

Universidade Federal do Paraná
Programa de Pós-Graduação em
Métodos Numéricos em Engenharia

**ESTIMATIVA DE ERROS DE ITERAÇÃO EM
DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL**

CURITIBA

2002

MÁRCIO ANDRÉ MARTINS

ESTIMATIVA DE ERROS DE ITERAÇÃO EM
DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

Dissertação apresentada como requisito parcial
à obtenção do grau de Mestre em Ciências,
Programa de Pós-Graduação em Métodos
Numéricos em Engenharia, Setor de Ciências
Exatas e Tecnologia, Universidade Federal do
Paraná.

Orientador: Prof. Carlos Henrique Marchi.

CURITIBA


2002

MÁRCIO ANDRÉ MARTINS

ESTIMATIVA DE ERROS DE ITERAÇÃO EM
DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciências, M. Sc. – Área de concentração: Programação Matemática – Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da Universidade Federal do Paraná, pela banca examinadora formada pelos professores:

Orientador:



Prof. Carlos Henrique Marchi, Dr. Eng.

DEMEC/TC/UFPR.



Prof. Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.

SINMEC/EMC/CTC/UFSC.



Prof. Roberto Dalledone Machado, Dr. Eng.

DCC/TC/UFPR.

Curitiba, 13 de dezembro de 2002.

À Deus.
À minha família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo financiamento deste trabalho.

Ao meu orientador Prof. Carlos Henrique Marchi Dr. Eng., pela orientação, apoio, e ensinamentos no transcorrer deste trabalho.

Aos professores, funcionários e colegas do CESEC, pela amizade e dedicação.

Meus sinceros agradecimentos a todos os familiares e aos amigos que direta ou indiretamente colaboraram na elaboração desta dissertação.

Aos membros da banca examinadora pelas críticas e sugestões apresentadas na defesa da dissertação.

Em especial, à minha esposa Danyelle pelo incentivo, apoio, compreensão e muito amor.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS.....	vii
LISTA DE FIGURAS.....	viii
LISTA DE SÍMBOLOS.....	xi
RESUMO.....	xiii
ABSTRACT.....	xiv
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 O Problema.....	1
1.2 Objetivo.....	3
1.3 Erro Numérico.....	3
1.4 Organização da Dissertação.....	5
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	7
2.1 Convergência.....	7
2.1.1 Critérios de convergência.....	8
2.2 Critérios para medir o desempenho de uma estimativa de erro.....	11
2.3 Estimadores de Erro de Iteração.....	12
2.3.1 O Estimador Delta.....	12
2.3.2 O Estimador de Ferziger e Peric.....	12
2.3.3 O Estimador de Kim, Anand e Rode.....	17
2.3.4 O Estimador de Roy e Blottner.....	21
2.4 Sistemas de equações.....	25
2.5 Resolução de sistemas de equações.....	26
2.6 Resumo do capítulo.....	26
3. O ESTIMADOR EMPÍRICO.....	27
3.1 Características do Erro de Iteração.....	27
3.1.1 A ordem efetiva.....	29
3.2 Estimativa do Erro de Iteração.....	29
3.2.1 Ordem aparente.....	30
3.2.2 Dedução do estimador empírico.....	31
3.3 O estimador empírico e o estimador <i>FP</i>	32
3.4 O estimador empírico e o estimador <i>Delta</i>	32
3.5 O estimador empírico e o estimador <i>RB</i>	33
3.6 Previsão da confiabilidade do resultado obtido pelo estimador de erro.....	34
3.6.1 Intervalo I.....	35
3.6.2 Intervalo II.....	36
3.6.3 Intervalo III.....	36
3.7 Considerações Finais.....	38
4. TESTES INICIAIS.....	39

4.1	Caso 1.....	39
4.2	Caso 2.....	42
4.3	Caso 3.....	46
4.4	Caso 4.....	48
4.5	Conclusão.....	52
5.	CASO 5: EQUAÇÃO DE POISSON.....	53
5.1	Modelo matemático e solução analítica.....	53
5.2	Modelo numérico.....	54
5.3	Resultados e discussões.....	55
5.4	Conclusão.....	61
6.	CASO 6: EQUAÇÃO DE LAPLACE.....	62
6.1	Modelo matemático e solução analítica.....	62
6.2	Modelo numérico.....	63
6.3	Resultados e discussões.....	65
6.4	Conclusão.....	72
7.	CASO 7: EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES.....	73
7.1	Modelo matemático e solução analítica.....	73
7.2	Modelo numérico.....	75
7.3	Resultados e discussões.....	76
7.4	Conclusão.....	81
8.	CONCLUSÃO.....	83
8.1	Constatações.....	83
8.2	Resumo das contribuições.....	84
8.3	Trabalhos futuros.....	85
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	86

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Comportamento apresentado pelo critério absoluto para alguns procedimentos iterativos (Roache, 1998).....	9
Figura 3.1 – Erro da solução numérica da Eq. (3.1), causado pelos erros de iteração.	28
Figura 3.2 – Comportamento de ϕ_{n_4} com relação a ϕ_{p_U} para o Intervalo I.....	35
Figura 3.3 – Comportamento de ϕ_{n_4} com relação a ϕ_{p_U} para o Intervalo II.....	36
Figura 3.4 – Comportamento de ϕ_{n_4} com relação a ϕ_{p_U} para o Intervalo III.....	37
Figura 3.5 – Gráfico de confiabilidade do método de previsão.....	37
Figura 4.1 – Erro (E) e Incerteza (U) envolvidos no cálculo da variável x do subcaso 1 (caso 1).....	40
Figura 4.2 – Erro (E) e Incerteza (U) envolvidos no cálculo da variável y do subcaso 1 (caso 1).....	41
Figura 4.3 – Erro (E) e Incerteza (U) envolvidos no cálculo da variável x do subcaso 2 (caso 1).....	41
Figura 4.4 – Erro (E) e Incerteza (U) envolvidos no cálculo da variável y do subcaso 2 (caso 1).....	42
Figura 4.5 – Erro (E) e Incerteza (U) para a variável x dos subcasos 1 e 3 (caso 2)....	44
Figura 4.6 – Erro (E) e Incerteza (U) para a variável x dos subcasos 2 e 4 (caso 2)....	44
Figura 4.7 – Gráfico de confiabilidade para o subcaso 1 (caso 2).....	45
Figura 4.8 – Gráfico de confiabilidade para o subcaso 2 (caso 2).....	45
Figura 4.9 – Erro (E) e Incerteza (U) para a variável x do subcaso 1 (caso 3).....	47
Figura 4.10 – Erro (E) e Incerteza (U) para a variável y do subcaso 1 (caso 3).....	47

Figura 4.11 – Erro (E) e Incerteza (U) para as variável x do subcaso 1 (caso 4).....	49
Figura 4.12 – Erro (E) e Incerteza (U) para a variável x do subcaso 2 (caso 4).....	49
Figura 4.13 – Erro (E) e Incerteza (U) a partir da Fig. 4.11 iterações 150 a 190.....	50
Figura 4.14 – Gráfico de confiabilidade subcaso 1 (caso 4).....	51
Figura 4.15 – Gráfico de confiabilidade subcaso 2 (caso 4).....	51
Figura 5.1 – Malha unidimensional uniforme.....	54
Figura 5.2 – Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza de $\lambda(L/5)$ para o subcaso 1.....	59
Figura 5.3 – Erro e incerteza de $\lambda(L/5)$ para o subcaso 1.....	60
Figura 5.4 – Gráfico de confiabilidade para $\lambda(L/5)$ do subcaso 1.....	60
Figura 6.1 – Malha bidimensional uniforme.....	64
Figura 6.2 – Ordem aparente p_U da incerteza de $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ para o subcaso 1.....	67
Figura 6.3 – Ordem aparente p_U da incerteza de λ_m para o subcaso 1.....	68
Figura 6.4 – Erro e incerteza de $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ para o subcaso 1.....	68
Figura 6.5 – Erro e incerteza de λ_m para o subcaso 1.....	69
Figura 6.6 – Gráfico de confiabilidade para $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ do subcaso 1.....	69
Figura 6.7 – Gráfico de confiabilidade para λ_m do subcaso 1.....	70
Figura 6.8 – Razão de convergência para $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ do subcaso 4.....	71
Figura 6.9 – Erro de iteração para $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ do subcaso 4.....	72
Figura 7.1 – Razão de convergência (ψ) para $v(L_1/2, L_2/2)$, subcaso 2, caso 7.....	78
Figura 7.2 – Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza de \bar{M} para o subcaso 3, caso 7.....	79

Figura 7.3 – Erro e incerteza de \bar{M} para o subcaso 3, caso 7.....	79
Figura 7.4 – Gráfico de confiabilidade de \bar{M} para o subcaso 3, caso 7.....	80

LISTA DE SÍMBOLOS

A	matriz do processo iterativo
Cap.	capítulo
CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CFD	Dinâmica dos Fluidos Computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
$E(\phi_n)$	erro de iteração na iteração n
E_p	erro de programação
E_π	erro de arredondamento
E_τ	erro de truncamento
Eq.	equação
Fig.	figura
FP	Estimador de Ferziger e Peric
h	tamanho de um elemento da malha, que é igual à distância entre dois nós consecutivos da malha (m)
(i, j)	coordenada de um nó em uma malha bidimensional
j	coordenada do nó em uma malha unidimensional
k	coeficientes da equação da incerteza de uma solução numérica
l^2	quadrado da magnitude do autovalor dominante de A
L	comprimento do domínio de cálculo (m)
N	número de nós da malha unidimensional
N^2	número de nós da malha bidimensional
p_E	ordem efetiva do erro (adimensional)
p_L	ordem assintótica do erro (adimensional)

p_U	ordem aparente da incerteza (adimensional)
r	raio espectral de A
R_n	resíduo na n -ésima iteração
R^*	resíduo adimensionalizado
RB	Estimador de Roy e Blottner
Tab.	tabela
$TDMA$	<i>TriDiagonal Matrix Algorithm</i>
U	incerteza ou erro estimado da solução numérica
z_n	parâmetro envolvido na formulação de FP

Letras Gregas

ε	tolerância
ϕ	solução numérica de uma variável genérica
Φ	solução analítica exata de uma variável genérica
ϕ_∞	estimativa da solução analítica exata (Φ) obtida por extrapolação
μ_1	autovalor dominante de A
μ_k	k -ésimo autovalor de A
Ψ_k	k -ésimo autovetor de A
θ	efetividade de um estimador de erro: razão entre incerteza (U) e erro (E)
σ	amplitude de uma função iterativa
ψ	razão de convergência
ϖ	parâmetro envolvido na formulação de RB
τ	taxa de convergência de um processo iterativo
Λ	variável dependente (escalar difundido)

RESUMO

A principal motivação para o desenvolvimento deste trabalho consiste no aperfeiçoamento dos critérios adotados para interromper a execução de um processo iterativo. Com este fim, analisa-se o desempenho do estimador *empírico*. Este estimador fornece uma estimativa do erro de iteração, também denominada de incerteza (U), com base na taxa de convergência da variável de interesse. O erro (E) de iteração pode ser definido pela diferença entre a solução numérica exata e a solução numérica em uma determinada iteração. Através da efetividade do estimador de erro, isto é, da razão entre incerteza e erro, analisa-se a eficiência do estimador *empírico* quanto à sua acurácia ($U/E \approx 1$) e confiabilidade ($U/E \geq 1$). Para tanto, são resolvidos sistemas de equações gerados a partir da aplicação dos métodos de diferenças finitas e volumes finitos sobre malhas unidimensionais e bidimensionais uniformes, de problemas de transferência de calor e de mecânica dos fluidos. Estes sistemas de equações foram resolvidos com a utilização de vários métodos iterativos. O desempenho do estimador *empírico* pode ser dividido em três intervalos: nas iterações iniciais, em geral a acurácia é baixa; quando o número de iterações é muito elevado, os erros de arredondamento predominam sobre os erros de iteração mas, mesmo assim, a acurácia é relativamente boa; no intervalo entre esses dois extremos, a acurácia tende a melhorar à medida que se aumenta o número de iterações. Não se recomenda o uso do estimador *empírico* em processos iterativos que envolvem a aplicação da técnica *multigrid* pois, em geral, sua acurácia é baixa. Constatou-se que existem relações diretas entre o estimador *empírico* e alguns estimadores disponíveis na literatura.

Palavras-chave: simulação numérica, erros numéricos, erros de iteração, estimador de erro, dinâmica dos fluidos, verificação.

ABSTRACT

The main motivation to develop this work consists in improve the rules or approaches adopted to interrupt the execution of an iterative process. It's proposed to calculate the uncertainty (U) of numerical solutions, where the uncertainty is defined as an estimated iterative error (E). To a variable of any interest, this error is the difference between the exact numerical solution and the calculated numerical solution. It is analyzed the efficiency of an empirical error estimator to iterative processes. This estimator calculates the numerical uncertainty (U) on basis on the convergence rate of the interest variable. Through the effectiveness of the error estimator, that is, of the reason between uncertainty and error, the error estimator efficiency is verified on its accuracy (U/E) and reliability (U/E). Therefore, are resolved linear systems generated from the application of finite differences and finite volume methods, on uniform unidimensional and bidimensional meshes, in heat transfer problems and and fluid mechanics. These systems of equations were resolved with the use of iterative methods. The performance of the empirical estimator can be divided in three intervals: In the "initial" iterations the accuracy is low, in general; when the number of iterations is very high, the round-off affect the accuracy, that is good; in the interval among those two limits, the accuracy tends to be big as it increases the iteration number. It was verified that, in iterative processes that involve the application of the multigrid method, the empirical estimator behavior doesn't seems to be good; because in the accomplished simulations it was obtained results with low accuracy and not very reliable. It was also verified that there are direct relations between the studied error estimator and some existent estimators in the literature.

Keywords: Numerical simulation, numerical errors, iteration errors, error estimator, fluid dynamics, verification.

INTRODUÇÃO

Este capítulo descreve o problema tratado neste trabalho, que se constitui no estudo de um estimador de erro para processos iterativos. São apresentadas as principais razões para utilização de um estimador. Em seguida, é feita uma breve apresentação sobre as principais fontes de erros envolvidos em processos numéricos. Por fim, tem-se o escopo do trabalho.

1.1 O PROBLEMA

Em engenharia, problemas que possuem solução analítica são aqueles que envolvem equações, geometrias e condições de contorno e iniciais muito simples, ou seja, são as exceções. Para os demais problemas utilizam-se **métodos numéricos** cujas soluções são obtidas com o emprego de computadores. A tarefa de um método numérico é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes na equação por expressões algébricas que envolvem a função incógnita. A maneira de obter essas equações algébricas é que caracteriza o tipo de método numérico. Para tratar modelos computacionalmente é necessário expressar de forma adequada as equações e a região (domínio) em que elas são válidas. Como não se pode obter soluções numéricas sobre uma região contínua, devido aos infinitos pontos da mesma, inicialmente o domínio deve ser discretizado, ou seja, dividido em pontos, elementos ou volumes. Somente nestes pontos é que as soluções serão obtidas.

Os resultados numéricos obtidos devem ser, entretanto, confiáveis e este é um ponto de extrema importância a ser observado. A diferença entre a solução analítica exata de uma variável de interesse e a sua solução numérica é denominada por Ferziger e Peric (1999) de **erro da solução numérica**, ou simplesmente, **erro numérico**. O erro numérico é causado por diversas fontes de erro, que podem ser classificados em (Marchi, 2001): erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação. Estas fontes de erro são explicadas na seção 1.3. O processo que quantifica o erro numérico tem sido denominado recentemente de

verificação (Blottner, 1990; Mehta, 1996; Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998; AIAA, 1998; Jameson e Martinelli, 1998; Rizzi e Voss, 1998; Fortuna, 2000) ou validação numérica (Maliska, 1995). A verificação dá-se através da utilização de **estimadores de erro**. A estimativa fornecida por um estimador de erro pode também ser chamada de incerteza numérica.

O problema tratado neste trabalho é a **estimativa do erro de iteração de soluções numéricas em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)**, sendo que os cálculos envolvidos nesta área requerem grande acurácia. A área de conhecimento denominada *CFD* estuda métodos computacionais para simulação de fenômenos que envolvem fluidos em movimento com ou sem troca de calor. No geral, *CFD* apresenta um versátil conjunto de algoritmos para solução numérica dos problemas de escoamento (Fortuna, 2000). A primeira solução numérica para um escoamento viscoso foi proposta por Thom (1933), envolvendo o método de diferenças finitas e o uso de um processo iterativo.

Em *CFD*, o uso de métodos iterativos é comum, devido à existência de modelos matemáticos constituídos por sistemas de equações não-lineares acoplados, equações de Navier-Stokes, etc. As descrições matemáticas do comportamento dos fluidos só ganharam força no século XIX, na forma das equações de Navier-Stokes. Ainda hoje, apesar de todos os progressos da matemática, não é possível resolver analiticamente estas equações para problemas reais de engenharia, os quais possuem domínios e condições de contorno complexas. Utilizam-se então métodos numéricos, os mais comuns são: diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. Em *CFD* uma particularidade dos sistemas lineares provenientes da discretização de equações diferenciais é que eles são, em geral, muito grandes e as matrizes que surgem da aplicação destes métodos numéricos são normalmente esparsas, ou seja, com muitos elementos nulos. A aplicação de um método direto para solução de um sistema cuja matriz possui estas características, não é recomendável, pois pode-se ao longo do processo preencher com valores os elementos nulos, e pelo fato de se ter que armazenar toda a matriz na memória do computador, apesar da maior parte destes espaços estar sendo preenchida com zeros. Os métodos iterativos não sofrem este problema, requerem somente o resultado da multiplicação da matriz coeficiente por um vetor e, portanto, o padrão de zeros da matriz não sofre qualquer modificação ao longo do processo.

Processos iterativos consistem em se repetir a aplicação de um algoritmo, em geral simples, que a partir de uma aproximação conhecida constrói uma nova, mais próxima da solução exata. Fornece desta maneira, uma resposta exata somente como limite de uma sequência infinita. Em geral, métodos iterativos são fáceis de serem programados porque os cálculos envolvidos são os mesmos em todas as iterações (Kreiszg, 1999).

1.2 OBJETIVO

Este trabalho tem como objetivo o aperfeiçoamento das técnicas existentes para estimar erros cometidos nos procedimentos iterativos aplicados em *CFD*. Propõe-se, então, analisar o desempenho de um novo estimador para o erro de iteração, o estimador *empírico*. Analisa-se também, um método de previsão da confiabilidade do resultado obtido pelo estimador de erro.

1.3 ERRO NUMÉRICO

O erro numérico é causado por diversas fontes, que são (Marchi, 2001): erros de truncamento (E_T), erros de arredondamento (E_π), erros de programação (E_p) e erros de iteração (E_n); segundo Ferziger e Peric (1999), Oberkampf e Blottner (1998), Roache (1998), Tannehill *et al.* (1997), Celik e Zhang (1995) e Demuren e Wilson (1994). Simbolicamente, tem-se

$$E(\phi) = E(E_T, E_\pi, E_p, E_n) \quad (1.1)$$

onde (ϕ) é a variável de interesse podendo ser local ou global, primária ou secundária; dependendo do problema. Essas quatro fontes de erro podem ter magnitudes e sinais diferentes, o que pode acarretar em cancelamentos parciais ou totais entre esses erros. A definição, o efeito e a origem de cada uma destas quatro fontes de erro são explicados a seguir de forma isolada.

- **Erros de Truncamento**

Como é mencionado anteriormente, dado um modelo matemático, é comum substituí-lo por um modelo numérico. A maioria dos modelos numéricos envolve o **truncamento**, que nada mais é do que o modelo original definido de tal forma que todas suas partes possam ser calculadas em um número finito de passos. O erro que ocorre ao se truncar um processo infinito é chamado erro de truncamento (E_T), ou seja, é proveniente do fato de se aproximar um problema contínuo com informação num conjunto infinito por um problema discreto com informação num conjunto finito.

Tannehill *et al.* (1997), Ferziger e Peric (1999) e Roache (1998) são exemplos de trabalhos que discutem sobre erros de truncamento e de discretização. Quando o erro $E(\phi)$ da solução numérica é gerado apenas por erros de truncamento (E_T), ele é denominado de erro de discretização (Ferziger e Peric, 1999). Questões sobre este tipo de erro podem ser encontradas no texto de Marchi (2001).

- **Erros de Arredondamento**

Um número pode admitir várias representações, mas normalmente adota-se uma sucessão de racionais que são múltiplos de uma potência de 10 (base decimal), ou seja, utiliza-se notação científica. No caso da notação científica, um número representa-se através do sinal, da mantissa e do expoente, na base decimal. Os dígitos variam entre 0 e 9, mas o primeiro dígito da mantissa deve ser diferente de zero (o número zero é representado à parte). Mas, a menos que se esteja de posse de uma máquina com memória infinita, a representação de um número deve ser finita, pelo que, conseqüentemente somos obrigados a considerar um número finito de dígitos na mantissa e uma limitação nos valores dos expoentes admitidos.

Dorn e McCracken (1981) e Hamming (1973) são exemplos de trabalhos que discutem sobre erros de arredondamento. Os erros de arredondamento (E_π) são os erros que ocorrem principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações. Eles dependem do compilador (*software*) usado para gerar o código computacional e do computador (*hardware*) empregado em sua execução. Na linguagem Fortran 90, por exemplo, pode-se usar precisão simples com quatro *bytes*, precisão dupla com oito *bytes* ou precisão quádrupla com 16 *bytes* por variável do tipo real. Quanto maior é a precisão usada para representar as variáveis, menores são os erros de arredondamento; entretanto, maior é a memória computacional necessária para o armazenamento destas variáveis.

- **Erros de Programação**

Não basta desenvolver o programa para resolver um dado problema, deve-se analisar se a solução está correta. Muitos erros podem ocorrer durante o desenvolvimento de um programa. Esses erros podem ocorrer por um mau entendimento dos elementos da linguagem utilizada ou até mesmo por descuido. Uma maneira de se evitar esse tipo de erro é efetuar testes para detectar erros no programa. Shih (1985), Maliska (1995) e Roache (1998) são exemplos de trabalhos que apresentam procedimentos para se detectar erros de programação. Na categoria de erros de programação (E_p) incluem-se basicamente (Roache, 1998):

- 1) os erros resultantes do uso incorreto de um modelo numérico na aproximação de um modelo matemático;
- 2) os erros gerados na implementação do modelo numérico num programa computacional;
- 3) os erros cometidos no uso do programa computacional durante a obtenção da solução numérica; e
- 4) qualquer outra eventual fonte de erro.

- **Erros de Iteração**

Roy e Blottner (2001), Ferziger e Peric (1999), Roache (1998), Kim *et al.* (1998) e Demuren e Wilson (1994) são exemplos de trabalhos que discutem sobre erros de iteração. De acordo com Ferziger e Peric (1999), considerando-se uma determinada variável de interesse (ϕ), o erro de iteração (E_n) é a diferença entre a solução exata (Φ) das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração (ϕ_n), admitindo-se que a solução exata seja única. As equações discretizadas resultam da aplicação de um modelo numérico sobre um modelo matemático. Tem-se, então, que:

$$E_n = \Phi - \phi_n \quad (1.2)$$

onde n representa o número da iteração corrente no processo de solução do sistema de equações algébricas, gerado pelas equações discretizadas do modelo matemático. Entre outros, alguns fatores que geram erros de iteração são:

- 1) o emprego de métodos iterativos para resolver as equações discretizadas, ou o sistema de equações algébricas;
- 2) o uso de métodos segregados na obtenção da solução de modelos matemáticos constituídos por mais de uma equação diferencial;
- 3) a existência de não-linearidades no modelo matemático;

1.4 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação está organizada em 8 capítulos, e apresenta-se da seguinte forma:

- O **Capítulo 1** apresentou uma breve abordagem do problema tratado durante este trabalho e o objetivo desta dissertação.
- No **Capítulo 2** discute-se sobre a convergência de processos iterativos e sobre os estimadores de erro de iteração disponíveis na literatura. Discute-se, também, sobre a estrutura e resolução de sistemas de equações encontrados em problemas de engenharia.
- O **Capítulo 3** trata das relações entre os estimadores já existentes e uma nova proposta de estimativa do erro de iteração, o estimador *empírico*. Também trata sobre um novo método de previsão da confiabilidade do resultado obtido pelo estimador de erro.

- No **Capítulo 4** são considerados quatro testes iniciais com a finalidade de verificar o desempenho do estimador *empírico* e do método de previsão da confiabilidade em alguns procedimentos iterativos simples.
- O **Capítulo 5** envolve a resolução numérica de um problema difusivo unidimensional com absorção de calor.
- No **Capítulo 6** é abordado um problema de difusão bidimensional, em regime permanente, sem geração de calor e com condutividade térmica constante.
- O **Capítulo 7** trata de um problema de escoamento bidimensional isotérmico de fluido incompressível, representado pelas equações de Navier-Stokes.
- O **Capítulo 8** é dedicado à conclusão da dissertação e sugestões para trabalhos futuros.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 CONVERGÊNCIA

O termo “convergência” é usado em dois diferentes contextos, que são: convergência de truncamento e convergência iterativa (Fletcher, 1997). A convergência de truncamento está relacionada ao fato de que a solução do sistema de equações algébricas obtidas pela discretização pode coincidir com a solução exata da equação diferencial em determinadas circunstâncias. O processo de discretização pode ser invertido, ou seja, através da expansão da série de Taylor pode-se recuperar a equação diferencial governante do problema. Ou então pode-se obter a solução exata da equação diferencial ao considerar-se um número infinito de pontos na malha. Num outro contexto, convergência iterativa que será considerada neste trabalho somente como “convergência” refere-se ao alcance da solução exata do sistema de equações algébricas discretizadas. A taxa, ou razão, de convergência pode ser vista como uma medida de quão rápido a solução fornecida pelo método iterativo se aproxima da solução do sistema linear (Fortuna, 2000).

Considerando a solução de uma variável de interesse em duas iterações consecutivas, ϕ_k e ϕ_{k-1} , e a solução exata do sistema Φ , supondo que existe um número real $\iota_k \geq 0$, tal que:

$$\|\phi_k - \Phi\| \leq \iota_k \|\phi_{k-1} - \Phi\| \quad (2.1)$$

Se $\iota_k < 1$, para todo k , o erro da solução numérica é reduzido de um fator de ι_k a cada iteração.

Considerando-se $k \rightarrow \infty$:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \iota_k = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\phi_k - \Phi\|}{\|\phi_{k-1} - \Phi\|} = \iota \quad (2.2)$$

Segundo Fortuna (2000), a taxa de convergência de um processo iterativo pode ser dada por:

$$\tau = -\frac{1}{\lambda} \quad (2.3)$$

Tem-se então que, se $\tau < 1$ o esquema iterativo converge, se $\tau > 1$ diverge e se $\tau = 1$ nada pode se afirmar. Quanto menor o valor de τ melhor é a convergência, ou seja necessita-se de menos iterações para se obter Φ para uma mesma condição inicial. Segundo Ferziger e Peric (1999), a convergência rápida é a chave da efetividade de um procedimento iterativo.

2.1.1 Critérios de Convergência

Critérios de convergência iterativa, ou somente “critérios de convergência”, são critérios adotados para interromper a execução de um processo iterativo, o que não é uma decisão fácil. Existem problemas que possuem convergência lenta e, caso a execução seja interrompida por um critério mal escolhido, pode-se ainda estar longe da solução convergida, ou seja, da solução exata do sistema de equações. Por outro lado, ao se utilizar um critério muito severo, e manter o processo iterando sem necessidade, pode-se ter desperdício de recursos como o tempo computacional.

Quando a ordem de grandeza da variável de interesse é conhecida, neste caso, um **critério absoluto** pode ser eficiente, ou seja, baseado na diferença entre duas iterações sucessivas. O procedimento é interrompido quando esta diferença, medida por alguma norma, é menor que um valor pré-estabelecido, normalmente denominado “tolerância” (ε).

$$\|\phi_{n+1} - \phi_n\| < \varepsilon \quad (2.4)$$

Segundo Roache (1998), ao se utilizar este critério deve-se cuidar com a escolha de ε , pois este pode possibilitar a suspensão das iterações com uma solução prematura, tal como mostrado na Fig. 2.1. Segundo citação feita por Roache (1998), este comportamento não é incomum (Ingham, 1968). Pode-se evitar esta parada prematura da computação, analisando-se a “segunda variação”, ou seja, definindo-se os critérios:

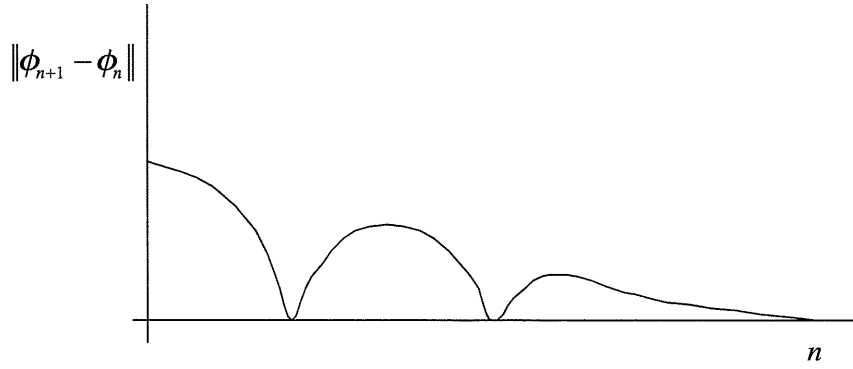


Figura 2.1 Comportamento apresentado pelo critério absoluto para alguns procedimentos iterativos (Roache, 1998).

$$\Delta_n = \|\phi_{n+1} - \phi_n\| \leq \varepsilon_1 \quad (2.5)$$

$$\Delta_n \Delta_n = \|\Delta_{n+1} - \Delta_n\| \leq \varepsilon_2 \quad (2.6)$$

Ou ainda testando passos maiores de iteração:

$$\|\phi_{n+10} - \phi_n\| < \varepsilon \quad (2.7)$$

onde ϕ_{n+10} é a décima iteração obtida após a iteração n . Mas nenhum destes critérios pode substituir o exame do comportamento iterativo, Fig. 2.1, (Roache, 1998).

Se a ordem de grandeza da variável de interesse não é conhecida, a tarefa é mais difícil. Um critério freqüentemente empregado na literatura é o **critério relativo**, ou seja:

$$\left\| \frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\phi_n} \right\| < \varepsilon \quad (2.8)$$

Este critério é normalmente mais significativo, mas é obviamente mais perigoso, pois se ϕ_n estiver próximo de zero, pode-se ter “indeterminação”. Um outro aspecto importante do uso do **critério relativo** ressaltado por Maliska (1995), é que este pode manter um processo iterativo

sendo executado, quando tudo o que interessa do ponto de vista físico já está sem variação. Para exemplificar, considera-se o campo de variação da variável ϕ com o valor mínimo 0,0010 e o valor máximo 1000. Sendo que da iteração (n) para iteração ($n + 1$), observa-se a variação de 0,0018 para 0,0020 na magnitude da variável. Ao se aplicar o critério dado pela Eq. (2.8) o valor encontrado é 0,1, ao passo que a variação de uma iteração para outra é de 0,0002. O resultado disto é que dependendo do valor adotado para ε , pode-se gastar um grande tempo de computação sem necessidade.

Um critério que evita este problema consiste em determinar a faixa de variação da variável de interesse através dos valores máximo e mínimo fornecidos pela função iterativa no domínio de cálculo. Isto é, define-se:

$$\sigma = \phi_{\max} - \phi_{\min} \quad (2.9)$$

E aplicando-se σ como referencial para o “critério relativo”, ou seja:

$$\left\| \frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\sigma} \right\| < \varepsilon \quad (2.10)$$

Com a utilização deste critério no exemplo descrito anteriormente, obtém-se o valor 0,0000002, fazendo com que o critério de parada seja satisfeito antecipadamente.

Diminuindo-se a tolerância do critério de convergência, pode-se reduzir os erros de convergência ou de iteração com um aumento do custo computacional. No entanto, deve-se ter cuidado, pois estes critérios prestam informações relativas à convergência, não fornecendo a magnitude do erro cometido no processo iterativo, sendo esta uma tarefa destinada aos **estimadores de erro**.

Além destes critérios existem outros disponíveis na literatura, como por exemplo: norma L_2 do resíduo (Fortuna, 2000) e norma L_∞ do resíduo (Patankar, 1980).

Roache (1998) faz algumas sugestões sobre o estabelecimento da convergência de um processo iterativo:

- Não basta somente examinar o comportamento iterativo (Fig. 2.1), deve-se ter também critérios quantitativos.

- Diferentes variáveis envolvidas em um mesmo processo iterativo podem apresentar diferentes taxas de convergência. Se a variável de convergência mais lenta é conhecida, ela pode ser testada; caso contrário todas as variáveis devem ser testadas.

2.2 CRITÉRIOS PARA MEDIR O DESEMPENHO DE UMA ESTIMATIVA DE ERRO

Conforme descrito anteriormente, faz-se necessário em *CFD* a utilização de **estimadores de erro**, devido à grande precisão exigida nos cálculos. A qualidade de uma estimativa de erro pode ser avaliada através da sua **efetividade** (θ), que é definida pela razão entre a incerteza (U) e o erro (E) (Zhu e Zienkiewicz, 1990):

$$\theta = \frac{U}{E} \quad (2.11)$$

Uma **estimativa de erro ideal** é aquela cuja efetividade é igual à unidade ($\theta = 1$), isto é, quando a incerteza é igual ao erro ($U = E$). Quando a magnitude da incerteza é maior do que a magnitude do erro de iteração e ambas tem o mesmo sinal, pode-se dizer que a estimativa do erro é **confiável** (Marchi, 2001). Matematicamente, diz-se que a estimativa do erro é confiável quando:

$$\theta \geq 1 \quad (2.12)$$

Se a magnitude da incerteza é aproximadamente igual à magnitude do erro de iteração, diz-se que a estimativa do erro é **acurada** (Chapra e Canale, 1994). Matematicamente, uma estimativa de erro com **acurácia** elevada significa que:

$$\theta \approx 1 \quad (2.13)$$

A definição quantitativa do que é uma estimativa de erro **acurada** é o quão próximo da unidade deve estar a efetividade.

2.3 ESTIMADORES DE ERRO DE ITERAÇÃO

São apresentados aqui alguns estimadores do erro de iteração disponíveis na literatura.

2.3.1 O Estimador *Delta*

Roache (1982) não considera adequado se decidir sobre a convergência de um processo iterativo utilizando-se “critérios relativos”, ou seja, envolvendo a razão entre dois números. Adota como critério de convergência de um processo iterativo a diferença entre os valores obtidos para a variável de interesse em duas iterações, ou seja, um “critério absoluto”, dado em :

$$|\phi_{n_2} - \phi_{n_1}| \leq \varepsilon \quad (2.14)$$

Com $n_2 > n_1$ e ε sendo um número pequeno variando de acordo com o problema. Se ε é considerado como sendo a tolerância, ou seja, o erro admitido, então o primeiro membro da Eq. (2.14) nos fornece o erro da solução numérica na iteração corrente. A estimativa do erro utilizando este fato é calculada pelo “estimador de Ita”, denominação adotada por Marchi (2001).

2.3.2 O Estimador de Ferziger e Peric

Qualquer esquema iterativo para resolução de um sistema linear pode ser escrito como:

$$\phi_{n+1} = A\phi_n + q \quad (2.16)$$

onde:

ϕ_n = vetor solução na n -ésima iteração

A = matriz iterativa (depende do esquema de iteração)

q = fator de atualização (depende do problema)

Considerando-se o valor absoluto do erro e a Eq. (1.2):

$$\phi_n = \Phi + E(\phi_n) \quad (2.17)$$

onde:

Φ = solução convergida ou exata

$E(\phi_n)$ = erro de iteração de ϕ_n

A convergência de um processo iterativo pode ser analisada com auxílio dos autovalores μ_k e autovetores Ψ_k da matriz A (Golub, 1990):

$$A\Psi_k = \mu_k \Psi_k ; \quad k = 1, 2, 3 \dots N \quad (2.18)$$

com N sendo o número de equações. O erro inicial $E(\phi_0)$ pode ser escrito como a combinação linear destes autovetores.

$$E(\phi_0) = \sum_{k=1}^N a_k \Psi_k \quad (2.19)$$

com a_k sendo uma generalização dos coeficientes de Fourier (Ferziger e Peric, 1996).

Na n -ésima iteração, tem-se:

$$E(\phi_n) = \sum_{k=1}^N a_k (\mu_k)^n \Psi_k \quad (2.20)$$

O estimador do erro de iteração proposto por Ferziger e Peric (1996), que será mencionado neste trabalho como estimador *FP*, abrange problemas em que a malha obtida no processo de discretização pode ser não-uniforme e também casos em que os autovalores associados às matrizes do processo iterativo sejam números complexos. Com relação aos autovalores associados, tem-se dois casos:

- Autovalores reais

Se o autovalor dominante μ_1 , que é o autovalor de maior magnitude (Golub, 1996), é real, então ao final de muitas iterações, ou seja, quando $n \rightarrow \infty$, o erro dominante é o primeiro termo do somatório apresentado na Eq. (2.20). Deste fato e pela combinação das Eqs. (2.17) e (2.20), tem-se:

$$\phi_n \approx \Phi + a_1 (\mu_1)^n \Psi_1 \quad (2.21)$$

Uma expressão para o erro de iteração pode ser obtida pela diferença entre duas iterações sucessivas. Da Eq. (2.17),

$$\phi_{n+1} - \phi_n = \Phi + E(\phi_{n+1}) - (\Phi + E(\phi_n)) \quad (2.22)$$

Assim, com a Eq. (2.20),

$$\chi_n = \phi_{n+1} - \phi_n = a_1 (\mu_1 - 1) (\mu_1)^n \Psi_1 \quad (2.23)$$

Segundo Ferziger e Peric (1996), o autovalor dominante μ_1 pode ser estimado por:

$$\mu_1 \approx \frac{|\chi_n|}{|\chi_{n-1}|} \quad (2.24)$$

onde $||$ = norma L_2 (Golub, 1996). Tendo-se o autovalor, não é difícil estimar o erro de iteração, através de:

$$E(\phi_n) = \Phi - \phi_n \approx a_1 (\mu_1)^n \Psi_1 \approx \frac{\chi_n}{(\mu_1 - 1)} \quad (2.25)$$

- Autovalores complexos

Métodos iterativos freqüentemente apresentam matrizes que possuem autovalores complexos. Se o autovalor de maior magnitude (μ_1) é complexo, então considera-se também o seu conjugado, pois se um número complexo é autovalor de uma matriz, conseqüentemente seu conjugado também o será (Golub, 1996). A equação (2.21) fica então representada por:

$$\phi_n \approx \Phi + a_1 (\mu_1)^n \Psi_1 + a_1^* (\mu_1^*)^n \Psi_1^* \quad (2.26)$$

com o símbolo $*$ indicando “conjugado”.

Com base na Eq. (2.22), tem-se:

$$\chi_n \approx \phi_{n+1} - \phi_n \approx (\mu_1)^n (\mu_1 - 1) a_1 \Psi_1 + (\mu_1^*)^n (\mu_1^* - 1) a_1^* \Psi_1^* \quad (2.27)$$

$$\chi_n \approx (\mu_1)^n \omega + (\mu_1^*)^n \omega^* \quad (2.28)$$

onde:

$$\begin{aligned} \omega &= (\mu_1 - 1) a_1 \Psi_1 \\ \omega^* &= (\mu_1^* - 1) a_1^* \Psi_1^* \end{aligned}$$

A magnitude do autovalor μ_1 pode ser representada por (Golub, 1996):

$$\mu_1 = l e^{i\vartheta} \quad (2.29)$$

Definindo-se:

$$z_n = \chi_{n-2} \chi_n - \chi_{n-1} \chi_{n-1} = 2l^{2n-2} |\omega|^2 [\cos(2\vartheta) - 1] \quad (2.30)$$

Segundo Ferziger e Peric (1996), estima-se o quadrado da magnitude do autovalor por:

$$l^2 = \frac{z_n}{z_{n-1}} \quad (2.31)$$

Desta forma, quando se tem autovalores complexos, a estimativa do erro requer um grande número de aproximações implicando muitas vezes em oscilações e os resultados contêm termos proporcionais ao cosseno do ângulo fase ϑ (argumento do número complexo). Lembrando que se tem interesse somente no valor absoluto, obtém-se:

$$|E(\phi_n)| \approx \frac{|\chi_n|}{\sqrt{l^2 + 1}} \quad (2.32)$$

Nos casos em que há oscilações na estimativa do erro por *FP*, esta não deve ser acurada em algumas iterações particulares, mas deve ser uma boa aproximação para o todo (Ferziger e Peric, 1996). No entanto deve-se cuidar com o número de iterações onde ocorre este problema e analisar em quais iterações esta estimativa não é adequada. Algumas vezes, para se remover o efeito da oscilação considera-se um valor médio para o autovalor estimado sobre um certo número de iterações. Dependendo do problema este número de iterações varia de 1 a 50 (cerca de 1% do número total de iterações).

Finalmente tem-se um caso que se pode tratar de autovalores reais e complexos. Para determinar se o autovalor dominante μ_1 é real ou complexo, usa-se a expressão “raio”.

$$r = \frac{|z_n|}{|\chi_n|^2} \quad (2.33)$$

Se r é “pequeno”, então μ_1 é real, caso contrário é complexo. Foi adotado por Ferziger e Peric (1996) $r = 0,1$ como um indicador do tipo de autovalor, para então se aplicar a expressão apropriada para o estimador de erro.

Algoritmo para estimar erros de iteração, segundo Ferziger e Peric (1996):

Para aplicação do estimador *FP* necessita-se de alguns parâmetros, que são:

$$i) \chi_n = \phi_{n+1} - \phi_n$$

$$ii) z_n = \chi_{n-2}\chi_n - \chi_{n-1}\chi_{n-1}$$

$$iii) r = \frac{|z_n|}{|\chi_n|^2}$$

Tem-se então uma condicional:

Se $r > 0,1 \Rightarrow$ autovalor complexo

Se $r \leq 0,1 \Rightarrow$ autovalor real

o Autovalor Complexo

$$U_n = \frac{|\phi_{n+1} - \phi_n|}{\sqrt{l^2 + 1}} \quad (2.34)$$

$$l^2 = \frac{z_n}{z_{n-1}}$$

○ Autovalor real

$$U_n = \frac{(\phi_n - \phi_{n+1})}{(\mu_{1,n} - 1)} \quad (2.35)$$

$$\mu_{1,n} = \left| \frac{(\phi_{n+1} - \phi_n)}{(\phi_n - \phi_{n-1})} \right|$$

onde a incerteza (U_n) corresponde à estimativa do erro ($E(\phi_n)$).

Para processos iterativos com muitas iterações ($n \rightarrow \infty$), a estimativa do erro obtida pelo estimador *FP* apresenta problemas. Estes problemas ocorrem devido ao grande número de operações envolvidas no cálculo da incerteza, ocasionando erros de arredondamento. Por exemplo, as operações de subtração acarretam muitas vezes o problema do cancelamento subtrativo.

Se a matriz iterativa (4) apresentar autovalores complexos, a estimativa do erro envolve um número bem maior de aproximações que para o caso de autovalores reais. Com isso, tem-se um grande número de oscilações nos resultados numéricos para incerteza. Para contornar este problema, os autores sugerem a utilização de um valor médio para o parâmetro l sobre um certo número de iterações, mas a utilização deste critério requer uma avaliação rigorosa sobre a quantidade e localização das oscilações.

Para o caso de autovalores reais, se o parâmetro μ assumir valores muito próximos de 1 tem-se “indeterminação”, pois o denominador da Eq. (2.35) se torna próximo de zero. Desta forma, não é possível se estimar o erro. Será mostrado no capítulo 3 que este parâmetro está diretamente relacionado com a ordem de convergência do processo iterativo. Portanto, pode-se dizer que o estimador *FP* não é adequado para se estimar erros de processos iterativos que têm convergência “muito lenta”.

2.3.3 O Estimador de Kim, Anand e Rhode

São avaliadas por Kim, Anand e Rhode (1998) duas grandezas que são comumente usadas para decidir sobre a convergência iterativa de problemas numéricos. Uma alternativa é a utilização do resíduo das equações lineares algébricas discretizadas, que é bastante usado no método de volumes finitos (Patankar, 1980). Segundo Kim, Anand e Rhode, a aproximação do erro iterativo pelo resíduo é mais apropriada conceitualmente que a utilização de “critérios absolutos”, envolvidos na aproximação dada pelo **estimador Delta**, pois o resíduo expressa a diferença entre a solução encontrada e a solução exata das equações discretizadas. Além disso,

um importante papel do resíduo é enfatizado por Buzzi-Ferraris e Tronconi (1993) na solução de equações algébricas não-lineares.

Para um domínio inteiro, o sistema de equações resultante de um processo de discretização pode ser escrito como:

$$A\phi = C \quad (2.36)$$

Métodos iterativos iniciam com uma estimativa inicial para solução em uma iteração n (ϕ_n), então calcula-se o valor de ϕ para a iteração $(n+1)$ e assim sucessivamente até que ϕ_{n+1} satisfaça a Eq. (2.36), quando isso ocorrer o processo iterativo é finalizado. No entanto, a Eq. (2.36) é produto da discretização, ou seja, aproximações para as equações diferenciais parciais e ordinárias. Mesmo que não se tenha erro de arredondamento, ϕ_{n+1} satisfazendo a Eq. (2.36) não é a solução exata para equação diferencial que rege o problema.

Kim, Anand e Rhode (1998) questionam sobre a garantia de que os “critérios de convergência absoluto e relativo” assegurem que ϕ_{n+1} é certamente solução para Eq. (2.36). Por esta razão sugerem o monitoramento do somatório do erro residual em cada nó da malha. Uma opção é declarar a convergência quando este somatório for menor que ε , com ε sendo um valor pequeno. O principal objetivo do trabalho de Kim, Anand e Rhode (1998) é avaliar o uso do critério de convergência absoluto e propor um estimador de erro baseado no resíduo adimensionalizado (R^*).

Considerando a Eq (2.36), o resíduo (R_n) para n -ésima iteração é dado por:

$$R_n = A\phi_n - C_n \quad (2.37)$$

Define-se R^* como sendo a soma do resíduo local adimensionalizado:

$$R^* = \frac{\sum_{i,j} |R_n|}{\sum_{i,j} |A\phi_n|} \quad (2.38)$$

Na Eq. (2.37) a matriz coeficiente A pode ser particionada (Hirsch, 1988) em uma soma de matrizes: L contendo os elementos abaixo da diagonal de A , D contendo os elementos ao longo da diagonal de A , e U contendo os elementos acima da diagonal de A , ou seja:

$$A = L + D + U \quad (2.39)$$

De acordo com o processo iterativo de Jacobi, tem-se:

$$D\phi_{n+1} = C_n - L\phi_n - U\phi_n \quad (2.40)$$

Subtraindo $D\phi_n$ de ambos os lados na Eq. (2.40), vem:

$$D\phi_{n+1} - D\phi_n = C_n - L\phi_n - U\phi_n - D\phi_n \quad (2.41)$$

Substituindo a Eq. (2.5) em (2.41), obtém-se:

$$D(\Delta_n) = C_n - L\phi_n - U\phi_n - D\phi_n \quad (2.42)$$

$$D(\Delta_n) = C_n - (L + D + U)\phi_n \quad (2.43)$$

$$D(\Delta_n) = C_n - A\phi_n \quad (2.44)$$

$$D(\Delta_n) = -R_n \quad (2.45)$$

Assim mostra-se que a troca em ϕ de uma iteração n para uma iteração $(n+1)$ é proporcional ao resíduo R na iteração n . A principal suposição nesta análise é que A é estacionária; no entanto, A muda de iteração para iteração para o caso de equações não-lineares. Considerando-se Φ como sendo a solução exata para Eq. (2.36), se $E(\phi_n) \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, então o método é convergente e pode-se escrever:

$$R = A\Phi - C = 0 \quad (2.46)$$

Também, por definição, (Kim, Anand e Rhode, 1998):

$$R_n = A_n C_n \quad (2.47)$$

Subtraindo a Eq. (2.47) da Eq.(2.46), tem-se:

$$R - R_n = A\Phi - A\phi_n - C + C_n \quad (2.48)$$

Assumindo que C é invariante com n , com o progresso da solução, a equação (2.48) pode ser reduzida para:

$$-R_n = A(\Phi - \phi_n) \quad (2.49)$$

$$-R_n = AE(\phi_n) \quad (2.50)$$

Comparando a Eq. (2.46) e a Eq. (2.50), vem:

$$D(\Delta\phi_n) = AE(\phi_n) \quad (2.51)$$

O erro originado ao se considerar as matrizes A e C como sendo invariantes, decresce nitidamente quando a convergência é alcançada, em função de ϕ (Kim, Anand e Rhode, 1998). Então, quando o processo está convergido, as matrizes A e C são essencialmente invariantes, isto é, quando o número de iterações tende a infinito a Eq. (2.37) tende ao valor exato do erro. Conseqüentemente, monitorar a troca em ϕ de iteração para iteração ou monitorar o resíduo na discretização das equações é equivalente a monitorar o erro $E(\phi_n)$.

Os experimentos numéricos realizados por Kim, Anand e Rhode (1998) envolveram um modelo computacional de volumes finitos que é comumente usado para escoamento (equações de Navier-Stokes). Na análise de alguns “casos teste”, que são representativos de uma grande quantidade de problemas bidimensionais de fluido incompressível envolvendo a convecção e difusão de calor, concluíram que, exceto com o uso de um fator de relaxamento menor que 0,2, o uso do “critério absoluto” é surpreendentemente mais próximo de $E(\phi_n)$.

Os resultados obtidos para R^* foram sempre menores, porém menos oscilatórios que os apresentados pelo “critério absoluto”. Desta forma pode-se dizer que a estimativa obtida por R^*

subestima a magnitude de $E(\phi_n)$, e com isso, não demonstrando ser confiável. Contudo, R^* apresentou um comportamento semelhante a $E(\phi_n)$, com relação às oscilações.

2.3.4 O Estimador de Roy e Blottner

A variável de interesse (ϕ) considerada por Roy e Blottner (2001) para o desenvolvimento deste estimador de erro foi o fluxo de calor em regime permanente. Neste problema tem-se muita atenção com os resultados numéricos, pois este requer grande precisão. É realizada uma análise sobre a convergência iterativa de malhas e propõe-se empiricamente um estimador para a magnitude do erro de iteração, baseado no fato deste apresentar um comportamento exponencial com as iterações. No presente trabalho o estimador de erro de iteração proposto por Roy e Blottner (2001) será denotado por RB . Neste estimador, o erro de iteração é definido por

$$E(\phi_n) = \phi_n - \phi_\infty \quad (2.52)$$

onde:

ϕ_n = solução numérica da variável de interesse na iteração n .

ϕ_∞ = solução exata extrapolada de ϕ , sem erros de arredondamento ou programação.

Visando uma uniformidade, considera-se aqui a mesma expressão para o erro iterativo proposta no capítulo 1, ou seja:

$$E(\phi_n) = \phi_\infty - \phi_n \quad (2.53)$$

Tem-se, então:

$$\phi_n = \phi_\infty + E(\phi_n) \quad (2.54)$$

Foi observado por Roy e Blottner (2001) que o erro de iteração para o código SACCARA (código computacional utilizado em seus experimentos), apresentou comportamento exponencial do tipo:

$$E(\phi_n) \propto e^{-n p} \quad (2.55)$$

onde α é um coeficiente que se admite ter valor constante, portanto independente de n , que é o número de iterações e p correspondendo à ordem do erro de iteração. No entanto, a equação geral do erro de iteração é composta por um único termo somente em problemas muito simples. Na maioria dos casos esta expressão tem vários termos, embora para $n \rightarrow \infty$, o valor do erro tende ao valor do primeiro termo.

Substituindo a Eq. (2.53) em (2.55), tem-se:

$$\phi_\infty - \phi_n = \alpha e^{-n p} \quad (2.56)$$

Considerando a Eq. (2.56) para iterações $(n-1)$ e (n) , pode-se deduzir a expressão de ϕ_∞ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_\infty - \phi_{n-1} = \alpha e^{-(n-1)p} \\ \phi_\infty - \phi_n = \alpha e^{-n p} \end{array} \right. \quad (2.57)$$

$$(2.58)$$

Da Eq. (2.57), tem-se:

$$\phi_\infty = \phi_{n-1} + \alpha e^{-(n-1)p} \quad (2.59)$$

Com a substituição da Eq. (2.59) na Eq. (2.58):

$$\phi_{n-1} + \alpha e^{-(n-1)p} - \phi_n = \alpha e^{-n p} \quad (2.60)$$

Com isso pode-se escrever:

$$\alpha = \frac{\phi_{n-1} - \phi_n}{e^{-n p} - e^{-n p + p}} \quad (2.61)$$

Analogamente considerando a Eq. (2.56) para duas iterações quaisquer n_1 e n_2 , com $n_1 < n_2$, tem-se a seguinte expressão:

$$\alpha = \frac{\phi_{n_1} - \phi_{n_2}}{e^{-n_2 p} - e^{-n_1 p}} \quad (2.62)$$

Do ponto de vista prático, considerar $n \rightarrow \infty$ não é factível, ou seja, não é possível se obter um número infinito de iterações. Deste fato pode-se concluir que adotar α constante, ou seja independente de n , conforme admitido na Eq. (2.55) é incorreto; maiores detalhes sobre este fato são apresentados no capítulo 3.

Considerando então, a Eq. (2.62) em (2.59), obtém-se a seguinte expressão para a estimativa da solução exata extrapolada:

$$\phi_{\infty} = \phi_{n-1} + \left(\frac{\phi_{n-1} - \phi_n}{e^{-p} - 1} \right) \quad (2.63)$$

Cuja expressão semelhante para iterações n_1 e n_2 , é dada por:

$$\phi_{\infty} = \phi_{n_1} + \left(\frac{\phi_{n_1} - \phi_{n_2}}{e^{-(n_2 - n_1)p} - 1} \right) \quad (2.64)$$

Aplicando o logaritmo neperiano na Eq. (2.55), tem-se:

$$\ln(E(\phi_n)) = \ln(\alpha e^{-n p}) \quad (2.65)$$

$$\ln(E(\phi_n)) = \ln \alpha - n p \quad (2.66)$$

Substituindo a Eq. (2.53) em (2.66):

$$\ln(\phi_{\infty} - \phi_n) = \ln \alpha - n p \quad (2.67)$$

$$n p = \ln \alpha - \ln(\phi_{\infty} - \phi_n) \quad (2.68)$$

Considerando a Eq. (2.68) para iterações $(n-1)$ e (n) , tem-se:

$$\begin{cases} (n-1)p = \ln \alpha - \ln(\phi_\infty - \phi_{n-1}) \\ (n)p = \ln \alpha - \ln(\phi_\infty - \phi_n) \end{cases} \quad (2.69)$$

$$(2.70)$$

Subtraindo a Eq. (2.70) de (2.69):

$$p = \ln(\phi_\infty - \phi_{n-1}) - \ln(\phi_\infty - \phi_n) \quad (2.71)$$

Tem-se então:

$$p = \ln \left(\frac{\phi_\infty - \phi_{n-1}}{\phi_\infty - \phi_n} \right) \quad (2.72)$$

De maneira análoga para iterações n_1 e n_2 , tem-se:

$$p = \ln \left(\frac{\phi_\infty - \phi_{n_1}}{\phi_\infty - \phi_{n_2}} \right) \quad (2.73)$$

Com base nas expressões anteriores, com $n_3 > n_2 > n_1$, é proposto por Roy e Blottner, estimar o erro de iteração na iteração n_2 , através da expressão:

$$U_{n_2} = -\frac{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}}{1 - \varpi} \quad (2.74)$$

onde:

$$\varpi = \frac{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}}{\phi_{n_2} - \phi_{n_1}} \quad (2.75)$$

Estes resultados estão relacionados aos apresentados por Ferziger e Peric (1996) para se estimar o erro de iteração, mas estes autores empregam outras aproximações. Se os autovalores são complexos, então esta aproximação não é apropriada, deve-se então utilizar o estimador *FP*.

2.5 RESOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES

A resolução numérica de um sistema linear é feita, em geral, por dois caminhos (Barroso, 1987): os métodos diretos e os métodos iterativos. São exemplos de métodos diretos: eliminação de Gauss, fatoração LU, fatoração de Cholesky, método de Crout e método de Doolittle (Kreyszig, 1999). Em sistemas cujas matrizes associadas são esparsas, ou seja, possuem muitos elementos nulos, a utilização de métodos diretos não é adequada, pois a sua esparsidade pode ser destruída. Os métodos diretos são processo finitos, e, portanto, teoricamente, obtêm a solução de qualquer sistema não singular de equações com um número de operações pré-estabelecido (Ruggiero e Lopes, 1998).

Em contraste, os métodos iterativos ou indiretos apresentam um número de operações variável, ou seja, não conhecido *a priori*. Neste caso, o número de operações varia de acordo com o critério de parada adotado. Um método iterativo consiste em uma aproximação inicial para as variáveis de interesse e então, através da repetição de um ciclo computacional se obtêm soluções sucessivas até que se alcance a acurácia exigida (Kreyszig, 1999). O uso de métodos iterativos é ideal em problemas que apresentam matrizes esparsas, não havendo assim necessidade de se armazenar os elementos nulos da matriz.

2.6 RESUMO DO CAPÍTULO

Neste capítulo foram apresentados o conceito e critérios de convergência para um processo iterativo. Foram definidos os conceitos de efetividade, confiabilidade e acurácia de uma estimativa de erro ou incerteza. Foram descritos quatro estimadores de erro de iteração que estão disponíveis na literatura: o estimador *delta*, estimador de Ferziger e Peric (*FP*), estimador de Kim, Anand e Rhode, e o estimador de Roy e Blottner (*RB*). Discutiu-se também sobre a estrutura e resolução de sistemas de equações encontrados em problemas de engenharia.

O ESTIMADOR EMPÍRICO

Com base no comportamento apresentado pelo erro de iteração, é introduzido neste capítulo um novo estimador de erro: o estimador *empírico*. Para tanto, inicialmente são apresentadas as características do erro iterativo e as definições de ordem assintótica e efetiva. Em seguida discute-se sobre a estimativa do erro de iteração, onde são apresentados o conceito e expressões para o cálculo da ordem aparente da incerteza de soluções numéricas e a formulação do estimador.

3.1 CARACTERÍSTICAS DO ERRO DE ITERAÇÃO

Para exemplificar o efeito dos erros de iteração sobre o erro da solução numérica, considere-se o uso do método da iteração linear (MIL) (Barroso, 1987) na resolução da equação

$$x^2 - 5x + 6 = 0 \tag{3.1}$$

A solução numérica iterativa da Eq. (3.1) é tratada detalhadamente no capítulo 4. Este exemplo mostra a característica principal dos erros de iteração quando se aumenta o número de iterações: em geral, seu valor diminui em escala logarítmica e tende a uma inclinação constante. Isso pode ser observado na Fig. 3.1.

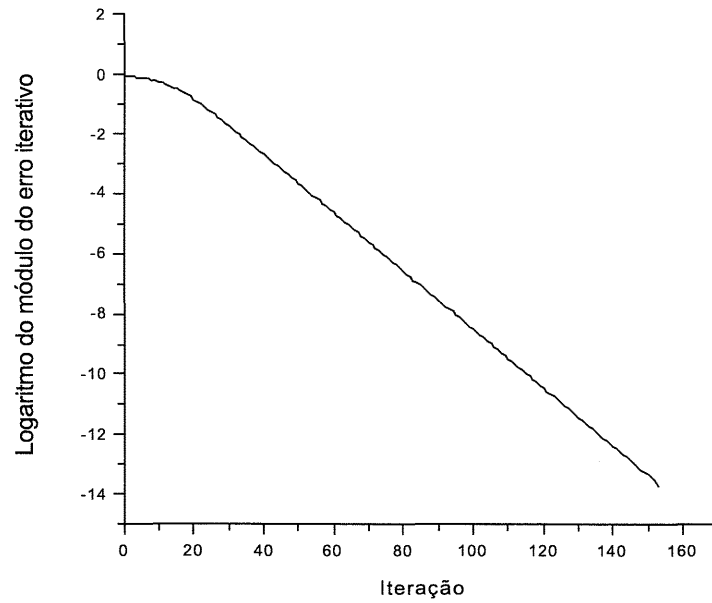


Figura 3.1 – Erro da solução numérica da Eq. (3.1),
causado pelos erros de iteração.

Com base no fato de que o erro de iteração ($E(\phi_n)$) apresenta comportamento exponencial (Roy e Blottner, 2001), conforme ilustrado na Fig. 3.1, na base decimal, tem-se:

$$E(\phi_n) = C 10^{-np_L} \quad (3.2)$$

onde p_L é a ordem assintótica do erro, ou seja, é a inclinação assintótica para a qual tende a curva do erro iterativo quando $n \rightarrow \infty$. Quanto maior é esta inclinação, maior é o valor da ordem e maior é a taxa de redução de $E(\phi_n)$ com o aumento de n . E ainda, para um mesmo número de iterações, menor é o erro.

Roy e Blottner (2001) consideram, por simplificação, que para $n \rightarrow \infty$, isto é, para um número infinito de iterações, o valor do coeficiente C na Eq. (3.2) é constante. Porém, para um caso prático qualquer, deve-se admitir que a forma geral do erro de iteração é dada pela Eq. (2.20). No entanto, quando o número de iterações (n) é muito grande, o primeiro termo desta expressão é o principal componente, já que μ_1 é o autovalor dominante da matriz iterativa, ou seja, o autovalor de maior magnitude (Ferziger e Peric, 1996). Isso possibilita uma aproximação para expressão geral do erro formada por um único termo.

3.1.1 Ordem efetiva

A ordem efetiva (p_E) do erro de iteração é definida como a inclinação local da curva de $E(\phi_n)$ versus n num gráfico logarítmico. Matematicamente, a ordem efetiva (p_E) é obtida a partir da Eq. (3.2), onde C é admitido ser independente de n . Considerando-se duas iterações n_1 e n_2 , com $n_1 < n_2$, tem-se:

$$\begin{cases} E(\phi_{n_1}) = C 10^{-n_1 p_E} \\ E(\phi_{n_2}) = C 10^{-n_2 p_E} \end{cases} \quad (3.3)$$

Do sistema (3.3), tem-se que:

$$p_E = \frac{\log \left[\frac{E(\phi_{n_1})}{E(\phi_{n_2})} \right]}{n_2 - n_1} \quad (3.4)$$

3.2 ESTIMATIVA DO ERRO DE ITERAÇÃO

Pela Eq. (1.2), o valor do erro de iteração só pode ser calculado quando se conhece a solução exata do sistema de equações resultante da discretização. Mas em termos práticos isso não é possível. Conseqüentemente é necessário estimar qual é o valor da solução exata. A solução exata para o sistema de equações não é a solução analítica para a equação que rege o problema, pois o sistema é produto da discretização, ou seja, aproximações.

A incerteza iterativa ($U(\phi_n)$) de uma solução numérica é calculada pela diferença entre a solução exata estimada (ϕ_∞) para a variável de interesse e a sua solução numérica em uma iteração n (ϕ_n):

$$U(\phi_n) = \phi_\infty - \phi_n \quad (3.5)$$

Com base na Eq. (3.2), admite-se que

$$U(\phi_n) = k 10^{-n p_U} \quad (3.6)$$

com k sendo constante e p_U indicando a ordem aparente, cujo valor explícito pode ser obtido pela Eq. (3.9).

3.2.1 Ordem aparente

A ordem aparente (p_U) é definida como a inclinação local da curva de incerteza (U_n) da solução numérica (ϕ_n) *versus* o número de iterações (n) num gráfico logarítmico. O valor para o qual as ordens efetiva e aparente tendem, quando se aumenta o número de iterações, é a *ordem assintótica* do erro iterativo (p_L). Ela não é um resultado conhecido *a priori*, ou seja, é obtida somente através de experimentos numéricos.

Considerando-se as iterações n_1 , n_2 e n_3 , com $n_1 < n_2 < n_3$, e as Eqs. (3.5) e (3.6), podemos escrever:

$$\begin{cases} \phi_\infty - \phi_{n_1} = k 10^{-n_1 p_U} \\ \phi_\infty - \phi_{n_2} = k 10^{-n_2 p_U} \\ \phi_\infty - \phi_{n_3} = k 10^{-n_3 p_U} \end{cases} \quad (3.7)$$

Supondo que:

$$\Delta n = n_2 - n_1 = n_3 - n_2 \quad (3.8)$$

Do sistema de equações (3.7), tem-se:

$$p_U = \frac{\log(\psi)}{\Delta n} \quad (3.9)$$

onde:

$$\psi = \frac{\phi_{n_2} - \phi_{n_1}}{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}} \quad (3.10)$$

3.2.2 Dedução do estimador *empírico*

Do sistema de equações (3.7), tem-se que:

$$\phi_{\infty} = \phi_{n_3} + \frac{(\phi_{n_3} - \phi_{n_2})}{(\psi - 1)} \quad (3.11)$$

Substituindo este resultado na Eq. (3.5):

$$U(\phi_{n_3}) = \frac{(\phi_{n_3} - \phi_{n_2})}{(\psi - 1)} \quad (3.12)$$

Sendo esta a expressão fornecida para a estimativa do erro de iteração na iteração n_3 , através do estimador *empírico*. Marchi e Silva (2002) demonstraram que estimativas de erro baseadas em equações semelhantes à Eq. (3.6) ou (3.12) são válidas apenas para $\psi > 1$ ou $p_U > 0$. Quando a ordem aparente (p_U) apresenta valores negativos a utilização do estimador *empírico* não faz sentido, pois o princípio deste estimador está no comportamento exponencial apresentado pelo erro de iteração, Eq. (3.6), e ao se considerar $p_U < 0$, a magnitude da estimativa do erro aumenta com o número de iterações. Isto é, este estimador é válido apenas para valores das ordens assintótica (p_L) e aparente (p_U) maiores do que zero, ou seja, $(p_L, p_U) > 0$. O argumento para justificar o uso de ordens positivas é o seguinte: considere-se $p_U < 0$ sobre a Eq. (3.6), isto implica que

$$U(\phi_n) = k 10^{n|p_U|} \quad (3.13)$$

A partir da Eq. (3.13), verifica-se que ao se aumentar o número de iterações (n), a incerteza aumenta. Este resultado é oposto ao esperado para o comportamento do erro de iteração.

Ao se considerar k como sendo um coeficiente constante na Eq. (3.6), ou seja, independente de n , tem-se algumas implicações, pois k desempenha o mesmo papel de C na Eq. (3.2). Este fato faz com que na maioria das aplicações, a incerteza obtida através desta estimativa seja diferente do erro de iteração; o quão diferente vai depender da complexidade de cada problema e do número de iterações (n) a ser utilizada.

3.3 O ESTIMADOR EMPÍRICO E O ESTIMADOR *FP*

Para os casos em que A possui autovalor dominante real, tem-se algumas relações entre este estimador e o estimador de Ferziger e Peric (*FP*), apresentado na seção 2.3.2. Pelo estimador *FP*, para autovalor dominante real e iterações n_1 , n_2 e n_3 , com $n_1 < n_2 < n_3$, tem-se:

$$U(\phi_{n_2}) = \frac{(\phi_{n_2} - \phi_{n_3})}{(\mu_{1,n_2} - 1)} \quad (3.14)$$

onde, μ_{1,n_2} indica o autovalor dominante para matriz iterativa A na iteração n_2 , que é dado por:

$$\mu_{1,n_2} = \left| \frac{(\phi_{n_3} - \phi_{n_2})}{(\phi_{n_2} - \phi_{n_1})} \right| \quad (3.15)$$

Comparando as Eqs. (3.15) e (3.10), pode-se concluir que:

$$\psi_{n_3} = \frac{1}{\mu_{1,n_2}} \quad (3.16)$$

Ou seja, o parâmetro ψ , adotado na formulação do estimador *empírico*, é o inverso do autovalor dominante (μ_1) considerado por Ferziger e Peric (1996) no cálculo da estimativa do erro de iteração; no entanto, não considerados em uma mesma iteração. Isto é, como estes parâmetros são atualizados a cada iteração, ψ é o inverso de μ_1 em uma iteração anterior.

3.4 O ESTIMADOR EMPÍRICO E O ESTIMADOR DELTA

Para as iterações n_2 e n_3 , com $n_2 < n_3$, a variação do erro (ΔE) pode ser analisada através do valor absoluto da diferença entre os erros em cada iteração (Roache, 1982):

$$\Delta E = |E(\phi_{n_3}) - E(\phi_{n_2})| \quad (3.17)$$

Conforme definido no capítulo 1, Eq. (1.2), o erro iterativo é dado pela diferença entre a solução exata Φ e a solução numérica na iteração corrente (ϕ_n) . Portanto, a Eq. (3.17) pode ser reescrita por

$$\Delta E = |(\Phi - \phi_{n_3}) - (\Phi - \phi_{n_2})| \quad (3.18)$$

o que resulta em

$$\Delta E = |\phi_{n_2} - \phi_{n_3}| \quad (3.19)$$

Portanto, analisar a variação do erro é equivalente a se analisar a variação da solução numérica nas respectivas iterações. Então, a incerteza calculada através do estimador *Delta*, Eq. (2.14), está diretamente relacionada à variação do erro entre duas iterações.

O cálculo da incerteza numérica utilizando o estimador *Delta* (U_Δ) usa soluções numéricas obtidas em duas iterações, não levando em conta a razão de convergência (ψ) envolvida na formulação do estimador *empírico*. Uma relação facilmente verificável é que a magnitude do estimador *empírico* coincide com o resultado do estimador *Delta* para o caso em que $\psi = 2$, ou seja:

$$|U(\phi_{n_3})| = \left| \frac{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}}{\psi - 1} \right| = \left| \frac{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}}{2 - 1} \right| = |\phi_{n_3} - \phi_{n_2}| \quad (3.20)$$

3.5 O ESTIMADOR EMPÍRICO E O ESTIMADOR *RB*

Na seção 2.3.4 foi apresentado o estimador de Roy e Blottner (*RB*). Considerando-se $n_1 < n_2 < n_3$, a incerteza de iteração na iteração n_2 , ($U(\phi_{n_2})$), obtida através do estimador *RB* é dada por:

$$U(\phi_{n_2}) = -\frac{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}}{1 - \varpi_{n_2}} = \frac{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}}{\varpi_{n_2} - 1} \quad (3.21)$$

onde:

$$\varpi_{n_2} = \frac{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}}{\phi_{n_2} - \phi_{n_1}} \quad (3.22)$$

Para se obter uma estimativa de erro utilizando-se o estimador *RB*, necessita-se da solução numérica da variável de interesse em três iterações sucessivas. Sendo que, somente é possível obter a incerteza na iteração intermediária, ou seja, obtém-se $U(\phi_{n_2})$ a partir dos resultados de ϕ_{n_1} , ϕ_{n_2} e ϕ_{n_3} .

Através do estimador *empírico* a estimativa do erro, dada pela Eq. (3.12), também necessita da solução numérica da variável de interesse em três iterações sucessivas. Portanto, $U(\phi_{n_2})$ através do estimador *RB* é equivalente a $U(\phi_{n_3})$ pelo estimador *empírico*, a menos dos parâmetros envolvidos: ϖ e ψ .

Com relação a ϖ e ψ , comparando as equações (3.10) e (3.22), pode-se concluir que:

$$\psi_{n_3} = \frac{1}{\varpi_{n_2}} \quad (3.23)$$

Ou seja, o parâmetro ψ , adotado na formulação do estimador *empírico*, é o inverso de ϖ considerado por Roy e Blottner no cálculo da estimativa do erro de iteração; no entanto, não considerados em uma mesma iteração. Isto é, como estes parâmetros são atualizados a cada iteração, ψ é o inverso de ϖ em uma iteração anterior.

3.6 PREVISÃO DA CONFIABILIDADE DO RESULTADO OBTIDO PELO ESTIMADOR DE ERRO

Propõe-se, aqui, prever as características da estimativa de erro na iteração n_3 através dos resultados numéricos de ϕ_{n_1} , ϕ_{n_2} , ϕ_{n_3} , ϕ_{n_4} e pela solução extrapolada ϕ_{p_U} , onde:

$$\phi_{p_U} = \frac{(\phi_{n_3} - \phi_{n_2})}{\psi} + \phi_{n_3} \quad (3.24)$$

$$\psi = \frac{\phi_{n_2} - \phi_{n_1}}{\phi_{n_3} - \phi_{n_2}} \quad (3.25)$$

com $n_1 < n_2 < n_3 < n_4$.

A principal hipótese adotada é que o comportamento de ϕ_{n_4} com relação a ϕ_{p_U} se repete a cada nova extrapolação até o limite de $n \rightarrow \infty$, onde n representa o número de iterações. São considerados três intervalos:

3.6.1 Intervalo I

Conforme a Fig. 3.2, se a solução numérica ϕ_{n_4} estiver entre a solução numérica ϕ_{n_3} e a solução extrapolada ϕ_{p_U} , então espera-se que a estimativa de erro na iteração n_3 seja confiável, isto é,

$$\left(\frac{\phi_{p_U} - \phi_{n_3}}{\phi_{n_4} - \phi_{n_3}} \right) > 1 \Rightarrow \frac{U(\phi_{n_3})}{E(\phi_{n_3})} > 1 \quad (3.26)$$

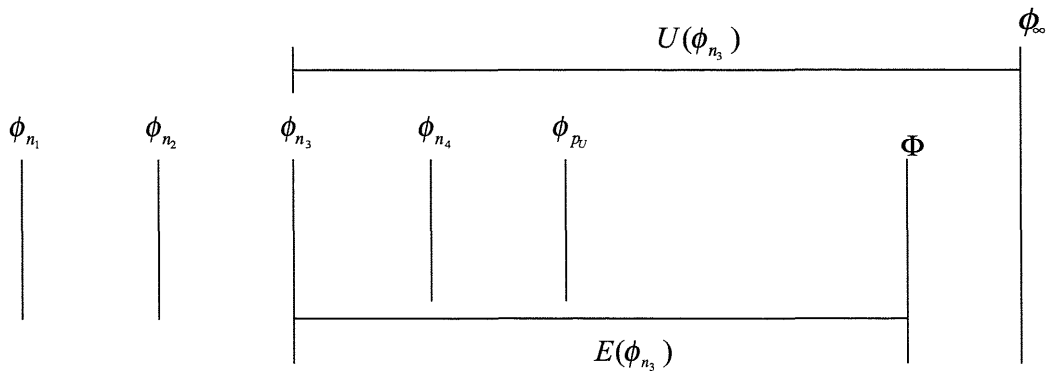


Figura 3.2 Comportamento de ϕ_{n_4} com relação a ϕ_{p_U} para o Intervalo I.

3.6.2 Intervalo II

Conforme a Fig. 3.3, se a solução extrapolada ϕ_{p_U} estiver entre a solução numérica ϕ_{n_3} e a solução numérica ϕ_{n_4} , então espera-se que a estimativa de erro na iteração n_3 não seja confiável, isto é,

$$0 < \left(\frac{\phi_{p_U} - \phi_{n_3}}{\phi_{n_4} - \phi_{n_3}} \right) < 1 \Rightarrow 0 < \frac{U(\phi_{n_3})}{E(\phi_{n_3})} < 1 \quad (3.27)$$

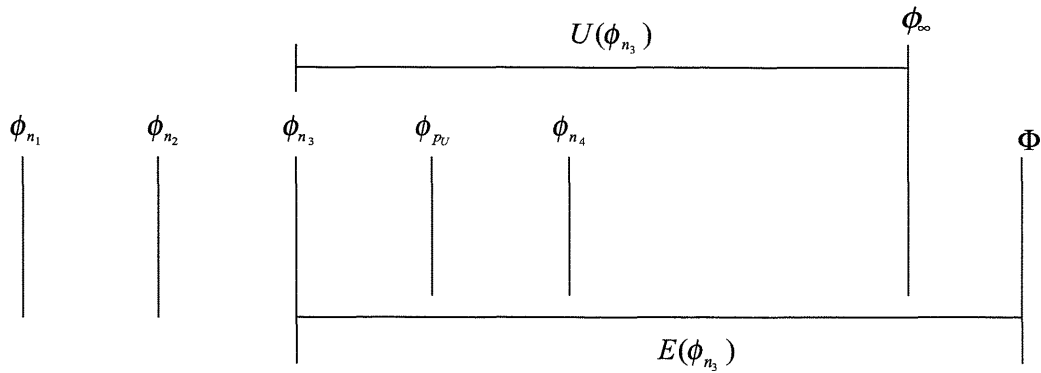


Figura 3.3 Comportamento de ϕ_{n_4} com relação a ϕ_{p_U} para o Intervalo II.

3.6.3 Intervalo III

Conforme Fig. 3.4, se a solução numérica ϕ_{n_3} estiver entre a solução numérica ϕ_{n_4} e a solução extrapolada ϕ_{p_U} , então espera-se que a estimativa de erro na iteração n_3 tenha sinal oposto ao erro; constitui-se na pior previsão de erro:

$$\left(\frac{\phi_{p_U} - \phi_{n_3}}{\phi_{n_4} - \phi_{n_3}} \right) < 0 \Rightarrow \frac{U(\phi_{n_3})}{E(\phi_{n_3})} < 0 \quad (3.28)$$

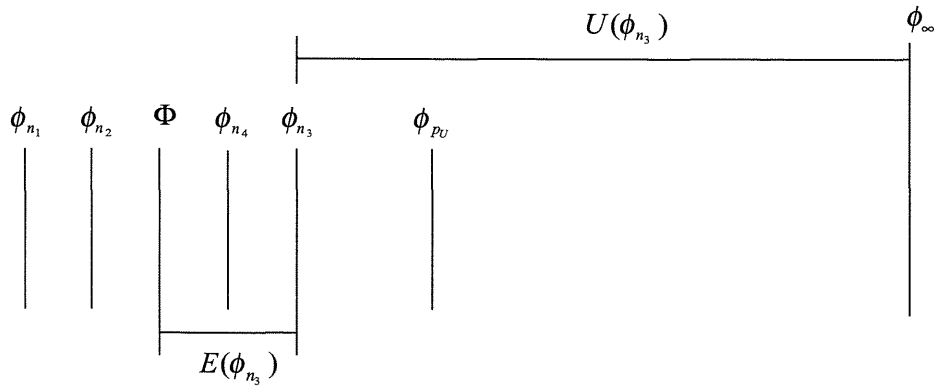


Figura 3.4 Comportamento de ϕ_{n_4} com relação a ϕ_{p_U} para o Intervalo III.

Este método de previsão (intervalos I a III) só pode ser aplicado se a razão de convergência (ψ) for maior do que 1, o que implica no fato de (p_U) existir e assumir valores positivos. A análise dos resultados ao se aplicar este método é feita através de um gráfico de confiabilidade (Fig. 3.5), utilizando-se os seguintes critérios:

- $0 \Rightarrow$ o método não se aplica (p_U não existe ou $p_U < 0$).
- $1 \Rightarrow$ o método se aplica e sua previsão é correta, conforme os intervalos I, II e III.
- $-1 \Rightarrow$ o método se aplica e sua previsão é incorreta.

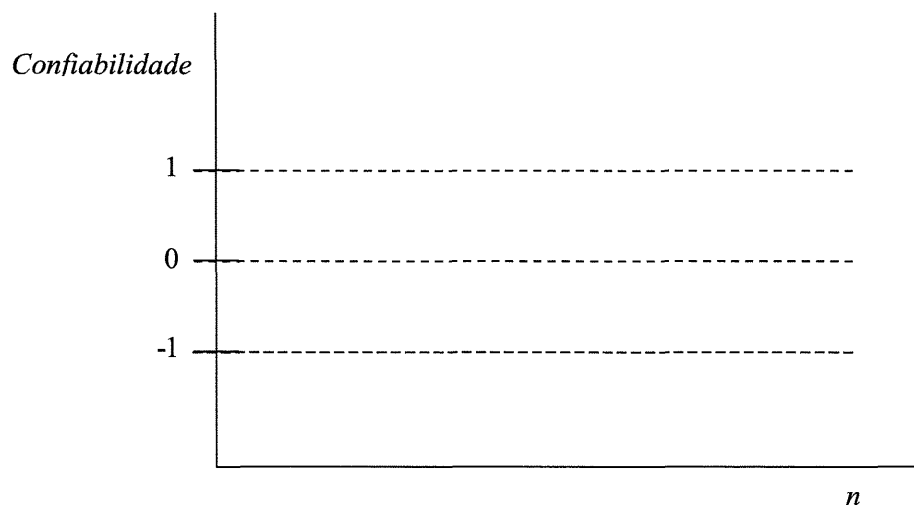


Figura 3.5 Gráfico de confiabilidade do método de previsão.

Aplicações de gráficos de confiabilidade são apresentadas nos próximos capítulos.

3.7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Conforme visto neste capítulo, existem relações dretas entre os estimadores de erro de iteração *empírico*, *delta*, *Ferziger e Peric*, e *Roy e Blotner*. Portanto, as análises feitas neste trabalho se concentram apenas no estimador *empírico*.

TESTES INICIAIS

Neste capítulo são considerados quatros testes iniciais com a finalidade de verificar o desempenho do estimador *empírico* em alguns procedimentos iterativos simples. Todos os cálculos foram realizados com a utilização do programa Microsoft Excel 2000 e precisão de 15 algarismos significativos.

4.1 CASO 1

O modelo matemático do caso 1 é dado por

$$\begin{cases} x - y = 1 \\ -x + 2y = 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

ou seja, um sistema de equações lineares de ordem 2 cuja solução analítica é: $x = 2$ e $y = 1$. O modelo numérico adotado foi o procedimento iterativo de Gauss-Seidel (Barroso, 1987) para resolução de sistemas de equações lineares. Este método iterativo pertence à classe dos métodos “ponto a ponto”, ou seja, consiste na resolução do sistema linear visitando equação por equação, iterativamente, usando os valores das variáveis já calculadas no nível iterativo anterior e no atual. Para o sistema (4.1),

$$\begin{cases} x_n = y_{n-1} + 1 \\ y_n = \frac{x_n}{2} \end{cases} \quad (4.2)$$

onde o subíndice n indica a n -ésima iteração. Foram adotados dois tipos de condições iniciais. Subcaso 1: $x_0 = y_0 = 0$. Subcaso 2: $x_0 = 10$ e $y_0 = 5$.

Como se pode observar nas Figs. 4.1 a 4.4, para ambos os subcasos a estimativa do erro iterativo obtida pelo estimador empírico apresentou concordância perfeita com o erro. Isto é, as estimativas são acuradas e confiáveis pois os valores apresentados por suas efetividades são iguais à unidade ($\theta = 1$). A mudança das condições iniciais não ocasionou alteração no valor da ordem assintótica (valor para o qual as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) se aproximam com o aumento do número de iterações) para ambas as variáveis. Ou seja, nos dois subcasos $p_L = \log 2 \approx 0,30103$. Portanto, a razão de convergência é $\psi = 2$. Neste caso, tem-se ainda que, $p_U = p_E = p_L$ em todas as iterações. A incerteza numérica obtida através do estimador empírico pode ser considerada “ideal”, não havendo necessidade da aplicação do método de previsão da confiabilidade da estimativa do erro, seção 3.6. A discordância entre incerteza e erro ao final do processo iterativo, Figs. 4.1 a 4.4, deve-se ao efeito dos erros de arredondamento no cálculo da incerteza (U) provocados pelo cancelamento subtrativo (Ruggiero, 1988).

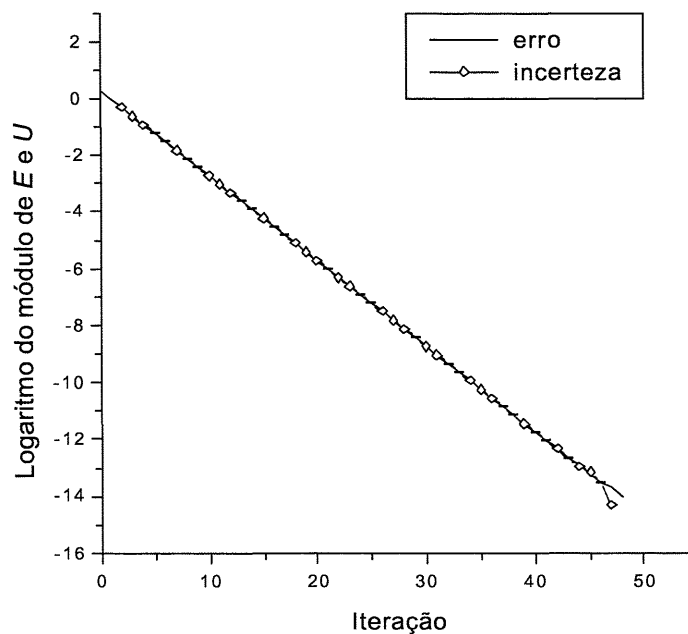


Figura 4.1 – Erro (E) e Incerteza (U) envolvidos no cálculo da variável x do subcaso 1 (caso 1).

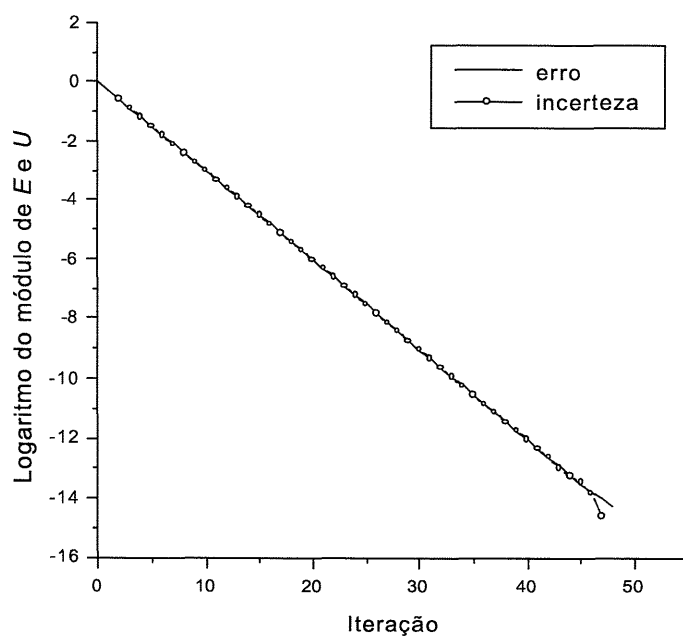


Figura 4.2 – Erro (E) e Incerteza (U) envolvidos no cálculo da variável y do subcaso 1 (caso 1).

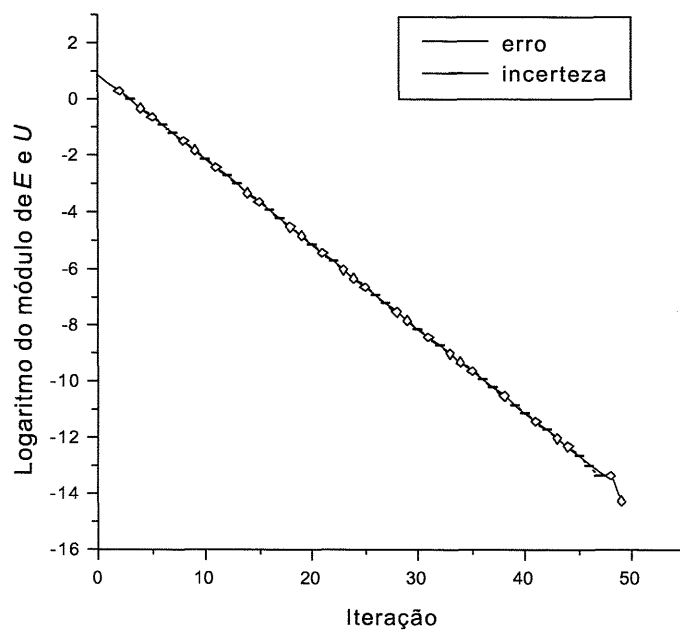


Figura 4.3 – Erro (E) e Incerteza (U) envolvidos no cálculo da variável x do subcaso 2 (caso 1).

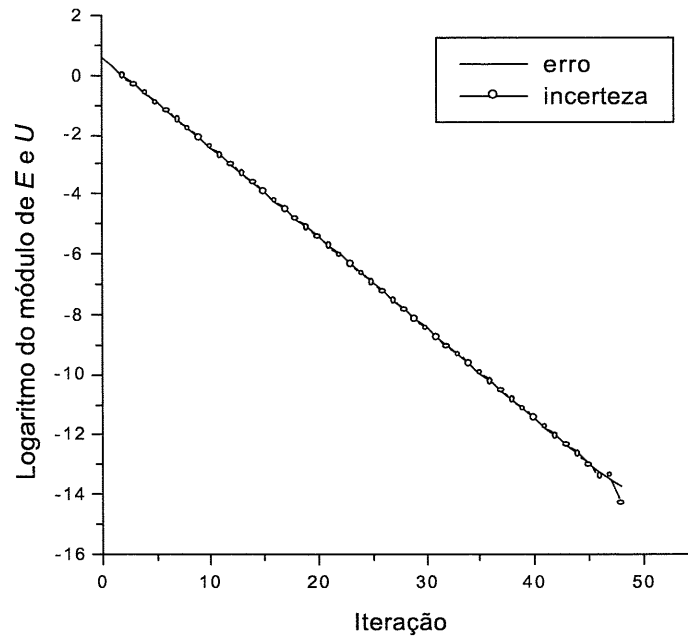


Figura 4.4 – Erro (E) e Incerteza (U) envolvidos no cálculo da variável y do subcaso 2 (caso 1).

4.2 CASO 2

O caso 2 consiste na resolução da equação quadrática

$$x^2 - 5x + 6 = 0 \quad (4.3)$$

cuja solução analítica considerada foi $x = 2$. O modelo numérico adotado foi o método da iteração linear (MIL) (Ruggiero, 1998). Este método consiste em transformar a equação, isolando-se a variável de interesse para obter uma *função iteração*.

A partir da Eq. (4.3) foram analisados dois tipos de *função iteração* com duas condições iniciais, o que gerou quatro subcasos. Para os subcasos 1 e 2 as condições iniciais usadas foram $x_0 = 0$ e $x_0 = 2,9$, respectivamente, e a *função iteração* adotada foi

$$x_n = \frac{(x_{n-1}^2 + 6)}{5} \quad (4.4)$$

Para os subcasos 3 e 4 também foram usadas as condições iniciais $x_0 = 0$ e $x_0 = 2,9$, respectivamente, para a seguinte *função iteração*

$$x_n = \frac{6}{5 - x_{n-1}} \quad (4.5)$$

Para os subcasos 2 e 4, a estimativa do erro iterativo obtida pelo estimador empírico não apresentou bons resultados nas iterações iniciais, o que pode ser observado na Fig. 4.6. Além disso, pode-se notar nas Figs. 4.5 e 4.6 que o comportamento apresentado nas iterações iniciais é totalmente diferente, ou seja, se altera com a mudança das condições iniciais. Mas nas demais iterações, a concordância entre a estimativa do erro (U) e o erro verdadeiro (E) é ótima. Para o subcaso 2, até a iteração 11 a ordem aparente (p_U) apresenta valores negativos, portanto o estimador *empírico* não é aplicável nestas iterações, conforme explicado na seção 3.2.2; (Fig. 4.6). Nota-se então que para o mesmo modelo numérico, a mudança das condições iniciais provocou alterações no comportamento do estimador *empírico* nas iterações iniciais. No entanto, não houve alteração no valor da ordem assintótica $p_L = \log 1,25 \approx 0,0969$ e da razão de convergência que para os subcasos 1 e 2 foi $\psi = 1,25$. A menos das “iteraões iniciais” que correspondem a, no máximo, 13% do número total de iterações, e dos erros de arredondamento envolvidos no final do processo iterativo devido ao cancelamento subtrativo, pode-se notar a ótima concordância entre U e E nas Figs. 4.5 e 4.6.

Para os subcasos 3 e 4 os resultados foram análogos aos subcasos 1 e 2 (Figs. 4.5 e 4.6). No entanto, houve mudança no valor da ordem assintótica, $p_L = \log(1,5) \approx 0,1760$ e da razão de convergência $\psi = 1,5$. Para o subcaso 4, até a iteração 6 a ordem aparente (p_U) apresenta valores negativos, o que não possibilita a eficiência do estimador *empírico* nestas iterações (Fig. 4.6).

Com a utilização da condição inicial $x_0 = 0$, subcasos 1 e 3, o estimador *empírico* pôde ser aplicado em todo processo iterativo, pois $p_U > 0$ em todas as iterações. Isso não ocorre para condição inicial $x_0 = 2,9$, subcasos 2 e 4, pois $p_U < 0$ até as iterações 11 e 6, respectivamente.

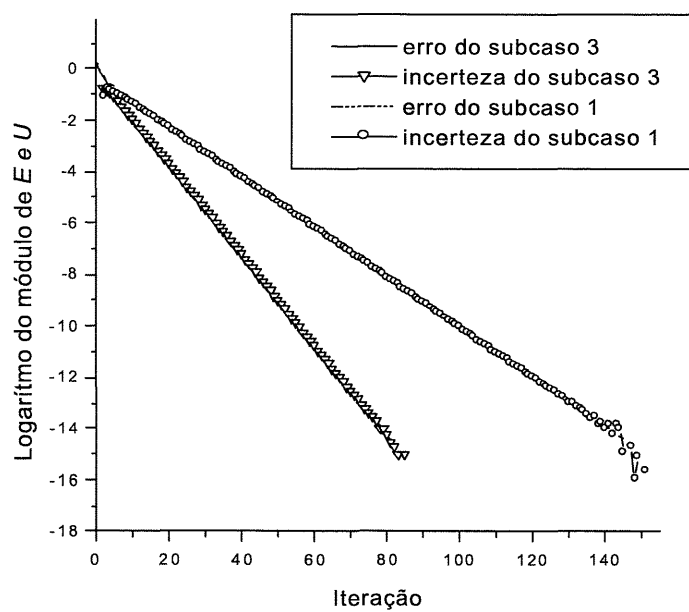


Figura 4.5 – Erro (E) e Incerteza (U) para a variável x dos subcasos 1 e 3 (caso 2).

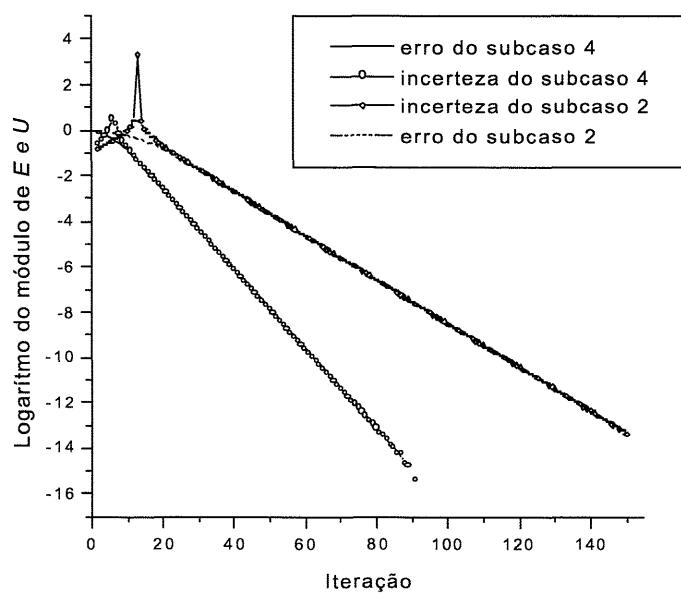


Figura 4.6 – Erro (E) e Incerteza (U) para a variável x dos subcasos 2 e 4 (caso 2).

Para este caso o método de previsão da confiabilidade da estimativa do erro, descrito na seção 3.6, mostrou-se eficiente em todo processo iterativo o que pode ser constatado nas Figs. 4.7 e 4.8. Sendo que, os subcasos 1 e 3 se enquadram no intervalo II e os subcasos 2 e 4 se enquadram no intervalo I do método de previsão.

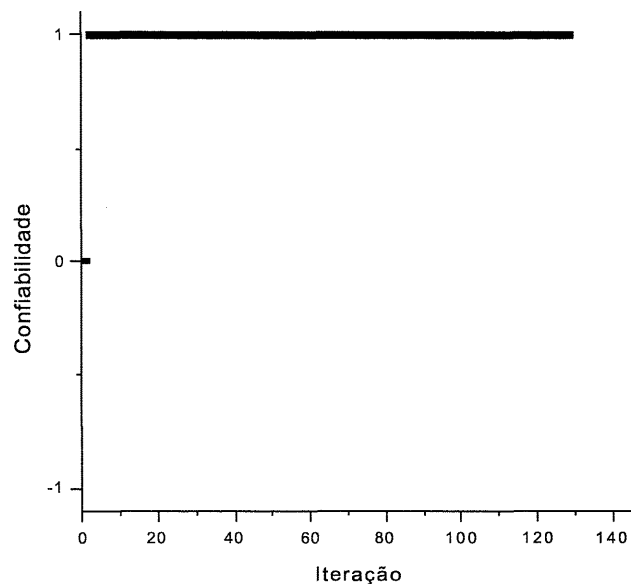


Figura 4.7 – Gráfico de confiabilidade para o subcaso 1 (caso 2).

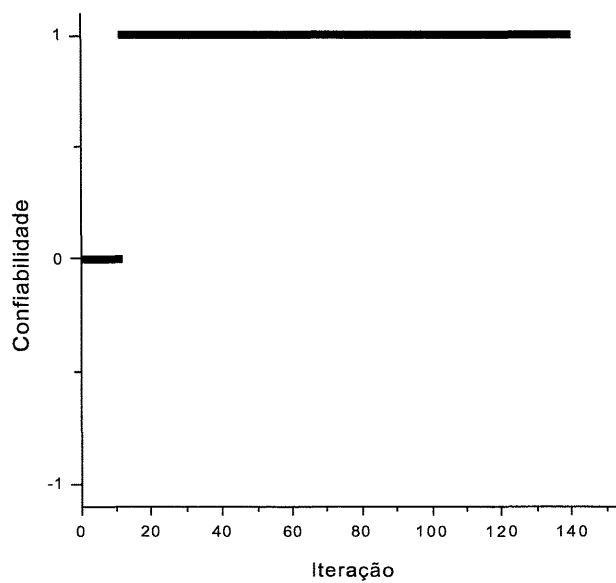


Figura 4.8 – Gráfico de confiabilidade para o subcaso 2 (caso 2).

4.3 CASO 3

Análogo ao caso 1, este caso consiste na resolução de um sistema linear de ordem 2 com a utilização do método Gauss-Seidel. O modelo matemático considerado é:

$$\begin{cases} x - y = 1 \\ 2x - 3y = 0 \end{cases} \quad (4.6)$$

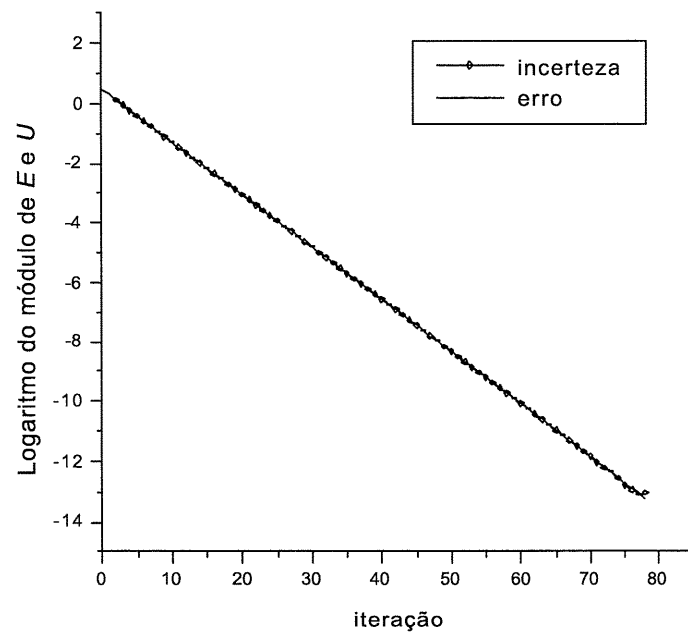
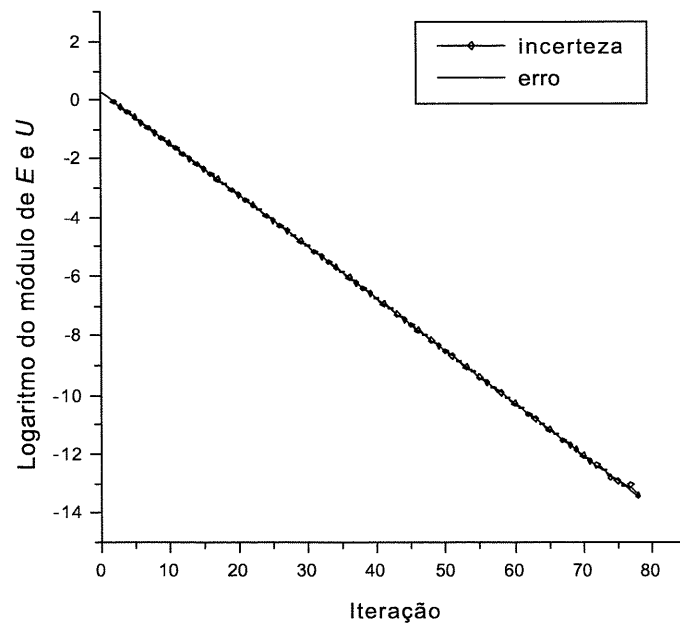
cuja solução analítica é: $x = 3$ e $y = 2$. O modelo numérico adotado é

$$\begin{cases} x_n = y_{n-1} + 1 \\ y_n = \frac{2x_n}{3} \end{cases} \quad (4.7)$$

Da mesma maneira, foram adotados dois tipos de condições iniciais. Subcaso 1: $x_0 = y_0 = 0$.

Subcaso 2: $x_0 = 10$ e $y_0 = 5$.

Para os dois subcasos a estimativa do erro de iteração obtida pelo estimador *empírico*, em ambas as variáveis, apresentou concordância perfeita com o erro conforme mostrado nas Figs. 4.9 e 4.10. Isto é, as estimativas são acuradas e confiáveis pois os valores apresentados por suas efetividades são iguais à unidade ($\theta = 1$). Em ambos os subcasos $p_L = \log(1,5) \approx 0,17609$ e $\psi = 1,5$. O método de previsão (seção 3.6) não é aplicado neste caso, pois a ordem aparente p_U é constante em todas as iterações.

Figura 4.9 - Erro (E) e Incerteza (U) para a variável x do subcaso 1 (caso 3).Figura 4.10 - Erro (E) e Incerteza (U) para a variável y do subcaso 1 (caso 3).

4.4 CASO 4

Análogo ao caso 2, este consiste na resolução da equação

$$x^2 - 7x + 12 = 0 \quad (4.8)$$

cuja solução analítica considerada foi $x = 3$. O modelo numérico utilizado foi o método da iteração linear (MIL), cuja *função iteração* adotada foi

$$x_n = \frac{x_{n-1}^2 + 12}{7} \quad (4.9)$$

Foram analisados dois tipos de condições iniciais, o que gerou dois subcasos. Subcaso 1: $x_0 = 0$.

Subcaso 2: $x_0 = 3,9$.

Para ambos os subcasos, o estimador não se mostrou eficiente nas iterações iniciais. Conforme as Figs. 4.11 e 4.12, o comportamento do estimador *empírico* se altera com a mudança das condições iniciais. Em ambos os subcasos, a incerteza apresenta oscilações a partir da iteração 150 devido aos erros de arredondamento. Para o subcaso 1 tem-se $p_U > 0$ em todas as iterações, portanto o estimador *empírico* pôde ser aplicado em todo processo iterativo. Para o subcaso 2, até a iteração 17 a ordem aparente (p_U) apresenta valores negativos, portanto o estimador *empírico* não é aplicável nestas iterações, conforme explicado na seção 3.2.2. Nota-se que para o mesmo modelo numérico, a mudança das condições iniciais provocou alterações no comportamento do estimador empírico nas iterações iniciais. No entanto, não houve alteração no valor da ordem assintótica $p_L \cong \log 1,167 \approx 0,0669$ e da razão de convergência que para os subcasos 1 e 2 foi $\psi \cong 1,167$. A menos das iterações iniciais e do efeito dos erros de arredondamento ao final do processo iterativo, pode-se notar a ótima concordância entre o erro (E) e a incerteza (U) nas Figs. 4.11 e 4.12. Pode-se notar também, Fig. 4.13, a redução do efeito causado pelos erros de arredondamento ao se aumentar a precisão dos cálculos de 15 para 30 algarismos significativos.

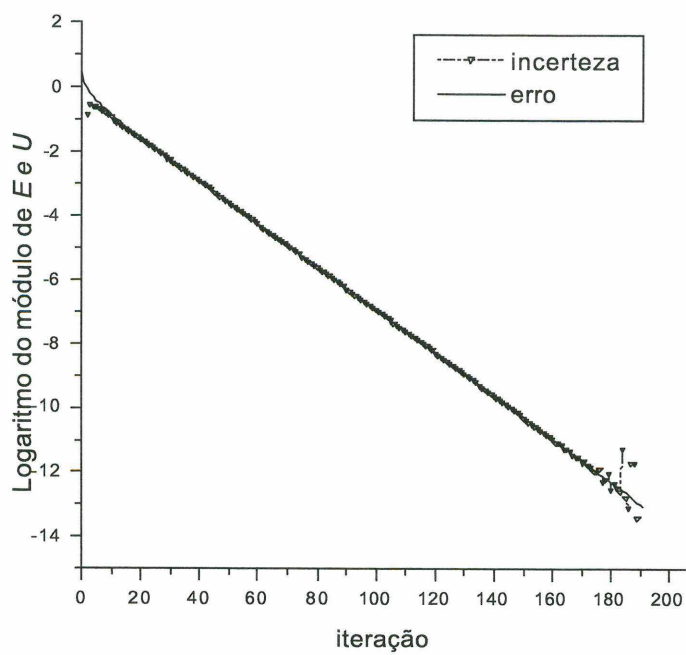


Figura 4.11 - Erro (E) e Incerteza (U) para as variável x do subcaso 1 (caso 4).

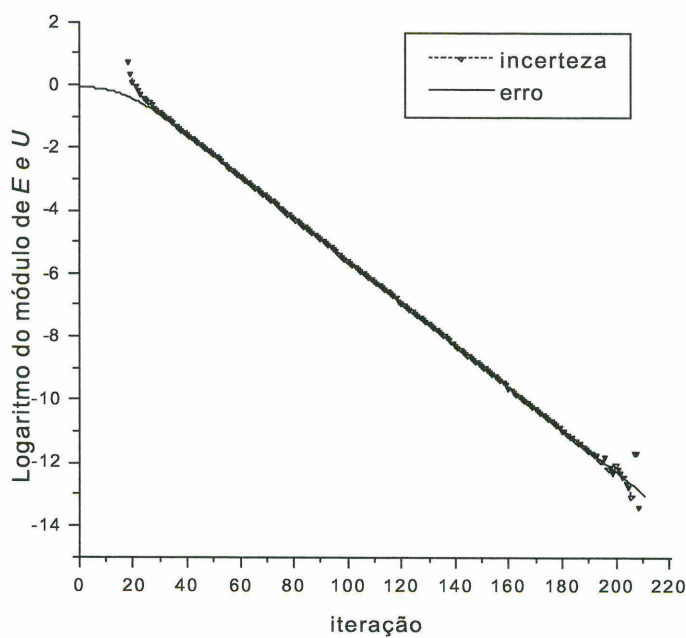


Figura 4.12 - Erro (E) e Incerteza (U) para a variável x do subcaso 2 (caso 4).

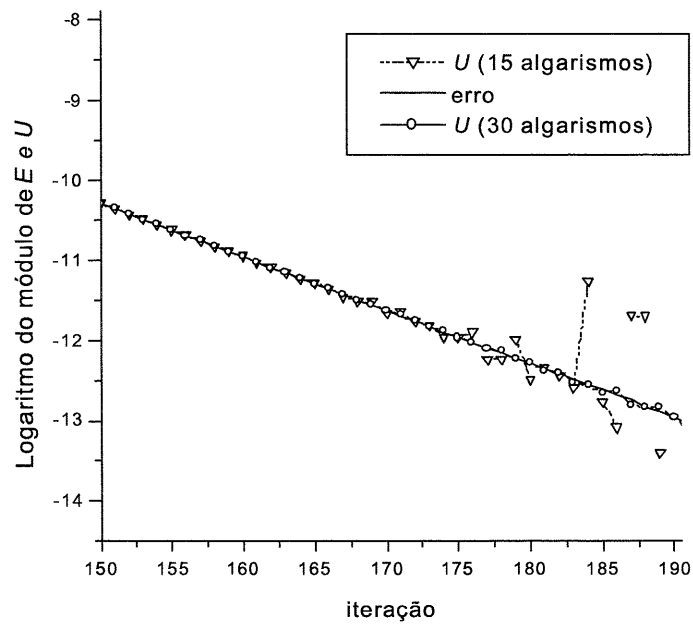


Figura 4.13 – Erro (E) e Incerteza (U) a partir da Fig. 4.11 para as iterações 150 a 190.

Para este caso o método de previsão da confiabilidade da estimativa do erro, descrito na seção 3.6, mostrou-se eficiente o que pode ser constatado nas Figs. 4.14 e 4.15. O subcaso 1 se enquadra no intervalo II do método de previsão, sendo que, houve falha na previsão em 2 iterações, Fig. 4.14, devido ao efeito dos erros de arredondamento. O subcaso 2 se enquadra no intervalo I do método de previsão; existe ocorrência de falha somente em 1 iteração, Fig. 4.15, também devido ao efeito dos erros de arredondamento.

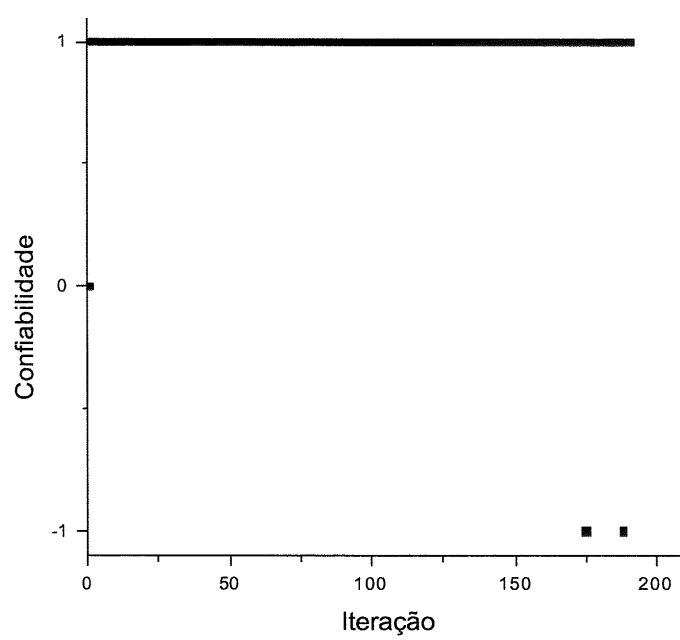


Figura 4.14 – Gráfico de confiabilidade subcaso 1 (caso 4).

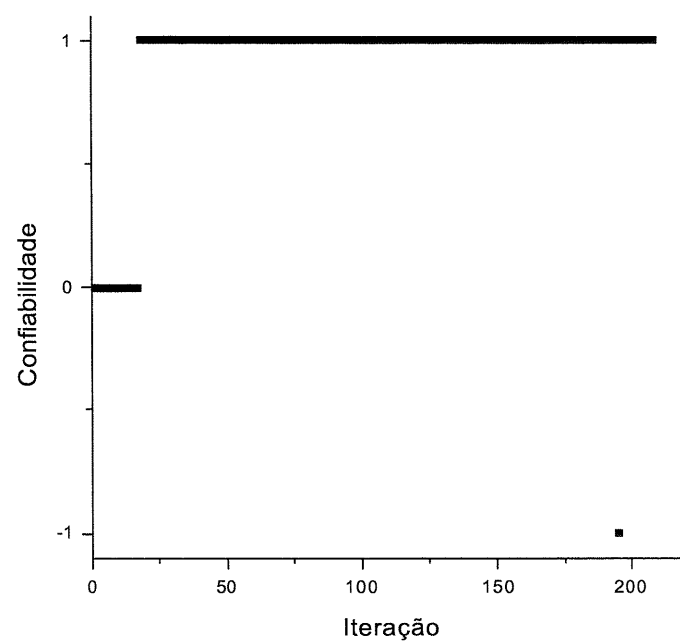


Figura 4.15 – Gráfico de confiabilidade subcaso 2 (caso 4).

4.5 CONCLUSÃO

Os casos 1 e 3 são formados por sistemas lineares de ordem 2, do tipo

$$\begin{cases} ax + by = p \\ cx + dy = q \end{cases} \quad (4.10)$$

gerados a partir da variação dos coeficientes c e d da segunda equação, sendo que, a primeira equação é mantida em ambos os casos. A variação das condições iniciais não causou alteração no valor de p_L , Tab. 4.1. Mas, a alteração dos coeficientes em uma equação do sistema altera o valor de p_L para o mesmo solver (Gauss-Seidel).

Os casos 2 e 4 são formados pela resolução de equações quadráticas ($ax^2 + bx + c = 0$) através do método MIL (método da iteração linear). Sendo que, variou-se o valor dos coeficientes b e c nos casos 2 e 4. Em ambos os casos, a variação das condições iniciais não causou alteração no valor de p_L , Tab. 4.1. A mudança da função iteração, no caso 2, causou influência sobre o valor de p_L . A variação dos coeficientes da equação quadrática (casos 2 e 4), também trouxe alteração sobre o valor de p_L .

O método de previsão da confiabilidade da estimativa do erro, seção 3.6, mostrou-se eficiente nos casos 1 a 4, de forma geral.

Tabela 4.1 Ordem assintótica e razão de convergência para os testes iniciais.

Caso	Subcaso	ψ	p_L
1	1	2,0000	0,3010...
	2	2,0000	0,3010...
2	1	1,2500	0,0969...
	2	1,2500	0,0969...
	3	1,5000	0,1760...
	4	1,5000	0,1760...
3	1	1,5000	0,1760...
	2	1,5000	0,1760...
4	1	1,1670	0,0669...
	2	1,1670	0,0669...

CASO 5: EQUAÇÃO DE POISSON

No presente capítulo, é abordado um problema difusivo unidimensional com absorção de calor (Incropera e DeWitt, 1992), o que resulta numa equação de Poisson, que é uma equação diferencial linear. O modelo numérico é constituído pelo método de diferenças finitas, com aproximações numéricas de 2ª ordem através de diferença central e malha uniforme.

5.1 MODELO MATEMÁTICO E SOLUÇÃO ANALÍTICA

O modelo matemático do caso 5 é definido por

$$\frac{d^2 \Lambda}{dx^2} = 12x^2 \quad (5.1)$$

com as seguintes condições de contorno de Dirichlet:

$$\Lambda(0) = 0 \quad (5.2)$$

$$\Lambda(L) = 1 \quad (5.3)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo, considerado $L = 1$, Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar difundido, e x é a variável independente, a direção coordenada.

A solução analítica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (5.1) a (5.3), para a variável dependente (Λ), é

$$\Lambda = x^4 \quad (5.4)$$

Definindo-se a média da variável dependente ao longo do domínio de cálculo por

$$\Lambda_m = \frac{1}{L} \int_0^L \Lambda dx \quad (5.5)$$

sua solução analítica exata é

$$\Lambda_m = \frac{L^4}{5} \quad (5.6)$$

5.2 MODELO NUMÉRICO

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (5.1) a (5.3) é obtida considerando-se (Ferziger e Peric, 1999): método de diferenças finitas, aproximação numérica da derivada de 2ª ordem da equação diferencial com diferença central e malha uniforme, Fig. 5.1. Desta forma, para a Eq. (5.1), tem-se

$$\frac{(\lambda_{j+1} + \lambda_{j-1} - 2\lambda_j)}{h^2} = 12x_j^2 \quad (5.7)$$

ou

$$-\lambda_{j-1} + 2\lambda_j - \lambda_{j+1} = -12x_j^2 h^2, \quad j = 2 \dots (N-1) \quad (5.8)$$

onde x_j é a coordenada do nó j , Fig. 5.1, h é a distância entre os nós j e $j-1$, ou entre j e $j+1$, também denominado de tamanho dos elementos da malha, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente. O sistema de equações representado pela Eq. (5.8) foi resolvido com o método de Gauss-Seidel (Kreyszig, 1999).

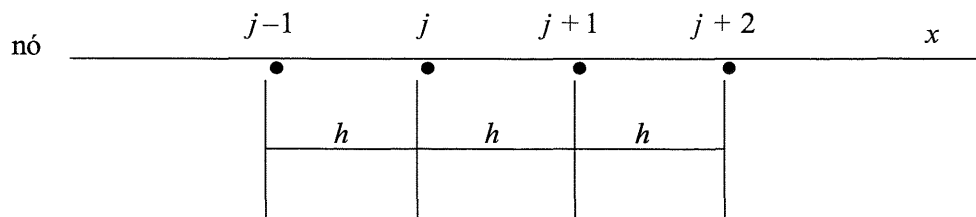


Figura 5.1 Malha unidimensional uniforme.

A solução numérica exata da Eq. (5.7) resulta em (Marchi, 2001):

$$\lambda_j = x_j^4 + x_j(1-x_j)h^2 \quad (5.9)$$

A média (λ_m) da variável dependente (λ_j) ao longo do domínio de cálculo, pode ser obtida pela regra do trapézio (Barroso, 1987) por

$$\lambda_m = \frac{h}{2L} \sum_{j=1}^N (\lambda_{j-1} + \lambda_j) \quad (5.10)$$

cuja solução numérica exata resulta em (Marchi, 2001)

$$\lambda_m = \frac{1}{5} + \frac{h^2}{2} - \frac{h^4}{5} \quad (5.11)$$

Com a solução numérica exata pode-se obter o erro de iteração ($E(\phi_n)$), conforme explicado na seção 1.3.

5.3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Foram definidas, neste caso, 4 variáveis de interesse, que são: os resultados numéricos em três nós específicos da malha, isto é, $\lambda(\frac{1}{2})$, $\lambda(\frac{9}{10})$, $\lambda(\frac{1}{5})$ e a média aritmética dos resultados numéricos obtidos em todos os nós da malha λ_m . Sendo que, em cada subcaso, Tab. 5.1, e para cada variável de interesse, foram analisados o resultado numérico (ϕ_n), seu erro de iteração ($E(\phi_n)$), estimativa do erro de iteração ($U(\phi_n)$), a razão de convergência (ψ), a ordem efetiva (p_E), a ordem aparente (p_U) e a efetividade (θ). As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N = 11, 101$ e 201 nós, o que equivale, a $h = \frac{1}{10}, \frac{1}{100}$ e $\frac{1}{200}$. Foram utilizados 3 tipos de condições iniciais, $C_1 : \lambda_j = 0$, $C_2 : \lambda_j = 1$, $C_3 : \lambda_j = x_j$, $j = 1 \dots N$, onde N indica o número de nós da malha. Com a variação das condições iniciais e do número de nós da malha, foram obtidos 9 subcasos que são mostrados na Tab. 5.1.

Tabela 5.1 Subcasos do Caso 5.

Subcaso	Condição inicial	Nº de nós	Nº de iterações	Tempo de CPU (s)
1	C_1	11	150	0,33
2	C_2	11	117	0,29
3	C_3	11	121	0,30
4	C_1	101	15933	111,20
5	C_2	101	11813	67,74
6	C_3	101	12001	70,55
7	C_1	201	63688	1024,68
8	C_2	201	47274	542,59
9	C_3	201	47963	554,34

Os cálculos foram realizados em um computador Pentium III 800 MHz com 256 MB de memória RAM. O número de iterações em cada subcaso foi obtido de acordo com o seguinte critério de parada: queda mínima de 5 ordens de grandezas na magnitude do erro de iteração para todas as variáveis de interesse. Adotou-se como parâmetro a razão entre o erro cometido na iteração corrente e o erro obtido na iteração inicial, isto é:

$$\text{Se máximo } \left| \frac{E(\phi_n)}{E(\phi_1)} \right| < 10^{-5} \Rightarrow \text{Pare.}$$

onde ϕ representa todas as variáveis. Observa-se na Tab. 5.1 que o número de iterações n está diretamente relacionado ao número de nós da malha N , ou seja, com a ordem do sistema de equações. Além disso, pode-se ainda relacionar o número de iterações em um determinado caso com o número de nós utilizados e com o número de iterações envolvidas no caso anterior:

$$n_2 \cong n_1 \left(\frac{N_2}{N_1} \right)^2 \quad (5.12)$$

Por exemplo: para o subcaso 1, $N_1 = 11$ e $n_1 = 150$. Para o subcaso 4, $N_2 = 101$, procura-se estimar o número de iterações necessárias n_2 , que resulta em 12646. Este valor está próximo do resultado real, 15933, mostrado na Tab. 5.1.

Nas Tabs. 5.2 a 5.5 são mostrados os resultados numéricos obtidos para as quatro variáveis de interesse ao final do processo iterativo, em todos os subcasos.

Tabela 5.2 Resultados numéricos para $\lambda(\frac{L}{2})$.

Subcaso	exato	numérico(ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	6,500000000E-02	6,499991826E-02	8,173684648E-08	9,999999900E-01
2	6,500000000E-02	6,500825375E-02	-8,253753822E-06	1,000000000E+00
3	6,500000000E-02	6,500270750E-02	-2,707506822E-06	9,99999998E-01
4	6,252500000E-02	6,252497218E-02	2,781041393E-08	1,000309149E+00
5	6,252500000E-02	6,253436278E-02	-9,362782036E-06	1,000000477E+00
6	6,252500000E-02	6,252832452E-02	-3,324527953E-06	1,000000514E+00
7	6,250625000E-02	6,250622272E-02	2,727936301E-08	9,975962018E-01
8	6,250625000E-02	6,251562281E-02	-9,372817957E-06	9,999827414E-01
9	6,250625000E-02	6,250959948E-02	-3,349483624E-06	9,999140260E-01

Análogo a $\lambda(\frac{L}{2})$, podemos ver os resultados numéricos para $\lambda(\frac{9L}{10})$, ao final do processo iterativo na Tab. 5.3.

Tabela 5.3 Resultados numéricos para $\lambda(\frac{9L}{10})$.

Subcaso	exato	numérico (ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	6,570000000E-01	6,569999793E-01	2,066453064E-08	9,099999916E-01
2	6,570000000E-01	6,570020866E-01	-2,086695971E-06	9,999999968E-01
3	6,570000000E-01	6,570007567E-01	-6,845059472E-07	1,000000018E+00
4	6,561090000E-01	6,561089915E-01	8,425888431E-09	1,028138584E+00
5	6,561090000E-01	6,561118366E-01	-2,836698882E-06	9,999797841E-01
6	6,561090000E-01	6,561100072E-01	-1,007252406E-06	9,998984841E-01
7	6,561022500E-01	6,5610224165E-01	8,346999758E-09	9,197849756E-01
8	6,561022500E-01	6,5610511791E-01	-2,867913539E-06	1,000114064E+00
9	6,561022500E-01	6,5610327488E-01	-1,024881678E-06	1,000344446E+00

Da mesma maneira, para $\lambda(\frac{1}{5})$, os resultados são apresentados na Tab. 5.4.

Tabela 5.4 Resultados numéricos para $\lambda(\frac{1}{5})$.

Subcaso	exato	numérico (ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	3,200000000E-03	3,199944150E-03	5,584928102E-08	9,999999987E-01
2	3,200000000E-03	3,205639637E-03	-5,639637895E-06	1,000000000E+00
3	3,200000000E-03	3,201849989E-03	-1,849989520E-06	9,999999998E-01
4	1,616000000E-03	1,615983409E-03	1,659039341E-08	1,000007572E+00
5	1,616000000E-03	1,621585398E-03	-5,585398042E-06	9,999999402E-01
6	1,616000000E-03	1,617983257E-03	-1,983257950E-06	9,999998479E-01
7	1,604000000E-03	1,603983846E-03	1,615354220E-08	9,997361203E-01
8	1,604000000E-03	1,609550137E-03	-5,550137412E-06	9,999998180E-01
9	1,604000000E-03	1,605983405E-03	-1,983405040E-06	9,999985224E-01

Para média da variável dependente (λ_m) pode-se ver os resultados na Tab. 5.5.

Tabela 5.5 Resultados numéricos para λ_m .

Subcaso	exato	numérico (ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	2,049800000E-01	2,049799480E-02	5,488429211E-08	9,456997136E-01
2	2,049800000E-01	2,049852412E-02	-5,238270816E-06	1,000568932E+00
3	2,049800000E-01	2,049817193E-02	-6,845059472E-06	1,001736405E+00
4	2,000499980E-01	2,000499802E-02	2,068445592E-08	9,201120367E-01
5	2,000499980E-01	2,000559583E-02	-5,957405369E-06	1,000505892E+00
6	2,000499980E-01	2,000521144E-02	-1,007252406E-06	1,001381251E+00
7	2,000124999E-01	2,000124825E-02	2,034670901E-08	9,042253064E-01
8	2,000124999E-01	2,000184967E-02	-5,963904326E-06	1,001143486E+00
9	2,000124999E-01	2,000146322E-02	-2,012935416E-06	1,000698918E+00

Nas Tabs. 5.2 a 5.5, pode-se notar que para todas as variáveis de interesse a ordem de grandeza do módulo do erro de iteração é menor para os subcasos que envolvem a condição C_1 . Notou-se também que, a partir de um determinado número de iterações iniciais as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) tendem monotonicamente à ordem assintótica (p_L), com o aumento do número de iterações. Nas iterações iniciais nota-se a ocorrência de oscilações, inclusive com valores negativos para a ordem aparente (p_U). Isso pode ser observado na Fig. 5.2. Para as demais variáveis e subcasos o comportamento é semelhante.

Para este caso o método de previsão da confiabilidade da estimativa do erro, descrito na seção 3.6, mostrou-se eficiente a menos dos erros de arredondamento. Considerando como exemplo a variável v_3 do subcaso 1 (Fig. 5.4), esta se enquadra no intervalo I do método de previsão. Neste exemplo o método de previsão não pôde ser aplicado nas iterações de 3 a 7 e de 11 a 15, pois nestas iterações $p_U < 0$ (Fig. 5.2). Na iteração 8 a previsão falha devido à oscilação apresentada em p_U . A partir da iteração 16 o método de previsão mostra-se eficiente, sendo que, a partir de esta iteração p_U apresenta comportamento subconvergente.

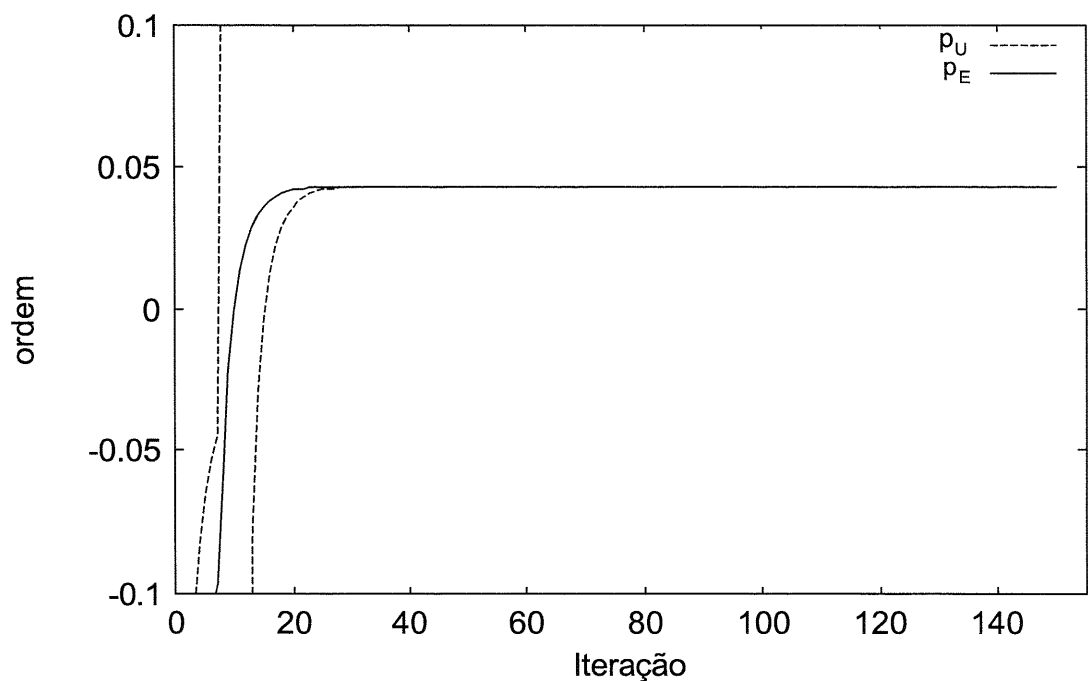


Figura 5.2 Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza de $\lambda(1/5)$ para o subcaso 1.

Para este caso, nas iterações iniciais a ordem aparente (p_U) oscila de -1,23 a 1,45.

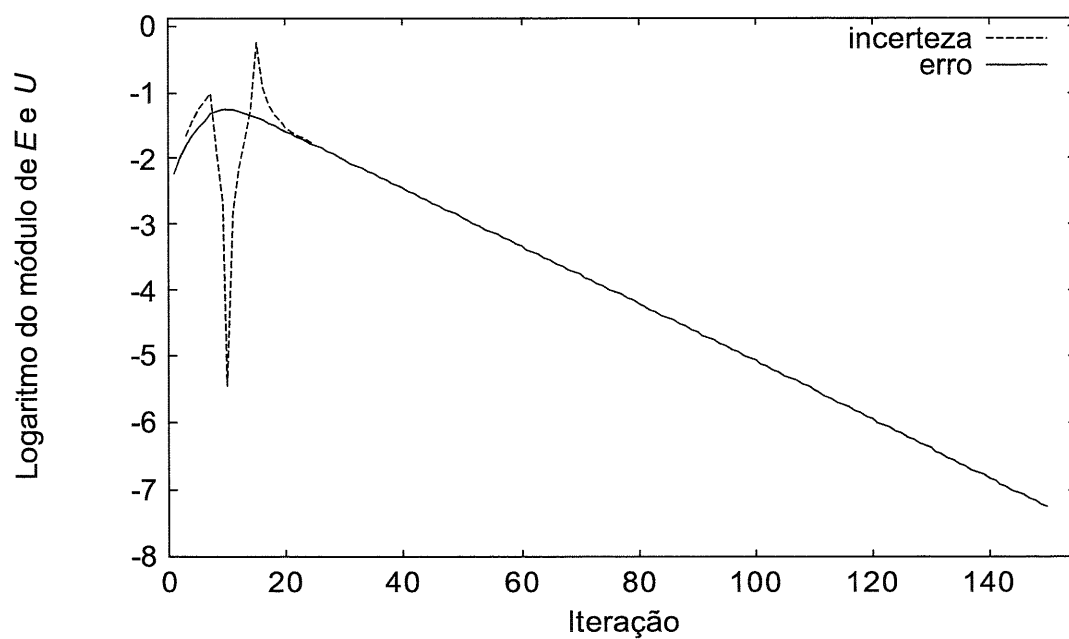


Figura 5.3 Erro e incerteza de $\lambda(\frac{1}{5})$ para o subcaso 1.

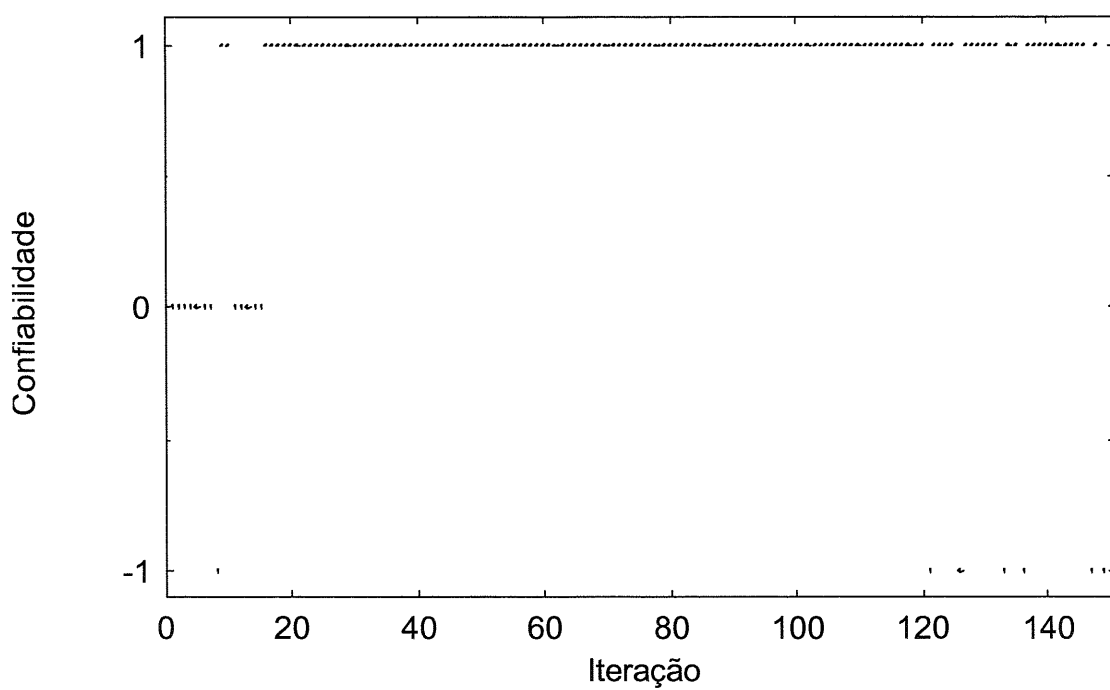


Figura 5.4 – Gráfico de confiabilidade para $\lambda(\frac{1}{5})$ do subcaso 1.

Nota-se também que, para este caso a razão de convergência ρ e a ordem assintótica (p_L) variam somente com o número de nós da malha, Tab 5.6. Portanto, não sofrem alteração com a mudança das condições iniciais ou da variável de interesse.

Tabela 5.6 Razão de convergência e ordem assintótica para caso 5.

N	Subcaso	ψ	p_L
11	1,2,3	1,1055728	0,0435873
101	4,5,6	1,0009873	0,0004285
201	7,8,9	1,0002473	0,0001073

5.4 CONCLUSÃO

Existe discordância entre incerteza e erro somente nas iterações iniciais, Fig. 5.3. Principalmente onde foi constatado que as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) apresentaram valores negativos, Fig. 5.2. Para as demais variáveis e subcasos, constatou-se comportamento semelhante, sendo que, estas “iterações iniciais” correspondem à uma faixa de, no máximo, 13% do número total de iterações envolvidas no cálculo. Salvo estas iterações, verificou-se a eficiência do estimador de erro para este caso quanto à sua acurácia e confiabilidade através de sua efetividade (θ). O método de previsão da confiabilidade, seção 3.6, apresentou bons resultados em todos os subcasos, sendo que, a ocorrência de falha na previsão deu-se pela influência dos erros de arredondamento.

Nos testes realizados com a equação de Poisson, verificou-se, então, dois tipos de comportamento. Nas iterações iniciais, as estimativas de erro são inacuradas e sem confiabilidade, de forma geral. Após estas iterações iniciais, as estimativas são cada vez mais acuradas.

CASO 6: EQUAÇÃO DE LAPLACE

Em todos os casos anteriores, Caps. 4 e 5, os problemas possuíam apenas um tratamento unidimensional. Neste capítulo, é abordado um problema de difusão bidimensional, em regime permanente, sem geração de calor e com condutividade térmica constante (Incropera e DeWitt, 1992), o que resulta na equação de Laplace. O modelo numérico é constituído pelo método de diferenças finitas, com aproximações numéricas de 2ª ordem através de diferença central e malha uniforme.

6.1 MODELO MATEMÁTICO E SOLUÇÃO ANALÍTICA

O modelo matemático do caso 6 é dado por

$$\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} = 0 \quad (6.1)$$

com as seguintes condições de contorno de Dirichlet:

$$\Lambda(0, y) = 0 \quad (6.2)$$

$$\Lambda(x, 0) = 0 \quad (6.3)$$

$$\Lambda(L_1, y) = y \quad (6.4)$$

$$\Lambda(x, L_2) = x \quad (6.5)$$

com o domínio de cálculo $D = \{0 < x < L_1; 0 < y < L_2\}$. Considera-se um domínio quadrado, ou seja, $L_1 = L_2 = 1$. Λ é a variável dependente do problema, que é um escalar difundido, x e y são as variáveis independentes, as direções coordenadas. A solução analítica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (6.1) a (6.5), para a variável dependente (Λ), é

$$\Lambda(x, y) = xy \quad (6.6)$$

Definindo-se a média da variável dependente ao longo do domínio de cálculo por

$$\Lambda_m = \frac{1}{L_1} \frac{1}{L_2} \int_0^{L_2} \int_0^{L_1} \Lambda dx dy \quad (6.7)$$

sua solução analítica exata é

$$\Lambda_m = \frac{L_1 L_2}{4} \quad (6.8)$$

6.2 MODELO NUMÉRICO

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (6.1) a (6.5) é obtida considerando-se: método de diferenças finitas, aproximação numérica da derivada de 2ª ordem da equação diferencial com diferença central e malha uniforme, Fig. 6.1. Desta forma, não se tem erro de discretização (Ferziger e Peric, 1996), e

$$\frac{\lambda_{i+1,j} - 2\lambda_{i,j} + \lambda_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\lambda_{i,j+1} - 2\lambda_{i,j} + \lambda_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} = 0 \quad (6.9)$$

Ao se utilizar malha uniforme, Fig. 6.1, tem-se $\Delta x = \Delta y = h$. Portanto, a Eq. (6.9) pode ser reescrita como

$$\frac{\lambda_{i+1,j} - 2\lambda_{i,j} + \lambda_{i-1,j}}{h^2} + \frac{\lambda_{i,j+1} - 2\lambda_{i,j} + \lambda_{i,j-1}}{h^2} = 0 \quad (6.10)$$

ou

$$-\lambda_{i,j-1} - \lambda_{i-1,j} + 4\lambda_{i,j} - \lambda_{i+1,j} - \lambda_{i,j+1} = 0, \quad i = 2, \dots, (N-1), \quad j = 2, \dots, (N-1) \quad (6.11)$$

onde N é o número de nós da malha em cada direção, h é a distância entre os nós (i, j) e $(i, j-1)$, ou entre $(i-1, j)$ e (i, j) , também denominado de tamanho dos elementos da malha, Fig. 6.1, e λ é a incógnita do problema, ou a variável dependente.

Erro!

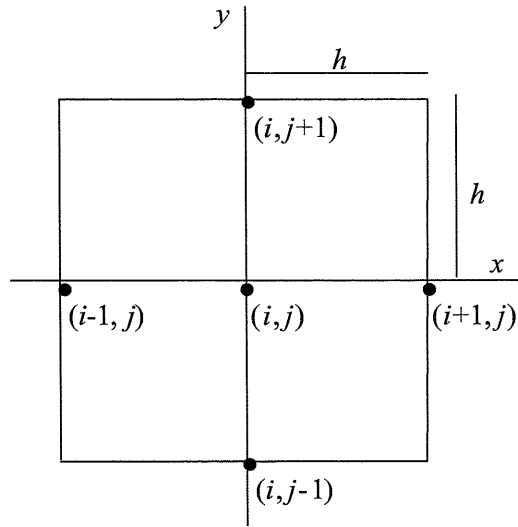


Figura 6.1 Malha bidimensional uniforme.

Neste caso; o erro de truncamento é nulo, pois apresenta somente aproximações numéricas de 2ª ordem com diferença central. A expressão para o erro de truncamento (E_T) envolvido nas aproximações apresentadas pela Eq. 6.10 para o nó (i, j) é dada por:

$$E_T = -\left(\frac{\partial^4 \Lambda}{\partial x^4}\right)_{i,j} - \left(\frac{\partial^4 \Lambda}{\partial y^4}\right)_{i,j} - \left(\frac{\partial^6 \Lambda}{\partial x^6}\right)_{i,j} - \left(\frac{\partial^6 \Lambda}{\partial y^6}\right)_{i,j} - \left(\frac{\partial^8 \Lambda}{\partial x^8}\right)_{i,j} - \left(\frac{\partial^8 \Lambda}{\partial y^8}\right)_{i,j} - \dots \quad (6.12)$$

que envolve apenas derivadas da variável dependente (Λ), com ordem 4 e superiores. Pode-se então observar através da Eq. (6.6) que estas derivadas são nulas. Portanto com a resolução do sistema de equações (6.11) e com a Eq. (6.6) pode-se obter o valor numérico do erro iterativo. O sistema de equações (6.11) foi resolvido através do método iterativo de Gauss-Seidel, e também com a utilização de uma técnica *multigrid* para problemas lineares, denominado esquema de

armazenamento de correção, conforme o algoritmo descrito nas páginas 169 e 170 do livro de Tannehill *et. al.* (1997).

6.3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste caso, considerou-se duas variáveis de interesse: o resultado numérico no ponto central da malha, isto é, $\lambda_{m,0}$ e a média aritmética dos resultados numéricos obtidos em todos os nós da malha λ_m . As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N^2 = 17^2$, 33^2 e 65^2 nós, o que equivale a $h = 1/16$, $1/32$ e $1/64$.

Em cada subcaso, Tab. 6.1, e para cada variável de interesse, foram analisados o resultado numérico (ϕ_n), seu erro iterativo ($E(\phi_n)$), estimativa do erro iterativo ($U(\phi_n)$), a razão de convergência (ψ), a ordem efetiva (p_E), a ordem aparente (p_U) e a efetividade (θ). Com a variação do número de nós da malha, e com ou sem a utilização do método *multigrid* (Tannehill *et al.*, 1997) foram obtidos 6 subcasos que são mostrados na Tab. 6.1. A técnica *multigrid* pode ser aplicada usando qualquer esquema iterativo, embora o mais comum seja o método de Gauss-Seidel (Tannehill *et al.*, 1997), que é utilizado neste caso. O objetivo da técnica *multigrid* é acelerar a convergência de um processo iterativo. Para isso, faz-se uso de vários níveis de malha para fornecer uma solução, ou seja, o mesmo problema diferencial é aproximado em diversas malhas cujos tamanhos de malha são geralmente múltiplos de dois.

Em todos os subcasos utilizou-se a condição inicial: $\lambda_{i,j} = 0$, $i = 1, \dots, N$, $j = 1, \dots, N$, isto é, nula em todos os nós da malha. O número de iterações em cada subcaso foi obtido de acordo com o seguinte critério de parada: queda mínima de 7 ordens de grandeza na magnitude do erro iterativo para as duas variáveis de interesse.

Tabela 6.1 Subcasos do Caso 6.

Subcaso	Método	Malha	Número de iterações	Tempo de CPU (s)
1	Sem <i>multigrid</i>	17×17	397	1,48
2	Sem <i>multigrid</i>	33×33	1586	9,86
3	Sem <i>multigrid</i>	65×65	6331	135,61
4	Com <i>multigrid</i>	17×17	22	0,13
5	Com <i>multigrid</i>	33×33	29	1,08
6	Com <i>multigrid</i>	65×65	35	2,17

Nas Tabs. 6.2 e 6.3 são mostrados os resultados numéricos obtidos para as duas variáveis de interesse ao final do processo iterativo, em todos os subcasos.

Tabela 6.2 Resultados numéricos para $\lambda(\frac{L_1}{2}, \frac{L_2}{2})$, Caso 6.

Subcaso	exato	numérico(ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	2,500000000E-01	2,499999019E-01	9,800085901E-08	1,000001584E+00
2	2,500000000E-01	2,499999007E-01	9,922623200E-08	1,000025961E+00
3	2,500000000E-01	2,499999001E-01	9,987822099E-08	1,001350588E+00
4	2,500000000E-01	2,500000534E-01	-5,349941700E-08	1,718844805E+00
5	2,500000000E-01	2,500000768E-01	-7,687705899E-08	2,775431056E+00
6	2,500000000E-01	2,499999729E-01	2,700025700E-08	1,543202394E+01

Tabela 6.3 Resultados numéricos para λ_m , Caso 6.

Subcaso	exato	numérico(ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	2,500000000E-01	2,499999603E-01	3,964124800E-08	1,000008338E+00
2	2,500000000E-01	2,499999598E-01	4,019552299E-08	9,998567758E-01
3	2,500000000E-01	2,499999595E-01	4,047425700E-08	1,007464542E+00
4	2,500000000E-01	2,499999126E-01	8,737835599E-08	-3,456950907E-02
5	2,500000000E-01	2,49999972E-01	2,705836998E-09	-3,247324112E+01
6	2,500000000E-01	2,500000205E-01	-2,052561898E-08	-1,228276055E+00

Considerando-se primeiramente os subcasos 1 a 3, notou-se como nos casos anteriores que a partir de um determinado número de iterações iniciais a ordem aparente (p_U) tende monotonicamente à ordem assintótica (p_L), com o aumento do número de iterações, Figs. 6.2 e 6.3. Constatou-se também a ocorrência de valores negativos para a ordem aparente (p_U) somente no cálculo de $\lambda(\frac{L_1}{2}, \frac{L_2}{2})$, Fig. 6.2.

Pode-se notar na Fig. 6.4 o comportamento obtido ao se aplicar o estimador empírico com ordem aparente (p_U) negativa nas iterações iniciais: a magnitude da estimativa do erro

aumenta com o número de iterações, conforme explicado na seção 3.2.2. Para λ_m a estimativa do erro não apresenta oscilações nas iterações iniciais, Fig. 6.5.

Para o subcaso 1 o resultado obtido pela aplicação do método de previsão da confiabilidade da estimativa do erro, descrito na seção 3.6, pode ser observado através dos gráficos de confiabilidade mostrados nas Figs. 6.6 e 6.7, sendo que para os subcasos 2 e 3 os resultados são semelhantes. Pode-se notar na Fig. 6.6 que para $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ o método de previsão não pôde ser aplicado até a iteração 23, valor (0) no gráfico de confiabilidade, pois nestas iterações $p_U < 0$ (Fig. 6.2). O mesmo não ocorre para λ_m , sendo que o método de previsão pôde ser aplicado em todo processo iterativo. Notou-se que em ambas as variáveis de interesse a primeira iteração onde ocorre falha (-1) no método de previsão é a mesma iteração onde ocorre oscilação na magnitude da estimativa do erro, devido ao efeito dos erros de arredondamento.

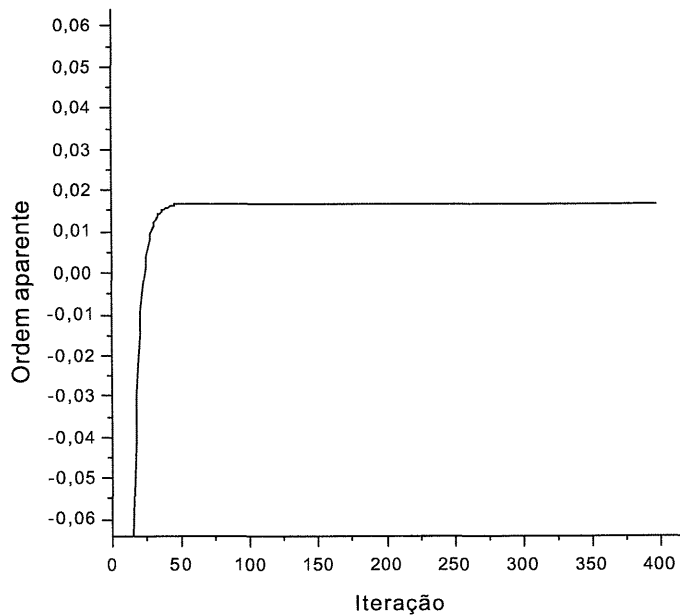


Figura 6.2 Ordem aparente p_U da incerteza de $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ para o subcaso 1.

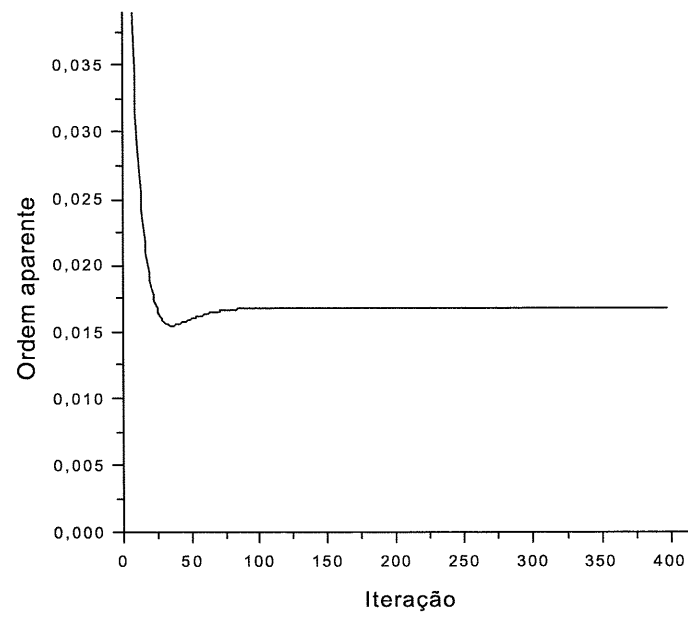


Figura 6.3 Ordem aparente p_U da incerteza de λ_m para o subcaso 1.

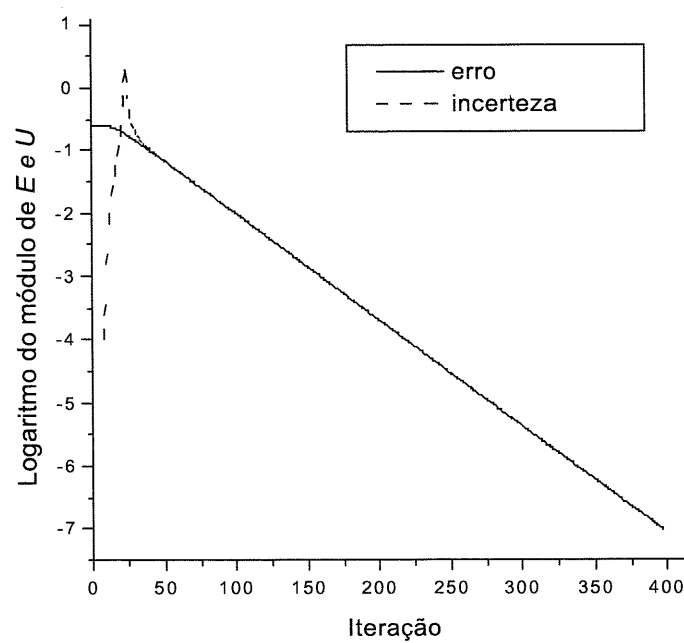


Figura 6.4 Erro e incerteza de $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ para o subcaso 1.

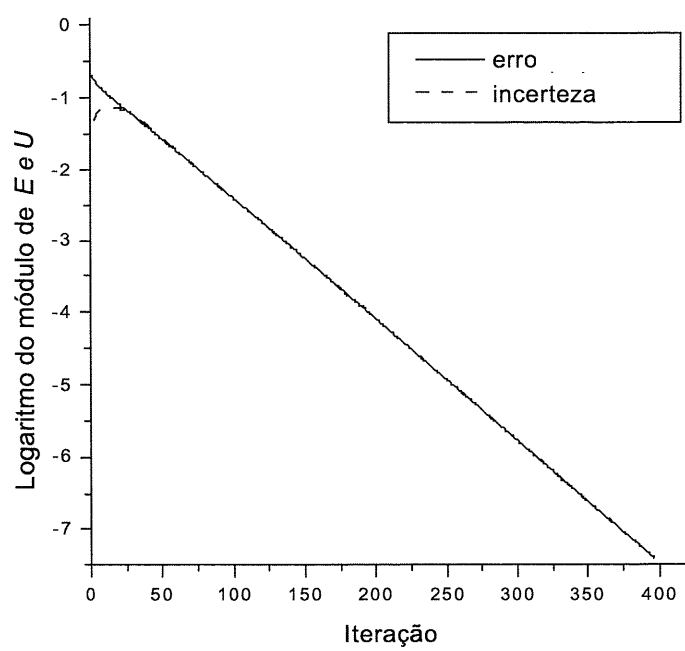


Figura 6.5 Erro e incerteza de λ_m para o subcaso 1.

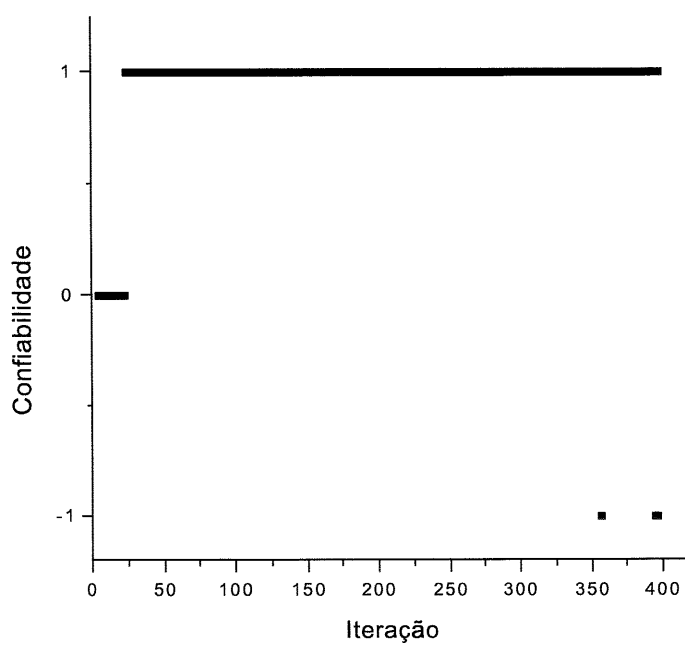


Figura 6.6 – Gráfico de confiabilidade para $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ do subcaso 1.

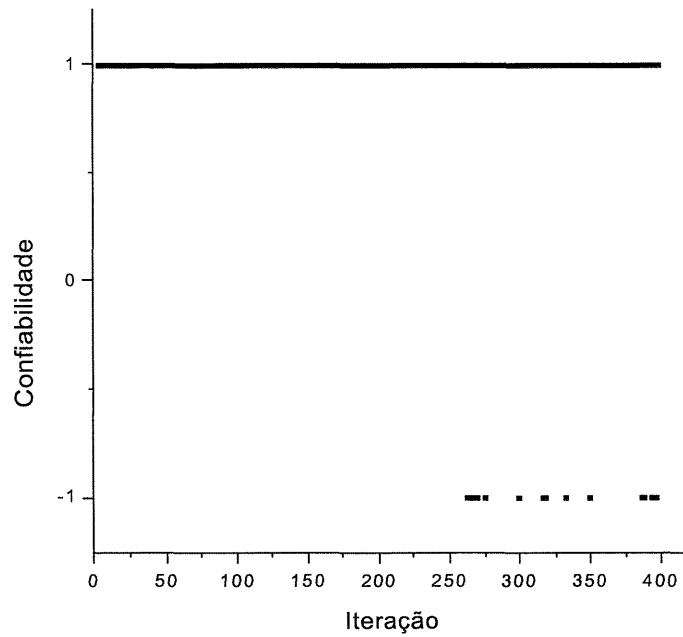


Figura 6.7 – Gráfico de confiabilidade para λ_m do subcaso 1.

Pode-se ver na Tab. 6.4 que a razão de convergência (ψ) e a ordem assintótica (p_L) variam com o número de nós da malha. No subcaso 3 existe uma pequena diferença entre a razão de convergência de $\lambda(L_2/2, L_2/2)$ e λ_m , provavelmente devido ao efeito dos erros de arredondamento. Apesar de que segundo Roache (1998), diferentes variáveis envolvidas em um mesmo processo iterativo podem apresentar diferentes taxas de convergência.

Tabela 6.4 Razão de convergência e ordem assintótica para o caso 6.

Subcaso	Malha	Variável	ψ	p_L
1	17×17	$\lambda(L_2/2, L_2/2)$	1,03956	0,01685
1	17×17	λ_m	1,03956	0,01685
2	33×33	$\lambda(L_2/2, L_2/2)$	1,00970	0,00419
2	33×33	λ_m	1,00970	0,00419
3	65×65	$\lambda(L_2/2, L_2/2)$	1,00241	0,00104
3	65×65	λ_m	1,00238	0,00103

Nos subcasos 4 a 6, notou-se que ao se utilizar a técnica *multigrid* (Tannehill *et al.*, 1997) a razão de convergência ... , apresentou comportamento oscilatório (Fig. 6.8), ou seja, não possui convergência monotônica como nos casos anteriores. Além disso, tem-se $\psi < 1$ em algumas iterações, o que acarreta em valores negativos para ordem aparente (p_U). Pode-se, então, observar na Fig. 6.9 que o erro de iteração não apresenta comportamento monotônico, conforme explicado na seção 3.1. Para estes subcasos, pode-se também constatar nas Tabs. 6.2 e 6.3 os resultados obtidos ao se aplicar o estimador *empírico* através de sua efetividade (θ). Para $\lambda(L_1/2, L_2/2)$, os resultados são inacurados e para λ_m , não são confiáveis. Portanto nos subcasos que envolvem a aplicação da técnica *multigrid* o estimador *empírico* não é recomendável; pois apresenta acurácia baixa e é pouco confiável. Pode-se também observar na Fig. 6.9 o comportamento apresentado pelos estimadores *RB* e *FP* ao se utilizar a técnica *multigrid*.

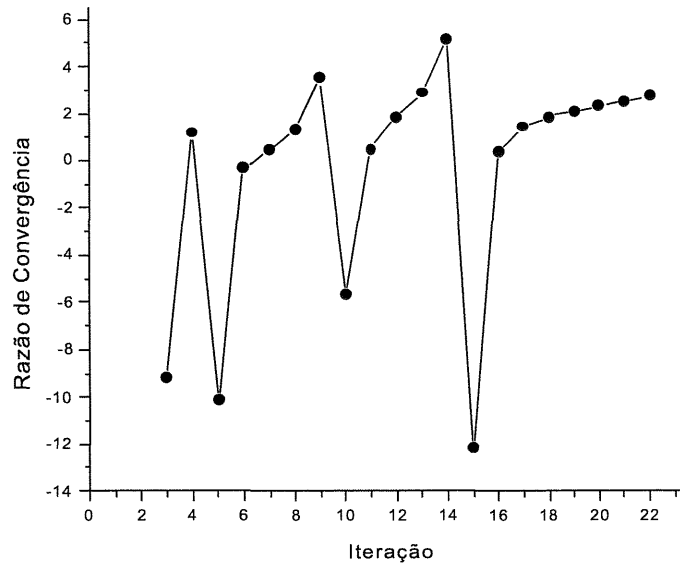


Figura 6.8 – Razão de convergência para $\lambda(L_1/2, L_2/2)$ do subcaso 4.

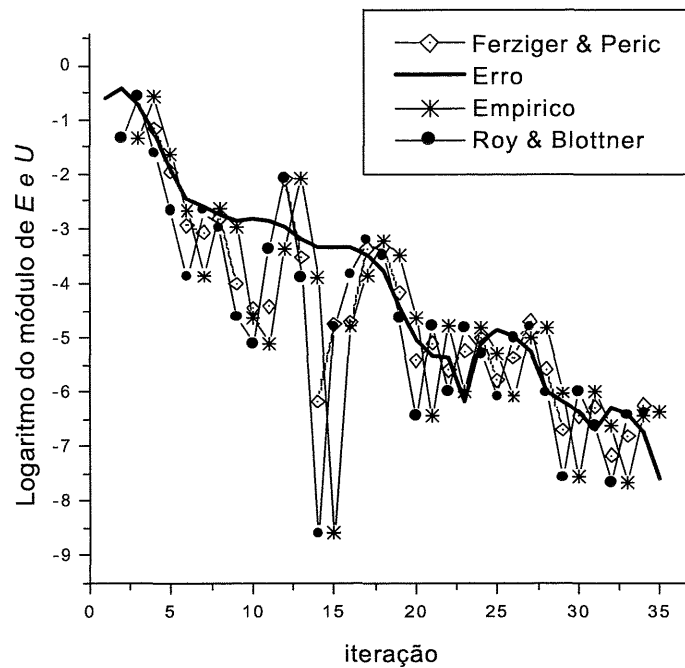


Figura 6.9 – Erro de iteração para $\lambda(l_1/2, l_2/2)$ do subcaso 6.

6.4 CONCLUSÃO

Quanto à eficiência do estimador *empírico*, para os subcasos 1 a 3 constatou-se comportamento semelhante aos casos anteriores, abordados nos Caps. 4 e 5. Ou seja, existe discordância entre incerteza e erro somente nas iterações iniciais, Figs. 6.4 e 6.5. Sendo que, para estes subcasos as “iterações iniciais” correspondem à uma faixa de no máximo 9% do número total de iterações envolvidas no cálculo. Para as demais iterações, verificou-se a eficiência do estimador de erro quanto à sua acurácia e confiabilidade através de sua efetividade (θ). O método de previsão da confiabilidade, seção 3.6, apresentou bons resultados nestes subcasos. A ocorrência de falha na previsão deu-se pela influência dos erros de arredondamento.

Nos subcasos 4 a 6 o erro de iteração não apresentou comportamento monotônico. Além disso, apresentou valores negativos para ordem aparente (p_U) não somente nas “iterações iniciais”. Portanto, não se recomenda usar o estimador *empírico* em processos iterativos que empreguem métodos *multigrid*.

CASO 7: EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES

Este capítulo trata de um problema de escoamento bidimensional isotérmico de fluido incompressível (Shih *et al.*, 1989), governado pelas equações de Navier-Stokes. O modelo numérico é constituído pelo método de volumes finitos, com aproximações numéricas de 2ª ordem através de diferença central e malha uniforme.

7.1 MODELO MATEMÁTICO E SOLUÇÃO ANALÍTICA

O modelo matemático do caso 7 é dado por

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u) = 0 \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vu) = -\frac{\partial p}{\partial x} + i \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (7.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vv) = -\frac{\partial p}{\partial y} + i \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + B \quad (7.3)$$

onde B é um termo fonte imposto para obtenção da solução analítica; definido no trabalho de Shih *et al.* (1989). As condições de contorno usadas são do tipo Dirichlet:

$$u(0, y) = 0 \quad (7.4)$$

$$u(x, 0) = 0 \quad (7.5)$$

$$u(L_1, y) = 0 \quad (7.6)$$

$$u(x, L_2) = 16(x^4 - 2x^3 + x^2) \quad (7.7)$$

$$v(x, 0) = 0 \quad (7.8)$$

$$v(0, y) = 0 \quad (7.9)$$

$$v(L_1, y) = 0 \quad (7.10)$$

$$v(x, L_2) = 0 \quad (7.11)$$

com o domínio de cálculo $D = \{0 < x < L_1; 0 < y < L_2\}$, onde; neste caso considera-se um domínio quadrado, ou seja, $L_1 = L_2 = 1$; ρ e μ são constantes; u , v e p são as incógnitas do problema, sendo que, u e v representam as componentes do vetor velocidade nas direções x e y , p é a pressão, x e y são as variáveis independentes, as direções coordenadas.

A solução analítica exata do modelo matemático definido pelas Eqs. (7.1) a (7.11), para as variáveis dependentes (u , v e p) e número de Reynolds $Re = 1$, é dada por (Shih *et al.*, 1989)

$$u(x, y) = 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(4y^3 - 2y) \quad (7.12)$$

$$v(x, y) = -8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(y^4 - y^2) \quad (7.13)$$

$$p(x, y) = 192 \left(0,2x^5 - 0,5x^4 + \frac{1}{3}x^3 \right) y + 8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(4y^3 - 2y) + 32(x^4 - 2x^3 + x^2)^2(-4y^6 + 2y^4 - 2y^2) \quad (7.14)$$

Definindo-se a média da variável dependente v em $0 \leq x \leq \frac{1}{2}$ e $y = \frac{1}{2}$ por

$$\bar{M} = \int_0^{\frac{1}{2}} v(x, y) dx \quad (7.15)$$

sua solução analítica exata é

$$\bar{M} = \frac{3}{32} \quad (7.16)$$

7.2 MODELO NUMÉRICO

A solução numérica do modelo matemático definido pelas Eqs. (7.1) a (7.11) é obtida considerando-se (Malisca, 1995): método de volumes finitos, com aproximações numéricas de 2ª ordem através de diferença central, malha uniforme e arranjo co-localizado de variáveis. Neste caso existe erro de discretização. Portanto, para análise dos erros de iteração não são consideradas as soluções analíticas, Eqs. (7.12) a (7.16). Considera-se, então, a solução iterativa “exata” no limite do “erro de máquina”, ou seja, a solução numérica obtida ao longo do processo iterativo quando não se tem mais erros de iteração mas, apenas, erros de arredondamento.

Algoritmo do modelo numérico utilizado:

- 1) Estimativa dos campos das variáveis dependentes.
- 2) Calcular coeficiente e termos fonte da variável u .
- 3) Resolver o sistema de equações para variável u com o método MSI.
- 4) Repetir os itens 2 e 3 para variável v .
- 5) Calcular as variáveis u e v nas faces dos volumes de controle.
- 6) Calcular os coeficientes e termos fonte para a variável p .
- 7) Resolver o sistema de equações para variável p com o método MSI.
- 8) Corrigir as variáveis u , v e p com a solução de p obtida no item 7.
- 9) Voltar ao item 2 até que algum critério de convergência seja satisfeito.

Observações:

- i) Nos itens 3 e 4 são feitas no máximo 5 iterações ou itera-se até a queda de uma ordem na magnitude do resíduo.
- ii) No item 7 utiliza-se no máximo 10 iterações ou itera-se até a queda de duas ordens na magnitude do resíduo inicial.
- iii) Considera-se uma iteração externa a seqüência dos itens 2 a 9.
- iv) Para cada iteração externa repete-se uma vez os itens 6 a 8.

Em todas as simulações utilizou-se o método iterativo MSI (Schneider e Zedan, 1981) e a condição inicial nula. O método MSI é um método quase direto, ou seja, aquele em que com

poucas iterações se obtém a convergência. Por outro lado, o esforço computacional por iteração, é bem superior aos demais métodos iterativos (Maliska, 1995). O número de iterações externas (n) para obtenção da solução numérica “exata” é mostrado na Tab. 7.1.

7.3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste caso, considerou-se quatro variáveis de interesse: os resultados numéricos de u , v e p no ponto central da malha, isto é, $u(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $v(\frac{L_1}{2}, \frac{L_2}{2})$, $p(\frac{L_1}{2}, \frac{L_2}{2})$ e a média da variável dependente v dada pela Eq. (7.15), \bar{M} . As soluções numéricas foram obtidas para malhas com $N^2 = 16^2$, 32^2 e 64^2 volumes. Analogamente aos casos anteriores, em cada subcaso, Tab. 7.1, e para cada variável de interesse, foram analisados o resultado numérico (ϕ_n), seu erro de iteração ($E(\phi_n)$), estimativa do erro de iteração ($U(\phi_n)$), a razão de convergência (ψ), a ordem efetiva (p_E), a ordem aparente (p_U) e a efetividade (θ). Com a variação do número de volumes da malha, foram determinados 3 subcasos que são mostrados na Tab. 7.1. O número de iterações externas (n) em que se analisou o erro de iteração e a incerteza numérica foi obtido de acordo com o seguinte critério de parada: queda mínima de 7 ordens de grandeza na magnitude do resíduo adimensionalizado (R^*) (Kim *et al.*, 1998), conforme descrito na seção 2.3.3. O tempo de CPU mostrado na Tab. 7.1 refere-se à estas iterações.

Tabela 7.1 Subcasos do Caso 7.

Subcaso	Malha	Iterações externas para queda de 7 ordens em R^*	Iterações externas para obtenção da solução “exata”	Tempo de CPU (s)
1	16×16	728	1889	11,01
2	32×32	1171	3999	53,20
3	64×64	2160	5998	498,41

Nas Tabs. 7.2 a 7.5 são mostrados os resultados numéricos obtidos para as quatro variáveis de interesse ao final do processo iterativo, em todos os subcasos.

Tabela 7.2 Resultados numéricos para $(\cdot/\sqrt{2}, \cdot/\sqrt{2})$, Caso 7.

Subcaso	exato	numérico(ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	-2,436442230E-01	-2,436442229E-01	-9,368000820E-11	1,004184820E+00
2	-2,483636535E-01	-2,483636524E-01	-1,118037996E-09	1,000277942E+00
3	-2,495877767E-01	-2,495877765E-01	-2,180909897E-10	1,041038090E+00

Tabela 7.3 Resultados numéricos para $v(L_1/2, L_2/2)$, Caso 7.

Subcaso	exato	numérico(ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	9,264290573E-05	9,264292595E-05	-2,021014950E-11	9,881418986E-01
2	2,728542177E-05	2,728540782E-05	1,395702310E-11	9,994393343E-01
3	7,097000028E-06	7,096996659E-06	3,369877301E-12	1,203608957E+00

Tabela 7.4 Resultados numéricos para $p(L_1/2, L_2/2)$, Caso 7.

Subcaso	exato	numérico(ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	1,545591915E+00	1,545591916E+00	-7,184399742E-10	1,013978569E+00
2	1,545434988E+00	1,545434985E+00	2,130740029E-09	1,026254886E+00
3	1,545337016E+00	1,545337015E+00	1,082719914E-09	1,096937015E+00

Tabela 7.5 Resultados numéricos para \bar{M} , Caso 7.

Subcaso	exato	numérico(ϕ_n)	$E(\phi_n)$	$\frac{U(\phi_n)}{E(\phi_n)}$
1	9,406575851E-02	9,406575885E-02	-3,372797042E-10	9,932319883E-01
2	9,382148287E-02	9,382148268E-02	1,828833890E-10	1,001629684E+00
3	9,376739441E-02	9,376739437E-02	4,250080843E-11	1,006611077E+00

Nas Tabs. 7.2 a 7.5, pode-se notar que para o subcaso 3, subcaso que envolve um maior número de iterações externas, em todas as variáveis de interesse o estimador *empírico* apresentou resultados confiáveis, isto é, $\theta > 1$ ao final do processo iterativo. Pode-se constatar também que para as variáveis $u^{(L_1/2, L_2/2)}$ e $p^{(L_1/2, L_2/2)}$, Tabs. 7.2 e 7.4 respectivamente, a estimativa do erro é confiável em todos os subcasos.

Para a variável $v^{(L_1/2, L_2/2)}$ a estimativa do erro não é confiável nos subcasos 1 e 2, Tab. 7.3. Observou-se que nestes subcasos a razão de convergência (ψ) para $v^{(L_1/2, L_2/2)}$ apresenta oscilações nas iterações externas finais, Fig. 7.1, inclusive com $\psi < 1$ em algumas dessas iterações externas. Sendo que, para o subcaso 1 o comportamento é semelhante.

Assim como nos casos anteriores, em todos os subcasos, Tab. 7.1, tem-se que a partir de um determinado número de iterações externas iniciais as ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) tendem monotonicamente à ordem assintótica (p_L), com o aumento do número de iterações externas, Fig. 7.2 e Tab. 7.6. No entanto, constatou-se neste caso a ocorrência de oscilações na magnitude do erro numérico. Pode-se, então, notar na Fig. 7.3 o comportamento obtido para o erro numérico e para sua estimativa. Para as demais variáveis e subcasos o comportamento é semelhante.

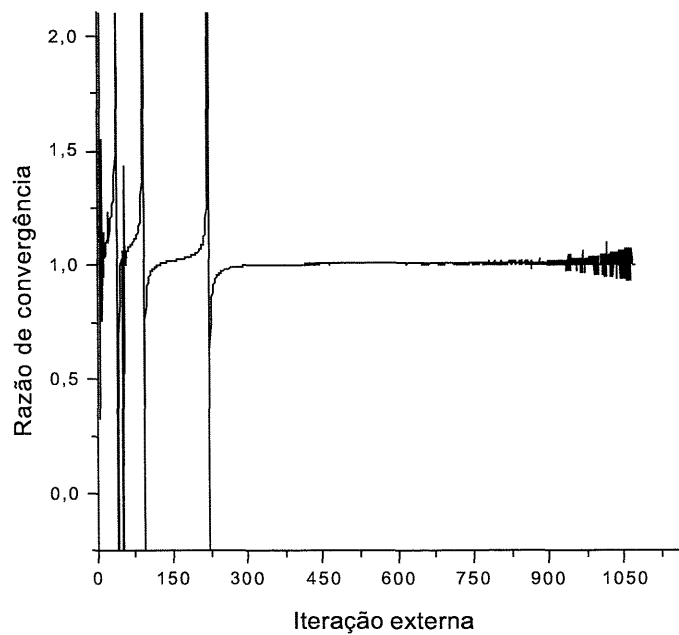


Figura 7.1 – Razão de convergência (ψ) para $v^{(L_1/2, L_2/2)}$, subcaso 2, caso 7.

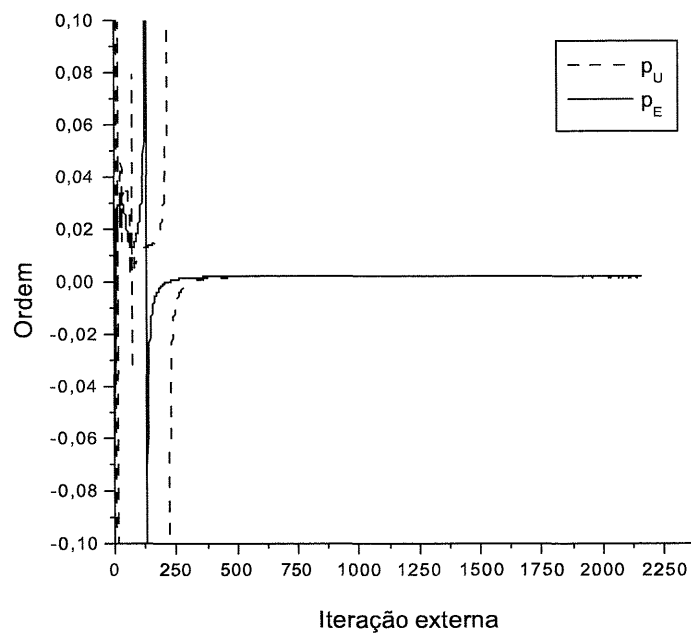


Figura 7.2 – Ordem efetiva (p_E) do erro e ordem aparente (p_U) da incerteza de \bar{M} para o subcaso 3, caso 7.

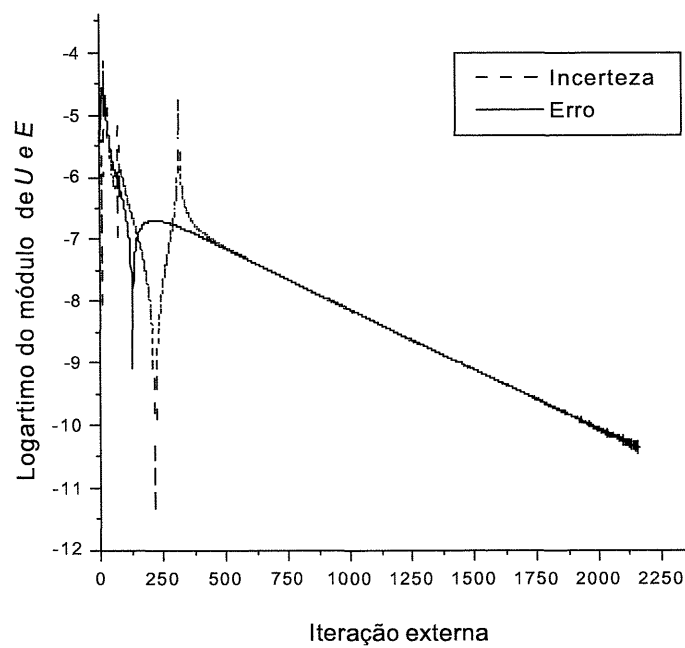


Figura 7.3 – Erro e incerteza de \bar{M} para o subcaso 3, caso 7.

Para o subcaso 3 o resultado obtido pela aplicação do método de previsão da confiabilidade da estimativa do erro, descrito na seção 3.6, pode ser observado através do gráfico de confiabilidade mostrado na Fig. 7.4. Pode-se notar que para \bar{M} o método de previsão não pôde ser aplicado em todas as iterações externas, valor (0) no gráfico de confiabilidade, pois nestas iterações externas $p_U < 0$ (Fig. 7.2). Constatou-se também que em todos os subcasos para todas as variáveis de interesse a primeira iteração externa onde ocorre falha (-1) no método de previsão é a mesma iteração externa onde ocorre oscilação na magnitude da estimativa do erro, devido ao efeito dos erros de arredondamento.

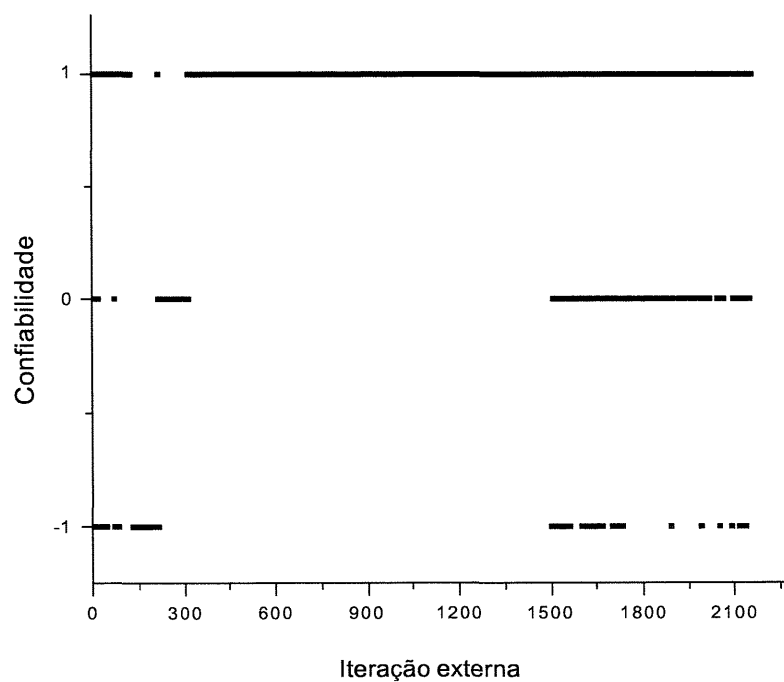


Figura 7.4 – Gráfico de confiabilidade de \bar{M} para o subcaso 3, caso 7.

Observa-se na Tab. 7.6 que a razão de convergência (ψ) e a ordem aparente (p_U) variam com o número de volumes da malha. Não se pode afirmar com certeza se há mudança nos valores de ψ e p_U para todas as variáveis de interesse, pois pode-se ter influência dos erros de arredondamento.

Tabela 7.6 Razão de convergência e ordem assintótica para caso 7.

Subcaso	Variável	ψ	P_U
1	$u(L_1/2, L_2/2)$	1,036120005E+00	1,541005888E-02
1	$v(L_1/2, L_2/2)$	1,016553170E+00	7,130099206E-03
1	$p(L_1/2, L_2/2)$	1,015802199E+00	6,809148522E-03
1	\bar{M}	1,014395257E+00	6,207209922E-03
2	$u(L_1/2, L_2/2)$	1,008815762E+00	3,811859153E-03
2	$v(L_1/2, L_2/2)$	1,009482381E+00	4,098743285E-03
2	$p(L_1/2, L_2/2)$	1,009284504E+00	4,013605391E-03
2	\bar{M}	1,008817479E+00	3,812598191E-03
3	$u(L_1/2, L_2/2)$	1,004591013E+00	1,989288579E-03
3	$v(L_1/2, L_2/2)$	1,005054655E+00	2,189679241E-03
3	$p(L_1/2, L_2/2)$	1,004469947E+00	1,936947299E-03
3	\bar{M}	1,004600572E+00	1,993420959E-03

7.4 CONCLUSÃO

Com a utilização do método iterativo MSI constatou-se que, para este caso, a magnitude do erro de iteração apresentou oscilações nas iterações iniciais, o que não havia ocorrido nos casos anteriores.

O estimador *empírico* apresentou comportamento semelhante aos casos anteriores, ou seja, existe discordância entre incerteza e erro somente nas iterações iniciais, Fig. 7.3. Contudo, a amplitude destas oscilações é mais significativa que a obtida nos casos anteriores. Para este caso as “iterações externas iniciais” correspondem à uma faixa de no máximo 17% do número total de iterações externas envolvidas no cálculo. Para as demais iterações, verificou-se a eficiência do estimador de erro quanto à sua acurácia, no entanto não se mostrou confiável para todas as variáveis de interesse e em todos os subcasos. Quanto à aplicação do método de previsão da

confiabilidade, seção 3.6, foi constatado que a iteração externa em que ocorre a primeira falha na previsão (-1) coincide com a iteração em que ocorre oscilação na magnitude da estimativa do erro de iteração devido aos erros de arredondamento.

CONCLUSÃO

Este capítulo apresenta as principais constatações deste trabalho, um resumo das contribuições desta dissertação e sugestões para trabalhos futuros.

8.1 CONSTATAÇÕES

Conforme apresentado inicialmente, este trabalho tinha como proposta o aperfeiçoamento das técnicas existentes para se estimar erros envolvidos em processos iterativos em *CFD*. Diante dos estudos sobre os estimadores de erro já existentes na literatura, dos testes realizados e dos resultados obtidos podemos dizer que os objetivos foram alcançados.

O estimador de erro de iteração estudado neste trabalho, o estimador *empírico*, calcula a incerteza numérica (estimativa do erro numérico) com base na taxa de convergência da variável de interesse. Foi constatado que este estimador apresenta relações diretas com os estimadores *delta*, *FP* e *RB*. Através da efetividade do estimador de erro, isto é, da razão entre incerteza e erro verificou-se a eficiência do estimador *empírico* quanto à sua acurácia e confiabilidade.

Nos testes numéricos realizados, inicialmente foram analisados procedimentos iterativos para resolução de equações quadráticas e sistemas lineares de ordem 2. Nestes casos o estimador mostrou-se eficiente. Em seguida foram realizados testes com a equação de Poisson, equação de Lapalce e equações de Navier-Stokes. Em todos os testes realizados, analisou-se também a eficiência do método de previsão da confiabilidade do resultado obtido pelo estimador de erro.

Nos testes com a equação de Poisson verificou-se dois tipos de comportamento. Nas iterações iniciais, no máximo 13% do número total de iterações, as estimativas de erro são inacuradas e sem confiabilidade, de forma geral. Após estas iterações iniciais, as estimativas são cada vez mais acuradas. Nestes testes o método de previsão da confiabilidade, apresentou bons resultados, sendo que, a ocorrência de falha na previsão deu-se pela influência dos erros de arredondamento.

Nos testes realizados com a equação de Laplace sem a utilização da técnica *multigrid* constatou-se comportamento semelhante ao obtido com a equação de Poisson, ou seja, existe discordância entre incerteza e erro somente nas iterações iniciais. No entanto, nestes testes as “iterações iniciais” correspondem a, no máximo, 9% do número total de iterações, sendo esta uma faixa percentual é menor que para a equação de Poisson. Para os testes envolvendo a aplicação da técnica *multigrid* o estimador *empírico* não mostrou-se eficiente; pois apresentou acurácia baixa e resultados pouco confiáveis.

Ao se analisar o comportamento do erro de iteração envolvido na resolução numérica das equações de Navier-Stokes constatou-se que neste caso o erro de iteração também apresentou oscilações nas “iterações externas iniciais”, o que não havia ocorrido nos casos anteriores. Quanto à eficiência do estimador de erro e do método de previsão obteve-se resultados semelhantes aos casos anteriores. Neste caso as “iterações externas iniciais” correspondem a no máximo 17 % do número total de iterações externas envolvidas no cálculo, sendo que esta faixa percentual é maior que nos casos anteriores.

O desempenho do estimador *empírico* pode ser dividido em três intervalos: nas “iterações iniciais” a acurácia é baixa, em geral; quando o número de iterações é muito elevado, os erros de arredondamento afetam a acurácia, que é boa; no intervalo entre esses dois extremos, a acurácia tende a ser grande à medida que se aumenta o número de iterações. Não se recomenda usar o estimador *empírico* em processos iterativos que empreguem métodos *multigrid*, pois nestes casos o erro de iteração não apresenta comportamento monotônico.

O método de previsão da confiabilidade apresentou bons resultados em todos os testes realizados, com exceção dos testes envolvendo a técnica *multigrid*. A ocorrência de falhas na previsão deu-se pela influência dos erros de arredondamento, pois quando o número de iterações é muito elevado, os erros de arredondamento prevalecem sobre os erros de iteração.

8.2 RESUMO DAS CONTRIBUIÇÕES

As contribuições do presente trabalho podem ser resumidas nos seguintes pontos:

- Verificou-se a existência de relações diretas entre os estimadores de erro de iteração *empírico*, *delta*, *Ferziger e Peric*, e *Roy e Blotner*.
- O estimador *empírico* foi aplicado e teve seu desempenho analisado nos seguintes casos: resolução numérica de equações quadráticas, sistemas lineares de ordem 2, equação de Poisson, equação de Laplace e equações de Navier-Stokes.

- Foi proposto um método de previsão da confiabilidade do resultado obtido pelo estimador de erro *empírico* através dos resultados numéricos em três iterações consecutivas e de uma solução extrapolada.
- Verificou-se que a aplicação do estimador *empírico* não é adequada para processos iterativos que empregam métodos *multigrid*.

8.3 TRABALHOS FUTUROS

Com o objetivo de aperfeiçoar os resultados obtidos neste trabalho, são propostas algumas sugestões para novos trabalhos:

- a) Investigação sobre a eficiência do estimador de erro em outros processos iterativos que apresentem razão de convergência de comportamento convergente. Analisar também, o comportamento da estimativa do erro para métodos iterativos com razão de convergência oscilatória.
- b) Formalização matemática do método de previsão da confiabilidade do estimador de erro.
- c) Aperfeiçoamento do estimador de erro onde a ordem aparente apresenta comportamento oscilatório.
- d) Investigação dos efeitos causado pelos erros de arredondamento devido aos cálculos envolvidos na estimativa do erro de iteração.
- e) Análise das “iterações iniciais”, ou seja, a partir de que iteração o estimador *empírico* é recomendável.
- f) Estudo da estimativa do erro envolvido em processos iterativos que empreguem a técnica *multigrid*.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARROSO, L. C.; BARROSO, M. M. A.; CAMPOS, F. F. C.; CARVALHO, M. L. B.; MAIA, M. L. **Cálculo Numérico (com aplicações)**, 2^a ed., São Paulo : Harbra, 1987.

BLOTTNER, F. G. Accurate Navier-Stokes results for the hypersonic flow over a spherical nosetip. **Journal of Spacecraft and Rockets**, v. 27, n. 2, p. 113-122, 1990.

BUZZI-FERRARIS, G.; TRONCONI, E. Na Improved Convergence Criterion in the Solution of Nonlinear Algebraic Equation, **Comput. Chem. Eng.**, v.17, n. 10, p. 1053-1056, 1993.

CELIK, I.; ZHANG, W. M. Calculation of numerical uncertainty using Richardson extrapolation: application to some simple turbulent flow calculations. **ASME Journal of Fluids of Fluids Engineering**, v. 117, p. 439-445, 1995.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Introduction to Computing for Engineers**. 2nd ed. New York : McGraw-Hill, 1994.

DEMUREN, A. O.; WILSON, R. V. Estimating uncertainty in computations of two-dimensional separated flows. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 116, p. 216-220, 1994.

DORN, W. S.; MCCracken, D.D. **Cálculo Numérico com estudos de Casos em Fortran IV**. Rio de Janeiro : Campus, 1981.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Further discussion of Numerical Errors in CFD. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 23, p.1263-1274, 1996.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for fluid dynamics**. 2nd ed. Berlin: Springer 1999.

FLETCHER, C. A. J. **Computational Techniques for Fluid Dynamics**, v.1, 2nd ed. Berlin: Springer, 1997.

FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos**. São Paulo: Edusp, 2000.

GOLUB, G. H.; LOAN, C. **Matrix Computations**. 2nd ed. Baltimore : Johns Hopkins, 1990.

HAMMING, R. W. **Numerical Methods for Scientists and Engineers**. 2nd ed. New York : Dover, 1973.

HIRSCH, C. **Numerical Computations of Internal and External Flows**, v. 1, New York : Wiley, 1988.

INCROPERA, F. P.; DeWITT, D. P. **Fundamentos de Transferência de Calor e Massa**. 3^a ed. Rio de Janeiro : Guanabara Koogan, 1992.

JAMESON, A.; MARTINELLI, L. Mesh refinement and modeling erros in flow simulation. **AIAA Journal**, v.36, n. 5, p. 676-686, 1998.

KIM, N.; ANAND, N. K.; RHODE, D. L. A study on convergence criteria for a simple-based finite-volume algorithm. **Numerical Heat Transfer**, Part B, v. 34, p. 401 – 417, 1998.

KREYSZIG, E. **Advanced engineering mathematics**. v. 8nd, New York : John Wiley & Sons, 1999.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. Rio de Janeiro : LTC, 1995.

- MARCHI, C. H.; CARVALHO DA SILVA, A. F. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. **Numerical Heat Transfer**, Part B, V. 42, p. 167-188, 2002.
- MARCHI, C. H. **Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos**. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil, 2001.
- METHA, U. B. Guide to credible computer simulations of fluid flows. **Journal of Propulsion and Power**, v.12, n.5, 940-948, 1996.
- MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.; PLETCHER, R. H.. **Handbook of Numerical Heat Transfer**. New York : Wiley, 1988.
- OBERKAMPF, W. L.; BLOTTNER, F. G. Issues in computational fluid dynamics code verification and validation. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, p. 687-695, 1998.
- PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, New York : McGraw-Hill, 1980.
- RIZZI, A.; VOZ, J. Toward establishing credibility in computational fluid dynamics simulations. **AIAA journal**, v. 36, n. 5, p. 668-675, 1998.
- ROACHE, P. J. **Computational Fluid Dynamics**, Albuquerque, USA : Hermosa, 1998.
- ROY, C. J.; BLOTTNER, J. R. Assessment of one- and two-equation turbulence models for hypersonic transitional flows. **Journal of Spacecraft and Rockets**, V. 38, n. 5, p. 699-710, 2001.
- RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. **Cálculo Numérico: aspectos teóricos e computacionais**. São Paulo : McGraw-Hill, 1988.
- SCHNEIDER, G.E. e ZEDAN, M. A Modified Strongly Implicit Procedure for Numerical

Solution of Field Problems. **Numerical Heat Transfer**, V. 4, p. 1-19, 1981.

SHIH, T. M.; TAN, C. H.; HWANG, B. C. Effects of grid staggering on numerical schemes.

International Journal for numerical methods in fluids, V. 9, p. 193-212, 1989.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. Washington, DC : Taylor & Francis, 1997.

ZHU, J. Z.; ZIENKIEWICZ, O. C. Superconvergence recovery technique and a posteriori error estimates. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 30, p. 1321-1339, 1990.