das discretizações	26
4.3 Problema elíptico com coeficientes constantes	27

4.3.1	Teste para malha uniforme	27
4.3.2	Teste para malha composta	28
4.4	Problema elíptico com coeficientes variáveis	31
4.4.1	Teste para malha uniforme	32
4.4.2	Teste para malha composta	34
5	Conclusões	39
5.1	Considerações Finais	39
5.2	Sugestões para Pesquisas Futuras	39
A	Verificação da ordem de convergência	41
A.1	Testes referente ao problema (4.8)	41
A.1.1	Tolerância igual a $1e - 16$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	41
A.1.2	Tolerância igual a $1e - 13$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	44
A.1.3	Tolerância igual a $1e - 10$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	45
A.1.4	Tolerância igual a $1e - 7$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	47
A.2	Testes referente ao problemas (4.16)	48
A.2.1	Tolerância igual a $1e - 16$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	48
A.2.2	Tolerância igual a $1e - 13$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	50
A.2.3	Tolerância igual a $1e - 10$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	52
A.2.4	Tolerância igual a $1e - 7$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	53
A.2.5	Tolerância igual a $1e - 16$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	57
A.2.6	Tolerância igual a $1e - 13$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	58
A.2.7	Tolerância igual a $1e - 10$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	59
A.2.8	Tolerância igual a $1e - 7$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5	61
	Referências Bibliográficas	63

Lista de Figuras

2.1	Malha deslocada.	8
2.2	Exemplo de uma malha tipo HiG e sua representação na forma de árvore (HiG-Tree).	8
2.3	Exemplo de um estêncil resultando em pontos a serem interpolados (x_L e x_B).	9
4.1	Esquema de interpolação	29
4.2	Malha correspondente ao testes das tabelas 4.2, 4.3, 4.4	30
4.3	Malha uniforme e solução obtida pelo PETSc	32
4.4	Grafico da função ω	35
4.5	Malha composta com dois níveis de refinamento e solução obtida pelo PETSc	35
A.1	(a) Malha G1L3, (b) Malha G2L3, (c) Malha G3L3 e (d) Malha G4L3 e (e) Malha G5L3	42
A.2	(a) Malha G1L1, (b) Malha G2L1, (c) Malha G3L1 e (d) Malha G4L1 e (e) Malha G5L1	49
A.3	(a) Malha G1L2, (b) Malha G2L2, (c) Malha G3L2 e (d) Malha G4L2 e (e) Malha G5L2	56

Lista de Tabelas

3.1	Definições de operadores de derivadas mistas em uma malha uniforme	20
4.1	Erro, ordem de convergência e número de iterações do MDF comparado com o ECDF para o problema de Poisson em uma malha uniforme.	28
4.2	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5.	30
4.3	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4.	31
4.4	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3.	31
4.5	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5.	33
4.6	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4.	33
4.7	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3.	34
4.8	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5.	36
4.9	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4.	36
4.10	Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3.	37
A.1	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3	43
A.2	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4	43
A.3	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5	44

A.4	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3	44
A.5	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4	45
A.6	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5	45
A.7	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3	46
A.8	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4	46
A.9	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5	47
A.10	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3	47
A.11	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4	48
A.12	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5	48
A.13	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3	49
A.14	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4	50
A.15	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5	50
A.16	Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3	51

A.17 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4	51
A.18 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5	52
A.19 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3	52
A.20 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4	53
A.21 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5	53
A.22 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3	54
A.23 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4	54
A.24 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5	55
A.25 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3	57
A.26 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4	57
A.27 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5	58
A.28 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3	58
A.29 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4	59

A.30 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5	59
A.31 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3	60
A.32 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4	60
A.33 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5	61
A.34 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3	61
A.35 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4	62
A.36 Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5	62

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

A pesquisa em torno de simulações computacionais tem ganhado espaço na literatura ao longo dos anos, pois auxiliam no entendimento de problemas em diversos ramos da engenharia e da ciência. Alguns exemplos podem ser citados nas áreas meteorológica, aerodinâmica, biologia, combustão e muitas outras. Em alguns problemas físicos é demandado um enorme esforço e custo para fazer experimentos em laboratório e muitos recursos são investidos para o desenvolvimento de novas tecnologias, computacional e experimental, com isso, a modelagem matemática e a simulação numérica vêm ganhando muito espaço. Este é o método chamado Dinâmica dos Fluidos Computacional ou CFD (Computational Fluid Dynamics) em inglês.

De forma geral, o usuário da CFD está interessado em obter as distribuições de velocidades, pressões, densidades, tensões, temperaturas etc., na região do escoamento. Segundo [5] muito tem se investido em modelos matemáticos para prever escoamentos, temperaturas, concentrações de espécies químicas de forma a evitar efeitos nocivos ao meio ambiente.

Com simulações em computador pode-se acelerar o desenvolvimento de um projeto, por meio da redução do tempo de testes em túneis de vento, por exemplo. Como todos os parâmetros simulados são virtuais, a princípio basta alterá-los e executar novamente o programa de simulação [9]. Para visualização de campos vetoriais tridimensionais, uma variedade de técnicas foi desenvolvida no passado. Estas técnicas incluem métodos baseados em geometria, como linhas de corrente e partículas animadas, que lembram o que os cientistas estão habituados a ver nos seus experimentos [29].

Em problemas nos quais, por exemplo, há fortes anisotropias de espaçamento nas malhas espaciais ou quando há saltos "grandes" de propriedades materiais, que é o caso da massa específica em escoamentos bifásicos contendo gotas de água em ar (bolhas de ar em água), a implementação é mais complicada [2]. Neste caso, a simulação em malha composta é de grande interesse e tem recebido contínua atenção dos grupos em CFD do IME-USP e do MfLab/FEMEC-UFU em muitas de suas linhas de pesquisa. Ainda hoje, se faz presente a necessidade de alternativas robustas e eficazes nestas situações onde potencialmente encontramos problemas na convergência dos métodos numéricos.

Considerando as dificuldades mencionadas acima, tornou-se evidente a necessidade de investirmos e propormos uma nova metodologia.

A intenção deste trabalho é desenvolver um método de alta precisão aplicável na solução de equações diferenciais parciais elípticas resultante do processo de correção da pressão nas equações de Navier-Stokes, como foi discutido no trabalho [2] e [44], assim como investigar e acoplar técnicas de discretização espacial e solução dos sistemas lineares gerados por estas

discretizações.

Para isto, objetiva-se aqui o desenvolvimento de uma metodologia numérica voltada para a solução da equação elíptica em um domínio bidimensional com refinamento adaptativo, que reduzam o tempo computacional, aumentem a robustez do código e aumente a precisão da solução.

Como este estudo é inicial, propõe-se aqui a implementação desta técnica em um domínio bidimensional com refinamento localizado. Uma variedade de testes de verificação por soluções manufaturadas é apresentada neste trabalho exemplificando o potencial desta metodologia numérica.

1.2 Métodos Numéricos de Alta Ordem

Métodos numéricos eficientes para gerar aproximações numéricas de Problemas de Valor Inicial (PVI) e / ou de Fronteira (PVF) modelados por equações diferenciais tem sido um objetivo de muitos pesquisadores há décadas. Nos últimos cinquenta anos, três abordagens dominaram as aproximações numéricas: diferenças finitas, elementos finitos e métodos de equações integrais. Entre 1950 e 1980, o Método de Diferenças Finitas (MDF) liderou sua popularidade, foi quando sua teoria e aplicação foi intensamente desenvolvida. Nos últimos anos, o método de elementos finitos ganhou popularidade considerável. Entretanto, a metodologia de diferenças finitas ainda permanece como uma técnica fundamental e muito utilizada devido sua eficácia, aplicabilidade e fácil implementação.

Observa-se na literatura que o método utilizado com mais frequência é o MDF explícito de primeira e segunda ordem, esse método, normalmente, envolve a discretização do domínio de interesse em uma malha estruturada e aproxima-se as derivadas por diferenças finitas. Sua implementação é relativamente simples, por exemplo, para aproximar o valor da primeira derivada de uma função ϕ , podemos usar uma fórmula de diferenças finitas centrada dada por $\phi' = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h}$, $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, onde h é tamanho do passo de uma partição do domínio de ϕ . Nesse método, a aproximação dos termos envolvendo derivadas da função é feita usando expansão em série de Taylor [9].

O erro local de truncamento, ou a medida pela qual a fórmula de diferenciação se aproxima da primeira derivada, é dado por $\tau_i = -\frac{1}{6}h^2\phi'''_{i+\epsilon}$, onde $\epsilon \in (i, i+1)$, [9]. Esse erro de truncamento se aproxima de zero quando a taxa h^2 se aproxima de zero, ou seja, quando $h \rightarrow 0$. Além disso, dizemos que o erro de truncamento é de ordem h^2 , que denota-se por $O(h^2)$.

Para aproximar a solução de uma equação diferencial o processo é análogo, em cada ponto da malha, o valor da função (ou funções) desejada é tratada como incógnita, e a equação diferencial governante é aproximada por um sistema de equações algébricas que pode ser resolvido por um método de solução apropriado.

A precisão do método depende da aproximação dos operadores de diferenças finitas utilizados e da discretização da malha. Uma malha muito refinada aumenta a precisão da solução numérica mas também aumenta, relativamente, a dimensão do problema a ser resolvido.

Segundo [42] a desvantagem do MDF é exigir uma malha estruturada, ao contrário do método de elementos finitos que são projetados para acomodar malhas altamente desestruturadas, bem como dados e soluções de problemas irregulares, pois subdivide o domínio de um problema em partes menores, denominadas elementos finitos. Por outro lado, o MDF se adequa mais facilmente à análise de erros de truncamento obtido na expansão em série de Taylor, e esta propriedade será explorada no presente trabalho para desenvolver métodos de aproximações de alta ordem.

A análise de erros de truncamento na expansão em série de Taylor para aproximações de diferenças finitas centrais mostra que o esquema aproxima os valores das derivadas com $O(h^2)$ à medida que o espaçamento h , entre os pontos da malha, se aproxima de zero.

Métodos com precisão melhor do que $O(h^2)$ são chamados métodos de alta ordem. Estes métodos são desejáveis porque a sua implementação permite malhas mais grossas com resultados precisos, diminuindo assim o custo computacional. O procedimento padrão para alcançar precisão de ordem superior é aumentar o stencil nas aproximações das derivadas. Em geral, em uma malha uniforme, uma derivada de ordem p , se p é par, pode ser aproximado com ordem $O(h^m)$ com $p + m - 1$ pontos. Se p é ímpar, são necessários $p + m$ pontos.

Para derivadas de alta ordem, a aproximação exige pontos adicionais na malha e isso aumenta a complexidade do algoritmo. Em geral, as derivadas de ordem p , se p é par, podem ser aproximados pelo MDF com $p + 1$ pontos simétricos localizados na malha. Os coeficientes da fórmula de aproximação para este caso são simétricos.

Para p ímpar, $p + 2$ nós são necessários na malha e os coeficientes, neste caso, são antisimétricos, isto significa que o coeficiente central para a fórmula de aproximação é sempre zero [42].

Uma teoria geral para diferenças finitas foi desenvolvida por [35] para aproximação de primeira e segunda derivadas até ordem de $O(h^{n-1})$ em uma malha com n nós. Os métodos de alta ordem obtidos desta maneira exigem sempre stencils que utilizam pontos de malha localizados além dos diretamente ligados ao ponto central sobre o qual a derivada está sendo aproximada. Isto complica formulações perto da fronteira, aumenta a largura de banda da matriz e aumenta os requisitos de comunicação e implementação em arquiteturas de programação paralela.

Nas últimas décadas, muitos pesquisadores examinaram um grande número de fórmulas de diferenças finitas e descobriram que embora as aproximações tenham precisão de ordem verificada, elas podem apresentar oscilações ou instabilidade computacional (ver Gupta (1991) [15]; Li et al. (1995) [30]; Mancera (2006) [32]), o que desencadeou um grande interesse em aprofundar uma pesquisa em torno dos métodos compactos.

Como mencionado acima, fórmulas de diferenças finitas compactas são conhecidas há quase cinquenta anos. Algumas fórmulas são relatados por Collatz, [8]. No entanto, a sua implementação começou no início de 1970 para alguns problemas de mecânica dos fluidos [1], [18], [43]. Desde então, várias classes distintas de esquemas compactos foram desenvolvidas.

Hirsch, [18] apresentou comparações entre métodos compactos e não compactos. Nesta análise, uma aproximação não compacta de 2ª ordem e uma aproximação compacta de 4ª ordem foram avaliadas em relação à precisão numérica. Foi realizado um teste computacional simulando a utilização das duas aproximações.

Com base nesta investigação, Hirsch concluiu que para trabalhar com o método de 2ª ordem não compacto, é necessário gerar uma malha computacional quatro vezes mais refinada que a malha utilizada na simulação com a aproximação de 4ª ordem compacta para gerar resultados com precisão semelhantes. Além disso, os resultados mostram que o custo computacional é efetivamente reduzido em até 20 vezes. Hirsch também confirma através da comparação de aproximações de mesma ordem de precisão que os métodos compactos possuem um erro de truncamento menor que os métodos não compactos.

Em 1991, Lele [26] publicou um artigo com uma análise aprofundada de esquemas compactos. Ele sugere o uso de métodos compactos de alta ordem e apresenta esquemas para a primeira e segunda derivada de 2ª até 10ª ordem. Lele também propõe esquemas para serem aplicados nos pontos da fronteira e próximos às fronteiras. Estes métodos compactos são resolvidos de forma implícita, isto é, as derivadas espaciais discretizadas geram um sistema n -diagonal de equações lineares que pode ser resolvido calculando a inversa da matriz dos

coeficientes relacionado ao sistema.

Gupta, [16] considerou a equação de convecção-difusão com coeficientes variáveis, esta equação muitas vezes aparece na descrição de fenômenos de transporte. Quando tal equação é discretizada usando diferenças centrais, o esquema resultante tem um erro de truncamento de ordem $O(h^2)$. Neste caso, os métodos iterativos para a solução do sistema resultante de equações lineares não converge quando os termos convectivos dominam. Uma alternativa para adequar a solução é usar aproximações progressivas ou regressivas para os termos convectivos, porém a ordem do erro de truncamento cai para $O(h)$, portanto isso requer um refinamento de malha que computacionalmente é mais custoso. Diante disso, Gupta desenvolveu um novo esquema de diferenças finitas para a equação de convecção-difusão com coeficientes variáveis. O esquema é definido em uma única célula quadrada de tamanho $2h$ ao longo de um estêncil de 9 pontos com um erro de truncamento de $O(h^4)$, porém o método só pode ser aplicado em malhas uniformes. O sistema resultante de equações foi resolvido por métodos iterativos.

Tendo como motivação os resultados apresentados por Young e Dauwalder [45], que desenvolveram um esquema compacto de $O(h^4)$ com stencil de 9 pontos, Ananthakrishnaiah, Manohar e Stephenson [3] desenvolveram uma abordagem simples para resolver um problema elíptico bidimensional com coeficientes variáveis. Foi desenvolvido um esquema de diferenças finitas compacta em uma malha quadrada uniforme, obtendo um método de quarta ordem de treze pontos adaptado para pontos perto da fronteira.

Métodos de diferenças finitas de alta ordem do tipo compacto também são aplicados na solução das equações de Navier-Stokes e são computacionalmente eficientes e estáveis e as soluções numéricas obtidas são altamente precisas, [15], [30]. Esses métodos têm como atrativo molécula computacional pequena utilizando os oito pontos vizinhos mais próximos do ponto central dessa molécula, fácil implementação e resultados mais precisos mesmo quando usado malha grosseira, enquanto os métodos do tipo não compacto resultam em moléculas computacionais enormes.

Dando continuidade à pesquisa, Gupta desenvolveu aproximações de diferenças finitas de alta precisão para equações diferenciais elíptica, dando ênfase na equação de convecção-difusão. Trata-se de aproximações compacta, com um erro de truncamento de quarta ordem. Neste artigo, Gupta adaptou essas aproximações de alta precisão na solução das equações de Navier-Stokes. Para verificação da metodologia, foi resolvido o problema modelo da cavidade controlada por baixo número de Reynolds, depois os resultados foram comparados com as soluções disponíveis na literatura e resultados obtidos por outros autores. Em todos os testes observou-se que o método compacto produziu resultados de alta precisão mesmo usando malha grosseira. Gupta conclui destacando que o método tem potencial para uso na solução de problemas importantes de fluxo de fluido viscoso, [15].

Zhang, [14] também contribuiu para a teoria dos métodos compactos com o esquema de diferença finita compacta de quarta ordem, este método foi utilizado para resolver as equações de difusão-convecção bidimensional influenciada pela camada limite. O domínio é discretizado em uma malha não uniforme. Uma técnica de transformação de coordenada é utilizada para mapear a malha não uniforme e transformá-la em uma malha uniforme, na qual os esquemas de diferenças são aplicados. Um método multigrid e uma técnica de pré-condicionamento multinível são usados para resolver os sistemas lineares dispersos resultantes.

Mancera, [32], resolveu o mesmo problema apresentado por [31], que foi proposto inicialmente por [16] usando um método compacto de quarta ordem, onde as velocidades são tratados separadamente. Considerou-se um procedimento para obter um método compacto de quarta ordem aplicado na solução das equações de Navier-Stokes utilizando o programa de

manipulação algébrica *Maple*. Vale ainda ressaltar que Mancera e Hunt exibem um processo de construção do método compacto que se baseia em [15] e [30].

O procedimento empregado para testar o método consiste na resolução de um problema com solução analítica e outros seis do tipo cavidade. Mancera e Hunt estenderam o procedimento mencionado anteriormente para malhas não uniforme e resolveram o problema do degrau com face para frente. Também foi utilizado diferenças centrais de segunda ordem para moderar os números de Reynolds.

Mais recentemente Karaa, [20], propôs um esquema de diferença finita de quarta ordem de 9 pontos para problemas elípticos 2D com derivada mista e coeficientes variáveis. A mesma abordagem foi estendida para derivar uma classe de esquemas compactos de dois níveis de alta ordem com discretização do tempo ponderado para resolver problemas parabólicos 2D com uma derivada mista. Os esquemas são de quarta ordem de precisão no espaço e segunda ou menor ordem de precisão no tempo, dependendo da escolha de um parâmetro médio ponderado μ . A estabilidade incondicional é provada para $0,5 \leq \mu \leq 1$, também são apresentadas soluções numéricas que confirmam a análise teórica e a precisão de alta ordem dos esquemas.

Baseado nos trabalhos já mencionados, apresenta-se neste trabalho um estudo detalhado de métodos compactos aplicado na solução de equações diferenciais parciais elípticas. A equação de Poisson assume posição de destaque neste trabalho, pois para resolver as equações de Navier-Stokes para escoamentos bifásicos com o Método da Projeção de Chorin-Temam, [7], também passamos pela resolução de uma equação elíptica para a correção da pressão, como foi discutido no trabalho [2] e [44].

1.3 Objetivos

De maneira geral, o objetivo deste trabalho é fazer um estudo detalhado e o desenvolvimento de uma metodologia numérica compacta, aplicáveis na resolução eficiente de problemas elípticos com coeficientes variáveis.

No contexto da motivação científica, fluidos newtonianos e não newtonianos em escoamentos incompressíveis estacionários são gerados por equações elípticas e parabólicas, com a função incógnita localizada em diferentes posições das células computacionais que formam a discretização do domínio computacional, por exemplo: centros de células e meios de arestas. Desta forma, o ponto de partida e a ferramenta principal desse trabalho foi o código Hig-Tree em desenvolvimento no Instituto de Ciências Matemáticas e Computação (ICMC), USP São Carlos detalhado em [23], o código representa uma estrutura de dados como uma árvore em que cada nível corresponde a um refinamento da malha. Assim temos a autonomia de definir e discretizar o domínio computacional por malhas não estruturadas.

Como citado acima, a estrutura de dados representado pela Hig-Tree agrega uma infinidade de possibilidades de refinamento de malha, nesse sentido a discretização dos problemas que serão resolvidos resultará em um sistema de equações lineares que não podem ser resolvidas empregando um único método de solução e necessita da paralelização de métodos, iterativos e diretos, de solução. Por esta razão a biblioteca PETSc tornou-se uma nova ferramenta de estudo desta dissertação.

Os objetivos específicos são:

- Entender o funcionamento das rotinas que compõem o código Hig-Tree, a fim de alterá-lo de maneira a permitir a implementação de outros métodos numéricos;
- Desenvolver detalhadamente uma metodologia numérica compacta de quarta ordem aplicável a problemas elípticos com coeficientes variáveis;

- Implementar o método de diferenças finitas explícito de quarta ordem clássico, com intuito de comparar com o método compacto desenvolvido.

E, com os resultados obtidos, proporcionar uma referência que possa contribuir para trabalhos científicos na área.

Capítulo 2

Estrutura HiGTree

Este capítulo descreve os métodos utilizados para resolução numérica de equações diferenciais parciais em uma malha hierárquica do tipo “HiG-tree”. São descritos detalhes sobre este tipo de malha, bem como os métodos utilizados para discretização por diferenças finitas generalizadas e interpolações necessárias entre os diferentes níveis de refinamento. Finalmente são apresentados os mecanismos necessários para a resolução de uma equação de Poisson em um domínio genérico.

2.1 Malhas hierárquicas

Neste trabalho, foi usada uma estrutura de dados chamada Hig-Tree em desenvolvimento no Instituto de Ciências Matemáticas e Computação, USP São Carlos detalhado em [23], que representa uma árvore em que cada nível corresponde a um refinamento da malha, alguns exemplos clássicos deste tipo de estrutura são as malhas octree (três dimensões) e quadtree (duas dimensões). A estrutura usada permite que haja refinamentos arbitrários em qualquer nível da árvore, além da possibilidade de refinamento adaptativo como pode ser visto na figura 2.1 que é um exemplo de malha deslocada em duas dimensões em que nem todas as células tem o mesmo tamanho. A figura 2.2 ilustra o esquema em duas dimensões para uma malha com diversos níveis de refinamento, a extensão para três dimensões é natural uma vez que a estrutura é suficientemente genérica para isso.

2.2 Diferenças finitas generalizadas

O método adotado para discretização de equações diferenciais é o método de diferenças finitas. Tal método é baseado na expansão em série de Taylor da função a ser aproximada e de suas derivadas, cuja omissão de termos de alta ordem desta série resulta em fórmulas adequadas para as aproximações.

Um exemplo clássico é a discretização de uma equação de Poisson do tipo

$$\nabla^2 u = f,$$

com condições de contorno adequadas. Simplificando o domínio por um retângulo em um espaço de dimensão dois $\Omega = [a, b] \times [c, d]$, e utilizando uma malha cartesiana regular (do tipo grid) com espaçamentos δx e δy , obtém-se a clássica fórmula do laplaciano de 5 pontos, dada por

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\delta y^2} + \mathcal{O}(\delta x^2 + \delta y^2) = f_{i,j},$$

Figura 2.1: *Malha deslocada.*

Figura 2.2: *Exemplo de uma malha tipo HiG e sua representação na forma de árvore (HiG-Tree).*

ou ainda, desprezando-se os termos de ordem 2,

$$\frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{\delta x^2} + \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{\delta y^2} = f_{i,j},$$

onde $U_{i,j}$ representa uma aproximação para a função $u_{i,j}$, avaliada em $(x_i, y_j) = (a + i\delta x, b + j\delta y)$, e $f_{i,j} = f(x_i, y_j)$. Com esta fórmula, mais as condições de contorno, é possível montar um sistema da forma

$$L\mathbf{u} = \mathbf{f},$$

cujas a solução é o vetor de aproximações $\mathbf{u} = (U_{1,1}, U_{1,2}, \dots)$ para a função u original, avaliada nos vértices da malha cartesiana.

O objetivo é utilizar diferenças finitas em uma malha cartesiana irregular, então tal aproximação deve ser modificada, pois uma discretização por um laplaciano de 5 pontos resultaria o envolvimento de valores não conhecidos no interior da malha. Desta forma é preciso realizar um procedimento de interpolação que seja genérico o suficiente para englobar qualquer configuração de células (como no exemplo da figura 2.2), e que seja preciso o suficiente para não deteriorar a ordem de convergência do método numérico. Uma clara desvantagem da utilização de malhas irregulares como as exemplificadas anteriormente é que uma numeração do tipo matricial (i, j) não é mais possível, sendo necessária a definição de uma enumeração dos nós válidos da malha. Tal enumeração é fornecida pela estrutura HiG-Tree, contudo, diferentes formas de enumeração podem ser implementadas, com impacto direto na estrutura da matriz do sistema resultante, e consequentemente no desempenho dos métodos numéricos utilizados para resolvê-lo.

Figura 2.3: Exemplo de um estêncil resultando em pontos a serem interpolados (x_L e x_B).

Considere o caso ilustrado na figura 2.3, onde um estêncil de cinco pontos é utilizado para discretizar as derivadas no ponto x_C . É fácil notar que, devido a configuração irregular da malha, não existe nó da malha que armazene um valor de u para os pontos x_L e x_B , ou seja, não existem incógnitas U_L e U_B para o sistema linear. Neste exemplo, é necessário obter então uma interpolação dos nós vizinhos, pertencentes à malha, mais próximos às incógnitas

não existentes. Digamos que uma interpolação adequada resulte na seguinte expressão para U_L

$$U_L \approx w_1 U_{j_1} + w_2 U_{j_2} + \cdots + w_n U_{j_n},$$

sendo $U_{j_1}, U_{j_2}, \dots, U_{j_n}$ valores conhecidos na malha. Escrevendo a fórmula usual do laplaciano de 5 pontos para o ponto x_C , obtém-se uma equação para U_C , a saber,

$$\frac{U_L - 2U_C + U_R}{\delta x^2} + \frac{U_T - 2U_C + U_B}{\delta y^2} = f_C,$$

que pode ainda ser reescrita como

$$a_L U_L + a_R U_R + a_T U_T + a_B U_B + a_C U_C = f_C,$$

onde

$$a_L = \frac{1}{\delta x^2}, \quad a_R = \frac{1}{\delta x^2}, \quad a_T = \frac{1}{\delta y^2}, \quad a_B = \frac{1}{\delta y^2}, \quad a_C = -\frac{2}{\delta x^2} - \frac{2}{\delta y^2}.$$

Substituindo o valor interpolado de U_L na equação, obtém-se

$$a_L (w_1 U_{j_1} + w_2 U_{j_2} + \cdots + w_n U_{j_n}) + a_R U_R + a_T U_T + a_B U_B + a_C U_C = f_C,$$

gerando-se novos coeficientes e uma equação. Note que o mesmo deve ser feito para U_B , para que a equação envolva finalmente somente valores conhecidos da malha. Note que este processo pode ser repetido arbitrariamente para qualquer valor que ainda não esteja definido na malha, e que incógnitas repetidas podem ser agrupadas em um único coeficiente multiplicativo. Desta forma, obtém-se uma expressão que é uma combinação linear formada somente por incógnitas verdadeiras, para valores definidos na malha, que define a equação para a incógnita U_C no sistema linear.

A próxima seção explica como obter uma interpolação que seja suficientemente genérica e precisa, e como obter os pesos $w_{j_1}, w_{j_2}, \dots, w_{j_n}$ necessários.

2.3 Interpolações

2.3.1 Aproximação polinomial

Um dos objetivos do método descrito aqui é obter uma aproximação para o valor de uma propriedade em um dado ponto (x, y, z) em função dos valores da propriedade em m outros pontos $(x_1, y_1, z_1), \dots, (x_m, y_m, z_m)$. Os valores nos m pontos não são conhecidos a priori. Denotamos o valor em um ponto (x, y, z) por $P(x, y, z)$ um polinômio de grau no máximo r ,

$$P(x, y, z) = \alpha_{i_1, j_1, k_1} x^{i_1} y^{j_1} z^{k_1} + \cdots + \alpha_{i_n, j_n, k_n} x^{i_n} y^{j_n} z^{k_n} = c^t \alpha,$$

onde $0 \leq i_s + j_s + k_s \leq r$, para $s = 1, \dots, n$. Observe que poderia ser uma combinação de funções não polinomiais.

Assim, o método deve obter os coeficientes w_i , para $1 \leq i \leq m$, de forma que

$$P(x, y, z) = \sum_{i=1}^m w_i P(x_i, y_i, z_i) = w^t b.$$

Assim,

$$\begin{aligned}
b = \begin{pmatrix} P(x_1, y_1, z_1) \\ \vdots \\ P(x_m, y_m, z_m) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_1^{i_1} y_1^{j_1} z_1^{k_1} & \cdots & x_1^{i_n} y_1^{j_n} z_1^{k_n} \\ \vdots & & \vdots \\ x_m^{i_1} y_m^{j_1} z_m^{k_1} & \cdots & x_m^{i_n} y_m^{j_n} z_m^{k_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} a_1^t \\ \vdots \\ a_m^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = A \alpha
\end{aligned}$$

Logo,

$$w^t b = w^t A \alpha = c^t \alpha$$

e uma solução é dada por $w^t A = c^t$, ou

$$A^t w = c.$$

Se $m \geq n$ e A tem posto máximo n , w pode ser obtido pelo método dos mínimos quadrados.

2.3.2 Aproximação pelo Método dos Mínimos Quadrados

Fazendo a decomposição QR de A , temos:

$$\begin{aligned}
A_{m \times n} &= \begin{pmatrix} A_{1n \times n} \\ A_{2m-n \times n} \end{pmatrix} = Q_{m \times m} R_{m \times n}^* \\
&= Q_{m \times m} \begin{pmatrix} R_{n \times n} \\ 0_{m-n \times n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.1}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
w &= A^+ c^t = A (A^t A)^{-1} c^t = Q R^* (R^{*t} Q^t Q R^*)^{-1} c^t = Q R^* (R^t R)^{-1} c^t = \\
&= Q R^* R^{-1} (R^t)^{-1} c^t = Q \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} R^{-1} (R^t)^{-1} c^t = Q \begin{pmatrix} (R^t)^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} c^t
\end{aligned}$$

Fazendo $u = Q^t w$ e $u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$, temos:

$$\begin{aligned}
u &= Q^t w = \begin{pmatrix} (R^t)^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} c^t \\
u &= \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (R^t)^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} c^t \\
\begin{cases} u_1 &= (R^t)^{-1} c^t \\ u_2 &= 0 \end{cases}
\end{aligned}$$

Daí, resolvendo o sistema triangular inferior $R^t u_1 = c^t$, temos $w = Qu$, com $u_2 = 0$.

Resumindo, são dados A e c^t e queremos w , então são feitos três passos:

1. Fazer a decomposição QR de A , isto é, $A = Q R^*$;
2. Resolver o sistema triangular inferior $R^t u_1 = c^t$;
3. Fazer $w = Qu$ com $u_2 = 0$.

Observe que para o caso de $m = n$, a aproximação polinomial P será o polinômio interpolador.

2.3.3 Cálculo dos coeficientes

Seja

$$C = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \\ A_2 & B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11}R & Q_{12} \\ Q_{21}R & Q_{22} \end{pmatrix}.$$

Desde que,

$$\begin{aligned} I_m = Q^t Q &= \begin{pmatrix} Q_{11}^t & Q_{21}^t \\ Q_{12}^t & Q_{22}^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} Q_{11}^t Q_{11} + Q_{21}^t Q_{21} & Q_{11}^t Q_{12} + Q_{21}^t Q_{22} \\ Q_{12}^t Q_{11} + Q_{22}^t Q_{21} & Q_{12}^t Q_{12} + Q_{22}^t Q_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & I_{m-n} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

Temos que,

$$A^t B = \begin{pmatrix} A_1^t & A_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = A_1^t B_1 + A_2^t B_2 = R(Q_{11}^t Q_{12} + Q_{21}^t Q_{22}) = 0,$$

$$B^t B = \begin{pmatrix} B_1^t & B_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = B_1^t B_1 + B_2^t B_2 = Q_{12}^t Q_{12} + Q_{22}^t Q_{22} = I_{m-n},$$

e

$$C^t C = \begin{pmatrix} A_1^t & A_2^t \\ B_1^t & B_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \\ A_2 & B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^t R & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}.$$

Logo $\text{Det}(C) = \pm \text{Det}(R) = R_{1,1} \cdots R_{n,n}$, e se A tem posto máximo $R_{i,i} \neq 0$ e

$$C^t w = \begin{pmatrix} A_1^t & A_2^t \\ B_1^t & B_2^t \end{pmatrix} w = \begin{pmatrix} c \\ 0 \end{pmatrix},$$

tem solução única.

Se $m = n$, $C^t = A_1^t = (a_1 \cdots a_n)$. Logo se $x = x_i (i = 1, \dots, n)$ tem-se $c = a_i$ e $C^t w = d$, segue que $A_1 w = c$ que implica que

$$(a_1 \cdots a_i \cdots a_n) w = a_i,$$

tem solução $w_k = 1$ se $i = k$ e $w_k = 0$ se $i \neq k$.

Se $m > n$ e $x = x_i (i = 1, \dots, n)$,

$$C^t w = \begin{pmatrix} A_1^t & A_2^t \\ B_1^t & B_2^t \end{pmatrix} w = \begin{pmatrix} a_1 & \cdots & a_i & \cdots & a_m \\ b_1 & \cdots & b_i & \cdots & b_m \end{pmatrix} w = \begin{pmatrix} c \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Como

$$\begin{aligned} C^t &= \begin{pmatrix} A_1^t & A_2^t \\ B_1^t & B_2^t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^t & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_{11}^t & Q_{21}^t \\ Q_{12}^t & Q_{22}^t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^t & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} Q^t, \\ \begin{pmatrix} A_1^t & A_2^t \\ 0 & 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} R^t & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_{11}^t & Q_{21}^t \\ Q_{12}^t & Q_{22}^t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^t & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q^t, \end{aligned}$$

que implica que

$$\begin{pmatrix} a_i \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1^t & A_2^t \\ 0 & 0 \end{pmatrix} e_i = \begin{pmatrix} R^t & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q^t e_i.$$

Logo,

$$\begin{aligned} C^t w &= d \\ \begin{pmatrix} R^t & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} Q^t w &= \begin{pmatrix} R^t & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q^t e_i. \\ w &= Q \begin{pmatrix} R^{-t} & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R^t & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q^t e_i. \\ w &= Q \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q^t e_i. \end{aligned}$$

2.3.4 Diferenças Finitas Generalizadas

Considere a equação

$$f''(x) = g(x)$$

em um intervalo $[a, b]$ com $f(a) = \alpha$ e $f(b) = \beta$.

Se subdividirmos o intervalo $[a, b]$ em intervalos igualmente espaçados $x_i = x_0 + ih$, $x_0 = a$ e $x_n = b$, uma discretização para a equação acima utilizando diferenças finitas é dada por:

$$\frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2} = g_i$$

este método é um método com erro local de truncamento da ordem de h^2 , isto é,

$$\frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2} - g_i = f''(x_i) - g(x_i) + O(h^2)$$

Caso o espaçamento dos pontos não seja uniforme, podemos o método dos mínimos quadrados para aproximar $f_{i-1}^* \sim f(x_i - h)$ e $f_{i+1}^* \sim f(x_i + h)$, isto é,

$$f_{i-1}^* = \sum_{x_j \in V(x_i - h)} w_j f_j$$

$$f_{i+1}^* = \sum_{x_k \in V(x_i + h)} w_k f_k$$

Se tomarmos os pontos na vizinhança em número suficiente, temos que $f_{i-1}^* = f(x_i - h) + O(h^4)$ e $f_{i+1}^* = f(x_i + h) + O(h^4)$.

Assim temos que:

$$\begin{aligned} \frac{f_{i-1}^* - 2f_i + f_{i+1}^*}{h^2} - g_i &= \frac{f(x_i - h) + O(h^4) - 2f(x_i) + f(x_i + h) + O(h^4)}{h^2} - g_i = \\ &= \frac{f(x_i - h) - 2f(x_i) + f(x_i + h)}{h^2} - g(x_i) + O(h^2) = f''(x_i) - g(x_i) + O(h^2) \end{aligned}$$

Desta forma o método fica:

$$f_{i-1}^* - 2f_i + f_{i+1}^* = h^2 g_i$$

$$\left(\sum_{x_j \in V(x_i-h)} w_j f_j \right) - 2f_i + \left(\sum_{x_k \in V(x_i+h)} w_k f_k \right) = h^2 g_i$$

Capítulo 3

Metodologia numérica

O Esquema Compacto de Diferenças Finitas (ECDF) é um método de resolução de equações diferenciais, que se baseia na aproximação de derivadas por aproximações de diferenças finitas implícitas representados por um estêncil pequeno. Neste capítulo, será tratado a dedução das fórmulas que compõem o ECDF. As fórmulas serão aplicadas no próximo capítulo.

3.1 Modelagem Matemática

Dinâmica de fluidos computacional é um dos campos da ciência que tem como objetivo descrever o comportamento dos fluidos (gases ou líquidos) e das leis que regem este comportamento através da obtenção de soluções numéricas para um sistema de equações diferenciais [30]. Os fluidos são geralmente classificados em compressíveis e incompressíveis, sendo que o primeiro sofre variações na densidade, enquanto no segundo a densidade permanece constante. Um aspecto relevante de um fluido é a sua viscosidade que pode ser interpretada como uma medida da resistência ao cisalhamento pelo fluido [34]. Com base nessa resistência ao cisalhamento, pode-se classificar os fluidos em newtonianos, em que a tensão de cisalhamento é diretamente proporcional a taxa de deformação, e os não newtonianos que não obedecem esse comportamento. Qualquer escoamento de um fluido é governado pelas equações de Navier-Stokes, as quais constituem um sistema de equações diferenciais parciais que descrevem o escoamento de fluidos compressíveis ou incompressíveis, turbulentos e laminares. Em particular, estas equações modelam alguns problemas de dinâmica dos fluidos como o fluxo sanguíneo através de artérias, veias e o movimento de água e rios.

3.2 Equações Diferenciais Parciais

Muitos fenômenos físicos são modelados por Equações Diferenciais Parciais (EDPs). As grandezas físicas procuradas, como, por exemplo, velocidade e pressão de um fluido, normalmente, são representadas por modelos que dependem de muitas variáveis [9]. Para efeito de classificação, divide-se as EDPs de segunda ordem em três categorias básicas:

1. Elípticas (normalmente associadas com problemas estacionários). Um exemplo de equação elíptica é dado por

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0, \quad (3.1)$$

que é a equação de Laplace.

2. Parabólicas (associadas com problemas de fluxo contendo mecanismos de dissipação). Um exemplo de equação parabólica é a equação do calor, dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (3.2)$$

em que T é a temperatura e α é o coeficiente de difusividade térmica do material.

3. Hiperbólicas (em geral associadas com problemas de fluxo que não contenham mecanismos de dissipação). Um exemplo de equação hiperbólica é dado por

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \alpha^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}, \quad (3.3)$$

que é a equação da onda, em que a constante α é a velocidade de propagação da onda.

Em geral EDPs podem ser relacionadas com problemas de fluxo de fluido, sendo as equações de Navier-Stokes o exemplo mais importante.

As equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível são dadas por:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p_{\nabla} \cdot (2\mu \mathbf{d}) + \mathbf{f}, \quad (3.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.5)$$

onde ρ é a densidade de massa (massa por unidade de volume), $\mathbf{d} = \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T}{2}$ é o tensor taxa de deformação de um fluido, μ é a viscosidade do fluido e p é a pressão estática.

A condição inicial é dada por: $\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0$, e a condição de contorno para o campo de velocidade pode ser, entre outras, do tipo Dirichlet ou Neumann.

De acordo com [39] tentar desenvolver um esquema numérico para resolver as equações (3.4)-(3.5) significa lidar com algumas dificuldades destas equações: a não linearidade das equações devido ao termo convectivo, a falta de uma equação para a pressão, etc. A maioria dos esquemas partem de equações discretizadas no tempo. A seguir, apresentam-se algumas aproximações no tempo das equações de Navier-Stokes:

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^n \right) &= -\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot [2\mu \mathbf{d}]^n + \mathbf{f}^n, \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} &= 0, \end{cases} \quad (3.6)$$

O sistema (3.6) pode ser obtido integrando-se as equações de Navier-Stokes no intervalo $[t^n, t^{n+1}]$ ($\Delta t = t^{n+1} - t^n$) [21]. O esquema (3.6) é de primeira ordem no tempo. Uma solução direta do sistema acoplado não é praticável devido à necessidade de métodos robustos para lidar com sistemas não lineares de equações e ao custo computacional que isto acarreta.

As metodologias mais populares estão baseadas no desacoplamento do cálculo da velocidade e da pressão, que permite o uso de técnicas mais eficientes para cada um dos processos resultantes [39] [25].

Harlow e Welch [17] apresentaram o método MAC (*marker and cell*) desenvolvido para o tratamento de escoamentos incompressíveis com superfícies livres. A proposta para resolver as equações de Navier-Stokes consiste na geração de uma equação de Poisson para a pressão, a partir da equação do balanço da quantidade de movimento discreta no tempo e da condição de livre divergência da velocidade. Uma vez obtida a pressão, o campo de velocidade é calculado da equação de quantidade de movimento considerando a pressão calculada. Vários trabalhos foram desenvolvidos seguindo esta filosofia. Liu [11] usou esta técnica para cada

sub-estágio do método de Runge-Kutta de quarta ordem empregado no estudo de esquemas de diferenças finitas usando a formulação vorticidade. Nos anos 60, Chorin [7] observou que para escoamentos incompressíveis, a pressão não tem um papel termodinâmico, ela tem por função forçar a condição de incompressibilidade para o fluido. Esta observação motivou um esquema de discretização baseado na separação de operadores e é conhecido como o método de projeção ou o método de passo fracionário. Neste método, os cálculos da velocidade e da pressão são realizados por intermédio de dois passos: um preditor e outro corretor. No primeiro passo, um campo de velocidade auxiliar é calculado, resolvendo-se a equação da quantidade de movimento sem considerar o termo da pressão e a condição de incompressibilidade. No segundo passo, de acordo com o teorema de decomposição de Hodge [6] a velocidade auxiliar é projetada no espaço dos campos vetoriais com divergente zero para determinar a pressão (ou correção de pressão) e a velocidade correta (que satisfaz a condição de incompressibilidade).

3.3 Equação de Poisson no Método de Projeção

Como foi descrito da seção anterior, o método de projeção está baseado no desacoplamento do cálculo da velocidade e da pressão. Várias propostas foram apresentadas [4], [7], [22], [19] e as principais diferenças entre elas residem nas expressões para o cálculo da velocidade auxiliar e para o passo de projeção. Exemplos da aplicabilidade dos métodos de projeção em problemas práticos podem ser encontrados em [12], [13], [38], [33], [36], [37], [10]. A seguir mostraremos a equação elíptica que aparece no Método de Projeção. Para isto, usaremos um método de projeção explícito.

3.3.1 Um método explícito de primeira ordem no tempo

O método explícito a ser apresentado está baseado na aproximação de primeira ordem no tempo, (3.4), para as equações de Navier-Stokes (3.6). Estas aproximações serão resolvidas através do método de projeção, que será dividido em três passos:

Passo 1:

Cálculo de uma velocidade auxiliar, $\mathbf{u}^*$, da equação da quantidade de movimento do sistema (3.6), sem considerar a condição de incompressibilidade:

$$\rho \left(\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}}{\Delta t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla q + \nabla \cdot [2\mu \mathbf{d}]^n + \mathbf{f}^n, \quad (3.7)$$

$$\mathbf{CC}(\mathbf{u}^*) = \mathbf{h}_{\mathbf{u}^*}, \quad (3.8)$$

onde q é uma aproximação para p^{n+1} e $\mathbf{CC}$ é algum tipo de condição de contorno para a velocidade auxiliar.

Passo 2:

Projeção da velocidade auxiliar:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \phi, \quad (3.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0. \quad (3.10)$$

Para calcular $\mathbf{u}^{n+1}$ de (3.9) é necessário conhecer ϕ . Aplicando-se o operador divergente à equação (3.9) e usando a igualdade (3.10), tem-se uma equação de Poisson para ϕ

$$\nabla^2 \phi = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad (3.11)$$

A solução desta equação será obtida uma vez definida a condição de contorno para ϕ .

Passo 3:

Determinação da pressão (atualização da pressão). Para isto será usado o seguinte fato: equações (3.7) e (3.9) aproximam a equação (3.6). Portanto, substituindo-se (3.9) em (3.7) e igualando-se com a equação (3.6) obtém-se

$$p^{n+1} = \phi + q. \quad (3.12)$$

O método de projeção foi criado com o objetivo de tratar dificuldades que surgem do modo como as incógnitas $\mathbf{u}$ e ρ estão acopladas em uma mesma equação. Tal acoplamento pode gerar sistemas muito grandes a serem resolvidos e que, em diversos casos, possuem matrizes malcondicionadas que interferem na convergência de métodos iterativos. Os métodos de projeção propõem a realização do cálculo de $\mathbf{u}$ e ρ separadamente, o que facilita a resolução dos sistemas lineares necessários.

Desta forma, a equação de Poisson resultante do método de projeção tornou-se objeto desse estudo e a solução numérica dessas EDPs não-lineares, é apresentada no capítulo seguinte.

3.4 Formulação de métodos

Devido ao fato das equações diferenciais, que em geral, modelam problemas de fluxo de fluido que apresentam complexidade de se obter soluções analíticas, faz-se necessário a aplicação de técnicas numéricas para resolvê-las. Essas equações são substituídas por um sistema de equações algébricas. Na literatura, encontra-se diversas técnicas para obter o sistema de equações algébricas, como por exemplo, diferenças finitas [9], elementos finitos [41], volumes finitos [28] e métodos espectrais [27].

Nesse trabalho, escolheu-se a técnica de diferenças finitas compactas que será abordada a seguir.

3.5 Esquema compacto de diferenças finitas

Esta seção fornece a dedução de um esquema compacto de diferenças finitas aplicada à problemas elípticos, conforme o procedimento descrito em [24]. Será tratado problemas 1D e 2D com coeficientes variáveis de convecção. Para introduzir as idéias principais, considere a equação de convecção-difusão

$$-a \frac{d^2 \phi}{dx^2} + u \frac{d\phi}{dx} = S(x) \quad (3.13)$$

com coeficientes a e u constantes, termo fonte $S(x)$ e condição do contorno do tipo Dirichlet $\phi(0) = \phi_0$ e $\phi(1) = \phi_1$. Este problema modelo é representativo de uma classe de problemas de transporte. Suponha que o domínio $[0; 1]$ seja dividido em células uniformemente espaçadas de comprimento h e que ϕ_i refere-se a aproximação de $\phi(x_i)$, onde x_i é a

coordenada do nó correspondente. Usando diferenças finitas centradas de segunda ordem, temos:

$$-a \frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{h^2} + u \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} - \tau_i = S(x_i) \quad (3.14)$$

onde τ_i é o erro de truncamento em i dado por

$$\tau_i = \frac{h^2}{12} \left[2u \frac{d^3\phi}{dx^3} - a \frac{d^4\phi}{dx^4} \right] + O(h^4) \quad (3.15)$$

Obtemos um esquema de diferenças finitas centradas de ordem $O(h^2)$. Podemos observar em (3.15) que se o termo $\left[2u \frac{d^3\phi}{dx^3} - a \frac{d^4\phi}{dx^4} \right]$ desaparecer, o esquema teria, pelo menos, ordem $O(h^4)$. Uma outra alternativa, segundo [24] e [42], seria o termo $\left[2u \frac{d^3\phi}{dx^3} - a \frac{d^4\phi}{dx^4} \right]$ ser aproximado por derivadas de ordem $O(h^4)$. Então teríamos um esquema de quarta ordem. Para obter um esquema compacto de alta ordem, devemos aproximar as derivadas do lado direito de (3.15) e depois incluí-las na equação discreta. As relações para $\frac{d^3\phi}{dx^3}$ e $\frac{d^4\phi}{dx^4}$ podem ser obtidas derivando a equação (3.13)

$$\begin{aligned} \frac{d^3\phi}{dx^3} &= \frac{1}{a} \left(u \frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{dS}{dx} \right), \\ \frac{d^4\phi}{dx^4} &= \frac{1}{a} \left(u \frac{d^3\phi}{dx^3} - \frac{d^2S}{dx^2} \right), \\ &= \frac{u}{a^2} \left(u \frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{dS}{dx} \right) - \frac{1}{a} \frac{d^2S}{dx^2}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Usando aproximações de diferenças finitas centradas de ordem $O(h^2)$ nas derivadas do lado direito de (3.16) a ordem de convergência é aumentada para $O(h^4)$. Assim, o esquema resultante permanece compacto, como desejado. O termo fonte S desempenha um papel importante nas aproximações $\frac{d^3\phi}{dx^3}$ e $\frac{d^4\phi}{dx^4}$. Se for possível calcular as derivadas de S analiticamente, essa informação poderá ser usada nas equações (3.16), no entanto, se isso não for possível, podemos usar uma aproximação de diferenças finita centrada de ordem $O(h^2)$ para aproximar o valor de $\frac{dS}{dx}$ e $\frac{d^2S}{dx^2}$ que ainda resulta em um esquema de quarta ordem. Podemos repetir o procedimento acima apresentado para criar esquemas compactos de alguma ordem arbitrária.

3.6 Equação elíptica 2D

Abordaremos a partir de agora um problema de Poisson 2D com coeficientes variáveis

$$a \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \phi}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial y} = f(x, y) \quad (3.17)$$

sujeito às condições de contorno em $\partial\Omega$ de Dirichlet, onde $f(x, y)$ é o termo forçante, Ω é o domínio espacial, a, c, d e e são funções que serão definidas nos testes e ϕ é a incógnita. Como relatamos na seção (3.3), é de grande interesse resolver o problema (3.17), construiremos um esquema compacto de diferenças finitas para resolver problemas desse tipo.

3.6.1 Formulação do esquema compacto de alta ordem

Por conveniência na aplicação do método para resolver a equação (3.17), primeiro vamos considerar o caso em que a, c, d e e são constantes e o domínio discretizado em uma malha

uniforme. Denotamos $\phi(x_i, y_j)$ por $\phi_{i,j}$ e, seguindo o procedimento adotado na seção (3.5), substituímos os operadores por aproximações de diferenças finitas centradas na equação (3.17), teremos

$$a\delta_x^2\phi_{i,j} + c\delta_y^2\phi_{i,j} + d\delta_x\phi_{i,j} + e\delta_y\phi_{i,j} - \tau_{i,j} = f_{i,j} \quad (3.18)$$

onde o erro de truncamento é igual a

$$\tau_{i,j} = \frac{h^2}{12} \left[2 \left(d \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + e \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} \right) + \left(a \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + c \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} \right) \right]_{i,j} + O(h^4). \quad (3.19)$$

Tabela 3.1: Definições de operadores de derivadas mistas em uma malha uniforme

Operador	Fórmula
$\delta_x \delta_y \phi_{i,j}$	$\frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i-1,j+1} - \phi_{i+1,j-1} + \phi_{i-1,j-1}}{4h^2}$
$\delta_x^+ \delta_y^+ \phi_{i,j}$	$\frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i,j+1} - \phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{h^2}$
$\delta_x^+ \delta_y^- \phi_{i,j}$	$\frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j} - \phi_{i,j-1} + \phi_{i+1,j-1}}{h^2}$
$\delta_x^- \delta_y^+ \phi_{i,j}$	$\frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i-1,j+1} - \phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{h^2}$
$\delta_x^- \delta_y^- \phi_{i,j}$	$\frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j} - \phi_{i,j-1} + \phi_{i-1,j-1}}{h^2}$
$\delta_x^2 \delta_y \phi_{i,j}$	$\frac{2(\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}) + \phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+1,j-1} + \phi_{i-1,j+1} - \phi_{i-1,j-1}}{2h^3}$
$\delta_x^2 \delta_y^+ \phi_{i,j}$	$\frac{2(\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}) + \phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j+1} - \phi_{i-1,j}}{h^3}$
$\delta_x^2 \delta_y^- \phi_{i,j}$	$\frac{2(\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}) + \phi_{i+1,j} - \phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - \phi_{i-1,j-1}}{h^3}$
$\delta_x \delta_y^2 \phi_{i,j}$	$\frac{2(\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}) + \phi_{i+1,j+1} - \phi_{i-1,j+1} + \phi_{i+1,j-1} - \phi_{i-1,j-1}}{h^3}$
$\delta_x^+ \delta_y^2 \phi_{i,j}$	$\frac{2(\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}) + \phi_{i+1,j+1} - \phi_{i,j+1} + \phi_{i+1,j-1} - \phi_{i,j-1}}{h^3}$
$\delta_x^- \delta_y^2 \phi_{i,j}$	$\frac{2(\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}) + \phi_{i,j+1} - \phi_{i-1,j+1} + \phi_{i,j-1} - \phi_{i-1,j-1}}{h^3}$
$\delta_x^2 \delta_y^2 \phi_{i,j}$	$\frac{4\phi_{i,j} - 2(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1})}{h^4} +$ $\frac{\phi_{i+1,j+1} + \phi_{i+1,j-1} + \phi_{i-1,j+1} + \phi_{i-1,j-1}}{h^4}$

Como feito anteriormente, iremos agora calcular as aproximações das derivadas em (3.19) e incluir na equação discretizada (3.18). Derivando a equação (3.17), temos

$$\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} = \frac{1}{a} \left(\frac{\partial f}{\partial x} - c \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^2} - d \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - e \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right) \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} = \frac{1}{a} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - c \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^2 \partial y^2} - d \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - e \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} \right) \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} = \frac{1}{c} \left(\frac{\partial f}{\partial y} - a \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} - d \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} - e \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} = \frac{1}{c} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - a \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^2 \partial y^2} - d \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^2} - e \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} \right) \quad (3.23)$$

Note que todos os termos do lado direito da equação (3.20) tem ordem $O(h^2)$ de aproximação (ver tabela 3.1 a lista completa dos operadores de derivadas mistas). Por exemplo

$$\left. \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^2} \right|_{i,j} = \delta_x \delta_y^2 \phi_{i,j} - \frac{h^2}{12} \left[2 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x \partial y^4} \right]_{i,j} + O(h^4), \quad (3.24)$$

Assim, $\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$ pode ser aproximado com ordem $O(h^2)$. Analogamente todos os termos do lado direito da equação (3.21) tem ordem $O(h^2)$ de aproximação, então $\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$ pode ser aproximado com ordem $O(h^2)$. O mesmo acontece com $\frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$ e $\frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4}$. Diante disso temos que as equações (3.20)-(3.23) têm ordem $O(h^2)$ de aproximação.

Substituindo as equações (3.20)-(3.23) na equação (3.19) e simplificando, temos que o erro de truncamento fica

$$\begin{aligned} \tau_{ij} = & \frac{h^2}{12} \left[-\frac{2d^2}{a} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{2dec+aed}{ac} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} - \frac{e^2}{c} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - (a+c) \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^2 \partial y^2} - \frac{2dc+ad}{a} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^2} \right] + \\ & \frac{h^2}{12} \left[-\frac{ea+ec}{c} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} - d \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - e \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{2d}{a} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{e}{c} \frac{\partial f}{\partial y} \right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

Agora, substituindo as derivadas em (3.25) por aproximações de ordem $O(h^2)$ e inserindo-as na equação (3.18), temos

$$\begin{aligned} & - \left(1 + \frac{a^2 h^2}{12} \right) \delta_x^2 \phi_{ij} - \left(1 + \frac{c^2 h^2}{12} \right) \delta_y^2 \phi_{ij} + a \delta_x \phi_{ij} + c \delta_y \phi_{ij} - \\ & \frac{h^2}{6} [\delta_x^2 \delta_y^2 \phi_{ij} - a \delta_x \delta_y^2 \phi_{ij} - c \delta_x^2 \delta_y \phi_{ij} + ac \delta_x \delta_y \phi_{ij}] = \\ & f_{ij} + \frac{h^2}{12} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - a \frac{\partial f}{\partial x} - c \frac{\partial f}{\partial y} \right]_{ij} + O(h^4). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Se os coeficientes a, c, d e e são variáveis ao longo do domínio, o procedimento para se chegar no esquema compacto é o mesmo, porém exige um pouco mais de manipulação algébrica para derivar as fórmulas resultantes do erro de truncamento [42]. No caso onde os coeficientes a, c, d e e são variáveis, temos o seguinte esquema compacto de $O(h^4)$

$$\begin{aligned} & A_{ij}^* \delta_x^2 \phi_{ij} + B_{ij}^* \delta_x \delta_y \phi_{ij} + C_{ij}^* \delta_y^2 \phi_{ij} + D_{ij}^* \delta_x \phi_{ij} + E_{ij}^* \delta_y \phi_{ij} + F_{ij}^* \phi_{ij} + P_{ij}^* \delta_x^2 \delta_y^2 \phi_{ij} + Q_{ij}^* \delta_x^2 \delta_y \phi_{ij} \\ & + R_{ij}^* \delta_x \delta_y^2 \phi_{ij} = G_{ij}^* \end{aligned} \quad (3.27)$$

onde os valores para $A_{ij}^*, B_{ij}^*, C_{ij}^*, D_{ij}^*, E_{ij}^*, F_{ij}^*, P_{ij}^*, Q_{ij}^*, R_{ij}^*$ e G_{ij}^* pode ser encontrado seguindo o procedimento a seguir.

Primeiro, temos a seguinte equação

$$a(x, y) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + c(x, y) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial x} + e(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial y} + f(x, y) \phi = g(x, y) \quad (3.28)$$

sujeito às condições de contorno em $\partial\Omega$ de Dirichlet, onde $g(x, y)$ é o termo forçante, Ω é o domínio espacial, a, c, d, e e f são funções que serão definidas nos testes e ϕ é a incógnita.

Substituindo os operadores por aproximações de diferenças finitas centradas na equação 3.28 temos o esquema compacto de diferenças finitas de segunda ordem

$$a_{ij} \delta_x^2 \phi_{ij} + c_{ij} \delta_y^2 \phi_{ij} + d_{ij} \delta_x \phi_{ij} + e_{ij} \delta_y \phi_{ij} + f_{ij} \phi_{ij} + \tau_{ij} = g_{ij} \quad (3.29)$$

com o erro local de truncamento dado por

$$\tau_{ij} = -\frac{1}{12} \left[a_{ij} h_x^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}_{ij} + c_{ij} h_y^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4}_{ij} + 2d_{ij} h_x^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}_{ij} + 2e_{ij} h_y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}_{ij} \right] + O(h^4). \quad (3.30)$$

Para obter um esquema compacto de quarta ordem seguimos a seguinte metodologia:

Derivando a equação 3.28 em relação a x , temos

$$\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} = \frac{1}{a} \left[\frac{\partial g}{\partial x} - \left(\frac{\partial a}{\partial x} + d \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - e \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} - c \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^3} - \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial d}{\partial x} + f \right) \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial x} \phi \right]. \quad (3.31)$$

analogamente, derivando a equação 3.28 em relação a y , temos

$$\frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} = \frac{1}{c} \left[\frac{\partial g}{\partial y} - \left(\frac{\partial c}{\partial y} + e \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - a \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} - \frac{\partial a}{\partial y} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - d \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial d}{\partial y} \frac{\partial \phi}{\partial x} - \left(\frac{\partial e}{\partial y} + f \right) \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial y} \phi \right]. \quad (3.32)$$

depois, derivando a equação 3.31 em relação a x , temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} &= \frac{1}{a} \left[\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} - \left(2 \frac{\partial a}{\partial x} + d \right) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial d}{\partial x} + f \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - e \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} - 2 \frac{\partial e}{\partial x} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + \right. \\ &\quad \left. - c \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^2 \partial y^2} - 2 \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^2} - \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 d}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial f}{\partial x} \right) \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial e}{\partial x^2} \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \phi \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

seguindo o raciocínio anterior, derivamos a equação 3.32 em relação a y

$$\begin{aligned} \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} &= \frac{1}{c} \left[\frac{\partial^2 g}{\partial y^2} - \left(2 \frac{\partial c}{\partial y} + e \right) \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} - \left(\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial e}{\partial y} + f \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - d \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^2} - 2 \frac{\partial d}{\partial y} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - a \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^2 \partial y^2} - 2 \frac{\partial a}{\partial y} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^2} - \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x} - \left(\frac{\partial^2 e}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial f}{\partial y} \right) \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \phi \right]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Usando diferenças finitas centradas em (x_i, y_j) para $u_{xxx}, u_{yyy}, u_{xxxx}$ e u_{yyyy} , temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}_{ij} &= \frac{1}{a_{ij}} \left[\delta_x g_{ij} - (\delta_x a_{ij} + d_{ij}) \delta_x^2 \phi_{ij} - e_{ij} \delta_x \delta_y \phi_{ij} - c_{ij} \delta_x \delta_y^2 \phi_{ij} - \delta_x c_{ij} \delta_y^2 \phi_{ij} + \right. \\ &\quad \left. - (\delta_x d_{ij} + f_{ij}) \delta_x \phi_{ij} - \delta_x e_{ij} \delta_y \phi_{ij} - \delta_x f_{ij} \phi_{ij} \right] + O(h_x^2 + h_x h_y + h_y^2). \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}_{ij} &= \frac{1}{c_{ij}} \left[\delta_y g_{ij} - (\delta_y c_{ij} + e_{ij}) \delta_y^2 \phi_{ij} - a_{ij} \delta_y^2 \delta_x \phi_{ij} - \delta_y a_{ij} \delta_x^2 \phi_{ij} - d_{ij} \delta_x \delta_y \phi_{ij} + \right. \\ &\quad \left. - \delta_y d_{ij} \delta_x \phi_{ij} - (\delta_y e_{ij} + f_{ij}) \delta_y \phi_{ij} - \delta_y f_{ij} \phi_{ij} \right] + O(h_x^2 + h_x h_y + h_y^2). \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}_{ij} &= \frac{1}{a_{ij}} \left[\delta_x^2 g_{ij} - (2 \delta_x a_{ij} + d_{ij}) \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_{ij} - (\delta_x^2 a_{ij} + 2 \delta_x d_{ij} + f_{ij}) \delta_x^2 \phi_{ij} + \right. \\ &\quad \left. - e_{ij} \delta_x^2 \delta_y \phi_{ij} - 2 \delta_x e_{ij} \delta_x \delta_y \phi_{ij} - c_{ij} \delta_x^2 \delta_y^2 \phi_{ij} - 2 \delta_x c_{ij} \delta_x \delta_y^2 \phi_{ij} - \delta_x^2 c_{ij} \delta_y^2 \phi_{ij} + \right. \\ &\quad \left. - (\delta_x^2 d_{ij} + 2 \delta_x f_{ij}) \delta_x \phi_{ij} - \delta_x^2 e_{ij} \delta_y \phi_{ij} - \delta_x^2 f_{ij} \phi_{ij} \right] + O(h_x^2 + h_x h_y + h_y^2). \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4}_{ij} &= \frac{1}{c_{ij}} \left[\delta_y^2 g_{ij} - (2 \delta_y c_{ij} + e_{ij}) \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3} \right)_{ij} - (\delta_y^2 c_{ij} + 2 \delta_y e_{ij} + f_{ij}) \delta_y^2 \phi_{ij} + \right. \\ &\quad \left. - d_{ij} \delta_x \delta_y^2 \phi_{ij} - 2 \delta_y a_{ij} \delta_x^2 \delta_y \phi_{ij} - \delta_y^2 a_{ij} \delta_x^2 \phi_{ij} - a_{ij} \delta_x^2 \delta_y^2 \phi_{ij} - 2 \delta_y d_{ij} \delta_x \delta_y \phi_{ij} + \right. \\ &\quad \left. - \delta_y^2 d_{ij} \delta_x \phi_{ij} - (\delta_y^2 e_{ij} + 2 \delta_y f_{ij}) \delta_y \phi_{ij} - \delta_y^2 f_{ij} \phi_{ij} \right] + O(h_x^2 + h_x h_y + h_y^2). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Finalmente, substituindo as equações 3.35 - 3.38 na equação 3.30, combinando com a equação 3.29, temos

$$A_{ij}^* \delta_x^2 \phi_{ij} + B_{ij}^* \delta_x \delta_y \phi_{ij} + C_{ij}^* \delta_y^2 \phi_{ij} + D_{ij}^* \delta_x \phi_{ij} + E_{ij}^* \delta_y \phi_{ij} + F_{ij}^* \phi_{ij} + P_{ij}^* \delta_x^2 \delta_y^2 \phi_{ij} + Q_{ij}^* \delta_x^2 \delta_y \phi_{ij} + R_{ij}^* \delta_x \delta_y^2 \phi_{ij} = G_{ij}^* \quad (3.39)$$

onde:

$$A_{ij}^* = a_{ij} + \frac{1}{12} [h_x^2 (\delta_x^2 a_{ij} + 2\delta_x d_{ij} + f_{ij} + \alpha_{ij} (\delta_x a_{ij} + d_{ij})) + h_y^2 (\delta_y^2 a_{ij} + \beta_{ij} \delta_y a_{ij})] \quad (3.40)$$

$$B_{ij}^* = \frac{1}{12} [h_x^2 (\alpha_{ij} e_{ij} + 2\delta_x e_{ij}) + h_y^2 (\beta_{ij} d_{ij} + 2\delta_y d_{ij})] \quad (3.41)$$

$$C_{ij}^* = c_{ij} + \frac{1}{12} [h_y^2 (\delta_y^2 c_{ij} + 2\delta_y e_{ij} + f_{ij} + \beta_{ij} (\delta_y c_{ij} + e_{ij})) + h_x^2 (\delta_x^2 c_{ij} + \alpha_{ij} \delta_x c_{ij})] \quad (3.42)$$

$$D_{ij}^* = d_{ij} + \frac{1}{12} [h_x^2 (\delta_x^2 d_{ij} + 2\delta_x f_{ij} + \alpha_{ij} (\delta_x d_{ij} + f_{ij})) + h_y^2 (\delta_y^2 d_{ij} + \beta_{ij} \delta_y d_{ij})] \quad (3.43)$$

$$E_{ij}^* = e_{ij} + \frac{1}{12} [h_y^2 (\delta_y^2 e_{ij} + 2\delta_y f_{ij} + \beta_{ij} (\delta_y e_{ij} + f_{ij})) + h_x^2 (\delta_x^2 e_{ij} + \alpha_{ij} \delta_x e_{ij})] \quad (3.44)$$

$$F_{ij}^* = f_{ij} + \frac{1}{12} [h_x^2 (\delta_x^2 f_{ij} + \alpha_{ij} \delta_x f_{ij}) + h_y^2 (\delta_y^2 f_{ij} + \beta_{ij} \delta_y f_{ij})] \quad (3.45)$$

$$P_{ij}^* = \frac{1}{12} (h_y^2 a_{ij} + h_x^2 c_{ij}) \quad (3.46)$$

$$Q_{ij}^* = \frac{1}{12} [h_x^2 e_{ij} + h_y^2 (2\delta_y a_{ij} + \beta_{ij} a_{ij})] \quad (3.47)$$

$$R_{ij}^* = \frac{1}{12} [h_y^2 d_{ij} + h_x^2 (2\delta_x c_{ij} + \alpha_{ij} c_{ij})] \quad (3.48)$$

$$G_{ij}^* = g_{ij} + \frac{1}{12} [h_x^2 (\delta_x^2 g_{ij} + \alpha_{ij} \delta_x g_{ij}) + h_y^2 (\delta_y^2 g_{ij} + \beta_{ij} \delta_y g_{ij})] \quad (3.49)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{d_{ij} - 2\delta_x a_{ij}}{a_{ij}} \quad \beta_{ij} = \frac{e_{ij} - 2\delta_y c_{ij}}{c_{ij}} \quad (3.50)$$

Assim, a equação 3.39 com as equações 3.40 - 3.50 formam o esquema compacto de quarta ordem para resolver a equação elíptica com coeficientes variáveis 3.28. O esquema pode ser escrito como um método de nove pontos, vejamos

$$l_0 u_{ij} + l_1 u_{i+1,j} + l_2 u_{i,j+1} + l_3 u_{i-1,j} + l_4 u_{i,j-1} + l_5 u_{i+1,j+1} + l_6 u_{i-1,j+1} + l_7 u_{i-1,j-1} + l_8 u_{i+1,j-1} = G_{ij}^* \quad (3.51)$$

onde

$$l_0 = -\frac{2}{h_x^2} A_{ij}^* - \frac{2}{h_y^2} C_{ij}^* + F_{ij}^* + \frac{4}{h_x^2 h_y^2} P_{ij}^* \quad (3.52)$$

$$l_1 = \frac{1}{h_x^2} A_{ij}^* + \frac{1}{2h_x} D_{ij}^* - \frac{2}{h_x^2 h_y^2} P_{ij}^* - \frac{1}{h_x h_y^2} R_{ij}^* \quad (3.53)$$

$$l_2 = \frac{1}{h_y^2} C_{ij}^* + \frac{1}{2h_y} E_{ij}^* - \frac{2}{h_x^2 h_y^2} P_{ij}^* - \frac{1}{h_x^2 h_y} Q_{ij}^* \quad (3.54)$$

$$l_3 = \frac{1}{h_x^2} A_{ij}^* - \frac{1}{2h_x} D_{ij}^* - \frac{2}{h_x^2 h_y^2} P_{ij} + \frac{1}{h_x h_y^2} R_{ij}^* \quad (3.55)$$

$$l_4 = \frac{1}{h_y^2} C_{ij}^* - \frac{1}{2h_y} E_{ij}^* - \frac{2}{h_x^2 h_y^2} P_{ij}^* + \frac{1}{h_x^2 h_y} Q_{ij}^* \quad (3.56)$$

$$l_5 = \frac{1}{4h_x h_y} B_{ij}^* + \frac{1}{h_x^2 h_y^2} P_{ij}^* + \frac{1}{2h_x^2 h_y} Q_{ij}^* + \frac{1}{2h_x h_y^2} R_{ij}^* \quad (3.57)$$

$$l_6 = -\frac{1}{4h_x h_y} B_{ij}^* + \frac{1}{h_x^2 h_y^2} P_{ij}^* + \frac{1}{2h_x^2 h_y} Q_{ij}^* - \frac{1}{2h_x h_y^2} R_{ij}^* \quad (3.58)$$

$$l_7 = \frac{1}{4h_x h_y} B_{ij}^* + \frac{1}{h_x^2 h_y^2} P_{ij}^* - \frac{1}{2h_x^2 h_y} Q_{ij}^* - \frac{1}{2h_x h_y^2} R_{ij}^* \quad (3.59)$$

$$l_8 = -\frac{1}{4h_x h_y} B_{ij}^* + \frac{1}{h_x^2 h_y^2} P_{ij}^* - \frac{1}{2h_x^2 h_y} Q_{ij}^* + \frac{1}{2h_x h_y^2} R_{ij}^* \quad (3.60)$$

com o erro local de truncamento: $O(h_x^4 + h_x^3 h_y + h_x^2 h_y^2 + h_x h_y^3 + h_y^4)$.

Podemos observar que para os dois esquemas compactos apresentados para o caso $2D$ envolvem um stencil de nove pontos, isso devido necessidade de introduzir a derivada mista de ϕ na formulação do método. No entanto, segundo [42] devido o método ser compacto, há um pequeno aumento na largura da banda da matriz resultante. Por exemplo, para um domínio quadrado de N pontos na malha, Spotz [42] afirma que para o método de diferenças finitas clássico de $O(h^4)$ a meia largura de banda é dado por $\sqrt{N} + 1$ enquanto que para o esquema compacto de ordem $O(h^4)$ a meia largura de banda é $\sqrt{N} + 2$.

Spotz [42] também evidencia que, para o esquema compacto, os coeficientes de matriz o vetor do lado direito são mais complicados de se obter, pois há um número de operações adicionais comparado com o método clássico. O número de multiplicações e divisões necessárias para calcular o sistema, do esquema compacto para o caso com coeficientes variáveis, é de aproximadamente $56N$, em comparação com aproximadamente $6N$ para o método clássico. Embora este seja um aumento de mais de nove vezes nas operações, esta comparação é insignificante e não deve ser levada em consideração ao se escolher um método, pois o ganho que se tem com o esquema compacto é mais valioso quando estamos comparando o aumento na precisão de aproximação da solução numérica, o que nos permite trabalhar com malhas mais grossas.

Capítulo 4

Resultados e discussões

Este Capítulo apresenta os resultados obtidos com o código implementado ao longo deste trabalho. São mostradas resoluções numéricas de problemas elípticos com coeficientes constantes e variáveis e, em ambos casos, foram consideradas discretizações do domínio em malhas uniformes e malhas hierárquicas (malhas compostas). A convergência e precisão do método foram verificadas usando a estratégia de *solução manufaturada*.

4.1 Normas e análise de convergência numérica em malhas regulares e em malhas compostas

Antes de apresentarmos qualquer resultado numérico, é necessário descrevermos as normas com as quais avaliaremos os erros tanto em malhas uniformes quanto em malhas compostas. Além disso, descreveremos como será efetuada a análise da convergência numérica. Primeiro, definimos as normas $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_2$ e $\|\cdot\|_\infty$ de uma variável escalar ϕ definida em Ω como

$$\|\phi\|_q = \left(\sum_{k \in \Omega} |\phi_k|^q h_k^2 \right)^{1/q}, \quad q = 1, 2, \quad (4.1)$$

$$\|\phi\|_\infty = \max_{k \in \Omega} |\phi_k|, \quad (4.2)$$

onde ϕ_k é o valor assumido por ϕ no centro da k -ésima célula cujas arestas medem $\delta_x = \delta_y = h_k$ (a igualdade é apenas para simplificar a apresentação e não representa nenhuma limitação das definições). Se definirmos $\psi = (\psi_1, \psi_2)$, uma variável vetorial, então ψ_1 estará posicionada em Ω_u e ψ_2 em Ω_v e

$$\|\psi\|_q = \left(\sum_{i \in \Omega_u} |\psi_{1,i}|^q a_i + \sum_{j \in \Omega_v} |\psi_{2,j}|^q b_j \right)^{1/q}, \quad q = 1, 2, \quad (4.3)$$

$$\|\psi\|_\infty = \max \left\{ \max_{i \in \Omega_u} \{|\psi_{1,i}|\}, \max_{j \in \Omega_v} \{|\psi_{2,j}|\} \right\} \quad (4.4)$$

onde

$$a_i = \begin{cases} H^2 & , \text{ nas arestas grossas} \\ H^2/r^2 & , \text{ nas arestas finas} \\ H^2(r+1)/(2r^2) & , \text{ nas arestas de interface fina-grossa} \end{cases} \quad (4.5)$$

sendo r a razão de refinamento entre os níveis l e $l + 1$ e H , o espaçamento da malha no nível l . Definimos os pesos b_j de maneira similar. Para efetuarmos a análise de convergência numérica, assumiremos que a solução numérica obtida pelo método possui uma expansão assintótica em potências do espaçamento da malha. Em uma malha uniforme, por exemplo, uma variável escalar ϕ tem solução numérica $\phi(x, t, h)$ a qual, por hipótese, pode ser escrita na forma

$$\phi(x, t, h) = \phi_\epsilon(x, t) + E_q(x, t)h^q + E_{q+1}(x, t)h^{q+1} + \dots \quad (4.6)$$

para todos os espaçamentos h suficientemente pequenos, onde $\phi_\epsilon(x, t)$ é a solução exata e as funções que definem os coeficientes $E_i, i = q, q + 1, \dots$, independem de h . Nos problemas apresentados na seção a seguir, a solução exata é conhecida. Para avaliarmos a ordem de convergência, depois de calcularmos um valor aproximado $\phi(x, t, h)$ para um dado espaçamento h , recalculamos para o mesmo ponto da malha (x, t) uma nova aproximação, desta com espaçamento $h/2$, a aproximação $\phi(x, t, h/2)$. Assim, para espaçamentos suficientemente pequenos, em primeira aproximação, teremos

$$\phi(x, t, h) \approx \phi_\epsilon(x, t) + E_q(x, t)h^q,$$

$$\phi(x, t, h/2) \approx \phi_\epsilon(x, t) + E_q(x, t)\frac{h^q}{2^q},$$

o que nos fornece a aproximação para a razão de convergência

$$\frac{\|\phi(x, t, h) - \phi_\epsilon(x, t)\|}{\|\phi(x, t, h/2) - \phi_\epsilon(x, t)\|} \approx 2^q, \quad (4.7)$$

onde $\|\cdot\|$ representa a norma (4.1) ou (4.2). Observe que as razões de convergência 2, 4, 8, ..., significam que o método numérico tem ordem de precisão $q = 1, 2, 3, \dots$. Empregaremos a estimativa da razão de convergência (4.7) tanto em malhas uniformes quanto em malhas compostas. Quando necessário, faremos observações suplementares sobre o cálculo de normas e sobre a análise de convergência numérica empregando refinamento de malha.

4.2 Representação matricial das discretizações

A matriz que representa alguma discretização tem uma dimensão que depende da quantidade de células visíveis, pois é nelas que estão definidas as equações. Se o sistema é para uma variável então a dimensão da matriz é o número de células visíveis da variável. Se a matriz é para resolver sistema linear acoplado com duas variáveis, então a dimensão da matriz é a soma da quantidade de células visíveis para cada variável.

A matriz que tem a discretização é definida seguindo a mesma estrutura de lista ligada para cada célula computacional. Quando a matriz já está definida na estrutura de dados, pode ser passada para uma biblioteca externa, como o PETSc, seguindo apropriadamente a maneira de se fazer a interface com cada biblioteca.

A matriz tem dimensão do número de células visíveis e devemos ter um mapa que relaciona cada posição das variáveis visíveis com seu índice de enumeração e com isto evitamos realizar buscas [40].

Para definir uma outra matriz de discretização, temos que seguir os mesmos passos: criar a estrutura matricial que armazena em cada célula uma lista ligada a um estêncil e depois, realizar em cada linha da matriz a chamada com a respectiva lista ligada de células e o peso da interpolação.

Essa matriz é depois passada para o PETSc, que resolve o sistema segundo as opções que nós desejamos. Com pré-condicionador ou sem, com paralelismo ou não e com o *solver* selecionado.

4.3 Problema elíptico com coeficientes constantes

Para analisar o desempenho do Esquema Compacto de Quarta Ordem, consideramos a seguinte equação elíptica:

$$\Delta\varphi(x, y) = f(x, y), \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1], \quad (4.8)$$

sujeito à condição de contorno de Dirichlet.

$$\begin{cases} \varphi(0, y) = 0 & \text{para } 0 \leq y \leq 1 \\ \varphi(1, y) = 0 & \text{para } 0 \leq y \leq 1 \\ \varphi(x, 0) = 0 & \text{para } 0 \leq x \leq 1 \\ \varphi(x, 1) = 0 & \text{para } 0 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (4.9)$$

A solução exata para este problema é

$$\begin{aligned} \varphi(x, y) &= \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \\ f(x, y) &= -8\pi^2 \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \end{aligned} \quad (4.10)$$

Discretizamos o problema (4.8) em malha uniforme e composta tanto usando o Esquema Compacto de Quarta Ordem (ECQO) descrito na seção anterior quanto o Método de Diferenças Finitas padrão de quarta ordem (MDF) a fim de comparar a performance dos dois métodos.

4.3.1 Teste para malha uniforme

A ordem de convergência (q) esperada para os métodos MDF e ECDF é quatro, o que foi comprovada numericamente. Os resultados obtidos encontram-se na Tabela (4.1). A solução do sistema linear dado pela discretização do problema foi computada com o uso do PETSc com o método GMRES e pré-condicionador PCJACOBI. Adotamos tolerância de 10^{-16} , número máximo de iterações de 10^4 . A coluna *Iter* na tabela fornece o número de iterações que o Método GMRES, com pré-condicionador PCJACOBI do PETSc [40] precisou para obter os resultados apresentados. Na Tabela (4.1) considere

$$r_e = \frac{\|u(x, y, h) - u_e(x, y)\|}{\|u(x, y, h/2) - u_e(x, y)\|}.$$

Fica evidente, pelos resultados apresentados na Tabela 4.1, que o ECDF para problemas bidimensionais é bem mais eficiente que o MDF, pois temos que obter a solução numérica de um sistema linear com bem menos incógnitas, para o mesmo erro de aproximação da solução do Problema de Poisson, levando a um menor esforço computacional. Além disso, o número de iterações para o esquema compacto é consideravelmente menor quando comparado com o método de diferenças finitas.

Malha	MDF			ECDF		
	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	$Iter$	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	$Iter$
10×10	2.921e-03		57	1.047e-06		44
20×20	2.261e-04	3.691	201	2.025e-08	5.693	139
40×40	1.036e-05	4.446	465	5.026e-10	5.332	374
80×80	5.555e-07	4.222	1614	1.514e-11	5.053	1149
160×160	3.269e-08	4.086	5488	5.160e-13	4.874	3767

Tabela 4.1: Erro, ordem de convergência e número de iterações do MDF comparado com o ECDF para o problema de Poisson em uma malha uniforme.

4.3.2 Teste para malha composta

A primeira dificuldade que surge é quando são necessários pontos que não pertencem aos nós da malha para calcular algumas derivadas, como pode ser observado na figura (4.1). Essas situações se repetem para o cálculo das outras derivadas envolvidas, deste modo é necessário um método para interpolar os valores de interesse nos pontos que não coincidem com os nós da malha. O método usado para realizar essa interpolação deve ser genérico o suficiente para tratar de quaisquer casos de configurações de células e preciso de modo que não deteriore a ordem de convergência do método numérico.

A metodologia utilizada neste trabalho foi desenvolvida pelo grupo de pesquisa em Mecânica dos Fluidos Computacional do ICMC/USP e está implementada na estrutura de dados *Hig-Tree*.

Quando algum ponto de interesse (x_1, x_2, x_3) não coincide com os nós da malha e é necessário avaliar alguma propriedade neste ponto, faz-se uma aproximação deste valor em função dos valores da propriedades em uma nuvem de m pontos $(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}), \dots, (x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, x_3^{(m)})$ próximos ao ponto de interesse. Essa aproximação pode ser feita por um polinômio da seguinte forma

$$\Phi(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^m \omega_i \Phi(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, x_3^{(i)}), \quad (4.11)$$

em que $\Phi(x_1, x_2, x_3)$ é o valor da propriedade no ponto (x_1, x_2, x_3) e ω_i é o peso atribuído a cada ponto usado na interpolação. A equação 4.11 pode ser reescrita na seguinte forma matricial

$$\Phi(x_1, x_2, x_3) = \omega^t b \quad (4.12)$$

em que

$$b = \begin{pmatrix} \Phi(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}) \\ \vdots \\ \Phi(x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, x_3^{(m)}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (x_1^{(1)})^{i1} (x_2^{(1)})^{j1} (x_3^{(1)})^{k1} \dots (x_1^{(1)})^{in} (x_2^{(1)})^{jn} (x_3^{(1)})^{kn} \\ \vdots \\ (x_1^{(m)})^{i1} (x_2^{(m)})^{j1} (x_3^{(m)})^{k1} \dots (x_1^{(m)})^{in} (x_2^{(m)})^{jn} (x_3^{(m)})^{kn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = A\alpha \quad (4.13)$$

A é uma matriz $m \times n$. Então

$$\omega^t b = \omega^t A\alpha = c^t \alpha \quad (4.14)$$

para encontrar o vetor de pesos ω basta resolver o sistema

$$\omega^t A = c^t \quad \text{ou seja} \quad A\omega = c \quad (4.15)$$

Figura 4.1: *Esquema de interpolação*

A *Hig-Tree* tem implementada rotinas para calcular esses pesos ω_i que usam o método dos mínimos quadrados móveis (MLS, do inglês *Moving Least Squares*) ou o método dos mínimos quadrados (LS, do inglês *least squares*) para tal. É possível determinar a ordem desejada para interpolação e, como esta depende apenas de uma nuvem de pontos ao redor do ponto de interesse, o formato da malha não influencia na interpolação. Portanto, independente dos níveis de refinamento existentes na vizinhança, a interpolação retornará um valor satisfatório para a propriedade.

Assim sendo, para discretização do problema (4.8), utilizou-se os esquemas de diferenças finitas padrão de quarta ordem comparado como esquema compacto de diferenças finitas de quarta ordem descrito neste trabalho.

Testes para Tolerância variando em $1e - 16$, $1e - 13$, $1e - 10$ e $1e - 7$ e ordem do polinômio intepolador variando em 5, 4 e 3

Nos testes que fizemos foram analisados dois *solvers* do PETSc empregando a malha (4.2), obtida de um refinamento feito pela *Hig-Tree* em três níveis. Escolhemos esta malha porque com ela se tinha um tempo computacional considerável no cálculo da solução do sistema nas contas da Tabela (4.2) (4.3) e (4.4). Os métodos utilizados na solução foram GMRES e BICG (Gradiente Biconjugado), com pré-condicionador ILU(0).

Mostramos os resultados obtidos nas Tabelas (4.2) (4.3) e (4.4) usando tolerância variando em $1e - 16$, $1e - 13$, $1e - 10$ e $1e - 7$ e variando a ordem do polinômio interpolador em 5, 4 e 3 a fim de experimentalmente analisar com qual ordem os métodos se comportam melhor.

Figura 4.2: *Malha correspondente ao testes das tabelas 4.2, 4.3, 4.4*

Na figura (4.2), temos a malha composta utilizada na discretização do problema (4.8).

Em todos os testes verificou-se ordem de convergência igual a quatro para ambos os métodos, a verificação da ordem de convergência encontra-se no apêndice (A).

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	2.513e-4	161	85	2.086e-4	82	37
	$1e10^{-13}$	2.513e-4	161	85	2.086e-4	82	37
	$1e10^{-10}$	2.513e-4	161	85	2.086e-4	82	37
	$1e10^{-7}$	2.513e-4	161	85	2.086e-4	82	37
BICG	$1e10^{-16}$	2.513e-4	94	66	2.086e-4	55	34
	$1e10^{-13}$	2.513e-4	94	66	2.086e-4	55	34
	$1e10^{-10}$	2.513e-4	94	66	2.086e-4	55	34
	$1e10^{-7}$	2.513e-4	94	66	2.086e-4	55	34

Tabela 4.2: *Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5.*

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	1.044e-4	160	75	1.245e-4	82	34
	$1e10^{-13}$	1.044e-4	160	75	1.245e-4	82	34
	$1e10^{-10}$	1.044e-4	160	75	1.245e-4	82	34
	$1e10^{-7}$	1.044e-4	160	75	1.245e-4	82	34
BICG	$1e10^{-16}$	1.044e-4	94	57	1.245e-4	54	32
	$1e10^{-13}$	1.044e-4	94	57	1.245e-4	54	32
	$1e10^{-10}$	1.044e-4	94	57	1.245e-4	54	32
	$1e10^{-7}$	1.044e-4	94	57	1.245e-4	54	32

Tabela 4.3: Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4.

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	1.946e-4	167	78	2.240e-4	82	35
	$1e10^{-13}$	1.946e-4	167	78	2.240e-4	82	35
	$1e10^{-10}$	1.946e-4	167	78	2.240e-4	82	35
	$1e10^{-7}$	1.946e-4	167	78	2.240e-4	82	35
BICG	$1e10^{-16}$	1.946e-4	89	54	2.240e-4	54	29
	$1e10^{-13}$	1.946e-4	89	54	2.240e-4	54	29
	$1e10^{-10}$	1.946e-4	89	54	2.240e-4	54	29
	$1e10^{-7}$	1.946e-4	89	54	2.240e-4	54	29

Tabela 4.4: Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3.

Analisando as Tabelas (4.2) (4.3) e (4.4) podemos observar que entre os *solvers* analisados o BICG nos deu resultados mais atrativos pois o tempo computacional e o número de iterações que ele precisa para resolver o sistema é menor comparado com o GMRES.

Na Tabela (4.3) também podemos observar que o erro obtido na solução, quando escolhemos um polinômio interpolador de grau 4, é menor comparado com os resultados para polinômio interpolador de grau 5 (4.2) e de grau 3 (4.4).

Além disso, nos resultados apresentados, verifica-se que o ECQO é mais eficiente que o MDF em todos os casos analisados, apresentando tempo computacional e número de iterações reduzido, praticamente, pela metade quando comparado com o MDF clássico.

4.4 Problema elíptico com coeficientes variáveis

Consideramos a equação de Poisson com coeficientes variáveis,

$$\nabla \cdot (\omega(x, y) \nabla \varphi(x, y)) = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \quad (4.16)$$

condições de contorno de Dirichlet, onde $f(x, y)$ é o termo forçante, Ω é o domínio espacial $[0, 1] \times [0, 1]$, $\partial\Omega$ é a fronteira do domínio espacial, $\omega(x, y)$ é uma função que será definida nos testes e φ é a incógnita.

Empregamos nos testes malha uniforme 4.3 e malha composta com dois níveis de refinamento 4.5.

Figura 4.3: *Malha uniforme e solução obtida pelo PETSc*

4.4.1 Teste para malha uniforme

Conforme descrito acima, abordaremos o problema (4.16) com refinamento uniforme na malha (4.3). A vantagem de apresentarmos desta maneira é tornar a exposição de ideias mais simples, didática e respeitar a ordem cronológica real de como as técnicas foram desenvolvidas ao longo do trabalho.

Alguns testes realizados são descritos a seguir, nos quais a solução do sistema linear, dado pela discretização do problema de Poisson (4.16) pelos métodos MDF clássico de quarta ordem e ECQO, foi computado com o uso do PETSc com o método GMRES e BICG com pré-condicionador ILU(0). Adotamos tolerância de $1e-16$, número máximo de iterações de 10^4 e novamente comparação entre o grau do polinômio interpolador variando em 5, 4 e 3.

As funções usadas para o teste são

$$\begin{aligned}\varphi(x, y) &= \sin(2\pi x) \sin(2\pi y), \\ f(x, y) &= \omega \nabla^2 \varphi + \partial_x \omega \partial_x \varphi + \partial_y \omega \partial_y \varphi, \\ \omega(x, y) &= (1 + h) + h \tanh(2\pi d(x - 0.5)),\end{aligned}\tag{4.17}$$

onde h controla a variação de φ e d a quantidade de células na qual esta variação sucede.

No primeiro teste empregamos $d = 2$ e $h = 10^3$ (com "salto de propriedade"). A condição de contorno de Dirichlet é calculada a partir da solução manufaturada para o problema.

A ordem esperada para a discretização nos dois métodos é quatro, a qual foi comprovada numericamente. Os resultados obtidos estão nas Tabelas (4.5) (4.6) e (4.7).

Testes para Tolerância igual a $1e-16$, $1e-13$, $1e-10$ e $1e-7$ e ordem do polinômio interpolador variando em 5, 4 e 3

Nas Tabelas (4.5) (4.6) e (4.7) a coluna "Niter" fornece a quantidade de iterações que os métodos GMRES e BICG, com pré-condicionador ILU(0) do PETSc, precisou para determinar a solução do sistema com precisão $1e-16$, $1e-13$, $1e-10$ e $1e-7$. A coluna "Time" indica o tempo computacional gasto para obter a solução.

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	3.016e-4	41	6	5.301e-3	23	3
	$1e10^{-13}$	3.016e-4	29	6	5.301e-3	20	3
	$1e10^{-10}$	3.016e-4	25	4	5.301e-3	17	3
	$1e10^{-7}$	3.016e-4	20	4	5.301e-3	13	3
BICG	$1e10^{-16}$	3.016e-4	36	7	5.301e-3	24	4
	$1e10^{-13}$	3.016e-4	32	6	5.301e-3	20	4
	$1e10^{-10}$	3.016e-4	26	5	5.301e-3	17	3
	$1e10^{-7}$	3.016e-4	21	5	5.301e-3	14	3

Tabela 4.5: Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5.

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	2.261e-4	42	6	5.273e-3	25	3
	$1e10^{-13}$	2.261e-4	31	5	5.273e-3	20	3
	$1e10^{-10}$	2.261e-4	25	4	5.273e-3	17	3
	$1e10^{-7}$	2.261e-4	20	4	5.273e-3	13	2
BICG	$1e10^{-16}$	2.261e-4	36	7	5.273e-3	24	4
	$1e10^{-13}$	2.261e-4	36	7	5.273e-3	24	4
	$1e10^{-10}$	2.261e-4	26	5	5.273e-3	17	3
	$1e10^{-7}$	2.261e-4	21	4	5.273e-3	14	3

Tabela 4.6: Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4.

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	6.292e-4	42	6	5.211e-3	32	4
	$1e10^{-13}$	6.292e-4	30	4	5.211e-3	20	3
	$1e10^{-10}$	6.292e-4	25	4	5.211e-3	17	3
	$1e10^{-7}$	6.292e-4	20	3	5.211e-3	13	3
BICG	$1e10^{-16}$	6.292e-4	36	6	5.211e-3	23	4
	$1e10^{-13}$	6.292e-4	32	5	5.211e-3	21	4
	$1e10^{-10}$	6.292e-4	26	4	5.211e-3	17	3
	$1e10^{-7}$	6.292e-4	21	4	5.211e-3	14	2

Tabela 4.7: Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3.

Analisando as Tabelas (4.5) (4.6) e (4.7) podemos observar o mesmo comparativo feito na seção anterior para problemas com coeficientes constantes. Entre os *solvers* analisados o BICG nos deu resultados mais atrativos pois o tempo computacional e o número de iterações que ele precisa para resolver o sistema é menor comparado com o GMRES, além disso verificamos que a variação na tolerancia não interfere nos resultados.

Analisando o grau do polinômio interpolador, aqui também podemos verificar que quando escolhemos um polinômio interpolador de grau 4, ver na Tabela (4.6), o erro obtido na solução é menor comparado com os resultados para polinômio interpolador de grau 5 (4.5) e de grau 3 (4.7).

Apesar de o erro obtido na solução para o ECQO ser maior comparado com o MDF, ainda assim o ECQO é mais eficiente que o MDF em todos os casos analisados, apresentando tempo computacional e número de iterações reduzido, praticamente, pela metade quando comparado com o MDF clássico.

4.4.2 Teste para malha composta

Por fim, abordaremos o problema (4.16) com refinamento em malha composta (4.5). A princípio o principal objetivo deste trabalho foi resolver um problema de Poisson com coeficientes variáveis e refinamento em malha composta usando o esquema compacto de quarta ordem e comparar os resultados diretamente com aqueles reportado em [2], porém a metodologia que usamos da biblioteca *Hig-Tree* difere em alguns aspectos da metodologia utilizada por [2] o que dificultou demasiadamente no refino da malha detalhado em [2].

Para este caso o refinamento localizado da malha se deu em particular onde a função ω definida em (4.16) apresenta elevados gradientes das propriedades próximo à faixa central do domínio de discretização, como podemos observar na Figura (4.4)

Figura 4.4: *Grafico da função ω*

Figura 4.5: *Malha composta com dois níveis de refinamento e solução obtida pelo PETSc*

Seguindo o mesmo roteiro de testes descritos nas seções anteriores, nos quais a solução do sistema linear, dado pela discretização do problema de Poisson (4.16) pelos métodos MDF clássico de quarta ordem e ECQO, foi computado com o uso do PETSc com o método GMRES e BICG com pré-condicionador ILU(0). Adotamos a variação da tolerância em $1e-16$, $1e-13$, $1e-10$ e $1e-7$, número máximo de iterações de 10^4 e novamente comparação entre o grau do polinômio interpolador variando em 5, 4 e 3.

As funções usadas para o teste são

$$\begin{aligned}\varphi(x, y) &= \sin(2\pi x) \sin(2\pi y), \\ f(x, y) &= \omega \nabla^2 \varphi + \partial_x \omega \partial_x \varphi + \partial_y \omega \partial_y \varphi, \\ \omega(x, y) &= (1 + h) + h \tanh(2\pi d(x - 0.5)),\end{aligned}\tag{4.18}$$

onde h controla a variação de φ e d a quantidade de células na qual esta variação sucede.

Neste teste, empregamos $d = 2$ e $h = 10^3$ (com "salto de propriedade"). A condição de contorno de Dirichlet é calculada a partir da solução manufaturada para o problema.

A ordem esperada para a discretização nos dois métodos é quatro, a qual foi comprovada numericamente. Os resultados obtidos estão nas Tabelas (4.8) (4.9) e (4.10).

Testes para Tolerância variando em $1e-16$, $1e-13$, $1e-10$ e $1e-7$ e ordem do polinômio intepolador variando em 5, 4 e 3

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	1.523e-4	89	31	2.367e-4	48	16
	$1e10^{-13}$	1.523e-4	78	27	2.367e-4	36	12
	$1e10^{-10}$	1.341e-4	57	21	2.367e-4	28	10
	$1e10^{-7}$	1.523e-4	37	18	2.367e-4	25	11
BICG	$1e10^{-16}$	1.341e-4	59	28	2.367e-4	38	15
	$1e10^{-13}$	1.341e-4	54	25	2.367e-4	35	14
	$1e10^{-10}$	1.341e-4	48	23	2.367e-4	30	12
	$1e10^{-7}$	1.341e-4	43	16	2.367e-4	23	8

Tabela 4.8: Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5.

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	7.036e-5	90	28	2.447e-4	48	13
	$1e10^{-13}$	7.036e-5	78	24	2.447e-4	36	10
	$1e10^{-10}$	7.036e-5	57	18	2.447e-4	28	9
	$1e10^{-7}$	7.036e-5	43	14	2.447e-4	22	7
BICG	$1e10^{-16}$	7.255e-5	63	24	2.447e-4	39	13
	$1e10^{-13}$	7.255e-5	54	22	2.447e-4	36	13
	$1e10^{-10}$	7.255e-5	48	19	2.447e-4	31	11
	$1e10^{-7}$	7.255e-5	37	16	2.447e-4	24	9

Tabela 4.9: Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4.

Solver	Tolerância	MDF			ECDF		
		$\ erro\ _2$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	Niter	Time
GMRES	$1e10^{-16}$	1.902e-3	84	25	1.453e-3	48	14
	$1e10^{-13}$	1.902e-3	79	25	1.453e-3	36	11
	$1e10^{-10}$	1.902e-3	57	18	1.453e-3	28	8
	$1e10^{-7}$	1.902e-3	43	14	1.453e-3	23	7
BICG	$1e10^{-16}$	1.902e-3	59	23	1.453e-3	41	14
	$1e10^{-13}$	1.902e-3	55	22	1.453e-3	35	12
	$1e10^{-10}$	1.902e-3	48	19	1.453e-3	30	11
	$1e10^{-7}$	1.902e-3	37	16	1.453e-3	25	9

Tabela 4.10: Erro dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3.

Nas Tabelas (4.8) (4.9) e (4.10) podemos observar o mesmo comparativo feito na seção anterior quando usamos malha com refinamento uniforme. Observamos em todos os casos que o *solver* BICG nos deu resultados mais atrativos pois o tempo computacional e o número de iterações que ele precisa para resolver o sistema é menor comparado com o GMRES, além disso verificamos que a variação na tolerância não interferiu nos resultados.

Analisando o grau do polinômio interpolador, aqui também podemos verificar que quando escolhemos um polinômio interpolador de grau 4, ver na Tabela (4.9), o erro obtido na solução é menor comparado com os resultados para polinômio interpolador de grau 5 (4.8) e de grau 3 (4.10) tanto no método de diferenças finitas quanto no esquema compacto de diferenças finitas.

Apesar de o erro obtido na solução para o ECQO ser maior comparado com o MDF, ainda assim o ECQO é mais eficiente que o MDF em todos os casos analisados, apresentando tempo computacional e número de iterações reduzido, praticamente, pela metade quando comparado com o MDF clássico.

Capítulo 5

Conclusões

5.1 Considerações Finais

O presente trabalho originou-se de uma pesquisa motivada no estudo de métodos numéricos de alta ordem capazes de realizar de maneira robusta e eficiente simulações computacionais de modelos matemáticos clássicos. O método da Projeção de Chorin-Temam aplicado em conjunto com o Esquema Compacto de Diferenças Finitas em malhas hierárquicas, compõem a seleção escolhida para abordar a resolução numérica das equações obtidas do modelo matemático mencionado.

Os problemas-modelos abordados foram discretizados em malha uniforme e em malhas compostas com o uso de uma estrutura de dados chamada *Hig-Tree* desenvolvida no Instituto de Ciências Matemáticas e Computação, USP São Carlos. Essas discretizações dão origem a sistemas lineares os quais foram resolvidos empregando-se uma biblioteca numérica externa, no caso, o PETSc.

A obtenção de um método de alta ordem compacto no contexto de malhas compostas aplicados à problemas elípticos com coeficientes variáveis ainda é um problema pouco estudado, pois há pouquíssimos relatos a seu respeito. Tal abordagem constitui, em nossa opinião, uma contribuição importante, pois permite, efetivamente, a solução de problemas-modelo essenciais. Além disso, com o uso da *Hig-Tree*, temos acesso à forma matricial explícita dos sistemas resultantes, dessa forma ganhamos acesso ao uso de vários métodos existentes e disponíveis inclusive em versões paralelas, via uso de bibliotecas numéricas externas como o PETSc. Merece especial destaque que, com as matrizes explicitamente calculadas, podemos usar pré-condicionadores para resolver os sistemas lineares associados de maneira mais eficiente.

5.2 Sugestões para Pesquisas Futuras

A pesquisa desenvolvida neste trabalho pode ser enriquecida nos seguintes aspectos:

- Aplicar o esquema compacto de alta ordem em simulações de escoamentos em malhas hierárquicas;
- Implementar modelos computacionais em três dimensões a fim de se obter mais informações sobre o comportamento de um fluido.

Apêndice A

Verificação da ordem de convergência

A.1 Testes referente ao problema (4.8)

A.1.1 Tolerância igual a $1e - 16$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5

Figura A.1: (a) Malha $G1L3$, (b) Malha $G2L3$, (c) Malha $G3L3$ e (d) Malha $G4L3$ e (e) Malha $G5L3$

Solver (tol $1e-16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.960e-3		55	11	1.895e-3		32	6
	G2L3	1.946e-4	3.927	167	78	2.240e-4	3.080	82	35
	G3L3	9.658e-6	4.332	418	643	1.338e-5	4.064	233	328
	G4L3	6.368e-7	3.922	100000	539624	4.839e-7	4.790	658	3375
	G5L3	4.867e-8	3.709	100000	2006652	1.818e-8	4.734	100000	1949563
BICG	G1L3	2.960e-3		44	12	1.895e-3		29	6
	G2L3	1.946e-4	3.927	89	54	2.240e-4	3.080	54	29
	G3L3	9.658e-6	4.332	192	365	1.338e-5	4.064	117	190
	G4L3	6.368e-7	3.922	397	2457	4.839e-7	4.790	230	1320
	G5L3	4.867e-8	3.709	828	17557	1.818e-8	4.734	494	10953

Tabela A.1: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e-16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.676e-3		55	11	2.282e-3		33	12
	G2L3	1.044e-4	4.679	160	75	1.245e-4	4.195	82	34
	G3L3	5.982e-6	4.125	446	672	6.503e-6	4.259	233	320
	G4L3	3.583e-7	4.061	100000	521299	3.849e-7	4.078	716	3500
	G5L3	2.222e-8	4.011	100000	1924963	2.346e-8	4.035	100000	2160550
BICG	G1L3	2.676e-3		45	12	2.282e-3		29	7
	G2L3	1.044e-4	4.679	94	57	1.245e-4	4.195	54	32
	G3L3	5.982e-6	4.125	190	349	6.503e-6	4.259	115	185
	G4L3	3.583e-7	4.061	415	2537	3.849e-7	4.078	231	1300
	G5L3	2.222e-8	4.011	827	18284	2.346e-8	4.035	486	10918

Tabela A.2: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e - 16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.673e-3		55	12	3.050e-3		34	7
	G2L3	2.513e-4	3.4111	161	85	2.086e-4	3.870	82	37
	G3L3	1.645e-5	3.933	537	897	1.249e-5	4.062	229	348
	G4L3	1.041e-6	3.982	100000	541289	7.343e-7	4.088	925	492
	G5L3	6.536e-8	3.993	100000	2016249	4.406e-8	4.058	100000	20060
BICG	G1L3	2.673e-3		43	14	3.050e-3		30	8
	G2L3	2.513e-4	3.411	94	66	2.086e-4	3.870	55	34
	G3L3	1.645e-5	3.933	194	407	1.249e-5	4.061	115	203
	G4L3	1.041e-6	3.982	407	2616	7.343e-7	4.088	230	136
	G5L3	6.536e-8	3.993	831	194616	4.406e-8	4.058	488	1081

Tabela A.3: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.1.2 Tolerância igual a $1e - 13$ e ordem do polinômio interpolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e - 13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.960e-3		55	11	1.895e-3		32	6
	G2L3	1.946e-4	3.927	167	78	2.240e-4	3.080	82	33
	G3L3	9.658e-6	4.332	418	643	1.338e-5	4.064	233	32
	G4L3	6.368e-7	3.922	100000	539624	4.839e-7	4.790	658	33
	G5L3	4.867e-8	3.709	100000	2006652	1.818e-8	4.734	100000	1949
BICG	G1L3	2.960e-3		44	12	1.895e-3		29	6
	G2L3	1.946e-4	3.927	89	54	2.240e-4	3.080	54	29
	G3L3	9.658e-6	4.332	192	365	1.338e-5	4.064	117	19
	G4L3	6.368e-7	3.922	397	2457	4.839e-7	4.790	230	13
	G5L3	4.867e-8	3.709	828	17557	1.818e-8	4.734	494	109

Tabela A.4: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e-13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.676e-3		55	11	2.282e-3		33	12
	G2L3	1.044e-4	4.679	160	75	1.245e-4	4.195	82	34
	G3L3	5.982e-6	4.125	446	672	6.503e-6	4.259	233	320
	G4L3	3.583e-7	4.061	100000	521299	3.849e-7	4.078	716	3500
	G5L3	2.222e-8	4.011	100000	1924963	2.346e-8	4.035	100000	2160550
BICG	G1L3	2.676e-3		45	12	2.282e-3		29	7
	G2L3	1.044e-4	4.679	94	57	1.245e-4	4.195	54	32
	G3L3	5.982e-6	4.125	190	349	6.503e-6	4.259	115	185
	G4L3	3.583e-7	4.061	415	2537	3.849e-7	4.078	231	1300
	G5L3	2.222e-8	4.011	827	18284	2.346e-8	4.035	486	10918

Tabela A.5: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e-13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.673e-3		55	12	3.050e-3		34	7
	G2L3	2.513e-4	3.4111	161	85	2.086e-4	3.870	82	37
	G3L3	1.645e-5	3.933	537	897	1.249e-5	4.062	229	348
	G4L3	1.041e-6	3.982	100000	541289	7.343e-7	4.088	925	4923
	G5L3	6.536e-8	3.993	100000	2016249	4.406e-8	4.058	100000	2006083
BICG	G1L3	2.673e-3		43	14	3.050e-3		30	8
	G2L3	2.513e-4	3.411	94	66	2.086e-4	3.870	55	34
	G3L3	1.645e-5	3.933	194	407	1.249e-5	4.061	115	203
	G4L3	1.041e-6	3.982	407	2616	7.343e-7	4.088	230	1363
	G5L3	6.536e-8	3.993	831	194616	4.406e-8	4.058	488	10810

Tabela A.6: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.1.3 Tolerância igual a $1e-10$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e - 10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.960e-3		55	11	1.895e-3		32	6
	G2L3	1.946e-4	3.927	167	78	2.240e-4	3.080	82	33
	G3L3	9.658e-6	4.332	418	643	1.338e-5	4.064	233	32
	G4L3	6.368e-7	3.922	100000	539624	4.839e-7	4.790	658	33
	G5L3	4.867e-8	3.709	100000	2006652	1.818e-8	4.734	100000	1949
BICG	G1L3	2.960e-3		44	12	1.895e-3		29	6
	G2L3	1.946e-4	3.927	89	54	2.240e-4	3.080	54	29
	G3L3	9.658e-6	4.332	192	365	1.338e-5	4.064	117	19
	G4L3	6.368e-7	3.922	397	2457	4.839e-7	4.790	230	13
	G5L3	4.867e-8	3.709	828	17557	1.818e-8	4.734	494	109

Tabela A.7: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e - 10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.676e-3		55	11	2.282e-3		33	11
	G2L3	1.044e-4	4.679	160	75	1.245e-4	4.195	82	33
	G3L3	5.982e-6	4.125	446	672	6.503e-6	4.259	233	32
	G4L3	3.583e-7	4.061	100000	521299	3.849e-7	4.078	716	35
	G5L3	2.222e-8	4.011	100000	1924963	2.346e-8	4.035	100000	2160
BICG	G1L3	2.676e-3		45	12	2.282e-3		29	7
	G2L3	1.044e-4	4.679	94	57	1.245e-4	4.195	54	33
	G3L3	5.982e-6	4.125	190	349	6.503e-6	4.259	115	18
	G4L3	3.583e-7	4.061	415	2537	3.849e-7	4.078	231	13
	G5L3	2.222e-8	4.011	827	18284	2.346e-8	4.035	486	109

Tabela A.8: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e - 10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.673e-3		55	12	3.050e-3		34	7
	G2L3	2.513e-4	3.4111	161	85	2.086e-4	3.870	82	37
	G3L3	1.645e-5	3.933	537	897	1.249e-5	4.062	229	348
	G4L3	1.041e-6	3.982	100000	541289	7.343e-7	4.088	925	4923
	G5L3	6.536e-8	3.993	100000	2016249	4.406e-8	4.058	100000	2006083
BICG	G1L3	2.673e-3		43	14	3.050e-3		30	8
	G2L3	2.513e-4	3.411	94	66	2.086e-4	3.870	55	34
	G3L3	1.645e-5	3.933	194	407	1.249e-5	4.061	115	203
	G4L3	1.041e-6	3.982	407	2616	7.343e-7	4.088	230	1363
	G5L3	6.536e-8	3.993	831	194616	4.406e-8	4.058	488	10810

Tabela A.9: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.1.4 Tolerância igual a $1e - 7$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e - 7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.960e-3		55	11	1.895e-3		32	6
	G2L3	1.946e-4	3.927	167	78	2.240e-4	3.080	82	35
	G3L3	9.658e-6	4.332	418	643	1.338e-5	4.064	233	328
	G4L3	6.368e-7	3.922	100000	539624	4.839e-7	4.790	658	3375
	G5L3	4.867e-8	3.709	100000	2006652	1.818e-8	4.734	100000	1949565
BICG	G1L3	2.960e-3		44	12	1.895e-3		29	6
	G2L3	1.946e-4	3.927	89	54	2.240e-4	3.080	54	29
	G3L3	9.658e-6	4.332	192	365	1.338e-5	4.064	117	190
	G4L3	6.368e-7	3.922	397	2457	4.839e-7	4.790	230	1320
	G5L3	4.867e-8	3.709	828	17557	1.818e-8	4.734	494	10953

Tabela A.10: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e-7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.676e-3		55	11	2.282e-3		33	12
	G2L3	1.044e-4	4.679	160	75	1.245e-4	4.195	82	34
	G3L3	5.982e-6	4.125	446	672	6.503e-6	4.259	233	320
	G4L3	3.583e-7	4.061	100000	521299	3.849e-7	4.078	716	3500
	G5L3	2.222e-8	4.011	100000	1924963	2.346e-8	4.035	100000	21605
BICG	G1L3	2.676e-3		45	12	2.282e-3		29	7
	G2L3	1.044e-4	4.679	94	57	1.245e-4	4.195	54	32
	G3L3	5.982e-6	4.125	190	349	6.503e-6	4.259	115	185
	G4L3	3.583e-7	4.061	415	2537	3.849e-7	4.078	231	1300
	G5L3	2.222e-8	4.011	827	18284	2.346e-8	4.035	486	1091

Tabela A.11: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e-7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L3	2.673e-3		55	12	3.050e-3		34	7
	G2L3	2.513e-4	3.4111	161	85	2.086e-4	3.870	82	37
	G3L3	1.645e-5	3.933	537	897	1.249e-5	4.062	229	348
	G4L3	1.041e-6	3.982	100000	541289	7.343e-7	4.088	925	4923
	G5L3	6.536e-8	3.993	100000	2016249	4.406e-8	4.058	100000	200608
BICG	G1L3	2.673e-3		43	14	3.050e-3		30	8
	G2L3	2.513e-4	3.411	94	66	2.086e-4	3.870	55	34
	G3L3	1.645e-5	3.933	194	407	1.249e-5	4.061	115	203
	G4L3	1.041e-6	3.982	407	2616	7.343e-7	4.088	230	1363
	G5L3	6.536e-8	3.993	831	194616	4.406e-8	4.058	488	10810

Tabela A.12: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.2 Testes referente ao problemas (4.16)

A.2.1 Tolerância igual a $1e-16$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5

Figura A.2: (a) Malha $G1L1$, (b) Malha $G2L1$, (c) Malha $G3L1$ e (d) Malha $G4L1$ e (e) Malha $G5L1$

Solver (tol $1e-16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	8.051e-3		23	3	2.500e-1		31	2
	G2L1	6.292e-4	3.677	42	6	5.211e-3	4.564	32	4
	G3L1	3.411e-5	4.204	110	33	2.201e-4	4.564	52	16
	G4L1	2.215e-6	3.944	295	291	1.250e-5	4.137	139	131
	G5L1	1.426e-7	3.956	100000	365172	7.638e-7	4.033	1109	3964
BICG	G1L1	8.051e-3		20	2	2.500e-1		15	2
	G2L1	6.292e-4	3.677	36	6	5.211e-3	5.584	23	4
	G3L1	3.411e-5	4.204	71	26	2.201e-4	4.564	43	14
	G4L1	2.215e-6	3.944	138	154	1.250e-5	4.137	81	85
	G5L1	1.426e-7	3.956	299	1168	7.638e-7	4.033	153	587

Tabela A.13: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e - 16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	2.921e-3		20	2	2.519e-1		19	2
	G2L1	2.261e-4	3.691	42	6	5.273e-3	5.578	25	3
	G3L3	1.036e-5	4.446	107	35	2.216e-4	4.572	52	19
	G4L1	5.555e-7	4.222	360	351	1.257e-5	4.139	136	150
	G5L1	3.269e-8	4.086	100000	367964	7.668e-7	4.035	687	2456
BICG	G1L1	2.921e-3		20	2	2.519e-1		15	2
	G2L1	2.261e-4	3.691	36	7	5.273e-3	5.578	24	4
	G3L3	1.036e-5	4.446	71	26	2.216e-4	4.572	43	15
	G4L1	5.555e-7	4.222	135	152	1.257e-5	4.139	81	84
	G5L1	3.269e-8	4.086	279	1118	7.668e-7	4.035	153	582

Tabela A.14: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e - 16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	3.124e-3		23	2	2.519e-1		14	1
	G2L1	3.016e-4	3.372	41	6	5.301e-3	5.570	23	3
	G3L3	1.262e-5	4.578	108	36	2.233e-4	4.569	52	17
	G4L1	6.099e-7	4.371	298	320	1.263e-5	4.143	132	137
	G5L1	3.387e-8	4.170	100000	373040	7.686e-7	4.039	415	1492
BICG	G1L1	3.124e-3		20	2	2.519e-1		15	1
	G2L1	3.016e-4	3.372	36	7	5.301e-3	5.570	24	4
	G3L3	1.262e-5	4.578	71	29	2.233e-4	4.569	43	16
	G4L1	6.099e-7	4.371	146	189	1.263e-5	4.143	81	92
	G5L1	3.387e-8	4.170	274	1151	7.686e-7	4.039	153	623

Tabela A.15: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.2.2 Tolerância igual a $1e - 13$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e-13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	8.051e-3		16	2	2.500e-1		12	1
	G2L1	6.292e-4	3.677	30	4	5.211e-3	4.564	20	3
	G3L3	3.411e-5	4.204	86	27	2.201e-4	4.564	42	12
	G4L1	2.215e-6	3.944	212	208	1.250e-5	4.137	106	105
	G5L1	1.426e-7	3.956	543	1977	7.638e-7	4.033	262	942
BICG	G1L1	8.051e-3		17	2	2.500e-1		13	2
	G2L1	6.292e-4	3.677	32	5	5.211e-3	5.584	21	4
	G3L3	3.411e-5	4.204	61	22	2.201e-4	4.564	37	12
	G4L1	2.215e-6	3.944	118	139	1.250e-5	4.137	70	79
	G5L1	1.426e-7	3.956	230	925	7.638e-7	4.033	133	525

Tabela A.16: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e-13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	2.921e-3		17	2	2.519e-1		13	1
	G2L1	2.261e-4	3.691	31	5	5.273e-3	5.578	20	3
	G3L3	1.036e-5	4.446	61	23	2.216e-4	4.572	37	13
	G4L1	5.555e-7	4.222	118	137	1.257e-5	4.139	70	73
	G5L1	3.269e-8	4.086	227	927	7.668e-7	4.035	133	508
BICG	G1L1	2.921e-3		20	2	2.519e-1		15	2
	G2L1	2.261e-4	3.691	36	7	5.273e-3	5.578	24	4
	G3L3	1.036e-5	4.446	71	26	2.216e-4	4.572	43	15
	G4L1	5.555e-7	4.222	135	152	1.257e-5	4.139	81	84
	G5L1	3.269e-8	4.086	279	1118	7.668e-7	4.035	153	582

Tabela A.17: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e - 13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	3.124e-3		16	2	2.519e-1		12	2
	G2L1	3.016e-4	3.372	29	6	5.301e-3	5.570	20	3
	G3L3	1.262e-5	4.578	85	29	2.233e-4	4.569	42	14
	G4L1	6.099e-7	4.371	203	226	1.263e-5	4.143	106	110
	G5L1	3.387e-8	4.170	489	1838	7.686e-7	4.039	271	976
BICG	G1L1	3.124e-3		17	2	2.519e-1		13	1
	G2L1	3.016e-4	3.372	32	6	5.301e-3	5.570	20	4
	G3L3	1.262e-5	4.578	61	26	2.233e-4	4.569	37	14
	G4L1	6.099e-7	4.371	117	147	1.263e-5	4.143	70	86
	G5L1	3.387e-8	4.170	227	968	7.686e-7	4.039	133	536

Tabela A.18: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.2.3 Tolerância igual a $1e - 10$ e ordem do polinômio interpolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e - 10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	8.051e-3		13	2	2.500e-1		10	2
	G2L1	6.292e-4	3.677	25	4	5.211e-3	4.564	17	3
	G3L3	3.411e-5	4.204	64	20	2.201e-4	4.564	30	10
	G4L1	2.215e-6	3.944	151	157	1.250e-5	4.137	82	76
	G5L1	1.426e-7	3.956	382	1387	7.638e-7	4.033	185	679
BICG	G1L1	8.051e-3		15	2	2.500e-1		11	1
	G2L1	6.292e-4	3.677	26	4	5.211e-3	5.584	17	3
	G3L3	3.411e-5	4.204	51	19	2.201e-4	4.564	31	11
	G4L1	2.215e-6	3.944	101	115	1.250e-5	4.137	58	68
	G5L1	1.426e-7	3.956	195	766	7.638e-7	4.033	111	425

Tabela A.19: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e - 10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$ erro _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$ erro _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	2.921e-3		13	2	2.519e-1		10	2
	G2L1	2.261e-4	3.691	25	4	5.273e-3	5.578	17	3
	G3L3	1.036e-5	4.446	64	20	2.216e-4	4.572	30	10
	G4L1	5.555e-7	4.222	147	146	1.257e-5	4.139	81	76
	G5L1	3.269e-8	4.086	388	1401	7.668e-7	4.035	197	699
BICG	G1L1	2.921e-3		14	2	2.519e-1		11	1
	G2L1	2.261e-4	3.691	26	5	5.273e-3	5.578	17	3
	G3L3	1.036e-5	4.446	51	19	2.216e-4	4.572	31	11
	G4L1	5.555e-7	4.222	101	116	1.257e-5	4.139	58	62
	G5L1	3.269e-8	4.086	192	769	7.668e-7	4.035	111	441

Tabela A.20: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e - 10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$ erro _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$ erro _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	3.124e-3		13	2	2.519e-1		10	1
	G2L1	3.016e-4	3.372	25	4	5.301e-3	5.570	17	3
	G3L3	1.262e-5	4.578	64	22	2.233e-4	4.569	30	10
	G4L1	6.099e-7	4.371	148	165	1.263e-5	4.143	81	79
	G5L1	3.387e-8	4.170	358	1332	7.686e-7	4.039	197	721
BICG	G1L1	3.124e-3		14	2	2.519e-1		11	2
	G2L1	3.016e-4	3.372	26	5	5.301e-3	5.570	17	3
	G3L3	1.262e-5	4.578	53	23	2.233e-4	4.569	31	12
	G4L1	6.099e-7	4.371	99	125	1.263e-5	4.143	58	66
	G5L1	3.387e-8	4.170	190	819	7.686e-7	4.039	111	451

Tabela A.21: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.2.4 Tolerância igual a $1e - 7$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e-7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	8.051e-3		10	2	2.500e-1		8	1
	G2L1	6.292e-4	3.677	20	3	5.211e-3	4.564	13	3
	G3L3	3.411e-5	4.204	42	14	2.201e-4	4.564	24	8
	G4L1	2.215e-6	3.944	90	91	1.250e-5	4.137	52	55
	G5L1	2.211e-7	3.956	237	851	7.638e-7	4.033	128	452
BICG	G1L1	8.051e-3		12	1	2.500e-1		8	1
	G2L1	6.292e-4	3.677	21	4	5.211e-3	5.584	14	2
	G3L3	3.411e-5	4.204	42	16	2.201e-4	4.564	25	9
	G4L1	2.215e-6	3.944	78	89	1.250e-5	4.137	46	49
	G5L1	1.426e-7	3.957	150	605	7.638e-7	4.033	88	338

Tabela A.22: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e-7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	2.921e-3		10	1	2.519e-1		8	1
	G2L1	2.261e-4	3.691	20	4	5.273e-3	5.578	13	2
	G3L3	1.036e-5	4.446	42	13	2.216e-4	4.572	24	8
	G4L1	5.555e-7	4.222	90	91	1.257e-5	4.139	52	50
	G5L1	1.975e-7	1.498	233	858	7.668e-7	4.035	128	456
BICG	G1L1	2.921e-3		12	1	2.519e-1		8	2
	G2L1	2.261e-4	3.691	21	4	5.273e-3	5.578	14	3
	G3L3	1.036e-5	4.446	41	15	2.216e-4	4.572	25	9
	G4L1	5.555e-7	4.222	77	87	1.257e-5	4.139	46	53
	G5L1	3.269e-8	4.086	150	603	7.668e-7	4.035	88	343

Tabela A.23: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e-7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L1	3.124e-3		10	1	2.519e-1		8	1
	G2L1	3.016e-4	3.372	20	4	5.301e-3	5.570	13	3
	G3L3	1.262e-5	4.578	44	15	2.233e-4	4.569	24	8
	G4L1	6.099e-7	4.371	90	98	1.263e-5	4.143	52	51
	G5L1	1.896e-7	1.720	219	836	7.686e-7	4.039	128	469
BICG	G1L1	3.124e-3		12	2	2.519e-1		8	2
	G2L1	3.016e-4	3.372	21	5	5.301e-3	5.570	14	3
	G3L3	1.262e-5	4.578	42	19	2.233e-4	4.569	25	10
	G4L1	6.099e-7	4.371	78	130	1.263e-5	4.143	46	53
	G5L1	3.387e-8	4.170	150	642	7.686e-7	4.039	88	353

Tabela A.24: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha uniforme com ordem do polinômio interpolador igual a 5

Figura A.3: (a) *Malha G1L2*, (b) *Malha G2L2*, (c) *Malha G3L2* e (d) *Malha G4L2* e (e) *Malha G5L2*

A.2.5 Tolerância igual a $1e - 16$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e - 16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$ erro _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$ erro _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	1.098e-2		35	5	9.591e-3		21	3
	G2L2	1.902e-3	2.529	84	25	1.453e-3	2.722	48	14
	G3L3	2.401e-4	2.986	237	199	1.987e-4	2.870	120	99
	G4L2	2.994e-5	3.003	63059	182505	2.540e-5	2.967	628	1849
	G5L2	3.737e-6	3.002	100000	1005526	3.179e-6	2.998	100000	1099524
BICG	G1L2	1.098e-2		32	6	9.591e-3		21	4
	G2L2	1.902e-3	2.529	59	23	1.453e-3	2.722	41	14
	G3L3	2.401e-4	2.986	133	138	1.987e-4	2.870	80	73
	G4L2	2.994e-5	3.003	247	833	2.540e-5	2.967	152	460
	G5L2	3.737e-6	3.002	522	5909	3.179e-6	2.998	314	3452

Tabela A.25: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e - 16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$ erro _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$ erro _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	8.835e-4		33	5	5.905e-3		30	3
	G2L2	7.036e-5	3.650	90	28	2.447e-4	4.592	48	13
	G3L3	5.0762e-6	3.792	239	219	1.340e-5	4.190	138	117
	G4L2	3.117e-7	4.025	100000	308345	7.956e-7	4.074	713	2087
	G5L2	1.822e-8	4.096	100000	1100686	4.942e-8	4.008	100000	110123
BICG	G1L2	9.596e-4		30	6	5.905e-3		21	3
	G2L2	7.255e-5	3.725	63	24	2.447e-4	4.592	39	13
	G3L3	4.615e-6	3.974	132	137	1.340e-5	4.190	77	69
	G4L2	2.588e-7	4.156	251	846	7.956e-7	4.074	153	471
	G5L2	1.532e-8	4.078	521	6234	4.942e-8	4.008	292	3182

Tabela A.26: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e - 16$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	1.224e-3		36	6	6.215e-3		26	4
	G2L2	1.523e-4	3.006	89	31	2.367e-4	4.714	48	16
	G3L3	1.011e-5	3.913	209	223	4.168	4.062	133	118
	G4L2	6.606e-7	3.935	100000	348345	7.875e-7	4.063	532	165
	G5L2	3.916e-8	4.076	100000	1137807	4.892e-8	4.008	100000	11189
BICG	G1L2	1.275e-3		29	6	6.215e-3		21	4
	G2L2	1.341e-4	3.249	59	28	2.367e-4	4.714	38	15
	G3L3	8.061e-6	4.056	126	159	1.316e-5	4.168	73	77
	G4L2	4.634e-7	4.120	245	904	7.875e-7	4.063	153	503
	G5L2	2.769e-8	4.064	499	5982	4.892e-8	4.008	314	359

Tabela A.27: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.2.6 Tolerância igual a $1e - 13$ e ordem do polinômio interpolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e - 13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	1.098e-2		26	4	9.591e-3		18	2
	G2L2	1.902e-3	2.529	79	25	1.453e-3	2.722	36	11
	G3L3	2.401e-4	2.986	176	160	1.987e-4	2.870	101	82
	G4L2	2.994e-5	3.003	537	1675	2.540e-5	2.967	254	730
	G5L2	3.737e-6	3.002	1153	12925	3.179e-6	2.998	603	6528
BICG	G1L2	1.098e-2		27	5	9.591e-3		18	3
	G2L2	1.902e-3	2.529	55	22	1.453e-3	2.722	35	12
	G3L3	2.401e-4	2.986	111	125	1.987e-4	2.870	65	64
	G4L2	2.994e-5	3.003	214	791	2.540e-5	2.967	130	428
	G5L2	3.737e-6	3.002	442	5450	3.179e-6	2.998	260	3119

Tabela A.28: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e - 13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	8.835e-4		26	5	5.905e-3		18	3
	G2L2	7.036e-5	3.650	78	24	2.447e-4	4.592	36	10
	G3L3	5.0762e-6	3.792	178	162	1.340e-5	4.190	99	82
	G4L2	3.117e-7	4.025	540	1665	7.956e-7	4.074	237	700
	G5L2	1.822e-8	4.096	1196	13381	4.942e-8	4.008	611	6693
BICG	G1L2	9.596e-4		27	4	5.905e-3		18	4
	G2L2	7.255e-5	3.725	54	22	2.447e-4	4.592	36	13
	G3L3	4.615e-6	3.974	113	128	1.340e-5	4.190	66	65
	G4L2	2.588e-7	4.156	229	820	7.956e-7	4.074	129	427
	G5L2	1.532e-8	4.078	442	5497	4.942e-8	4.008	255	3070

Tabela A.29: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e - 13$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	1.224e-3		25	4	6.215e-3		18	4
	G2L2	1.523e-4	3.006	78	27	2.367e-4	4.714	36	12
	G3L3	1.011e-5	3.913	168	180	4.168	4.062	99	88
	G4L2	6.606e-7	3.935	509	1719	7.875e-7	4.063	255	783
	G5L2	3.916e-8	4.076	987	11184	4.892e-8	4.008	605	6995
BICG	G1L2	1.275e-3		27	6	6.215e-3		19	4
	G2L2	1.341e-4	3.249	54	25	2.367e-4	4.714	35	14
	G3L3	8.061e-6	4.056	113	158	1.316e-5	4.168	67	75
	G4L2	4.634e-7	4.120	229	911	7.875e-7	4.063	133	485
	G5L2	2.769e-8	4.064	456	6010	4.892e-8	4.008	270	3417

Tabela A.30: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.2.7 Tolerância igual a $1e - 10$ e ordem do polinômio intepolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e - 10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	1.098e-2		22	3	9.591e-3		15	2
	G2L2	1.902e-3	2.529	57	18	1.453e-3	2.722	28	8
	G3L3	2.401e-4	2.986	127	116	1.987e-4	2.870	77	71
	G4L2	2.994e-5	3.003	415	1304	2.540e-5	2.967	166	481
	G5L2	3.737e-6	3.002	826	9080	3.179e-6	2.998	420	4627
BICG	G1L2	1.098e-2		24	5	9.591e-3		16	3
	G2L2	1.902e-3	2.529	48	19	1.453e-3	2.722	30	11
	G3L3	2.401e-4	2.986	97	111	1.987e-4	2.870	55	57
	G4L2	2.994e-5	3.003	187	679	2.540e-5	2.967	110	364
	G5L2	3.737e-6	3.002	355	4514	3.179e-6	2.998	216	2627

Tabela A.31: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e - 10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	8.835e-4		22	4	5.905e-3		15	2
	G2L2	7.036e-5	3.650	57	18	2.447e-4	4.592	28	9
	G3L3	5.0762e-6	3.792	129	117	1.340e-5	4.190	77	63
	G4L2	3.117e-7	4.025	412	1299	7.956e-7	4.074	157	455
	G5L2	1.822e-8	4.096	777	8653	4.942e-8	4.008	476	5179
BICG	G1L2	9.596e-4		24	4	5.905e-3		16	3
	G2L2	7.255e-5	3.725	48	19	2.447e-4	4.592	31	11
	G3L3	4.615e-6	3.974	94	106	1.340e-5	4.190	56	55
	G4L2	2.588e-7	4.156	185	684	7.956e-7	4.074	110	364
	G5L2	1.532e-8	4.078	355	4401	4.942e-8	4.008	212	2597

Tabela A.32: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e-10$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	1.275e-3		22	4	6.215e-3		15	3
	G2L2	1.341e-4	3.249	57	21	2.367e-4	4.714	28	10
	G3L3	1.011e-5	4.056	120	131	1.316e-5	4.168	77	68
	G4L2	6.606e-7	4.120	389	1292	7.875e-7	4.063	179	572
	G5L2	3.916e-8	4.064	696	7553	4.892e-8	4.008	436	4828
BICG	G1L2	1.275e-3		24	5	6.215e-3		16	4
	G2L2	1.341e-4	3.249	48	23	2.367e-4	4.714	30	12
	G3L3	1.011e-5	4.056	97	136	1.316e-5	4.168	55	62
	G4L2	6.606e-7	4.120	177	726	7.875e-7	4.063	112	406
	G5L2	3.916e-8	4.064	355	4677	4.892e-8	4.008	216	2830

Tabela A.33: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5

A.2.8 Tolerância igual a $1e-7$ e ordem do polinômio interpolador variando em 3, 4 e 5

Solver (tol $1e-7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	1.098e-2		17	3	9.591e-3		12	2
	G2L2	1.902e-3	2.529	43	14	1.453e-3	2.722	23	7
	G3L3	2.401e-4	2.986	82	79	1.987e-4	2.870	55	50
	G4L2	2.994e-5	3.003	289	925	2.540e-5	2.967	106	309
	G5L2	3.737e-6	3.002	462	5319	3.179e-6	2.998	275	3154
BICG	G1L2	1.098e-2		20	4	9.591e-3		13	2
	G2L2	1.902e-3	2.529	37	16	1.453e-3	2.722	25	9
	G3L3	2.401e-4	2.986	75	87	1.987e-4	2.870	47	48
	G4L2	2.994e-5	3.003	150	565	2.540e-5	2.967	91	302
	G5L2	3.737e-6	3.002	289	3580	3.179e-6	2.998	176	2159

Tabela A.34: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 3

Solver (tol $1e-7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	8.835e-4		17	3	5.905e-3		12	2
	G2L2	7.036e-5	3.650	43	14	2.447e-4	4.592	22	7
	G3L3	5.0762e-6	3.792	81	75	1.340e-5	4.190	55	46
	G4L2	3.117e-7	4.025	274	875	7.956e-7	4.074	106	314
	G5L2	1.822e-8	4.096	452	5113	4.942e-8	4.008	295	3268
BICG	G1L2	9.596e-4		20	4	5.905e-3		13	3
	G2L2	7.255e-5	3.725	37	16	2.447e-4	4.592	24	9
	G3L3	4.615e-6	3.974	76	92	1.340e-5	4.190	47	48
	G4L2	2.588e-7	4.156	147	537	7.956e-7	4.074	87	293
	G5L2	1.532e-8	4.078	293	3824	4.942e-8	4.008	179	2232

Tabela A.35: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 4

Solver (tol $1e-7$)	Malha	MDF				ECDF			
		$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time	$\ erro\ _2$	$\log_2 r_e \approx q$	Niter	Time
GMRES	G1L2	1.224e-3		18	4	6.215e-3		13	3
	G2L2	1.523e-4	3.006	37	18	2.367e-4	4.714	25	11
	G3L3	1.011e-5	3.913	75	103	4.168	4.062	46	52
	G4L2	6.606e-7	3.935	151	595	7.875e-7	4.063	91	323
	G5L2	3.916e-8	4.076	278	3662	4.892e-8	4.008	179	2363
BICG	G1L2	1.275e-3		17	3	6.215e-3		12	3
	G2L2	1.341e-4	3.249	43	16	2.367e-4	4.714	23	8
	G3L3	8.061e-6	4.056	81	91	1.316e-5	4.168	54	51
	G4L2	4.634e-7	4.120	270	1011	7.875e-7	4.063	107	329
	G5L2	2.769e-8	4.064	418	5043	4.892e-8	4.008	313	3669

Tabela A.36: Erro e ordem de convergência dos métodos MDF de quarta ordem e ECDF de quarta ordem em malha composta com ordem do polinômio interpolador igual a 5

Referências Bibliográficas

- [1] Y. Adam. Highly Accurate Compact Implicit Methods and Boundary Conditions. *Journal of Computational Physics*, 24:10–22, 1977. 3
- [2] C. M. R. Alvarez. *Simulação computacional adaptativa de escoamentos bisáficos viscoelásticos*. PhD thesis, Tese de Doutorado, Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, Brasil, 2013. 1, 5, 34
- [3] U. Ananthakrishnaiah, R. Manohar, and J. W. Stephenson. High-Order Methods for Elliptic Equations With Variable Coefficients. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 3:219–227, 1987. 4
- [4] J. B. Bell, P. Colella, and H. M. Glaz. A Second Order Projection Method for the Incompressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, 85:257–283, 1989. 17
- [5] P. C. Calegari. *Simulações de escoamentos bifásicos tridimensionais empregando métodos adaptativos e modelos de campo de fase*. PhD thesis, Tese de Doutorado, Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, Brasil, 2013. 1
- [6] A. Chorin and J. E. Marsden. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Springer-Verlag, 1990. 17
- [7] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. 104:745–762, 1968. 5, 17
- [8] L. Collatz. *The numerical treatment of differential equations*. Springer-Verlag, 1966. 3
- [9] A. de Oliveira Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmicas dos Fluidos. Conceitos Básicos e Aplicações*. EDUSP, 2000. 1, 2, 15, 18
- [10] F. S. de Sousa, N. Mangiavacchi, L. G. Nonato, A. C. Filho, M. F. Tomé, V. G. Ferreira, J. A. Cuminato, and S. McKee. A Front-Tracking/Front-Capturing Method for the Simulation of 3D Multi-Fluid Flows with Free Surfaces. *Journal of Computational Physics*. 198:469–499, 2004. 17
- [11] W. E. and J.-G. Liu. Vorticity boundary condition and related issues for finite difference schemes. 124:368–382, 1996. 16
- [12] E. A. Fadlun, R. Verzicco, P. Orlandi, and J. Mohd-Yusof. Combined Immersed Boundary Finite-Difference Methods for Three-Dimensional Complex Flow Simulations. *Journal of Computational Physics*, 161:35–60, 2000. 17
- [13] L. Fauci and C. S. Peskin. A Computational Model of Aquatic Animal Locomotion. *Journal of Computational Physics*, 77:85–108, 1988. 17

- [14] L. Ge and J. Zhang. Accuracy, robustness and efficiency comparison in iterative computation of convection diffusion equation with boundary layers. 16:379?394, 2000. 4
- [15] M. M. Gupta. High Accuracy Solutions of Incompressible Navier-Stokes Equations. *Journal of computational physics*, 93:343–359, 1991. 3, 4, 5
- [16] M. M. Gupta, R. P. Manohar, and J. W. Stephenson. A Single Cell High Order Scheme For The Convection-Diffusion Equation With Vaiable Coefficients. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, 4:641–651, 1984. 4
- [17] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous of incompressible flow of fluid with free surface. 8:2182–2189, 1965. 16
- [18] R. S. Hirsch. Higher order accurate difference solution of fluid mechanics problems by a compact differencing technique. pages 90–109, 1975. 3
- [19] J. V. Kan. A Second-Order Accurate Pressure-Correction Scheme for Viscous Incompressible Flow. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computation*, 7:870–891, 1986. 17
- [20] S. Karaa. High-order difference schemes for 2D elliptic and parabolic problems with mixed derivatives. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 23:366?378, 2007. 5
- [21] G. Karniadakis, M. Israeli, and S. A. Orszag. High-order splitting methods for the incompressible navier-stokes equations. 97:414–443, 1991. 16
- [22] J. Kim and P. Moin. Application of a Fractional-Step Method to Incompressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, 59:308–323, 1985. 17
- [23] C. F. A. Lages. Métodos numéricos para escoamentos multifásicos em malhas hierárquicas. Master’s thesis, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, Brasil, May 2016. 5, 7
- [24] B. Lan, Y. Ge, Y. Wang, and Y. Zhan. High order compact difference scheme and multi-grid method for 2d elliptic problems with variable coefficients and interior/boundary layers on nonuniform grids. 2015. 18, 19
- [25] H. P. Langtangen, K.-A. Mardal, and R. Winther. Numerical methods for incompressible viscous flow. 25:1125–1146, 2002. 16
- [26] S. K. Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. 1991. 3
- [27] S. K. Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. 103:16–42, 1992. 18
- [28] R. J. Leveque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. 18
- [29] L. Li and H.-W. Shen. Image-Based Streamline Generation and Rendering. *Visualization and computer graphics*, 13:630–640, 2007. 1
- [30] M. Li and T. Tang. A compact fourth-order finite difference scheme for the steady incompressible Navier-Stokes equations. *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, 20:1137–1151, 1995. 3, 4, 5, 15

- [31] P. F. A. Mancera and R. Hunt. Fourth order method for solving the Navier-Stokes equations in a constricting channel. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 25:1119–1135, 1997. [4](#)
- [32] P. F. A. Mancera and R. Hunt. Some experiments with high order compact methods using a computer algebra software?Part I. *Applied Mathematics and Computation*, 174:775–794, 2006. [3](#), [4](#)
- [33] L. Ming-Chih. *Simulation of the flow Past an Array of Circular Cylinders as a Test of the Immersed Boundary Method*. PhD thesis, Ph.D. thesis, New York University, 1998. [17](#)
- [34] A. Nachbin. Aspectos de modelagem matemática em dinâmica dos fluidos. Master's thesis, IMPA - Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada, 2001. [15](#)
- [35] J. C. Patterson. General Derivative Approximations for Finite Difference Schemes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 19:1235–1241, 1983. [3](#)
- [36] C. S. Peskin. Flow patterns around heart valves: A numerical method. 10:252–271, 1972. [17](#)
- [37] D. M. M. Queen and C. S. Peskin. A Three-Dimensional Computational Method for Blood Flow in the Heart. I. Immersed Elastic Fibers in a Viscous Incompressible Fluid. 81:372–405, 1989. [17](#)
- [38] D. M. M. Queen and C. S. Peskin. Heart simulation by an immersed boundary method with formal second-order accuracy and reduced numerical viscosity. 2000. [17](#)
- [39] S. A. E. Remigio. *Simulação Numérica Bidimensional da Interação Fluido-Estrutura através do Método Físico Virtual*. PhD thesis, Tese de Doutorado, Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, Brasil, Setembro 2005. [16](#)
- [40] S Balay and J Brown and K Buschelman and V Eijkhout and W Gropp and D Kaushik and M Knepley and L C mcinnes and B Smith and H Zhang. *PETSc User Manual 3.4*. [S.l.], 2013. [26](#), [27](#)
- [41] H. L. Soriano. *Método de Elementos Finitos em Análise de Estrutura*. EDUSP, 2003. [18](#)
- [42] W. F. Spitz. *High-Order Compact Finite Difference Schemes for Computational Mechanics*. PhD thesis, The University of Texas at Austin, Dezembro 1995. [2](#), [3](#), [19](#), [21](#), [24](#)
- [43] A. I. Tolstykh. High accuracy non-centered compact difference schemes for fluid dynamics applications. 1994. [3](#)
- [44] M. M. Villar. *Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais*. PhD thesis, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Brasil, 2007. [1](#), [5](#)
- [45] D. M. Young and J. H. Dauwalder. Discrete Representations of Partial Differential Operators. *Errors in Digital Computation*, pages 181–207, 1965. [4](#)