UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ



2025

PRISCILA DOMBROVSKI ZEN

MÉTODO MULTIGRID ESPAÇO-TEMPO E MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON NA SOLUÇÃO E ACURÁCIA DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR NÃO LINEAR EM SILÍCIO COM CONDIÇÃO DE CONTORNO RELAXANTE

Tese apresentada ao curso de Doutorado em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE), Setor Exatas e de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito à obtenção do título de Doutora em Métodos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto Coorientador: Prof. Dr. Sebastião Romero Franco

CURITIBA 2025

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP) UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Zen, Priscila Dombrovski

Método multigrid espaço-tempo e múltipla extrapolação de Richardson na solução e acurácia da transferência de calor não linear em silício com condição de contorno relaxante / Priscila Dombrovski Zen. – Curitiba, 2025. 1 recurso on-line : PDF.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas , Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos Em Engenharia.

Orientador: Marcio Augusto Villela Pinto Coorientador: Sebastião Romero Franco

 Matemática - Estudo e ensino - Análise de erros. 2. Equação de calor.
 Métodos Multigrid (Análise numérica). 4. Método de diferença finita. I. Universidade Federal do Paraná. II. Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos Em Engenharia. III. Pinto, Marcio Augusto Villela. IV. Franco, Sebastião Romero. V. Título.

Bibliotecário: Elias Barbosa da Silva CRB-9/1894



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA - 40001016030P0

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **PRISCILA DOMBROVSKI ZEN**, intitulada: **Método Multigrid espaço-tempo e Múltipla Extrapolação de Richardson na solução e acurácia da transferência de calor não linear em silício com condição de contorno relaxante**, sob orientação do Prof. Dr. MARCIO AUGUSTO VILLELA PINTO, que após terem inquirido a aluna e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de doutora está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

Curitiba, 11 de Abril de 2025.

Assinatura Eletrônica 11/04/2025 14:51:30.0 MARCIO AUGUSTO VILLELA PINTO Presidente da Banca Examinadora Assinatura Eletrônica 14/04/2025 11:09:22.0 ÁLVARO LUIZ DE BORTOLI Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL)

Assinatura Eletrônica 13/04/2025 09:10:13.0 SIMONE DE FATIMA TOMAZZONI GONÇALVES Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ) Assinatura Eletrônica 11/04/2025 15:09:13.0 ELÍAS ALFREDO GUDIÑO ROJAS Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

e insira o codigo 442153

A Deus. Ao meu querido marido, Paulo Zen. Às minhas queridas filhas: Fernanda e Mariana. À minha amada família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Márcio Augusto Villela Pinto, por ter aceitado me orientar neste trabalho, pela confiança, pelo incentivo constante e pelo valioso conhecimento compartilhado ao longo desta jornada.

Expresso minha sincera gratidão ao meu co-orientador, Prof. Dr. Sebastião Romero Franco, pelo acompanhamento atento, pelas contribuições técnicas e pelo apoio essencial durante o desenvolvimento desta pesquisa.

Agradeço, igualmente, aos membros da banca examinadora pelas contribuições relevantes e pela dedicação na leitura deste trabalho: Prof. Dr. Elías Alfredo Gudiño Rojas (Universidade Federal do Paraná), Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli (Universidade Federal do Sul) e Prof.^a Dra. Simone de Fátima Tomazzoni Gonçalves (Universidade Federal do Paraná).

Aos meus familiares e amigos, agradeço profundamente pelo apoio incondicional, paciência e compreensão em todos os momentos.

Agradeço, também, ao Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE) da Universidade Federal do Paraná (UFPR), à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), à Fundação Araucária, pela oportunidade de cursar o doutorado.

A vitória mais bela que se pode alcançar é a vitória sobre si mesmo. Santo Inácio de Loyola

RESUMO

Este trabalho apresenta uma investigação detalhada sobre a aplicação de técnicas avançadas de análise numérica na solução de problemas não lineares de transferência de calor unidimensional. O modelo matemático estudado descreve a difusão de calor em uma barra fina e homogênea de silício, cuja condutividade térmica varia com a temperatura, sem solução analítica conhecida. Problemas desse tipo são comuns na modelagem de processos térmicos em materiais semicondutores e dispositivos eletrônicos, sendo fundamentais para o entendimento e a previsão do comportamento térmico em aplicações tecnológicas. A ausência de soluções analíticas para esse modelo não linear impõe a necessidade de desenvolver métodos numéricos eficientes que garantam alta precisão e baixo custo computacional. Apesar do sucesso de métodos clássicos, como o Crank-Nicolson e técnicas de linearização, esses métodos podem apresentar limitações na precisão ou na eficiência computacional, especialmente para sistemas altamente não lineares e malhas refinadas. Além disso, ainda há pouca exploração do uso combinado de técnicas *multigrid* e extrapolação para melhorar a precisão e acelerar a convergência em problemas térmicos não lineares. O objetivo deste trabalho é propor e avaliar duas abordagens para a solução numérica eficiente do problema, combinando métodos *multigrid* não lineares com técnicas de extrapolação para aumentar a precisão e a eficiência na solução de sistemas não lineares. A solução numérica foi estruturada utilizando o método das diferenças finitas centradas (CDS) para a discretização espacial e o método de Crank-Nicolson para a aproximação temporal. Duas abordagens foram consideradas no processo de solução: (i) a abordagem baseada no esquema de correção (Correction Scheme, CS) do multigrid, que lineariza o sistema pelo método de Newton associado à varredura Time-Stepping (TS); (ii) a abordagem baseada no esquema de aproximação completa (Full Approximation Scheme, FAS), que resolve diretamente o sistema não linear em conjunto com a varredura Waveform Relaxation (WR), formando o método FAS-MGWR. Para melhorar a precisão das soluções, foi aplicada a técnica de Múltipla Extrapolação de Richardson (MER). A verificação do código implementado foi realizada comparando os resultados numéricos com dados da literatura e com a ordem assintótica teórica esperada. Os resultados indicaram que ambas as abordagens, CS com TS e FAS-MGWR, associadas à MER, proporcionaram ganhos expressivos na precisão das soluções. A abordagem FAS-MGWR apresentou ainda uma redução significativa no tempo computacional em relação aos métodos convencionais, mantendo um excelente fator de convergência e *speed-up* com a versão *singlequid*. Os resultados obtidos destacam a eficiência e a robustez do método FAS-MGWR associado à MER na solução de problemas não lineares de transferência de calor, oferecendo uma abordagem promissora para aplicações em sistemas térmicos complexos. A flexibilidade da abordagem proposta permite sua adaptação para outros modelos não lineares encontrados em modelagem computacional e sistemas termodinâmicos, com potencial para aplicações na Engenharia Térmica e dispositivos eletrônicos modernos.

Palavras-chave: Análise de erros. Verificação. Simulação numérica. Equação do calor não linear. *Multigrid*. Método das diferenças finitas.

ABSTRACT

This work presents a detailed investigation into the application of advanced numerical analysis techniques for solving nonlinear one-dimensional heat transfer problems. The studied mathematical model describes heat diffusion in a thin, homogeneous silicon bar, where thermal conductivity varies with temperature and unknown analytical solution exists. Problems of this kind are common in modeling thermal processes in semiconductor materials and electronic devices, playing a fundamental role in understanding and predicting thermal behavior in technological applications. The absence of analytical solutions for this nonlinear model necessitates the development of efficient numerical methods that ensure high accuracy with low computational cost. Despite the success of classical methods such as Crank-Nicolson and linearization techniques, these approaches may present limitations in accuracy or computational efficiency, especially for highly nonlinear systems and refined meshes. Furthermore, there has been little exploration of the combined use of multigrid techniques and extrapolation to enhance accuracy and accelerate convergence in nonlinear thermal problems. The objective of this work is to propose and evaluate two approaches for the efficient numerical solution of this problem, combining nonlinear multigrid methods with extrapolation techniques to improve both accuracy and efficiency in solving nonlinear systems. The numerical solution was structured using the centered finite difference scheme (CDS) for spacial discretization and the Crank-Nicolson method for temporal approximation. Two approaches were considered in the solution process: (i) the approach based on the multigrid Correction Scheme (CS), which linearizes the system using Newton's method combined with Time-Stepping (TS) sweeping; (ii) the approach based on the Full Approximation Scheme (FAS), which directly solves the nonlinear system in conjunction with Waveform Relaxation (WR) sweeping, forming the FAS-MGWR method. To improve solution accuracy, the Repeated Richardson Extrapolation (RRE) technique was applied. The implemented code was verificated by comparing the numerical results with literature data and the expected theoretical asymptotic order. The results indicated that both approaches, CS with TS and FAS-MGWR, combined with RRE provided significant improvements in solution accuracy. Additionally, the FAS-MGWR approach achieved a substantial reduction in computational time compared to conventional methods while maintaining an excellent convergence factor and speed-up relative to its singlegrid version. The obtained results highlight the efficiency and robustness of the FAS-MGWR method combined with RRE in solving nonlinear heat transfer problems, offering a promising approach for applications in complex thermal systems. The flexibility of the proposed approach allows its adaptation to other nonlinear models encountered in computational modeling and thermodynamic systems, with potential applications in Thermal Engineering and modern electronic devices.

Keywords: Error analysis. Verification. Numerical simulation. Nonlinear heat equation. Multigrid. Finite difference method.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| FIGURA 1 – | Malha uniforme unidimensional | 32 |
|-------------|--|-----|
| FIGURA 2 – | Esquema de engrossamento de malhas | 39 |
| FIGURA 3 – | Operador de restrição por injeção unidimensional | 40 |
| FIGURA 4 – | Operador de restrição por ponderação completa unidimensional | 40 |
| FIGURA 5 – | Operador de prolongação por interpolação linear unidimensional | 40 |
| FIGURA 6 – | Estrutura do ciclo V | 41 |
| FIGURA 7 – | Esquema da barra de silício em contato com o reservatório térmico | 52 |
| FIGURA 8 – | Esquema <i>Time-Stepping</i> bidimensional. | 58 |
| FIGURA 9 – | Esquema Waveform Relaxation bidimensional | 60 |
| FIGURA 10 – | Esquema Waveform Relaxation unidimensional | 61 |
| FIGURA 11 – | Solução para diversos tempos finais | 65 |
| FIGURA 12 – | Comparação dos métodos TS Newton-MG e WR FAS com a solução | |
| | de Filipov e Faragó (2018) para $t_f = 2,0$ s | 66 |
| FIGURA 13 – | Tempo computacional para o método TS Newton-SG/MG. $\ .\ .\ .$ | 70 |
| FIGURA 14 – | Speed-up para o método TS Newton-MG | 73 |
| FIGURA 15 – | Fator de convergência médio para o método TS Newton-MG | 74 |
| FIGURA 16 – | Tempo computacional nos métodos WR FAS e WR SG | 76 |
| FIGURA 17 – | Speed-up para o método WR FAS | 77 |
| FIGURA 18 – | Speed- up comparativo para os métodos TS Newton-MG e WR FAS. | 78 |
| FIGURA 19 – | Fator de convergência no método WR FAS | 79 |
| FIGURA 20 – | Ordem aparente p_U para os parâmetros do MG-Caso1 com WR FAS. | 82 |
| FIGURA 21 - | Estimativa do erro de discretização para uc e um sem o uso da MER | |
| | (U_h) e com o uso da MER (U_m) versus espaçamento h | 82 |
| FIGURA 22 - | Gráfico comparativo do refinamento de malhas com solução global | |
| | u_m e solução local u_c para MER utilizando Estimador de Richardson | |
| | e diversos níveis de extrapolação | 83 |
| FIGURA A.1- | t_{CPU} para o método TS Newton-MG: (a) para $\kappa=0,01;0,1;0,5$ e | |
| | (b) para $\kappa = 1,0; 2,0; 10,0; 100,0$ | 99 |
| FIGURA A.2- | $-\rho_m$ para o método TS Newton-MG: (a) para $\kappa=0,01;0,1;0,5$ e (b) | |
| | para $\kappa = 1,0; 2,0; 10,0; 100,0$ | 102 |
| FIGURA A.3- | -Speed-up para o método TS Newton-MG: (a) para $\kappa=0,01;0,1;0,5$ | |
| | e (b) para $\kappa = 1,0; 2,0; 10,0; 100,0$ | 103 |
| FIGURA B.4- | t_{CPU} para o método WR FAS: (a) para $\kappa=0,01;0,1;0,5$ e (b) para | |
| | $\kappa = 1,0; 2,0; 10,0; 100,0$ | 106 |

| FIGURA B.5–Speed-up para o método WR FAS: (a) para $\kappa = 0,01; 0,1; 0,5$ e (b) |
|---|
| para $\kappa = 1,0; 2,0; 10,0; 100,0 107$ |
| FIGURA B.6- ρ_m para o método WR FAS: (a) para $\kappa = 0,01; 0,1; 0,5$ e (b) para |
| $\kappa = 1,0; 2,0; 10,0; 100,0 100,0 100$ |
| |
| FIGURA C.7–MG-Caso2: $\kappa_0 = 0,1$ e $\chi = 2,0$ para o método WR FAS |
| FIGURA C.8–MG-Caso3: $\kappa_0 = 0,1 \text{ e } \chi = 0,5 \text{ o WR FAS.} \dots \dots$ |
| FIGURA C.9–MG-Caso4: $\kappa_0 = 10,0$ e $\chi = 2,0$ o WR FAS |
| FIGURA D.10-Gráfico do Speed-up entre os métodos Time Stepping e Waveform |
| $Relaxation. \ldots 113$ |

LISTA DE TABELAS

| TABELA 1 – Representação esquemática do emprego de MER. MER. | 50 |
|--|-----|
| TABELA 2 – Combinações de valores para $\kappa_0 \in \chi$ | 63 |
| TABELA 3 – Número médio de linearizações no método TS Newton-MG \ldots . | 68 |
| TABELA 4 – \overline{it}_{MG} no método TS Newton-MG | 69 |
| TABELA 5 – Ordem de Complexidade - TS Newton-MG | 72 |
| TABELA 6 – Número de ciclos $V(1,1)$ no método WR FAS | 75 |
| TABELA 7 – Ordem de Complexidade - WR FAS e WR SG. . Ordem de Complexidade - WR FAS e WR SG. . | 79 |
| TABELA A.1 $-i\overline{t}_{Lin}$ no método TS Newton-MG | 97 |
| TABELA A.2 $-\overline{it}_{Lin}$ no método TS Newton-MG | 98 |
| TABELA A.3–Ordem de complexidade para o método TS Newton-MG 1 | 100 |
| TABELA B.4 $-i\overline{t}_{MG}$ no método WR FAS | 105 |
| TABELA B.5–Ordem de complexidade para o método WR FAS | 108 |

LISTA DE ALGORITMOS

| 1 | MG-CS ciclo V(l) | 42 |
|---|----------------------------------|----|
| 2 | MG-FAS ciclo V(l) | 44 |
| 3 | Time-Stepping - multigrid | 59 |
| 4 | Waveform Relaxation - singlegrid | 62 |
| 5 | Waveform Relaxation - multigrid | 62 |

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CDSCentral Differencing Scheme CFD Computational Fluid Dynamics CNCrank-Nicolson CPU Central Processing Unit CSCorrection Scheme EDO Equação Diferencial Ordinária EDP Equação Diferencial Parcial \mathbf{ER} Extrapolação de Richardson FAS Full Approximation Scheme FMG Full multigrid MDF Método das Diferenças Finitas MG Multigrid Newton-MG Newton multigrid MER Múltipla Extrapolação de Richardson MGRIT Método *multigrid* com redução no tempo Tempo de CPU t_{CPU} Tolerância tolSGSinglegrid STSpace-Time TSTime-Stepping Waveform Relaxation WR

LISTA DE SÍMBOLOS

| С | Calor específico $[J/KgK]$ |
|---------------------------------|---|
| C_p | Capacidade de calor da pressão $[J/KgK]$ |
| E_h | Erro de discretização |
| E_I | Erro de iteração |
| E_m | Erro de discretização obtido após o emprego de MER com o maior nível de extrapolação possível $(m=g-1)$ |
| E_{π} | Erro de arredondamento |
| G | Número total de malhas consideradas |
| h | Distância entre os pontos da discretização espacial |
| i | Contador na direção espacial x |
| I_h^{2h} | Operador de restrição |
| I^h_{2h} | Operador de prolongação |
| it_{Lin} | Número de linearizações em cada passo de tempo |
| \overline{it}_{Lin} | Número médio de linearizações em todos os passos de tempo |
| it_{MG} | Número de ciclos $V(1,1)$ para resolver cada uma das linearizações |
| \overline{it}_{MG} | Número médio de ciclos $V(1,1)$ considerando todas as linearizações em cada passo de tempo |
| $\overline{\overline{it}}_{MG}$ | Número médio de ciclos $V(1,1)$ considerando todas as linearizações e todos os passos de tempo |
| κ | Condutividade térmica $[W/m\cdotK]$ |
| κ_0 | Condutividade térmica numa temperatura de referência $[W/m \cdot K]$ |
| l | Número do nível da malha usado no <i>multigrid</i> |
| m | Indicador do nível de extrapolação |
| N_x | Número de pontos na discretização espacial \boldsymbol{x} |
| N_t | Número de pontos na discretização temporal t |
| Ν | Número de incógnitas |

| p | Ordem de complexidade do algoritmo |
|----------------|--|
| p_E | Ordem efetiva do erro de discretização |
| $(p_E)_{g,m}$ | Ordem efetiva p_{E} inerente à solução obtida com o emprego de MER |
| p_L | Ordem assintótica do erro de discretização |
| p_U | Ordem aparente do erro de discretização |
| $(p_U)_{g,m}$ | Ordem aparente p_U inerente à solução obtida com o emprego de MER |
| p_V | Conjunto das ordens verdadeiras do erro de discretização |
| Q_m | Calor metabólico $[W/m^3]$ |
| Q_r | Calor externo gerado pelas nanopartículas $[W/m^3]$ |
| r | Vetor dos resíduos |
| re | Razão de engrossamento de malha |
| r(0) | Resíduo na estimativa inicial |
| r(it) | Resíduo na iterada atual it |
| S | Speed-up |
| U_h | Estimativa para E_h |
| U_{Δ} | Estimador Δ |
| U_{Ri} | Estimador de Richardson |
| U_{pm} | U_{Ri} com base em p_V para MER |
| U_{pmc} | U_{pm} corrigido |
| U_{ψ} | Estimador ψ |
| U_{ψ}^{*} | U_{ψ} corrigido |
| u | Variável da temperatura $[K]$ |
| u_c | Valor da variável u no centro do domínio |
| u_m | Valor médio da variável u |
| t_0 | Tempo inicial $[s]$ |
| t_f | Tempo final $[s]$ |

Letras gregas

| χ | Coeficiente de dependência de temperatura associado à ${\cal K}$ | |
|-----------------|---|--|
| Δ | Operador Laplaciano | |
| ∇ | Operador gradiente | |
| $ abla \cdot$ | Operador divergente | |
| $ u_1 $ | Número de pré-suavizações | |
| ν_2 | Número de pós-suavizações | |
| Ω | Domínio de cálculo (contínuo) | |
| Ω^h | Domínio de cálculo discretizado com espaçamento \boldsymbol{h} (malha uniforme) | |
| Φ | Solução analítica para a variável de interesse | |
| ϕ | Solução numérica para variável de interesse | |
| ρ | Densidade $[kg/m^3]$ | |
| $ ho_m$ | Fator de convergência médio | |
| τ | Intervalo entre os pontos da aproximação temporal | |
| ε_1 | Critério de parada para as linearizações | |
| ε_2 | Critério de parada para os ciclos <i>multigrid</i> | |
| Subíndices | | |
| i | Posição do nó na direção espacial \boldsymbol{x} | |
| Superíndices | | |

- n Posição do nó na variável temporal t

SUMÁRIO

| 1 | INTRODUÇÃO | 19 |
|-------|---|-----------|
| 1.1 | Generalidades | 19 |
| 1.2 | Descrição do problema | 21 |
| 1.3 | Revisão bibliográfica | 23 |
| 1.3.1 | Equação do calor não linear | 23 |
| 1.3.2 | Método <i>multigrid</i> | 24 |
| 1.3.3 | Varreduras no tempo | 26 |
| 1.3.4 | Múltipla Extrapolação de Richardson | 28 |
| 1.4 | Objetivos | 30 |
| 1.5 | Organização do texto | 31 |
| 2 | FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | 32 |
| 2.1 | Método das Diferenças Finitas | 32 |
| 2.2 | Método de Crank-Nicolson | 34 |
| 2.3 | Esquema de linearização | 35 |
| 2.4 | Método <i>multigrid</i> | 37 |
| 2.4.1 | Operadores de restrição e prolongação | 39 |
| 2.4.2 | Ciclos e esquemas | 40 |
| 2.5 | Erro numérico e erro de discretização | 44 |
| 2.6 | Estimativas para o erro de discretização | 46 |
| 2.7 | Múltipla Extrapolação de Richardson | 47 |
| 3 | MODELOS MATEMÁTICO E NUMÉRICOS | 52 |
| 3.1 | Modelo matemático | 52 |
| 3.2 | Modelos numéricos | 54 |
| 4 | MÉTODOS DE VARREDURAS NO TEMPO | 58 |
| 4.1 | Time-Stepping | 58 |
| 4.2 | Waveform Relaxation | 59 |
| 5 | RESULTADOS | 63 |
| 5.1 | Verificação do código | 64 |
| 5.2 | Time-Stepping Newton-MG | 67 |
| 5.2.1 | Número médio de linearizações | 67 |
| 5.2.2 | Número médio de ciclos | 68 |
| 5.2.3 | Tempo computacional, complexidade e Speed-up $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$ | 70 |
| 5.2.4 | Fator de convergência médio | 73 |
| 5.3 | Waveform Relaxation e Full Approximation Scheme | 74 |

| 5.3.1 | Número de ciclos $V(1,1)$ |
|-----------------|---|
| 5.3.2 | Tempo computacional |
| 5.3.3 | Speed- up |
| 5.3.4 | Ordem de complexidade |
| 5.3.5 | Fator de convergência médio |
| 5.4 | Análise dos erros |
| 5.4.1 | Ordem dos erros $\ldots \ldots $ 81 |
| 5.4.2 | Estimadores de erros |
| 6 | CONSIDERAÇÕES FINAIS |
| 6.1 | Escopo do trabalho |
| 6.2 | Principais conclusões |
| 6.3 | Principais contribuições |
| 6.4 | Trabalhos futuros |
| | REFERÊNCIAS 87 |
| | APÊNDICES 95 |
| | APÊNDICE A–MÉTODO <i>TIME-STEPPING</i> NEWTON-MG 96 |
| A.1 | Número médio de linearizações |
| A.2 | Número médio de ciclos $V(1,1)$ |
| A.3 | Tempo de CPU |
| A.4 | Ordem de complexidade |
| A.5 | Fator de convergência médio |
| A.6 | Speed-up |
| | APÊNDICE B-WAVEFORM RELAXATION-FULL AP- |
| D (| $PROXIMATION \ SCHEME \ \dots \ 104$ |
| B.1 | Número de cíclos $V(1,1)$ |
| B.2 | Tempo de CPU |
| B.3 | <i>Speed-up</i> |
| B.4 | Ordem de complexidade |
| B.5 | Fator de convergência médio |
| | APÊNDICE C – MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RI- CHARDSON 110 |
| C_1 | $\begin{array}{c} \text{OHARDSON} & \dots & $ |
| \mathbf{O} .1 | Outras variações de parametros κ_0 e χ |

| APÊNDICE | D-SPEED-UP COMPARATIVO ENTRE OS | |
|----------|---------------------------------|-----|
| | MÉTODOS TIME STEPPING E WAVE- | |
| | FORM RELAXATION | 113 |

1 INTRODUÇÃO

Neste trabalho, busca-se desenvolver e aplicar técnicas numéricas para resolver problemas das Ciências e Engenharias. Essas técnicas baseiam-se em modelos matemáticos, frequentemente descritos por equações diferenciais cuja solução analítica não é conhecida ou mesmo inexistente. A literatura destaca uma busca constante por métodos confiáveis de resolução, intensificada pelo crescente interesse em pesquisas e pelo desenvolvimento de métodos mais robustos e eficientes. Esses avanços, aliados ao progresso computacional, têm gerado melhorias significativas em termos de precisão e convergência.

Neste capítulo, apresentam-se as motivações do trabalho, incluindo uma revisão bibliográfica sobre métodos de linearização, o acelerador de convergência *multigrid*, varreduras no tempo e análise dos erros de discretização. Além disso, discutem-se os objetivos deste estudo e a organização do texto.

1.1 Generalidades

Para resolver problemas oriundos das Ciências e Engenharias, é possível utilizar três abordagens principais: métodos experimentais, métodos analíticos e métodos numéricos (MALISKA, 2004). Os métodos experimentais em laboratório permitem estudar de maneira realista determinados fenômenos. No entanto, a realização de experimentos geralmente envolve altos custos e, muitas vezes, é inviável devido às dificuldades para reproduzir condições reais ou por questões de segurança.

Ao tratar teoricamente os problemas físicos reais, busca-se resolver as equações diferenciais que os modelam, em geral Equações Diferenciais Parciais (EDPs). Para isso, é possível recorrer aos métodos analíticos ou numéricos (MALISKA, 2004).

È necessário ressaltar que os métodos analíticos se aplicam a problemas que simplificam muito as hipóteses do fenômeno real, ao passo que exigem condições de fronteira e geometrias bastante simples. Em contrapartida, as simulações numéricas possibilitam resolver problemas com condições de contorno mais gerais e definidos em praticamente todos os tipos de geometria (BRADIE, 2006).

Segundo Luo *et al.* (2015), as EDPs oriundas da modelagem de problemas físicos apresentam um alto grau de dificuldade para serem resolvidas e, por isso, geralmente não possuem soluções analíticas conhecidas, o que leva à busca por soluções numéricas. É importante salientar que os métodos analíticos não devem ser descartados, pois fornecem soluções exatas que ajudam a verificar a precisão das soluções numéricas.

Em geral, as EDPs que modelam fenômenos físicos dependem da variável temporal. Conforme Ferziger e Peric (2002), ao buscar soluções numéricas, é necessário transformar o domínio contínuo (com número infinito de pontos) em um domínio discreto (com número finito de pontos onde as variáveis de interesse serão calculadas), por meio de uma malha e de métodos de discretização espacial e temporal.

Para a discretização espacial do modelo matemático, comumente utiliza-se o Método das Diferenças Finitas (MDF) (STRIKWERDA, 1989; GOLUB; ORTEGA, 1992; FERZIGER; PERIC, 2002; SAAD, 2003), o Método dos Elementos Finitos (SAAD, 2003), o Método dos Volumes Finitos (GOLUB; ORTEGA, 1992; MALISKA, 2004), entre outros. A discretização temporal, por sua vez, pode ser realizada por diferentes métodos, como o Método de Euler (implícito ou explícito), o Método de Crank-Nicolson (STRIKWERDA, 1989; BURDEN; FAIRES, 2016), os métodos de Runge-Kutta e os métodos de passos múltiplos, como o de Adams-Bashforth (GOLUB; ORTEGA, 1992; ALI; ABBAS; ABDELHAKEM, 2024).

A partir da discretização das EDPs, obtém-se um sistema de equações algébricas que precisa ser resolvido para determinar as variáveis de interesse nos pontos da malha. Em problemas lineares, o sistema de equações resultante da discretização também é linear. A resolução de sistemas lineares pode ser feita por métodos diretos ou iterativos, também chamados de *solvers*.

Na prática, a matriz de coeficientes do sistema linear resultante é esparsa e de grande porte, o que torna os métodos diretos computacionalmente custosos e, em geral, inviáveis (GOLUB; LOAN, 1989). Assim, opta-se por métodos iterativos, que têm custo computacional mais aceitável (BURDEN; FAIRES, 2016). Embora esses métodos apresentem boas propriedades de suavização no início do processo iterativo, tendem a se tornar mais lentos com o aumento do número de iterações (TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001; BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000).

Nos casos em que o modelo é não linear, a complexidade do problema aumenta significativamente, pois a discretização gera um sistema não linear, cuja solução pode ser bastante complexa. Para lidar com a não linearidade, pode-se tratar diretamente a não linearidade do problema ou aplicar métodos de linearização, como o Método de Newton ou o Método de Picard (FILIPOV; FARAGó, 2018; ZARBA, 1988), transformando o problema em uma sequência de problemas lineares.

Por outro lado, para se obter soluções numéricas precisas, são necessárias malhas altamente refinadas, o que pode comprometer a eficiência dos métodos iterativos convencionais. Uma forma de contornar essa perda de eficiência é o uso do método *multigrid*, que acelera a convergência (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001).

O método *multigrid* permite diferentes abordagens, como o esquema de correção (*Correction Scheme*, CS), que, segundo Briggs, Henson e McCormick (2000), é indicado para problemas lineares. Nos casos não lineares, pode-se utilizar esta estratégia aplicando-

a após a linearização. Outra abordagem é o esquema de aproximação completa (*Full* Approximation Scheme, FAS), considerado eficiente e robusto em diversas aplicações, pois trata diretamente com a não linearidade (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001; PINTO; MARCHI, 2007; LUO et al., 2015). Neste trabalho um método é considerado eficiente quando consegue alcançar a solução desejada com baixo custo computacional, ou seja, utilizando menos tempo de processamento e memória. Já a robustez refere-se à capacidade do método de manter sua estabilidade e precisão mesmo diante de variações nos dados de entrada ou condições iniciais, além de funcionar bem em uma ampla gama de problemas não lineares.

Outra questão que se aborda são as simulações numéricas com dependência temporal. Nesse caso, é necessário decidir qual método de varredura no tempo utilizar, principalmente para ter-se a possibilidade de desenvolver algoritmos paralelizáveis. Os métodos de varredura temporal mais citados na literatura são o método *Time-Stepping* (TS) (STRIKWERDA, 1989; LENT, 2006), o método *Waveform Relaxation* (WR) (VANDEWALLE; HORTON, 1993; JANSSEN, 1997; LENT, 2006; FRANCO *et al.*, 2018b), e o método *Space-Time* (ST) (HORTON; VANDEWALLE, 1995; FRANCO, 2017; FRANCO *et al.*, 2018a).

Um dos grandes desafios enfrentados no contexto de equações que não possuem soluções analíticas é garantir a precisão das soluções numéricas, especialmente no controle e na redução dos erros de discretização (E_h) , considerados a principal fonte de imprecisão em modelos computacionais (ROY; OBEEKAMPF, 2011; MARCHI *et al.*, 2013). Entre as estratégias investigadas para mitigar esses erros, destacam-se o aumento da ordem de acurácia das aproximações e o uso de técnicas de extrapolação. Dentre estas, a Extrapolação de Richardson (ER) sobressai pela simplicidade de implementação e pelo baixo custo computacional, configurando-se como uma ferramenta eficaz para aprimorar a precisão em sistemas de equações diferenciais (DAHLQUIST; BJORCK, 2008; SIDI, 2003). Sua aplicação recursiva, conhecida como Múltipla Extrapolação de Richardson (MER), potencializa a eficácia na redução do E_h , sendo amplamente empregada em simulações que demandam alta precisão, conforme evidenciado por Marchi *et al.* (2016), Silva *et al.* (2021).

1.2 Descrição do problema

A equação do calor não linear é amplamente estudada na literatura de métodos numéricos devido à sua importância na modelagem de diversos fenômenos físicos. Essa equação descreve a evolução temporal de processos de difusão, advecção ou mesmo, convecção térmica e tem aplicações em diversas áreas da Ciência e Engenharia, incluindo transferência de calor, termodinâmica de materiais e processos industriais. Neste trabalho vamos tratar da equação da difusão térmica com condição de contorno convectiva (condição de contorno relaxante).

Além de sua importância teórica e prática, a equação do calor não linear serve como estudo de caso para avaliar a eficácia de métodos numéricos (INCROPERA *et al.*, 2008). No entanto, a obtenção de soluções acuradas para esse tipo de problema ainda representa um grande desafio, especialmente quando se busca explorar todo o potencial da paralelização computacional. Esse fator é crucial em aplicações que demandam alta ordem na resolução e baixo tempo de processamento para viabilizar as simulações numéricas.

De acordo com Özişik *et al.* (2017), muitas EDPs envolvem não linearidades, que podem estar presentes tanto nas próprias características das equações quanto nas condições de contorno impostas. A presença dessas não linearidades torna a resolução da equação ainda mais desafiadora, exigindo métodos numéricos robustos e eficientes. Embora o Métodos das Diferenças Finitas (MDF) seja amplamente utilizado para discretizar tais problemas, a principal complexidade reside na solução dos sistemas de equações não lineares resultantes, podem demandar um alto custo computacional.

Um exemplo representativo desse tipo de problema é o modelo matemático que descreve a difusão do calor em uma barra de silício com condições de contorno relaxantes, onde a condutividade térmica varia com a temperatura, caracterizando um problema não linear (FILIPOV; FARAGó; AVDZHIEVA, 2022).

Para enfrentar esses desafios, o presente trabalho adota o MDF na discretização espacial da equação do calor, enquanto a discretização temporal é realizada pelo método de Crank-Nicolson. No que se refere à não linearidade, são investigadas duas abordagens baseadas no método *multigrid*. A primeira, denominada esquema de correção (*Correction Scheme*, CS), lineariza a equação em cada nível da hierarquia de malhas no método *multigrid*, permitindo a solução de sistemas lineares. A segunda, conhecida como esquema de correção completa (*Full Approximation Scheme*, FAS), resolve diretamente a equação, preservando suas características não lineares em todos os níveis do *multigrid*.

Como o problema em estudo é transiente, a implementação de diferentes varreduras no tempo torna-se essencial para o desenvolvimento de algoritmos paralelizáveis que maximizem a eficiência computacional e reduzam o tempo de processamento. Nesse contexto, serão investigadas as técnicas de varredura TS e WR, amplamente empregadas na solução de problemas temporais. Além disso, a Extrapolação de Richardson (ER) e suas variantes, como a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER), serão exploradas. Essas técnicas têm se mostrado altamente eficazes na redução de erros numéricos e no aprimoramento da precisão das soluções, permitindo superar os desafios impostos pela necessidade de alta resolução e pela complexidade da discretização (DAHLQUIST; BJORCK, 2008; SILVA *et al.*, 2021; MARCHI *et al.*, 2016).

A aplicação das técnicas investigadas neste trabalho permitirá avanços expressivos

na eficiência computacional e na precisão da solução de problemas não lineares de transferência de calor. A combinação de métodos *multigrid* com varreduras temporais e extrapolação numérica tem se mostrado uma abordagem promissora para a resolução de EDPs transientes, especialmente em sistemas com alta complexidade numérica e ausência de soluções analíticas. A integração da ER e da MER amplia o potencial de obtenção de soluções de alta ordem de precisão, oferecendo ferramentas robustas para o aprimoramento da qualidade das simulações. Além da transferência de calor, espera-se que a abordagem proposta possa ser facilmente estendida para problemas em meios porosos deformáveis, fenômenos acoplados e sistemas com condições de contorno não lineares (CHEMEDA; MERGA, 2021; RODRIGUES *et al.*, 2022; SILVA *et al.*, 2021). Dessa forma, este trabalho não apenas contribui para o desenvolvimento de métodos numéricos eficientes, mas também estabelece uma base sólida para a aplicação dessas técnicas em diversas áreas da Ciência e Engenharia.

1.3 Revisão bibliográfica

Nesta seção, apresenta-se uma breve revisão bibliográfica sobre os problemas relacionados à equação do calor não linear, seguida por uma descrição do método *multigrid*, diferentes estratégias de varredura no tempo e análises de erro baseadas em extrapolações de Richardson.

1.3.1 Equação do calor não linear

A equação do calor não linear descreve a propagação de calor em um meio onde a condutividade térmica depende da temperatura de forma não linear. Essa equação generaliza o modelo clássico ao permitir que a condutividade térmica varie conforme a temperatura do meio. Como será detalhado na seção 3, ela modela várias aplicações importantes em diferentes ramos das Ciências e Engenharias, incluindo a análise de transferência de calor em estruturas de Engenharia (BECKER, 2000; MOHAMMADI; RAISEE, 2017; KARIMI *et al.*, 2019; WANG *et al.*, 2021), segurança no armazenamento de alimentos (SONG *et al.*, 2019; KARTHIKEYAN *et al.*, 2015), fluxo em meios porosos (PARLANGE *et al.*, 1998; GASPAR; RODRIGO, 2016), e ondas de calor por radiação (ZEL'DOVICH; RAIZER, 2002; VANDEWALLE; PIESSENS, 1991).

No campo da tecnologia de semicondutores, Schaum *et al.* (2022) estudaram a temperatura da superfície de *wafers* de silício durante processos de produção, aplicando equações de calor não lineares em uma dimensão e coordenadas cilíndricas. Essa abordagem contribuiu para a otimização térmica em processos industriais. Por sua vez, Seaid (2007) propôs um algoritmo para modelar a transferência de calor radiativa em materiais semitransparentes, resolvendo o problema como um ponto fixo não linear por meio de diferenças finitas e o método de Newton.

Problemas de transferência de calor em contextos não lineares são particularmente desafiadores, devido à dependência das propriedades de condutividade térmica e capacidade térmica em relação à temperatura (BECKER, 2000). Por exemplo, Filipov, Faragó e Avdzhieva (2022) e Zen, Pinto e Franco (2024) estudaram modelos para a convecção de calor em barras de silício, onde a condutividade térmica varia com a temperatura, e as condições de contorno são relaxantes.

O estudo numérico da equação do calor unidimensional com condutividade térmica dependente da temperatura foi realizado por Filipov e Faragó (2018), utilizando o método de Euler implícito para a discretização temporal e o Método das Diferenças Finitas (MDF) para a discretização espacial. Para lidar com a não linearidade, aplicaram o método de Newton e resolveram os sistemas lineares resultantes com métodos diretos. Essa abordagem, baseada em dados físicos aproximados, apresentou resultados satisfatórios, esclarecendo os efeitos da temperatura na condutividade térmica dos semicondutores.

Para aprimorar o tratamento da não linearidade, Iqbal e Zegeling (2020) adaptaram o método de Newton para um esquema denominado Newton *multigrid* (Newton-MG), que combina a linearização pelo método de Newton e com a resolução dos sistemas lineares pelo método *multigrid* CS. Nesse mesmo artigo houve uma comparação do CS com a técnica FAS, que não faz uso de linearizações. Nesse caso, o FAS mostrou desempenho superior na maioria dos casos. Vale destacar que o método Newton-MG foi empregado anteriormente por Vandewalle e Piessens (1992) na solução da equação do calor quase linear com condição de contorno de radiação não linear, apresentando resultados satisfatórios com os ciclos $V \in W$ do *multigrid*. Adicionalmente, Zhuang, Xiong e Ding (2021) aplicaram o método de Newton para resolver problemas de condução de calor em otimização topológica com restrições mais gerais. Os resultados demonstram que a abordagem proposta é capaz de obter detalhes topológicos intrincados e reduzir as temperaturas regionais em problemas de condução de calor não linear, melhorando significativamente a eficiência térmica das estruturas otimizadas.

1.3.2 Método multigrid

Proposto inicialmente por Fedorenko (1964), o método *multigrid* tornou-se uma técnica numérica amplamente reconhecida por sua eficiência na aceleração da convergência de processos iterativos, especialmente na resolução de sistemas de equações lineares e não lineares oriundos da discretização das EDPs. Pertencente à classe dos solucionadores iterativos, o *multigrid* destaca-se como uma das abordagens mais eficazes e difundidas, sendo amplamente aplicável em problemas numéricos gerais (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001; WESSELING; OOSTERLEE, 2001).

A principal característica do *multigrid* é a utilização de uma hierarquia de malhas,

que permite suavizações em diferentes níveis (malhas finas e grossas), tornando as iterações mais eficazes e acelerando significativamente a convergência em comparação com métodos iterativos convencionais (BANK; DUPONT; YSERENTANT, 1988; GHIA; GHIA; SHIN, 1982; MALACARNE; PINTO; FRANCO, 2022a). Essas operações otimizam a resolução iterativa, combinando a eficiência de métodos de suavização com a capacidade de lidar com erros em diversas escalas (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001; WESSELING; OOSTERLEE, 2001). A sequência com que essas malhas são visitadas caracteriza ciclos *multigrid*, que podem ser do tipo V, W ou F, entre outros. Os sistemas lineares associados a cada nível de malha são suavizados com métodos iterativos que reduzem rapidamente os erros oscilatórios, aproveitando as propriedades de suavização (TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001; WESSELING; OOSTERLEE, 2001).

O desempenho do método *multigrid* é particularmente notável em problemas elípticos, onde há predominância de efeitos difusivos (WESSELING, 1992; TROTTEN-BERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001). Contudo, em problemas dominados pela advecção, os resultados ainda não alcançaram o mesmo nível de eficiência, especialmente em aplicações realísticas de Dinâmica de Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) (FERZIGER; PERIC, 2002; BRANDT, 1977; STüBEN, 2001). Além disso, pequenas modificações em seus parâmetros podem resultar em grandes variações no tempo computacional (TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001).

Embora inicialmente focado em dimensões espaciais, o método *multigrid* demonstrou sua versatilidade ao ser adaptado para problemas mais complexos, incluindo dimensões temporais. Estudos recentes exploraram sua eficácia em problemas espaçotempo, como elastodinâmica (HUGHES; HULBERT, 1988), poroelasticidade (FRANCO, 2017; LUO *et al.*, 2015; BAUSE; RADU; KÖCHER, 2017) e fluxos multifásicos em meios porosos (LI; LEUNG; WHEELER, 2020; OLIVEIRA *et al.*, 2024). Esses avanços reforçam a flexibilidade e a eficiência do método na solução de problemas físicos complexos, consolidando-o como uma técnica indispensável para a modelagem de fenômenos governados por EDPs (SUERO *et al.*, 2012; MARCHI *et al.*, 2013; PINTO *et al.*, 2016; FRANCO; PINTO, 2024).

No contexto de problemas não lineares, o método *multigrid* oferece duas estratégias principais: a primeira combina um método de linearização, o método de Newton por exemplo, com o método *multigrid* CS para problemas lineares. Neste caso, chamado de Newton-MG. Essa abordagem destaca-se por sua precisão e estabilidade que pode utilizar a inversa da matriz jacobiana no processo iterativo (HENSON, 2003; BRABAZON; HUBBARD; JIMACK, 2014; OLIVEIRA *et al.*, 2024). Por outro lado, o FAS aplica o método *multigrid* diretamente ao sistema não linear, eliminando a necessidade de linearização prévia. Esse esquema é particularmente útil em problemas de grande escala devido à menor demanda de memória e à maior flexibilidade na escolha dos algoritmos de suavização (BRANDT, 1977; HENSON, 2003).

Comparações entre Newton-MG e FAS evidenciam vantagens distintas de cada abordagem. O Newton-MG destaca-se por sua menor demanda computacional e maior estabilidade em problemas elípticos e parabólicos discretizados pelo Método de Elementos Finitos (BRABAZON; HUBBARD; JIMACK, 2014). Já o FAS demonstra maior flexibilidade, tornando-se mais adequado para aplicações em larga escala, como na modelagem da poroelasticidade de fluidos incompressíveis. Nessas situações, a combinação do FAS com o suavizador Gauss-Seidel de ordenação lexicográfica mostrou excelente desempenho na convergência (LUO *et al.*, 2015).

Enquanto o Newton-MG é amplamente preferido por sua robustez e alta taxa de convergência, o FAS se sobressai na resolução de problemas com não linearidades locais, oferecendo um controle mais refinado dos erros em diferentes níveis de malha (BRANDT, 1977; IQBAL; ZEGELING, 2020). Estudos como os de Brabazon, Hubbard e Jimack (2014) e Vandewalle e Piessens (1991) indicam que ambas as estratégias são complementares, sendo a escolha do método dependente das características específicas do problema e das exigências computacionais envolvidas.

Os métodos FAS e Newton-MG são bem estabelecidos como solucionadores rápidos para EDPs não lineares elípticas (BASTIAN *et al.*, 2007; DONATELLI; SEMPLICE; SERRA-CAPIZZANO, 2013; GASKELL *et al.*, 2004; GREEN *et al.*, 2011). Quanto a eficiência entre os referidos métodos, Iqbal e Zegeling (2020) concluíram que uma iteração com o método Newton-MG pode ser mais rápida comparado com uma iteração FAS padrão para uma discretização em elementos finitos. Além disso, Brabazon, Hubbard e Jimack (2014) demonstraram que para problemas elípticos e parabólicos, o Newton-MG apresenta menor tempo de execução e maior estabilidade na convergência das iterações.

1.3.3 Varreduras no tempo

Para superar as dificuldades associadas ao grande número de incógnitas de um problema e com o avanço da arquitetura paralela, diversos métodos de varredura no tempo foram investigados para permitir a solução simultânea de múltiplos níveis temporais, reduzindo o custo computacional (GANDER; NEUMüLLER, 2016). Esses métodos têm sido objeto de estudo e aprofundamento nas últimas décadas, com foco no aumento da eficiência computacional (VANDEWALLE; HORTON, 1993; GANDER; NEUMüLLER, 2016; FRANCO *et al.*, 2018a; FRANCO *et al.*, 2018b; MALACARNE; PINTO; FRANCO, 2022b; ZEN; PINTO; FRANCO, 2024).

O estudo pioneiro de Nievergelt (1964) introduziu a ideia de substituição de algoritmos sequenciais por métodos paralelizados para Equações Diferenciais Ordinárias

(EDOs), permitindo que múltiplas sub-tarefas fossem resolvidas de forma independente. Essa abordagem abriu caminho para os métodos modernos de varredura no tempo. Entre as principais estratégias, destacam-se três abordagens: *Time-Stepping* (TS), *Waveform Relaxation* (WR) e *Space-Time* (ST), cada uma com características específicas para acelerar a convergência e viabilizar a paralelização computacional (GASPAR; RODRIGO, 2015; FRANCO *et al.*, 2018b; FRANCO *et al.*, 2018a; VANDEWALLE; PIESSENS, 1992; HORTON; VANDEWALLE, 1995; GANDER; NEUMüLLER, 2016).

O método TS, conforme descrito em Tannehill, Anderson e Pletcher (1997), utiliza algoritmos que abordam equações parabólicas como uma sequência de equações elípticas em cada passo de tempo, resolvendo o sistema discretizado de forma sequencial até alcançar o tempo final. Em cada passo de tempo, aplica-se um método para resolver o problema estacionário. O TS foi inicialmente estudado por Bakhvalov (1966) para problemas elípticos na equação de advecção-difusão e aprimorado por Tannehill, Anderson e Pletcher (1997) para problemas parabólicos, como a equação do calor transiente. Além disso, Horton e Vandewalle (1995) destacam que quando combinado com o *multigrid*, o TS pode alcançar taxas de convergência superiores, pois aproveita a hierarquia de malhas para suavizar erros em diferentes escalas e em cada passo de tempo, apesar de seu potencial para paralelismo no tempo ser restrito.

Diferente do TS, o método WR permite a solução de todo o intervalo de tempo como um único sistema global, possibilitando maior paralelização e melhor adaptação a equações acopladas (GANDER, 2015). Esse método tem se mostrado eficaz na modelagem de transferência de calor (LIU; JIANG, 2011) e, mais recentemente, tem sido aplicado em problemas biomédicos, como a modelagem térmica para diagnóstico precoce de melanomas (SANTIAGO *et al.*, 2023).

O WR também tem sido combinado com a técnica *multigrid* para outros problemas dependentes do tempo. A combinação dos métodos foi estudada inicialmente por Lubich e Ostermann (1987) e, posteriormente, por outros autores, incluindo Lent e Vandewalle (2002), que mostraram a robustez desse método, especialmente em problemas anisotrópicos. A análise de Fourier-Laplace foi utilizada para demonstrar a eficácia do método de *Waveform Relaxation* (WR) em problemas que envolvem grande variabilidade espacial e temporal, como os problemas de difusão e calor. Conforme destacado por Gander (2015), a aplicação da transformada de Fourier-Laplace permitiu avaliar a convergência do método WR em equações de calor e de onda, evidenciando sua eficiência em cenários com múltiplos subdomínios.

Recentemente, avanços no método *multigrid* com redução no tempo (MGRIT) têm permitido a paralelização mais eficiente de equações diferenciais em várias dimensões, como descrito por Falgout *et al.* (2014). Esses desenvolvimentos proporcionam uma solução mais rápida ao resolver múltiplos passos de tempo simultaneamente, ao invés de um processo sequencial, como ocorre com o TS. Falgout *et al.* (2017) realizaram uma comparação entre o desempenho do método tradicional TS e os métodos que operam simultaneamente no espaço e no tempo, como o *Space-Time* (ST) *multigrid*. A pesquisa mostrou que os métodos que utilizam paralelismo no tempo, como o MGRIT ou ST, são mais eficientes em termos de tempo computacional, especialmente quando combinados com técnicas de suavização por blocos. Esses avanços ilustram a eficácia das abordagens que fazem uso da paralelização, proporcionando um desempenho superior em comparação com os métodos sequenciais.

Esses desenvolvimentos no campo dos métodos numéricos para a solução de equações diferenciais têm sido impulsionados pelo avanço das arquiteturas computacionais, como os processadores multi-core, que oferecem novas oportunidades para a aplicação de paralelismo no tempo. Isso leva a uma crescente eficiência nos métodos de solução, permitindo a resolução de problemas complexos em menos tempo e com maior precisão.

1.3.4 Múltipla Extrapolação de Richardson

Em problemas numéricos complexos, a precisão das soluções é frequentemente limitada pelos erros de discretização. Para mitigar esse efeito, técnicas de extrapolação têm sido amplamente estudadas, com destaque para a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER), que permite aumentar a ordem de acurácia sem custo computacional excessivo.

A MER tem se destacado como uma técnica eficaz para a redução de erros de discretização e aumento da ordem de acurácia em problemas numéricos complexos, incluindo os modelos de transferência de calor. Em particular, a combinação da MER com esquemas numéricos para resolver as equações do calor tem demonstrado resultados significativos, melhorando tanto a precisão quanto a eficiência computacional das soluções.

A Extrapolação de Richardson tradicional baseia-se na combinação de soluções obtidas com diferentes tamanhos de malha para reduzir os erros de discretização (RICHARDSON; GAUNT, 1927). Já a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) estende essa abordagem, aplicando-a de forma iterativa para alcançar ordens de precisão ainda mais elevadas (MARCHI *et al.*, 2016).

Quando aplicada de forma iterativa, como na MER, a técnica pode alcançar uma ordem de precisão muito superior à dos métodos base (MARTINS; MARCHI, 2008; RODRIGUES *et al.*, 2022; SILVA *et al.*, 2021).

Marchi *et al.* (2016) mostraram que a MER, combinada com interpolação polinomial, melhora significativamente a precisão numérica e reduz o erro de discretização em problemas lineares e não lineares, como as equações de Poisson 1D, Burgers 2D e Navier-Stokes 2D. Os resultados numéricos evidenciaram que a MER não apenas reduz o erro de discretização, mas também aumenta a ordem de precisão das soluções. Em um dos experimentos, partindo de um esquema de segunda ordem com erro de 1.4×10^6 (sem o uso de MER), a aplicação de seis extrapolações resultou em um erro de 2.1×10^{-27} (com o uso de MER), com uma ordem de precisão de 14,5. Essa abordagem também demonstrou uma redução significativa no esforço computacional, minimizando o tempo de CPU e o uso de memória para alcançar um nível de erro numérico desejado em grades específicas.

A MER tem sido particularmente útil na resolução das equações do calor, um conjunto de EDPs que modelam a transferência de calor em sistemas físicos. A combinação da MER com métodos numéricos de alta ordem, permite uma redução significativa dos erros de discretização associados às condições de contorno e ao processo de discretização espacial e temporal. Por exemplo, estudos de Chemeda e Merga (2021) demonstraram como a aplicação da ER em combinação com o esquema de Crank-Nicolson melhorou significativamente a precisão e a estabilidade de soluções numéricas para a equação do calor unidimensional, alcançando uma ordem de precisão de quarta ordem. A equação do calor é amplamente utilizada para modelar processos térmicos em Engenharia e Ciências aplicadas. A aplicação da MER nesse contexto permite minimizar os erros de discretização e aprimorar a estabilidade numérica, especialmente quando combinada com o MDF e o método dos volumes finitos (CHEMEDA; MERGA, 2021).

Além disso, a MER tem sido aplicada com sucesso em problemas de escoamento e transferência de calor em meios porosos e fluídos viscoelásticos. Em um estudo realizado por Rodrigues *et al.* (2022), a MER foi utilizada para reduzir o erro de discretização em problemas de escoamento em meios porosos deformáveis, com a combinação do método das diferenças finitas de segunda ordem e o método de Crank-Nicolson para discretização temporal. Os resultados mostraram que a MER foi eficaz na redução do erro de discretização e na melhoria da precisão das soluções, com o aumento da ordem de precisão.

Este aumento na precisão também foi demonstrado por DA SILVA *et al.* (2022), que mostraram que a MER pode alcançar até a décima sexta ordem de precisão, sendo uma técnica promissora para discretizações sem malha e modelos multidimensionais.

Além disso, Silva *et al.* (2021) aplicaram a MER em conjunto com o método *multigrid* FAS para resolver a equação de Poisson 2D, um problema frequentemente associado a simulações de transferência de calor, observando uma melhora significativa na precisão e na aceleração da convergência das soluções em malhas finas. Essa abordagem se mostrou eficaz em esquemas de diferenças finitas de alta ordem (compacto e exponencial), proporcionando soluções mais precisas para problemas que exigem altos níveis de acurácia.

A aplicação da MER a sistemas de EDPs, como as equações de transferência de calor e massa em meios heterogêneos e não lineares, tem se mostrado uma metodologia promissora para aprimorar a precisão das soluções numéricas, especialmente em cenários onde os métodos tradicionais de discretização podem apresentar limitações significativas (MARCHI *et al.*, 2016). A implementação de MER em conjunto com outras técnicas avançadas, como os métodos *multigrid* e de otimização polinomial, continua a ser uma área de pesquisa ativa, buscando superar os desafios associados a problemas complexos e de grande escala (MARCHI *et al.*, 2016; SILVA *et al.*, 2021; RODRIGUES *et al.*, 2022).

Com base nas contribuições de Marchi e Germer (2013) e Marchi *et al.* (2016), que enfatizaram o uso de MER para reduzir o erro de discretização em problemas complexos de transferência de calor, bem como as investigações de Rodrigues *et al.* (2022), que exploraram a aplicação da MER em problemas de poroelasticidade e escoamento incompressível (BAOKU; OLAJUWON; MUSTAPHA, 2013; FAZIO; JANNELLI; ROTONDO, 2018), pode-se concluir que a MER é uma técnica robusta e eficiente para a melhoria da acurácia de soluções numéricas.

Com esta revisão bibliográfica, observamos a complexidade envolvida na resolução acurada de problemas de difusão de calor não linear com condições de contorno relaxantes (condições de contorno convectiva), destacando a lacuna existente na literatura para esse tipo de problema. A principal dificuldade reside na necessidade de resolver sistemas esparsos e de grande porte, o que exige estratégias eficientes para garantir precisão e viabilidade computacional. Para enfrentar esses desafios, este trabalho propõe aprimorar a solução deste tipo de problema combinando três estratégias principais.

Primeiramente, utiliza-se MER permitindo minimizar erros de discretização, especialmente em problemas que envolvem malhas altamente refinadas. Para isso, método *multigrid* será empregado para acelerar a convergência das soluções numéricas, utilizando tanto o esquema CS quanto o esquema FAS. Em seguida, varreduras no tempo serão analisadas para aprimorar a estabilidade e eficiência computacional (no intuito de se utilizar arquiteturas paralelas), considerando abordagens como TS e WR. Dessa forma, buscamos superar as limitações dos métodos tradicionais e oferecer uma abordagem mais eficiente para o tratamento de problemas complexos e de grande escala.

1.4 Objetivos

Diante dos desafios na solução numérica de equações diferencias não lineares transientes, este trabalho tem por objetivo principal, o aprimoramento de métodos numéricos na solução de problemas de difusão de calor transiente e não linear em uma barra de silício com condições de contorno relaxantes (condições de contorno convectiva); equação com ampla aplicação na indústria de semicondutores e em sistemas térmicos avançados. Para isso, explora-se abordagens avançadas, como o método *multigrid*, varreduras temporais e extrapolação de erro, garantindo maior eficiência e precisão na obtenção das soluções.

Como objetivos específicos, temos:

- Estudar a equação do calor não linear em regime transiente considerando condições de contorno relaxantes, aplicando-as a uma barra de silício com o intuito de avaliar seu comportamento térmico.
- Desenvolver um código computacional eficiente para resolver a equação do calor não linear transiente, assegurando precisão e bom desempenho nas simulações numéricas.
- Comparar os métodos CS e FAS, analisando sua eficiência em diferentes configurações de malhas e condições de contorno.
- Avaliar o desempenho das varreduras no tempo (*Time-Stepping* e *Waveform Relaxation*), com base em critérios de estabilidade, convergência e precisão.
- Aplicar a técnica de Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) para reduzir erros de discretização nos problemas propostos aprimorando a qualidade das soluções obtidas.

1.5 Organização do texto

A organização do texto segue uma estrutura lógica e progressiva para facilitar a compreensão dos conceitos e métodos abordados e está dividido em mais 5 capítulos, como segue. O Capítulo 2 explora os principais métodos numéricos utilizados, como o MDF, o método de Crank-Nicolson e o método *multigrid*, além de discutir erros de discretização e estimadores de Richardson. O Capítulo 3 apresenta os modelos matemáticos e numéricos, explicando os modelos que regem o problema físico e as abordagens numéricas aplicadas para solucioná-los. O Capítulo 4 descreve os métodos de varredura no tempo, detalhando os métodos *Time-Stepping* e *Waveform Relaxation*. O Capítulo 5 apresenta testes numéricos, como: a verificação do código, análise da convergência dos métodos, a ordem do erro e as estimativas de erro de discretização. Por fim, o Capítulo 6 sintetiza as conclusões do estudo, destacando as contribuições da pesquisa e possíveis direções futuras.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo é dedicado à descrição dos princípios que fundamentam este trabalho. Inicialmente, apresentamos o método de discretização espacial e os métodos de discretização temporal. Em seguida, descrevemos os métodos de linearização e, por fim, o método *multigrid*.

2.1 Método das Diferenças Finitas

De acordo com Ferziger e Peric (2002), o Método das Diferenças Finitas (MDF) é amplamente utilizado na discretização de Equações Diferenciais Parciais (EDPs), permitindo sua transformação em sistemas algébricos solucionáveis numericamente. Seu principal objetivo é aproximar cada termo do modelo matemático por meio de expressões algébricas em cada nó da malha. O processo inicia-se com a discretização do domínio, onde os valores da variável dependente são aproximados em pontos de tal malha.

Nos métodos numéricos, a malha é composta por nós internos, onde as equações diferenciais são discretizadas, e nós de contorno, onde são aplicadas as condições de contorno do problema. A correta definição dessas regiões influencia diretamente a precisão e estabilidade da solução.

No caso unidimensional, cada nó onde o modelo matemático será discretizado é representado por *i* e seus vizinhos são i - 1 e i + 1, como é apresentado na Fig. 1. Para uma malha unidimensional uniforme, a distância entre nós consecutivos é dada por $h = \frac{L}{N_x - 1}$, onde L é o comprimento do domínio de cálculo e N_x é o número de nós da malha. Nesta e em outras figuras desta seção, o símbolo (•) denota os nós sobre os contornos e o símbolo (•) denota os nós internos da malha.



Para ilustrar o princípio do método MDF, será feito a sua dedução. Esse método baseia-se na utilização de uma expansão em série de Taylor para uma variável genérica Λ centrada em x_i , com o objetivo de aproximar a derivada (KREYSZIG, 1999).

$$\Lambda_x = \Lambda_i + (x - x_i) \left(\frac{d\Lambda}{dx}\right)_i + \frac{(x - x_i)^2}{2!} \left(\frac{d^2\Lambda}{dx^2}\right)_i + \frac{(x - x_i)^3}{3!} \left(\frac{d^3\Lambda}{dx^3}\right)_i + \dots, \quad (2.1)$$

em que Λ_x representa $\Lambda(x)$, Λ_i representa $\Lambda(x_i) \in \left(\frac{d\Lambda}{dx}\right)_i$ representa a derivada de Λ aplicada em x_i .

O valor de Λ_x é exato se forem considerados todos os termos da série de Taylor. Para aplicar a Eq. (2.1) aos nós i - 1 e i + 1 a partir do ponto i (veja Fig. 1, com o valor de h sendo constante (malha uniforme), pode-se fazer

$$x = x_{i+1} \implies (x - x_i) = (x_{i+1} - x_i) = h_i$$

assim para o nó i + 1 tem-se:

$$\Lambda_{i+1} = \Lambda_i + h\left(\frac{d\Lambda}{dx}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left(\frac{d^2\Lambda}{dx^2}\right)_i + \frac{h^3}{6}\left(\frac{d^3\Lambda}{dx^3}\right)_i + \dots, \qquad (2.2)$$

e para i-1:

$$x = x_{i-1} \implies (x - x_i) = (x_{i-1} - x_i) = -h$$

$$\Lambda_{i-1} = \Lambda_i - h\left(\frac{d\Lambda}{dx}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left(\frac{d^2\Lambda}{dx^2}\right)_i - \frac{h^3}{6}\left(\frac{d^3\Lambda}{dx^3}\right)_i + \dots$$
(2.3)

De acordo com Marchi (2001), Burden e Faires (2016) e Tannehill, Anderson e Pletcher (1997), as expressões para a primeira derivada podem ser obtidas por combinação das Eq. (2.2) e Eq. (2.3). A escolha de quais equações usar define o tipo de esquema e a ordem do erro de truncamento cometido. A seguir serão apresentados alguns dos esquemas mais comuns e que serão usados no decorrer deste trabalho.

Subtraindo-se a Eq. (2.3) da Eq. (2.2) e manipulando os termos, tem-se

$$\left(\frac{d\Lambda}{dx}\right)_{i} = \underbrace{\frac{\Lambda_{i+1} - \Lambda_{i-1}}{2h}}_{\text{considerado}} \underbrace{-\frac{h^{2}}{6} \left(\frac{d^{3}\Lambda}{dx^{3}}\right)_{i} - \frac{h^{4}}{120} \left(\frac{d^{5}\Lambda}{dx^{5}}\right)_{i} - \dots}_{\text{desprezado (erro de truncamento)}}$$
(2.4)

Assim, a primeira derivada de Λ é aproximada de forma centrada (*Central Difference Scheme*, CDS) para o ponto i, através de:

$$\left(\frac{d\Lambda}{dx}\right)_{i}^{CDS} = \frac{\Lambda_{i+1} - \Lambda_{i-1}}{2h} + O(h^2), \qquad (2.5)$$

e o erro de truncamento é dado por

$$\varepsilon \left(\frac{d\Lambda}{dx}\right)_{i}^{CDS} = -\frac{h^2}{6} \left(\frac{d^3\Lambda}{dx^3}\right)_{i} - \frac{h^4}{120} \left(\frac{d^5\Lambda}{dx^5}\right)_{i} - \dots = O(h^2).$$
(2.6)

A aproximação de diferenças finitas centradas para a primeira derivada apresenta um erro de truncamento de $O(h^2)$, o que significa que a precisão da solução melhora quadraticamente conforme o refinamento da malha. Esse erro decorre da omissão dos termos de ordem superior na expansão de Taylor.

A dedução da segunda derivada segue um raciocínio semelhante ao da primeira derivada. Somando-se as expansões de Taylor para os pontos i - 1 e i + 1, obtemos uma aproximação simétrica para a segunda derivada.

Somando-se a Eq. (2.2) e a Eq. (2.3), e manipulando os termos, tem-se

$$\left(\frac{d^{2}\Lambda}{dx^{2}}\right)_{i} = \underbrace{\frac{\Lambda_{i-1} - \Lambda_{i} + \Lambda_{i+1}}{h^{2}}}_{\text{considerado}} \underbrace{-\frac{h^{2}}{12}\left(\frac{d^{4}\Lambda}{dx^{4}}\right)_{i} - \frac{h^{4}}{360}\left(\frac{d^{6}\Lambda}{dx^{6}}\right)_{i} - \dots}_{\text{desprezado (erro de truncamento)}}$$
(2.7)

Assim, a segunda derivada de Λ é aproximada de forma centrada com 3 pontos (CDS) para o ponto i, através de

$$\left(\frac{d^2\Lambda}{dx^2}\right)_i^{CDS} = \frac{\Lambda_{i-1} - 2\Lambda_i + \Lambda_{i+1}}{h^2} + O(h^2), \qquad (2.8)$$

e o erro de truncamento é dado por

$$\varepsilon \left(\frac{d^2 \Lambda}{dx^2}\right)_i^{CDS-2} = -\frac{h^2}{12} \left(\frac{d^4 \Lambda}{dx^4}\right)_i - \frac{h^4}{360} \left(\frac{d^6 \Lambda}{dx^6}\right)_i - \frac{h^6}{20160} \left(\frac{d^8 \Lambda}{dx^8}\right)_i - \dots = O(h^2). \quad (2.9)$$

Vale destacar que existem outras aproximações para essas derivadas na literatura (KREYSZIG, 1999; BURDEN; FAIRES, 2016; FERZIGER; PERIC, 2002).

O Método das Diferenças Finitas (MDF) é uma ferramenta fundamental na discretização de EDPs, permitindo transformar problemas diferenciais contínuos em sistemas algébricos. A escolha da discretização adequada, considerando a ordem de erro e a estabilidade do método, é essencial para a precisão e eficiência da solução numérica. No próximo tópico, exploraremos como a discretização temporal pode ser combinada ao MDF para resolver problemas transientes.

2.2 Método de Crank-Nicolson

O método de Crank-Nicolson (CN) é uma das abordagens mais utilizadas para a solução de Equações Diferenciais Parciais (EDPs) dependentes do tempo. Sua principal vantagem é ser incondicionalmente estável, permitindo o uso de passos de tempo maiores sem comprometer a estabilidade. Neste trabalho, o CN será empregado para a discretização temporal da equação do calor, garantindo uma solução precisa e eficiente para problemas transientes e precisão de segunda ordem no tempo (BURDEN; FAIRES, 2016; FERZIGER; PERIC, 2002; FORTUNA, 2000). Essas propriedades o tornam adequado para a resolução de equações diferenciais parciais, independentemente da relação entre o tamanho do passo
de tempo (τ) e a discretização espacial (h) (TANNEHILL; ANDERSON; PLETCHER, 1997; HIRSCH, 2007).

O método de Crank-Nicolson é baseado na combinação das abordagens explícita e implícita, utilizando uma média ponderada entre os valores do passo de tempo atual e do passo anterior. Isso resulta na seguinte formulação geral

$$\begin{cases} v_0 = y_0, \\ v_{n+1} = v_n + \frac{\tau}{2} \Big[f(v_{n+1}, t_{n+1}) + f(v_n, t_n) \Big], \end{cases}$$
(2.10)

para $n = 0, 1, ..., N_t - 1$, onde v_n representa o valor da solução no instante n, t_n é o passo de tempo, e os subíndices n + 1 e n correspondem aos passos de tempo atual e anterior, respectivamente.

Comparado ao método de Euler Implícito, que é de primeira ordem no tempo, o método de Crank-Nicolson se destaca por sua precisão de segunda ordem $O(\tau^2)$. Isso significa que, para um mesmo refinamento da malha temporal, o CN proporciona menor erro numérico, tornando-se uma opção mais eficiente para simulações de longo prazo (TANNEHILL; ANDERSON; PLETCHER, 1997; HIRSCH, 2007).

2.3 Esquema de linearização

A discretização da equação do calor não linear gera um sistema de equações algébricas não lineares, cuja solução direta pode ser computacionalmente custosa e complexa. Para contornar esse desafio, aplicam-se métodos de linearização, que aproximam a equação não linear por uma sequência de problemas lineares mais fáceis de resolver.

Dentre os métodos apresentados na literatura, destaca-se o método de Newton, amplamente utilizado devido à sua convergência quadrática (HENSON, 2003). Isso significa que, se a aproximação inicial for suficientemente próxima da solução exata, o erro diminui rapidamente a cada iteração. No entanto, sua eficiência depende da qualidade da estimativa inicial e da inversão da matriz jacobiana (ÖZIşIK *et al.*, 2017; FILIPOV; FARAGó, 2018), que pode ser computacionalmente custosa para sistemas de grande porte. Trata-se de um processo iterativo para encontrar as raízes de sistemas de equações algébricas não lineares.

Dessa forma, considerando a importância do método de Newton na resolução de sistemas não lineares, aplicamos essa abordagem para encontrar a solução do sistema discretizado. Seja $\mathbf{G}(\mathbf{u}) = 0$ o sistema de equações algébricas não lineares resultante da discretização. O objetivo é encontrar \mathbf{u} tal que $\mathbf{G}(\mathbf{u}) = 0$. Para isso, aplicamos uma abordagem iterativa baseada no método de Newton, expressa na forma geral:

$$\mathbf{G}\left(\mathbf{u}^{\nu+1}\right) = \mathbf{0},\tag{2.11}$$

em que $\mathbf{G}^{\nu+1} = \left[G_1^{\nu+1}, G_2^{\nu+1}, \dots, G_{N_x}^{\nu+1}\right]^T$ e $\mathbf{u}^{\nu+1} = \left[u_1^{\nu+1}, u_2^{\nu+1}, \dots, u_{N_x}^{\nu+1}\right]^T$ e $\nu + 1$ passo de linearização atual.

Dada uma estimativa inicial $\mathbf{u}^0,$ o sistema não linear da Eq. (2.11) pode ser resolvido por

$$\mathbf{u}^{\nu+1} = \mathbf{u}^{\nu} - (\mathbf{L}^{\nu})^{-1} \mathbf{G} (\mathbf{u}^{\nu}), \quad \nu = 0, 1, 2, \dots,$$
 (2.12)

onde L é a matriz jacobiana de G com respeito a u, definida por

$$\mathbf{L} \equiv \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial G_1}{\partial u_{N_x}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial G_{N_x}}{\partial u_1} & \cdots & \frac{\partial G_{N_x}}{\partial u_{N_x}} \end{bmatrix}.$$
 (2.13)

A Eq. (2.12) define o método iterativo de Newton (BURDEN; FAIRES, 2016). Esse processo é repetido até que a norma do resíduo $\|\mathbf{G}(\mathbf{u}^{\nu+1})\|$ seja menor que um valor de tolerância ϵ ou até que a variação entre dois passos de linearizações consecutivos seja suficientemente pequeno, garantindo a convergência da solução.

Apenas com o intuito de ilustrar o método, a seguir apresenta-se um exemplo com $N_x = 2$, assim

$$G_1(x,y) = 0, G_2(x,y) = 0.$$
(2.14)

Usando a Eq. (2.12), tem-se

$$\begin{bmatrix} x^{\nu+1} \\ y^{\nu+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^{\nu} \\ y^{\nu} \end{bmatrix} - \mathbf{L}^{-1}(x^{\nu}, y^{\nu}) \begin{bmatrix} G_1(x^{\nu}, y^{\nu}) \\ G_2(x^{\nu}, y^{\nu}) \end{bmatrix},$$
(2.15)

onde a matriz jacobiana é dada por

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial x} & \frac{\partial G_1}{\partial y} \\ \frac{\partial G_2}{\partial x} & \frac{\partial G_2}{\partial y} \end{bmatrix}.$$
 (2.16)

Neste caso, introduzindo a inversa explícita da matriz jacobiana, pode-se reescrever a Eq. (2.15) da seguinte forma

$$\begin{bmatrix} x^{\nu+1} \\ y^{\nu+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^{\nu} \\ y^{\nu} \end{bmatrix} - \left(\frac{1}{D} \begin{bmatrix} \frac{\partial G_2}{\partial y} & -\frac{\partial G_1}{\partial y} \\ -\frac{\partial G_2}{\partial x} & \frac{\partial G_1}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_1(x^{\nu}, y^{\nu}) \\ G_2(x^{\nu}, y^{\nu}) \end{bmatrix} \right), \quad (2.17)$$

onde o $D = det(\mathbf{L})$.

Para o caso $N_x = 1$, especificamente, o método se reduz à

$$x^{\nu+1} = x^{\nu} - \frac{G(x^{\nu})}{G'(x^{\nu})}.$$
(2.18)

Uma boa aproximação inicial é essencial para a convergência bem-sucedida desse método. Segundo Golub e Ortega (1992), é bastante difícil encontrar bons valores de estimativa inicial na vizinhança da solução, portanto, a convergência da solução apresenta um problema sério. Se a estimativa inicial estiver longe da solução exata, a matriz \mathbf{L} pode ficar mal condicionada. O problema de encontrar bons valores iniciais para o método de Newton tem sido objeto de inúmeras investigações. Além disso, à medida que o sistema torna-se grande, a montagem e a inversão de \mathbf{L} tornam-se mais complexas.

Inicialmente, a proposta deste trabalho é utilizar apenas o método de Newton. Em trabalhos futuros serão investigados/estudados outros métodos de linearização, tal como o método de Picard.

2.4 Método multigrid

O método *multigrid* é amplamente utilizado para a solução eficiente de sistemas lineares de grande porte, especialmente aqueles provenientes da discretização de equações diferenciais parciais (FEDORENKO, 1964; WESSELING, 1992; BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001). Neste estudo, ele será aplicado para acelerar a convergência de problemas térmicos transientes, garantindo maior eficiência computacional em comparação aos métodos iterativos convencionais,

O método *multigrid* torna-se uma abordagem comum para resolver muitos tipos de problemas lineares da forma

$$A\mathbf{u} = \mathbf{f},\tag{2.19}$$

onde A é a matriz de coeficientes, \mathbf{u} é o vetor de incógnitas e \mathbf{f} é o vetor de termos independentes. Denotando por \mathbf{v} uma aproximação para a solução exata \mathbf{u} e por $\mathbf{e} = \mathbf{u} - \mathbf{v}$ seu erro, definem-se o resíduo como

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} - A\mathbf{v},\tag{2.20}$$

e a relação $A\mathbf{e} = \mathbf{r}$, conhecida como equação residual.

O sistema dado pela Eq. (2.19) pode ser resolvido utilizando-se métodos diretos ou iterativos (aqui chamados de *solvers*) para obter sua solução. Em nosso caso, por se tratar de sistemas esparsos e de grande porte, é inviável a utilização dos métodos diretos, pois demandam custo computacional elevado. Já os métodos iterativos, possuem custo computacional aceitável (BURDEN; FAIRES; BURDEN, 2023).

Os métodos iterativos convencionais, como Gauss-Seidel e Jacobi ponderado, são eficientes para reduzir erros oscilatórios, mas tendem a perder desempenho à medida que o refinamento da malha aumenta. Essa limitação ocorre porque, em tais métodos, as componentes oscilatórias do erro (modos de Fourier de alta frequência) são rapidamente reduzidas nas primeiras iterações, enquanto as componentes suaves (modos de Fourier de baixa frequência) persistem, tornando a convergência mais lenta.

O método *multigrid* resolve esse problema ao combinar cálculos em uma hierarquia de malhas, transferindo componentes de erros suaves para malhas mais grosseiras (com uma quantidade menor de pontos), onde estas componentes tornam-se mais oscilatórias, reduzindo assim todas as componentes do erro eficientemente (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001). Esse processo pode ser repetido até a malha mais grossa possível e faz com que o método iterativo usado não perca a eficiência, pois o processo agirá em todas as componentes dos erros (TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001)

Para haver a transferência de informações entre as malhas fina e grossa, existe uma relação entre os tamanhos de seus elementos, aqui chamada de razão de engrossamento, dada por

$$re = \frac{H}{h},\tag{2.21}$$

em que $h \in H$ são os tamanhos dos elementos da malha fina e grossa, respectivamente. A Fig. 2 mostra uma sequência de três malhas, para o caso bidimensional Ω^h , Ω^{2h} , Ω^{4h} com razão de engrossamento padrão re = 2, ou seja, H = 2h. Durante todo este texto, será usada apenas a razão de engrossamento padrão re = 2, por ser a mais recomendada para os problemas que serão tratados nesta pesquisa (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001).

No contexto dos métodos *multigrid*, os métodos que usam apenas uma malha serão chamados de *singlegrid*.

Devido à sua estrutura iterativa, o método *multigrid* demonstra grande eficácia na resolução de problemas não lineares, nos quais a necessidade de um processo iterativo é inerente. Assim como seu desenvolvimento permitiu aprimorar os métodos convencionais de relaxação linear, ele também fornece um arcabouço teórico e prático para a construção e aprimoramento de algoritmos voltados à solução de sistemas não lineares (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000).

Com isso o método *multigrid* também pode ser uma alternativa para resolver problemas não lineares da forma

$$A(\mathbf{u}) = \mathbf{f},\tag{2.22}$$

onde a notação diferenciada, com o uso de (), ressalta a presença da não linearidade no sistema.

Uma das estratégias para resolver tal sistema não linear, é aplicar um esquema de linearização, como o método de Newton, e empregar *multigrid* para a solução do sistema Jacobiano em cada linearização.



FIGURA 2 – Esquema de engrossamento de malhas.

Fonte: A autora (2025)

Outra estratégia é aplicar *multigrid* diretamente ao problema não linear. Para isto, o conceito de erro, resíduo e equação residual merecem ser revistos. Neste caso, o erro e resíduo são dados, respectivamente por $\mathbf{e} = \mathbf{u} - \mathbf{v}$ e $\mathbf{r} = \mathbf{f} - A(\mathbf{v})$. Subtraindo a equação original do resíduo, obtemos a equação residual para o caso não linear (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001).

$$A(\mathbf{u}) - A(\mathbf{v}) = \mathbf{r}.$$
(2.23)

Note que, como A é um operador não linear e geralmente $A(\mathbf{e}) \neq \mathbf{r}$, não pode-se determinar o erro resolvendo uma equação linear simples na malha grossa, como no caso linear.

2.4.1 Operadores de restrição e prolongação

Os operadores de restrição são responsáveis pela transferência de informações das malhas finas para as malhas imediatamente mais grossas e esses operadores são genericamente representados por I_h^H .

Entre os operadores de restrição, os mais conhecidos são os operadores por injeção, meia ponderação e ponderação completa (WESSELING, 1992; BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000).

Na Fig. 3, segue um exemplo do operador por injeção, com re = 2 (H = 2h), para o caso unidimensional. Nota-se que os dados são transferidos integralmente (note o peso 1).



FIGURA 3 – Operador de restrição por injeção unidimensional.

O operador de restrição por ponderação completa, como ilustrado na Fig. 4, utiliza informações dos pontos vizinhos ao ponto calculado na malha fina para o correspondente na malha grossa (note os pesos 1/2 e 1/4).

FIGURA 4 – Operador de restrição por ponderação completa unidimensional.



Os operadores de prolongação (ou interpolação) são responsáveis pela transferência de informações das malhas grossas para a malhas imediatamente mais finas e são genericamente representados por I_H^h . Na Fig. 5 segue um exemplo do operador de prolongação por interpolação linear com re = 2 para o caso unidimensional $(I_H^h = I_{2h}^h)$ (note os pesos 1/2 e 1/4).

FIGURA 5 – Operador de prolongação por interpolação linear unidimensional.



Fonte: A autora (2025)

2.4.2 Ciclos e esquemas

No método *multigrid*, um ciclo define a sequência de visitação das malhas, controlando como os erros são suavizados e corrigidos em diferentes níveis de resolução. Os ciclos V e W são os mais comuns, sendo escolhidos de acordo com a complexidade do

problema e os requisitos de convergência (WESSELING, 1992). Eles são classificados dessa forma devido ao formato que adquirem quando realizam as visitações às malhas. Estes percorrem as malhas partindo da mais fina Ω^h até a mais grossa possível, ou desejada. Outros tipos de ciclos também são conhecidos, como por exemplo, o ciclo F ou o ciclo dente-de-serra, mas não serão tratados nesta pesquisa. Mais detalhes, ver em Briggs, Henson e McCormick (2000) e Trottenberg, Oosterlee e Schüller (2001).

Na Fig. 6 está representado um ciclo V com 5 níveis de malhas. Definimos ν_1



FIGURA 6 – Estrutura do ciclo V.

FONTE: Franco (2017).

como o número de pré-suavizações (suavizações aplicadas no processo de restrição) e ν_2 como o número de pós-suavizações (suavizações aplicadas no processo de prolongação).

O processo de suavização desempenha um papel essencial na redução dos componentes de erro oscilatório. No método *multigrid*, utilizamos:

- **Pré-suavização** (ν_1) : aplicada para eliminar erros de alta frequência.
- Pós-suavização (ν_2): aplicada para corrigir erros remanescentes de baixa frequência.

O ajuste adequado desses parâmetros influencia diretamente a taxa de convergência do método.

Para problemas lineares, o esquema de correção CS é uma abordagem eficiente, pois transfere apenas o resíduo entre as malhas, reduzindo o custo computacional sem comprometer a precisão da solução. No entanto, essa estratégia pode não ser ideal para equações não lineares, uma vez que não considera correções globais na solução (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001). O Alg. 1 (FRANCO, 2017) apresenta a implementação do esquema CS para o ciclo V.

| \mathbf{Al} | goritmo 1: MG-CS ciclo V(l) |
|---------------|---|
| 1 ii | $\mathbf{f} \ l = L_{max} \ \acute{e} \ o \ nivel \ de \ malha \ mais \ grossa \ \mathbf{then}$ |
| 2 | Resolva sistema $A_l v^{(l)} = f^{(l)}$ na malha grossa $\Omega^{2^{l-1}h}$ |
| 3 | else |
| 4 | Suavize ν_1 vezes o sistema $A_l v^{(l)} = f^{(l)}$ na malha $\Omega^{2^{l-1}h}$ |
| 5 | Calcule e restrinja o resíduo: $f^{(l+1)} = I_{2^{l-1}h}^{2^l h} (f^{(l)} - A_l v^{(l)})$ |
| 6 | Resolva no próximo nível: MG-CS ciclo $V(l+1)$ |
| 7 | Corrija usando interpolação: $v^{(l)} \leftarrow v^{(l)} + I_{2^{lh}}^{2^{l-1}h} v^{(l+1)}$ |
| 8 | Suavize ν_2 vezes $A_l v^{(l)} = f^{(l)}$ na malha $\Omega^{2^{l-1}h}$ |
| 9 | end |
| 10 e | nd |

Embora o método Newton-MG seja eficiente para resolver sistemas não lineares, ele ainda depende da solução de um sistema linear a cada passo de linearização. Em problemas altamente não lineares, a convergência pode ser prejudicada, exigindo esquemas como o de aproximação completa FAS, que trata a não linearidade diretamente em todos os níveis de malha.

Suponha uma aproximação \mathbf{v}^h na malha fina $A^h(\mathbf{u}^h) = \mathbf{f}^h$. Como no caso linear, objetiva-se usar a equação residual na malha mais grossa e aproximar \mathbf{e}^h com o erro em \mathbf{v}^h , assim a equação residual para a malha grossa é dada por:

$$A^{2h}(\mathbf{v}^{2h} + \mathbf{e}^{2h}) - A^{2h}(\mathbf{v}^{2h}) = \mathbf{r}^{2h},$$
(2.24)

onde A^{2h} é o operador, \mathbf{r}^{2h} resíduo, \mathbf{v}^{2h} é a aproximação para \mathbf{v}^h e \mathbf{e}^{2h} o erro, todos na malha grossa.

Seja \mathbf{v}_h a solução aproximada na malha fina e \mathbf{e}_h o erro associado. A equação do resíduo restrito à malha grossa é definida como

$$\mathbf{r}^{2h} = I_h^{2h} \mathbf{r}^h = I_h^{2h} (\mathbf{f}^h - A^h(\mathbf{v}^h)).$$
(2.25)

Essa Eq. (2.25) representa a diferença entre a solução exata $(\mathbf{v}^{2h} + \mathbf{e}^{2h})$ e a numérica (\mathbf{v}^{2h}) , propagada para a malha imediatamente mais grossa. O método *multigrid* utiliza essa informação para corrigir iterativamente a solução.

Utilizando $\mathbf{v}^h = I_h^{2h} \mathbf{v}^h$, tem-se que a equação residual pode ser reescrita como:

$$A^{2h}\underbrace{(I_h^{2h}\mathbf{v}^h + \mathbf{e}^{2h})}_{\mathbf{v}^h} = \underbrace{A^{2h}(I_h^{2h}\mathbf{v}^h) + I_h^{2h}(\mathbf{f}^h - A^h(\mathbf{v}^h))}_{\mathbf{v}^h}.$$
(2.26)

O lado direito da equação é conhecido na malha grossa e do lado esquerdo supomos \mathbf{u}^{2h} a solução desse sistema. Assim, o erro pode ser obtido por $\mathbf{e}^{2h} = \mathbf{u}^{2h} - I_h^{2h} \mathbf{v}^h$ e que

deve ser interpolado e usado para corrigir a aproximação na malha fina, como em

$$\mathbf{v}^h \leftarrow \mathbf{v}^h + I^h_{2h} \mathbf{e}^{2h}.\tag{2.27}$$

Como pode ser visto, este esquema é um esquema que transfere informações relacionadas tanto do resíduo como das soluções para as malhas grossas. Como o problema na malha mais grossa possível, ou mais grossa desejada, é resolvido completamente, e não só o erro, este esquema é chamado de esquema de aproximação completa (*Full Approximation Scheme*, FAS). Por este motivo, tal esquema é mais adequado para problemas não lineares (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHÜLLER, 2001).

O Alg. 2 apresenta o esquema FAS para o ciclo V. De forma geral, tanto o algoritmo MG-CS ciclo V (Alg. 1) quanto o MG-FAS ciclo V (Alg. 2) serão tratados como MG-ciclo V.

Nota-se que, se A é um operador linear, então o esquema FAS reduz-se diretamente ao esquema CS. Assim, o método FAS pode ser visto como uma generalização do esquema de correção para problemas não lineares.

Independentemente do tipo de ciclo (V, W ou F) ou do tipo de esquema (CS ou FAS), existe também o método *multigrid* completo (*Full Multigrid*, FMG) que se inicia numa malha grosseira e vai transferindo informações para as malhas mais finas até que se atinja a malha mais fina desejada para então iniciar o processo *multigrid* padrão. Esta estratégia é responsável por acelerar a convergência do método de forma satisfatória por fornecer excelentes estimativas iniciais ao *multigrid* (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001; FRANCO, 2017).

Os ciclos e esquemas no método *multigrid* desempenham um papel fundamental na eficiência do algoritmo. O CS é eficiente para problemas lineares, mas para equações não lineares, esquemas como o FAS são mais adequados (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001). O ciclo V é mais eficiente, mas o ciclo W é mais robusto (FRANCO *et al.*, 2018b). A escolha correta do ciclo e do esquema de correção impacta diretamente a rapidez e precisão da solução, assim como outros parâmetros *multigrid*, como: *solver*, número de pré e pós-suavização, operadores de restrição e prolongação, entre outros.

| Al | goritmo 2: MG-FAS ciclo V(l) |
|--------------|--|
| 1 i f | $E l = L_{max}$ é o nível de malha mais grossa then |
| 2 | Resolva o sistema $A_l(v^{(l)}) = f^{(l)}$ na malha grossa $\Omega^{2^{l-1}h}$ |
| 3 | Calcule a correção na malha grossa: $w^{(l)} = v^{(l)} - \overline{v}^{(l)}$ |
| 4 | else |
| 5 | Suavize ν_1 vezes $A_l(v^{(l)}) = f^{(l)}$ na malha $\Omega^{2^{l-1}h}$ |
| 6 | Calcule e restrinja o resíduo: $R^{(l+1)} = I_{2^{l-1}h}^{2^l h} [f^{(l)} - A_l(v^{(l)})]$ |
| 7 | Restrinja a solução: $\overline{v}^{(l+1)} = I_{2^{l-1}h}^{2^l h} v^{(l)}$ |
| 8 | Atualiza o lado direito $f^{(l+1)} = R^{(l+1)} + A_{l+1}\overline{v}^{(l+1)}$ |
| 9 | Resolva no próximo nível: MG-FAS ciclo $V(l+1)$ |
| 10 | Interpole a correção: $w^{(l)} = I_{2^l h}^{2^{l-1}h} w^{(l+1)}$ |
| 11 | Corrija a solução: $v^{(l)} \leftarrow v^{(l)} + w^{(l)}$ |
| 12 | Suavize ν_2 vezes $A_l(v^{(l)}) = f^{(l)}$ na malha $\Omega^{2^{l-1}h}$ |
| 13 | Calcule a correção: $w^{(l)} = v^{(l)} - \overline{v}^{(l)}$ |
| 14 | end |
| 15 e | nd |

2.5 Erro numérico e erro de discretização

O erro numérico (E) é a diferença entre a solução exata da equação diferencial e a solução aproximada obtida numericamente. De forma geral, pode ser expresso como

$$E(\phi) = \Phi - \phi, \tag{2.28}$$

onde $\Phi \in \phi$, são respectivamente, solução numérica e solução exata.

Diversas fontes contribuem para o erro numérico, sendo as principais: erro de truncamento (E_T) , erro de iteração (E_I) e erro de arredondamento (E_{π}) (FERZIGER; PERIC, 2002).

O erro de truncamento ocorre quando uma equação diferencial contínua é aproximada numericamente. Esse erro está associado à substituição de derivadas exatas por aproximações numéricas, geralmente utilizando séries de Taylor (ROACHE, 1998). Quanto menor o espaçamento da malha (h), menor o erro de truncamento, mas ele nunca é totalmente eliminado, exceto em problemas lineares.

O erro de discretização (E_h) é uma consequência direta do erro de truncamento, surgindo quando se aproxima uma equação diferencial contínua por uma formulação discreta. A análise da convergência da solução numérica geralmente se baseia na avaliação de E_h . Quando os erros de iteração (E_I) e arredondamento (E_{π}) são desprezíveis ou inexistentes, o erro de truncamento (E_T) é conhecido como erro de discretização (E_h)

(FERZIGER; PERIC, 2002).

A expansão em série de Taylor permite expressar o erro de discretização como uma soma de potências de h,

$$E_h = c_0 h^{p_0} + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + \dots = \sum_{V=0}^{\infty} c_V h^{p_V}, \qquad (2.29)$$

onde c_0, c_1, c_2, \ldots ordem dominante p_L . Como h tende a zero, o termo $c_0 h^{p_o}$ torna-se dominante em E_h , permitindo estimar a taxa de convergência do método numérico empregado. Os coeficientes c_0, c_1, \ldots são coeficientes reais dependentes da variável dependente e de suas derivadas, mas independentes de h. Os expoentes p_0, p_1, \ldots indicam as ordens verdadeiras de E_h , sendo p_0 a ordem dominante, chamada de ordem assintótica e aqui denotada por p_L .

Em gráficos bilogarítmicos de E_h versus h, a inclinação da reta reflete p_L . Estimar p_L permite prever como E_h se comporta com o refinamento da malha (h). A relação entre os erros em diferentes malhas pode ser expressa como

$$\frac{E_{h1}}{E_{h2}} = r^{p_L},\tag{2.30}$$

onde $r = \frac{h_1}{h_2}$ é a razão de refinamento e h_1 e h_2 são, respectivamente, os espaçamentos das malhas fina e grossa. Essa equação é usada para estimar *a posteriori* p_L e verificar se a solução numérica converge conforme esperado.

De outro modo, a análise *a posteriori* da ordem de convergência p_L da solução numérica pode ser realizada de duas formas distintas. Quando a solução analítica é conhecida, utiliza-se o cálculo da ordem efetiva (p_E) . No entanto, nos casos em que a solução analítica não está disponível, calcula-se a ordem aparente (p_U) , obtida a partir das soluções numéricas em diferentes níveis de refinamento da malha, dada por

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_1}\right)}{\log(r)},\tag{2.31}$$

onde $\phi_1, \phi_2 \in \phi_3$ representam as soluções numéricas obtidas, respectivamente, nas malhas Ω_{h1} (grossa), Ω_{h2} (fina) e Ω_{h3} (superfina). A partir dessas soluções, obtém-se p_U , que fornece uma estimativa da ordem assintótica (p_L) , ou seja, da taxa de convergência da solução numérica. Essa abordagem é particularmente útil quando a solução exata não está disponível, pois permite avaliar o comportamento do erro e a precisão do método numérico adotado, garantindo uma análise mais robusta da confiabilidade dos resultados.

Outro tipo de erro numérico envolvido na solução dos nossos problemas, é o erro de iteração (E_I) . Tal erro é a diferença entre a solução exata do sistema algébrico (ϕ_{ex}) e a solução numérica após n iterações (ϕ_n) :

$$E_I = \phi_{\rm ex} - \phi_n. \tag{2.32}$$

Esse erro ocorre devido ao uso de métodos iterativos para resolver sistemas algébricos, tratar com não linearidades ou resolver sistemas acoplados com múltiplas equações. Em geral, E_I diminui com o aumento do número de iterações, ou seja, $n \rightarrow \infty \implies E_I \rightarrow 0$. No entanto, a taxa de convergência do erro depende do método iterativo adotado e de suas características, como fator de relaxação ou critério de parada.

Além do erro de iteração, outro tipo de erro que afeta a precisão numérica é o erro de arredondamento E_{π} , que decorre da representação finita de números nos cálculos computacionais. Sua magnitude depende das características do *software* e do *hardware* utilizados. Maior precisão reduz E_{π} , mas aumenta os requisitos de memória e tempo computacional.

Segundo Silva *et al.* (2021), Rodrigues *et al.* (2022), entre todas as fontes de erro numérico, o erro de discretização é geralmente a mais significativo, portanto, neste trabalho vamos focar neste tipo de erro.

2.6 Estimativas para o erro de discretização

Quando a solução analítica exata Φ de um modelo matemático não é conhecida, o erro da solução numérica, ϕ , para uma variável de interesse não pode ser calculado diretamente. Nesses casos, uma estimativa para o erro, ou incerteza da solução numérica U, pode ser obtida. Essa incerteza é definida como a diferença entre a solução analítica estimada (ϕ_{∞}) e a solução numérica correspondente ϕ (CHAPRA; CANALE, 1994; MEHTA, 1996):

$$U(\phi) = \phi_{\infty} - \phi. \tag{2.33}$$

A estimativa do erro de discretização, ou incerteza da solução numérica, é fundamental para avaliar a precisão de métodos numéricos aplicados a equações diferenciais. Diferentes estratégias podem ser utilizadas para quantificar esse erro. Entre os principais estimadores utilizados estão o estimador Δ , o estimador de Richardson e o estimador ψ .

O estimador Δ baseia-se na diferença entre soluções numéricas obtidas em duas malhas distintas, $\Omega_{h_g} \in \Omega_{h_{g-1}}$. Para soluções $\phi_g \in \phi_{g-1}$, respectivamente, a incerteza da solução é calculada como (MARCHI *et al.*, 2016)

$$U_{\Delta}(\phi_g) = |\phi_g - \phi_{g-1}|, \qquad (2.34)$$

onde ϕ_g e ϕ_{g-1} são as soluções numéricas obtidas nas malhas fina Ω_{h_g} e grossa $\Omega_{h_{g-1}}$, respectivamente. Esse estimador fornece uma estimativa simples para o erro de discretização, como um intervalo em torno da solução ϕ_g , baseada apenas na diferença entre soluções de malhas adjacentes, sem incorporar a taxa de convergência esperada do método e a razão de refino entre as malhas.

Por outro lado, o estimador de Richardson fornece uma estimativa mais precisa do erro de discretização. Sua expressão é dada por (RODRIGUES *et al.*, 2022):

$$U_{Ri}(\phi_g) = \frac{\phi_g - \phi_{g-1}}{r^{p_L} - 1}.$$
(2.35)

O estimador de Richardson permite uma aproximação mais refinada do erro de discretização, pois incorpora a ordem assintótica do método (p_L) e a razão de refinamento da malha (r) em sua expressão. Esse estimador é amplamente utilizado na análise de erros de métodos numéricos.

O estimador ψ (MARTINS, 2013) utiliza a extrapolação de Richardson para fornecer uma estimativa mais precisa do erro de discretização, permitindo a obtenção de soluções com maior precisão ao eliminar ordens inferiores do erro, descrita por meio da série de Richardson:

$$R_{\infty} = \frac{1}{\psi} + \frac{1}{\psi^2} + \frac{1}{\psi^3} + \cdots, \qquad (2.36)$$

onde $\psi \in \mathbb{R}$ é denominado razão de convergência da série. Quando $|\psi| > 1$, a soma da série pode ser escrita como:

$$R_{\infty} = \frac{1}{\psi - 1}.\tag{2.37}$$

Admitindo $r \in P$ como números reais positivos, define-se $|\psi| = r^P$, e a soma da série é ajustada para:

$$R_{\infty} = \begin{cases} \frac{1}{r^{P} - 1}, & \text{se } \psi > 1\\ -\frac{1}{r^{P} + 1}, & \text{se } \psi < -1 \end{cases}.$$
 (2.38)

Substituindo $P = p_L$, a solução estimada ϕ_{∞} pode ser expressa como:

$$\phi_{\infty} = \phi_g + R_{\infty}(\phi_g - \phi_{g-1}).$$
(2.39)

Assim, a incerteza baseada no estimador ψ é dada por:

$$U_{\psi}(\phi_g) = \frac{\phi_g - \phi_{g-1}}{\psi - 1}.$$
(2.40)

Esses estimadores fornecem ferramentas úteis para avaliar e reduzir a incerteza associada às soluções numéricas, permitindo maior confiabilidade nos resultados obtidos em simulações computacionais.

2.7 Múltipla Extrapolação de Richardson

A Extrapolação de Richardson (ER) (BURDEN; FAIRES, 2016) é um método amplamente utilizado para reduzir o erro de discretização em simulações numéricas, especialmente quando esse erro pode ser previsto e expresso em função de um parâmetro, como o espaçamento nodal h. Esse método permite aumentar a precisão das soluções sem a necessidade de refinamento excessivo da malha, reduzindo, assim, o custo computacional e melhorando a eficiência dos cálculos.

Inicialmente, a ER foi proposta para combinar soluções numéricas de forma a obter uma solução com maior ordem de acurácia p_A , considerando parâmetros específicos, como $p_L = 2$, $p_1 = 4$ e razão de refino r = 2. Essa abordagem ficou conhecida como ER padrão. Posteriormente, o método foi generalizado para valores arbitrários desses parâmetros, sendo então denominado ER generalizada (OBERKAMPF; ROY, 2010).

A ER pode ser vista como um processo de pós-processamento aplicado a soluções numéricas $\phi(h)$ obtidas em diferentes malhas Ω_h , levando em conta a razão de refino $r = \frac{h_g}{h_{g+1}}$, onde g+1 e g indicam as malhas fina e grossa, respectivamente. A forma original da ER (RICHARDSON; GAUNT, 1927) é dada por:

$$\phi_{\infty} = \frac{h_g^2 \phi_{g+1} - h_{g+1}^2 \phi_g}{h_g^2 - h_{g+1}^2} + E(\phi_{\infty}), \qquad (2.41)$$

onde ϕ_{∞} é a solução analítica estimada, enquanto ϕ_{g+1} e ϕ_g são soluções numéricas nas malhas g + 1 e g, respectivamente. A generalização para qualquer ordem assintótica (p_L) e razão de refino (r) é expressa como:

$$\phi_{\infty} = \phi_{g+1} + \frac{\phi_{g+1} - \phi_g}{r^{p_L} - 1},$$
(2.42)

que é efetiva se as soluções numéricas contêm apenas erros de discretização.

A Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) estende o método tradicional ao aplicar sucessivamente a ER sobre soluções obtidas em diferentes malhas. Cada iteração reduz o erro residual e melhora a convergência da solução numérica. Esse procedimento iterativo permite alcançar ordens de precisão mais altas, sendo especialmente útil em problemas que exigem precisão extrema, com o objetivo de aumentar a ordem de acurácia do erro de discretização (E_h) . A abordagem recursiva é definida por (MARCHI *et al.*, 2016)

$$\phi_0(h_g) = \phi(h_g), \tag{2.43}$$

$$\phi_1(h_{g+1}) = \phi_0(h_{g+1}) + \frac{\phi_0(h_{g+1}) - \phi_0(h_g)}{r^{p_L} - 1}, \qquad (2.44)$$

onde g = 1, 2, ...

A generalização desse processo, apresentada por Marchi e Germer (2013), define a solução refinada $\phi_{q,m}$ por meio da combinação de múltiplas soluções em diferentes malhas.

A formulação geral para m níveis de extrapolação e g malhas Ω_h , onde m e g são números naturais não nulos, é dada por:

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{(m-1)}} - 1},$$
(2.45)

com m = 1, 2, ..., e g = m + 1, m + 2, ..., G malhas. Embora teoricamente possam ser realizadas iterações infinitas, na prática o número de malhas é limitado a G (inteiro positivo).

A Tab. 1 apresenta uma representação esquemática da aplicação da técnica de Múltipla Extrapolação de Richardson (MER). Observa-se que a estrutura recursiva, quando aplicada em múltiplos níveis, permite a obtenção de soluções $\phi_{G,G-1}$ com elevada precisão. Essa abordagem é implementada para $g = 3, \ldots, G$ e $m = 1, \ldots, \operatorname{Int}\left(\frac{g-2}{3}\right)$, conforme descrito na Eq. (2.46), onde $\operatorname{Int}(\gamma)$ representa a parte inteira do número real γ .

Cada linha da tabela representa um nível de discretização, enquanto as colunas indicam a progressão da extrapolação, evidenciando a evolução da precisão numérica com o aumento dos níveis de refinamento. Para m = 0, obtém-se a solução numérica ϕ sem qualquer extrapolação. Já para m = 1, é aplicado um nível de extrapolação; para m = 2, dois níveis de extrapolação; e assim por diante, até o valor máximo permitido para m na malha Ω_{h_g} , que é dado por m = G - 1. Teoricamente, $\phi_{G,G-1}$ apresenta o maior nível de acurácia entre todas as soluções $\phi_{g,m}$.

Supondo que o processo recursivo aumente progressivamente a ordem de precisão, a ordem aparente p_U do erro de discretização pode ser calculada a partir de:

$$(p_U)_{g,m} = \frac{\log\left(\frac{\phi_{g-1,m} - \phi_{g-2,m}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}\right)}{\log(r)}.$$
(2.46)

Como pode-se perceber, para calcular p_U , é necessário o uso de pelo menos três malhas. Isso ocorre porque, para cada valor obtido de $\phi_{m,g}$, são requeridas pelo menos três malhas distintas (g, g - 1, g - 2).

Nessa perspectiva, quando a solução analítica não é conhecida e, consequentemente, as ordens verdadeiras também não são conhecidas, o cálculo de MER, realizado por meio da Eq. (2.45), pode ser efetuado considerando os valores de $(p_U)_{g,m-1}$ em substituição a $p_{(m-1)}$.

As estimativas do erro de discretização são frequentemente realizadas com base em estimadores como por exemplo: Delta (Δ), Estimador de Richardson (U_{pm}) e Estimador Psi (U_{ψ}), que oferecem diferentes perspectivas sobre a magnitude do erro remanescente após a aplicação da MER.

O estimador Δ (MARCHI; SUERO; ARAKI, 2009), é utilizado para estimar o erro de discretização E_m após o emprego de MER com G malhas distintas (E_h com aplicação de MER). Ele fornece uma estimativa do erro na malha mais fina adotada por meio da

| m = 0 | | m = 1 | | m = 2 | ••• | m = G - 2 | | m = G - 1 | | |
|---|---------------|-------------------------|---------------|---------------|-------|-----------------------|---------------|----------------|--|--|
| $\phi_{1,0} = \phi_1$ | | | | | | | | | | |
| | \searrow | | | | | | | | | |
| $\phi_{2,0} = \phi_2$ | \rightarrow | $\phi_{2,1}$ | | | | | | | | |
| | | | \searrow | | | | | | | |
| $\phi_{20} = \phi_2$ | | <i>φ</i> _{2,1} | \rightarrow | $\phi_{2,2}$ | | | | | | |
| φ3,0 φ3 | | γ 3,1 | | φ 3,2 | | | | | | |
| : | | : | | ÷ | · | | | | | |
| $\phi_{G-1,0} = \phi_{G-1}$ | | ϕ_{G-11} | | ϕ_{G-12} | | ϕ_{C-1} $_{C-2}$ | | | | |
| 70-1,0 70-1 | | 70-1,1 | | 70-1,2 | | 70-1,0-2 | | | | |
| | | | | | | | \searrow | | | |
| $\phi_{G,0} = \phi_G$ | | $\phi_{G,1}$ | | $\phi_{G,2}$ | • • • | $\phi_{G,G-2}$ | \rightarrow | $\phi_{G,G-1}$ | | |
| | | , ,, <u>,</u> | A 1 | , ,,_ | 3.6 | , 2,0 2 | | ,, | | |
| Fonte: Adaptada de Martins (2013). | | | | | | | | | | |

TABELA 1 – Representação esquemática do emprego de MER.

expressão

$$U_{\Delta}(\phi_{G,m}) = |\phi_{G,m-1} - \phi_{G-1,m-1}|, \qquad (2.47)$$

onde m = G - 1 representa o último nível de extrapolação considerado e m - 1 é o nível imediatamente anterior. Assim, $U_{\Delta}(\phi_{G,m})$ fornece uma estimativa para E_m associada a $\phi_{G,m}$, considerando os valores $\phi_{G,m-1}$ e $\phi_{G-1,m-1}$.

Para as soluções obtidas com MER, é conhecida uma extensão do estimador de Richardson, dado por Marchi *et al.* (2013)

$$U_{pm}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}{r^{pm-1}},$$
(2.48)

onde g representa o nível de malha e m o nível de extrapolação, sendo válido para m = [0, G-2] e g = [m+2, G]. O estimador U_{pm} é aplicado às soluções obtidas com MER, sendo conhecido como estimador p_m (MARTINS, 2013).

Entretanto, o estimador U_{pm} não é adequado para estimar o erro de discretização associado a $\phi_M = \{\phi_{2,1}, \phi_{3,2}, \dots, \phi_{g,g-1}, \dots, \phi_{G,G-1}\}$. Ele é aplicado a soluções com um nível a menos de extrapolação, ou seja, m = g - 2, sendo o erro de discretização associado denotado por E_{m_2} . Para estimar E_m com base no estimador U_{pm} , utiliza-se a relação:

$$\frac{E_m}{E_{m_2}} = r^{pm},\tag{2.49}$$

e o estimador corrigido, denotado por U_{pmc} , é definido como:

$$U_{pmc}(\phi_{g,m}) = r_{pm} \cdot U^{pm}(\phi_{g+1,m}), \qquad (2.50)$$

onde m = g - 1. Devido à introdução do fator de correção r^{pm} , este estimador é denominado p_m corrigido.

O estimador ψ também pode ser empregado para estimar E_m . Este estimador é definido como:

$$U_{\psi}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi - 1}, \quad \text{com} \quad \psi = (\psi_M)_g = \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}, \tag{2.51}$$

onde g = 3, ..., G. Este estimador é eficaz somente se $|\psi| > 1$, condição que assegura a convergência de ϕ_M e a redução do erro de discretização.

Uma correção para o estimador ψ , denotada por ψ^* , é introduzida considerando a razão de convergência em três malhas consecutivas. A correção é descrita por (MARCHI, 2001)

$$\psi^* = \begin{cases} \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\phi_{g+1,m+1} - \phi_{g,m}}, & g = 2, 3, \dots, G - 1\\ \frac{(\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2})^2}{(\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1})(\phi_{g-2,m-2} - \phi_{g-3,m-3})}, & g = G \end{cases}$$
(2.52)

Com a determinação de ψ^* , a estimativa do erro numérico é realizada por:

$$U_{\psi^*}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi^* - 1}.$$
(2.53)

Essa abordagem corrige a ordem de convergência estimada e fornece uma estimativa mais robusta para o erro de discretização nas soluções obtidas por MER.

A MER é, portanto, uma ferramenta poderosa para a melhoria da precisão de soluções numéricas. No entanto, sua eficácia depende da natureza do erro de discretização e da escolha adequada dos parâmetros de refinamento. Em alguns casos, a presença de instabilidades numéricas pode limitar os benefícios da extrapolação, exigindo ajustes nos critérios de refinamento.

3 MODELOS MATEMÁTICO E NUMÉRICOS

Nesta seção, são apresentados o modelo matemático e os modelos numéricos empregados na formulação e resolução de um problema não linear de difusão de calor unidimensional em uma barra de silício, considerando condições de contorno relaxantes (condições de contorno convectiva). Inicialmente, descreve-se a equação diferencial parcial que governa o fenômeno físico, acompanhada das condições de contorno e iniciais associadas. Em seguida, são introduzidos os métodos de discretização utilizados para a aproximação numérica das soluções: o método de Newton, baseado no esquema de correção (CS); e o esquema de aproximação completa (FAS).

3.1 Modelo matemático

O modelo matemático adotado neste trabalho, considera uma barra de silício homogênea unidimensional com propriedades termofísicas dependentes da temperatura, com condições de contorno relaxantes (FILIPOV; FARAGó; AVDZHIEVA, 2022; ZEN; PINTO; FRANCO, 2024). Suponha tal barra de silício posicionada ao longo do eixo x, com $x \in [a, b]$, conforme Fig. 7, com sua temperatura ao longo do tempo representada por u(x, t), isolada lateralmente e em contato térmico com um reservatório preenchido com líquido a uma temperatura T(t). Neste material, a condutividade térmica κ é dependente da temperatura u(x, t), tornando o modelo matemático não linear.

FIGURA 7 – Esquema da barra de silício em contato com o reservatório térmico.



Fonte: Adaptação de Filipov, Faragó e Avdzhieva (2022)

Essa EDP parabólica descreve a evolução da temperatura em um meio, considerando os efeitos de difusão térmica e um possível termo fonte f (FILIPOV; FARAGó, 2018)

$$\rho c_p \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = f, \qquad (3.1)$$

onde u(x,t) é a temperatura na posição x e no instante $t \in [t_0, t_f]$, onde t_0 e t_f são os tempos inicial e final respectivamente, ρ é a densidade da barra de silício e c_p é a capacidade

térmica sob pressão constante. A distribuição de temperatura na barra no tempo inicial, t = 0, é dada por $u(x,0) = u_0(x), x \in [a,b]$. Nesta formulação, assume-se que ρ e c_p são constantes, enquanto a condutividade térmica $\kappa = \kappa(u)$ depende da temperatura.

Considerando que a temperatura inicial do tanque (Fig. 7), em t = 0, seja dada por T_0 e que a temperatura T_r do líquido de entrada for diferente de T_0 , a temperatura no tanque T(t) sofrerá variações ao longo do tempo. Essas mudanças decorrem da transferência convectiva de energia pelos tubos, conforme ilustrado na Fig. 7, onde o líquido com uma determinada densidade de energia substitui o líquido com uma densidade de energia diferente, alterando a energia total do tanque.

Sob essas condições, a temperatura na fronteira x = a, varia gradualmente, aumentando ou diminuindo ao longo do tempo até se aproximar de um valor finito. Utilizando a condição inicial T_0 , obtemos

$$T(t) = T_r + (T_0 - T_r)e^{-\frac{Q}{v}t},$$
(3.2)

onde Q e v representam, respectivamente, a taxa de fluxo do líquido de entrada e o volume do tanque. Observa-se que a temperatura desta fronteira evolui suavemente ao longo do tempo, convergindo para um valor finito de forma exponencialmente relaxante. Esta condição de contorno em x = a, denominada condição de contorno convectiva, equilibra o fluxo de energia resultante da condutividade térmica e do gradiente de temperatura na barra de silício com o fluxo de energia associado às propriedades de transporte do sistema líquido. Isso é expresso pela equação

$$-\kappa(u(a,t))\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\bigg|_{x=a} = c(T(t) - u(a,t)), \quad t > 0,$$
(3.3)

onde c é o coeficiente de transferência de calor convectivo. Essa condição é adequada para superfícies de contato sólido-líquido nas quais a convecção predomina na transferência de calor.

Nesse tipo de condição de contorno, a temperatura na superfície u(a, t) difere da temperatura T(t) no interior do tanque. Conforme mostrado na Eq. (3.2), à medida que o tempo avança, T(t) se aproxima do valor constante T_r . Por esse motivo, a Eq. (3.3) é denominada condição de contorno relaxante por convecção (FILIPOV; FARAGó, 2018).

Para o contorno direito, em x = b, impõe-se uma condição de contorno de Dirichlet

$$u(b,t) = \beta, \quad t > 0, \tag{3.4}$$

onde β é uma constante.

3.2 Modelos numéricos

Como já visto na seção 2.4, o esquema de correção (CS), utiliza apenas o resíduo no processo de correção e é indicado para problemas lineares, e o esquema de aproximação completa (FAS), mais adequado para problemas não lineares, emprega tanto o resíduo quanto a solução aproximada em sua estratégia de correção (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001). No contexto de problemas não lineares, os modelos numéricos adotados nesse trabalho baseiam-se nessas duas abordagens (HENSON, 2003): a primeira usa o esquema FAS para incorporar diretamente a não linearidade dentro do conceito do método *multigrid*. A segunda abordagem consiste em realizar uma linearização global, seguida da aplicação do esquema CS do *multigrid* para resolver os problemas linearizados. Para ambos os métodos, é necessário discretizar a equação de difusão do calor não linear transiente, expressa na Eq. (3.1), utilizando o Método das Diferenças Finitas (MDF), com esquema de diferenças centradas para aproximações espaciais e o método semi-implícito de Crank-Nicolson para aproximação temporal.

Agora será detalhada a primeira abordagem numérica adotada neste trabalho, que é baseada no esquema FAS.

Partindo da Eq. (3.1) ao isolar o termo de condutividade térmica κ , que depende da temperatura u, aplicando a regra do produto e considerando f = 0, obtem-se

$$\rho c_p \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial k(u)}{\partial u} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + k(u) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$
(3.5)

Em Filipov e Faragó (2018), foi considerado

$$k(u) = k_0 e^{\chi u},\tag{3.6}$$

onde κ_0 é a condutividade térmica do meio e χ constante usada para a distribuição da temperatura.

Como $\frac{\partial k(u)}{\partial u} = k_0 \chi e^{\chi u} = \chi k(u)$, podemos reescrever a Eq. (3.5) da seguinte forma

$$\rho c_p \frac{\partial u}{\partial t} = \chi k(u) \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + k(u) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$
(3.7)

A discretização espacial é realizada usando MDF, utilizando o esquema de Diferenças Centrais (CDS), que apresenta precisão de segunda ordem. Para isso, considerase o espaçamento uniforme $h = \frac{L}{N_x-1}$, onde L = b - a representa o comprimento da barra e N_x é o número total de pontos nodais na malha espacial.

A aproximação temporal é realizada pelo método de Crank-Nicolson (CN), um esquema semi-implícito que combina soluções em dois passos de tempo distintos, garantindo maior estabilidade numérica e precisão de segunda ordem. O passo temporal é definido por $\Delta t = \frac{t_f}{N_t}$, onde t_f é o tempo final da simulação e N_t é o número total de passos de tempo. A partir dessas definições, temos

$$\rho c_p \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} = \frac{1}{2} \left[\chi k(u_i^{n+1}) \left(\frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2h} \right)^2 + k(u_i^{n+1}) \frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{h^2} \right] + \frac{1}{2} \left[\chi k(u_i^n) \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2h} \right)^2 + k(u_i^n) \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{h^2} \right],$$
(3.8)

onde u_i^n representa a temperatura no ponto i e no instante de tempo n.

Reorganizando

$$\rho c_p \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} = \frac{\chi k(u_i^{n+1})}{8h^2} (u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1})^2 + \frac{k(u_i^{n+1})}{2h^2} (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}) + \frac{\chi k(u_i^n)}{8h^2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)^2 + \frac{k(u_i^n)}{2h^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n).$$
(3.9)

Simplificando ainda mais:

$$\rho c_p \frac{u_i^{n+1}}{\tau} + \frac{2k(u_i^{n+1})}{h^2} u_i^{n+1} = \frac{\chi k(u_i^{n+1})}{8h^2} (u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1})^2 + \frac{k(u_i^{n+1})}{2h^2} (u_{i-1}^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}) \\
+ \frac{\chi k(u_i^n)}{8h^2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)^2 + \frac{k(u_i^n)}{2h^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) + \rho c_p \frac{u_i^n}{\tau}.$$
(3.10)

Definindo os coeficientes auxiliares:

$$a_w = \frac{1}{2h^2},\tag{3.11}$$

$$a_{w2} = \frac{\chi}{8h^2} = 0.25\chi a_w, \tag{3.12}$$

$$a_p = \frac{\rho c_p}{\tau},\tag{3.13}$$

obtemos a forma final da equação:

$$a_{p} + 2a_{w}k(u_{i}^{n+1})u_{i}^{n+1} = a_{w2}k(u_{i}^{n+1})(u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}) + a_{w}k(u_{i}^{n+1})(u_{i-1}^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}) + a_{w2}k(u_{i}^{n})(u_{i+1}^{n} - u_{i-1}^{n}) + a_{w}k(u_{i}^{n})(u_{i-1}^{n} - 2u_{i}^{n} + u_{i+1}^{n}) + a_{p}u_{i}^{n}.$$
(3.14)

O contorno esquerdo, em x = a, atende à condição de contorno relaxante, dada por

$$-k(u(a,t))\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=a} = c(T(t) - u(a,t)), \quad t > 0.$$
(3.15)

Considerando a aproximação central de segunda ordem no Método das Diferenças Finitas (MDF), no ponto i = 1 (x = a), temos:

$$-k(u_i^{n+1})\frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2h} = c(T(t) - u_i^{n+1}),$$
(3.16)

ou

$$-k(u_1^{n+1})\frac{u_2^{n+1} - u_0^{n+1}}{2h} = c(T(t) - u_1^{n+1}), \qquad (3.17)$$

assim,

$$u_0^{n+1} = u_2^{n+1} + \frac{2hc\left(T(t) - u_1^{n+1}\right)}{k(u_1^{n+1})},$$
(3.18)

е

$$u_0^n = u_2^n + \frac{2hc\left(T(t-\tau) - u_1^n\right)}{k(u_1^n)}.$$
(3.19)

Calculando $u_0^{n+1} \in u_0^n$ dados nas Eq. (3.18)
e Eq. (3.19) e substituindo na Eq. (3.14) para i = 1, temos:

$$a_{p} + 2a_{w}k(u_{1}^{n+1})u_{1}^{n+1} = a_{w2}k(u_{1}^{n+1})\frac{u_{2}^{n+1} - u_{0}^{n+1}}{2} + a_{w}k(u_{1}^{n+1})(u_{0}^{n+1} + u_{2}^{n+1}) + a_{w2}k(u_{1}^{n})\frac{u_{2}^{n} - u_{0}^{n}}{2} + a_{w}k(u_{1}^{n})(u_{0}^{n} - 2u_{1}^{n} + u_{2}^{n}) + a_{p}u_{1}^{n}.$$
(3.20)

Para o método FAS, $k(u_i^n) \in k(u_i^{n+1})$ são calculados com base nas estimativas de *u* obtidas na iteração anterior. Essas estimativas são utilizadas para aprimorar a solução ao longo das iterações, garantindo uma melhor convergência do método.

Para a outra abordagem numérica, propomos a utilização da linearização de Newton e, portanto, adotaremos o esquema de correção (CS).

Partindo da Eq. (3.9), este sistema não linear será resolvido numericamente pelo método de Newton. Para isso, introduzimos o vetor $\mathbf{G}^n = [G_1^n, \cdots, G_i^n, \cdots, G_{N_x}^n]^T$,

 $1 \leq n \leq N_t$, definido por

$$\begin{cases} G_1^n = \rho c_p \frac{1}{\tau} (u_1^n - u_1^{n-1}) - \frac{\chi c^2 (T^n - u_1^n)^2}{2\kappa (u_1^n)} - \frac{\kappa (u_1^n)}{h^2} (u_2^n - u_1^n) - \frac{c (T^n - u_1^n)}{h}, \\ G_i^n = \rho c_p \frac{1}{\tau} (u_i^n - u_i^{n-1}) - \frac{\kappa (u_i^n)}{2h^2} \left[\frac{\chi}{4} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)^2 + u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n \right], \quad 2 \le i \le N_x - 1 \\ G_{n_x}^n = u_{n_x}^n - \beta. \end{cases}$$

$$(3.21)$$

onde n representa o passo de tempo atual.

O sistema não linear completo pode ser reescrito como $\mathbf{G}^n(\mathbf{u}^n) = 0$, onde $\mathbf{u}^n = [u_1^n, \cdots, u_i^n, \cdots, u_{N_x}^n]^T$, $1 \le n \le N_t$ e **0** é o vetor nulo de dimensão N_x . As iterações de Newton são então definidas, a partir de uma estimativa inicial $\mathbf{u}^{n,0}$ como

$$\mathbf{u}^{n,\nu+1} = \mathbf{u}^{n,\nu} - (\mathbf{J}^{n,\nu})^{-1} \mathbf{G}^{n,\nu}(\mathbf{u}^{n,\nu}), \quad \mathbf{J}^{n,\nu} = \frac{\partial \mathbf{G}^{n}}{\partial \mathbf{u}^{n}}(\mathbf{u}^{n,\nu}), \quad \nu \ge 0, \quad 1 \le n \le N_{t}, \quad (3.22)$$

onde ν representa o passo da linearização e **J** é a matriz Jacobiana.

Definindo $\mathbf{u}^{n,\nu+1} - \mathbf{u}^{n,\nu} = \mathbf{e}^{n,\nu+1}$ e multiplicando ambos os lados por $\mathbf{J}^{n,\nu}$, temos:

$$\mathbf{J}^{n,\nu}\mathbf{e}^{n,\nu+1} = -\mathbf{G}^{n,\nu}(\mathbf{u}^{n,\nu}).$$
(3.23)

Nota-se que, dessa forma, evita-se a necessidade do cálculo direto da inversa da matriz Jacobiana, o que torna o método computacionalmente mais eficiente e estável, especialmente em sistemas de grande porte.

Os coeficientes não nulos da matriz jacobian
a $\mathbf{J}^{n,\nu},$ válidos para $1\leq n\leq N_t$ e $\nu\geq 0,$ são

$$\begin{cases} J_{i,i-1}^{n,\nu} = \frac{\kappa(u_i^{n,\nu})}{2h^2} \left(\frac{\chi}{2} (u_{i+1}^{n,\nu} - u_{i-1}^{n,\nu}) - 1 \right), & 2 \le i \le N_x - 1, \\ J_{i,i}^{n,\nu} = \frac{\kappa(u_i^{n,\nu})}{2h^2} \left(2 - \chi(u_{i+1}^{n,\nu} - 2u_i^{n,\nu} + u_{i-1}^{n,\nu}) + \frac{\chi}{4} (u_{i+1}^{n,\nu} - u_{i-1}^{n,\nu})^2 \right) + \frac{\rho c_p}{\tau}, & 2 \le i \le N_x - 1, \\ J_{i,i+1}^{n,\nu} = -\frac{\kappa(u_i^{n,\nu})}{2h^2} \left(\frac{\chi}{2} (u_{i+1}^{n,\nu} - u_{i-1}^{n,\nu}) + 1 \right), & 2 \le i \le N_x - 1. \end{cases}$$

$$(3.24)$$

Enquanto que para i = 1, tem-se

$$\begin{cases} J_{1,1}^{n,\nu} = \frac{\rho c_p}{\tau} + \frac{c}{h} + \frac{\chi c(T^n - u_1^{n,\nu})}{\kappa(u_1^{n,\nu})} \left(c + \frac{\chi c(T^n - u_1^{n,\nu})}{2}\right) + \frac{\kappa(u_1^{n,\nu})}{h^2} \left(1 - \chi(u_2^{n,\nu} - u_1^{n,\nu})\right), \\ J_{1,2}^{n,\nu} = -\frac{\kappa(u_1^{n,\nu})}{h^2}, \end{cases}$$
(3.25)

e para $i = N_x$, tem-se:

$$J_{N_x,N_x}^{n,\nu} = 1. (3.26)$$

Definimos a estimativa inicial como $\mathbf{u}^{n,0} = \mathbf{u}^{n-1,\nu_c}$, onde \mathbf{u}^{n-1,ν_c} é a solução do passo de tempo anterior convergida após ν_c passos de linearização de Newton. Quando n = 1 e $\nu = 0$, utiliza-se a condição inicial dada por $u(x,0) = u_0(x), x \in [a,b]$.

4 MÉTODOS DE VARREDURAS NO TEMPO

Nesta seção, são apresentados os métodos de varreduras no tempo empregados para a resolução numérica do modelo transiente. Esses métodos são fundamentais para a integração temporal de EDPs, especialmente em problemas com dependência temporal significativa. Serão abordadas duas técnicas amplamente utilizadas na literatura: a varredura tradicional no tempo, denominada *Time-Stepping* (TS), e a abordagem de Relaxação por Formas de Onda, conhecida como *Waveform Relaxation* (WR).

4.1 Time-Stepping

O método Time-Stepping (TS) é um dos mais antigos e amplamente utilizados para a resolução de problemas transientes (VANDEWALLE; HORTON, 1993; LENT, 2006; FALGOUT et al., 2017). Esse método transforma uma equação diferencial parcial parabólica em uma sequência de equações elípticas estacionárias a cada passo de tempo, facilitando a solução numérica. Ele consiste em resolver espacialmente o sistema de equações discretizado em cada passo de tempo, até que se atinja o tempo final. Para isso, é usado a solução do passo de tempo anterior n como estimativa inicial para resolver o sistema de equações correspondente no passo de tempo atual n + 1, conforme presente em Vandewalle e Horton (1993) e apresentado na Fig. 8 para um caso bidimensional. Dessa forma, o método TS discretiza o tempo e resolve o sistema de equações em cada instante t_n . Essa abordagem permite o uso de técnicas eficientes de solução para cada um desses problemas elípticos, como o método multigrid, que acelera a convergência da solução em cada passo (TANNEHILL; ANDERSON; PLETCHER, 1997; LENT, 2006).





Fonte: (MALACARNE; PINTO; FRANCO, 2022b)

A implementação do TS segue uma estrutura de laço duplo: um laço externo que percorre os passos de tempo n até N_t , e um laço interno que varre as variáveis espaciais (índices i,j). Em cada iteração, o sistema de equações resultante do passo n + 1 é suavizado até atingir um critério de convergência adequado. Neste trabalho, a implementação do método TS será realizada utilizando o método *multigrid*, no qual diferentes níveis de malha são empregados para acelerar a convergência da solução. Essa estratégia será detalhada no Alg. 3.

| Algoritmo 3: Time-Stepping - multigrid |
|---|
| 1 Entre com os dados de entrada, condição inicial e condições de contornos. |
| 2 for $n = 1 : N_t$ do |
| 3 while Não alcançar algum critério de parada do |
| 4 Um ciclo multigrid com MG-CS ciclo $V(1)$ |
| 5 end |
| 6 end |
| |

4.2 Waveform Relaxation

O método de relaxação de forma de onda (*Waveform Relaxation*, WR), também conhecido como método de iteração dinâmica, é um esquema iterativo contínuo no tempo amplamente utilizado para resolver grandes sistemas de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs). Seu princípio básico consiste em resolver cada equação diferencial de forma independente ao longo do tempo, permitindo a decomposição do problema em subproblemas menores e facilitando a implementação paralela.

Suas primeiras pesquisas foram apontadas por Lelarasmee, Ruehli e Vincentelli (1982), Lubich e Ostermann (1987), Vandewalle e Piessens (1991) e estudadas em detalhes para diferentes problemas (VANDEWALLE; PIESSENS, 1992; VANDEWALLE; HORTON, 1993; TA-ASAN; ZHANG, 1995; FRANCO *et al.*, 2018b; SANTIAGO *et al.*, 2023; MALACARNE; PINTO; FRANCO, 2022b; MALACARNE; PINTO; FRANCO, 2024).

Além de sua aplicação em EDOs, o método WR também pode ser estendido para Equações Diferenciais Parciais (EDPs) dependentes do tempo. Inicialmente, é realizada uma discretização somente espacial do problema, transformando uma EDP em um conjunto de EDOs. Nessa abordagem, o domínio espacial é decomposto em um conjunto de pontos, e para cada um deles, uma EDO é resolvida em todos os instantes de tempo, permitindo a paralelização de algoritmos para EDPs transitórias, como apresentado na Fig. 9 para um caso bidimensional.

Conforme apresentado em Vandewalle e Horton (1995), a principal característica do método WR é a conversão de EDPs em um sistema de EDOs, descrito pela equação



FIGURA 9 – Esquema Waveform Relaxation bidimensional.

Fonte: (MALACARNE; PINTO; FRANCO, 2024)

$$\frac{d^2 v_i}{dt^2} = G_i(v_i, t), \tag{4.1}$$

onde G_i representa funções ou vetores que contêm informações temporais para cada coordenada espacial *i*, calculadas a partir dos valores $\mathbf{v}_i = (v_1, v_2, v_3, \ldots, v_{N_x})$. Dessa forma, para cada nó, x_i da discretização espacial, uma EDO temporal é resolvida de maneira independente até o tempo final. Cada componente do sistema, conforme indicado na Eq. (4.1), pode ser expresso como:

$$\begin{cases} \frac{d^2 v_1}{dt^2} = G_1(v_1, v_2, v_3, \dots, v_{N_x}, t), & v_1(0) = v_1^0, & \frac{dv_1}{dt} = g_1^0, \\ \frac{d^2 v_2}{dt^2} = G_2(v_1, v_2, v_3, \dots, v_{N_x}, t), & v_2(0) = v_2^0, & \frac{dv_2}{dt} = g_2^0, \\ \vdots \\ \frac{d^2 v_{N_x}}{dt^2} = G_{N_x}(v_1, v_2, v_3, \dots, v_{N_x}, t), & v_{N_x}(0) = v_{N_x}^0, & \frac{dv_{N_x}}{dx} = g_{N_x}^0. \end{cases}$$

$$(4.2)$$

Aqui, N_x representa a dimensão do sistema, enquanto $v_i(0) = v_i^0 e \frac{dv_i}{dt} = g_i^0$, para $1 \le i \le N_x$, correspondem às condições iniciais e velocidades associadas a cada ponto da discretização espacial. Cada equação do sistema Eq. (4.2) pode ser resolvida individualmente, utilizando um núcleo de processamento dedicado para cada linha temporal, como ilustrado na Fig. 10 para $N_x = 12$.

Cada EDO temporal pode ser resolvida de maneira independente em todos os nós espaciais, permitindo que a atualização das variáveis desconhecidas ocorra ao final de um ciclo WR. Dessa forma, o método é iterativo e repete esse procedimento até que um critério de convergência seja satisfeito. Além disso, a abordagem pode ser completamente paralelizável no espaço ao utilizar esquemas de ordenamento colorido, como o método Gauss-Seidel *Red-Black* (GSRB) (MALACARNE; PINTO; FRANCO, 2022b).



A combinação do método WR com o método *multigrid* também é viável, aplicando o refinamento apenas na direção espacial, visto que WR é contínuo no tempo. Assim, o número de pontos de discretização temporal permanece constante (FALGOUT *et al.*, 2017). Por exemplo, para uma grade fina Ω^h com $N_x \times N_t = 33 \times 33$ pontos, as malhas mais grossas, obtidas com taxa de refinamento r = 2, são Ω^{2h} , Ω^{4h} , Ω^{8h} e Ω^{16h} , contendo respectivamente 17×33 , 9×33 , 5×33 e 3×33 pontos. Em seguida, um ciclo *multigrid* é aplicado a todos os pontos espaciais ao longo dos passos de tempo.

O Alg. 5 apresenta a estrutura do WR com *multigrid* para a solução do sistema $A^{h}(t)\mathbf{v}^{h}(t) = f^{h}(t)$, conforme adaptado de Franco *et al.* (2018b).

A convergência do método WR foi estudada por Miekkala e Nevanlinna (1996), que demonstraram que sua taxa de convergência pode ser lenta para EDPs do tipo parabólico, como a equação do calor. Isso ocorre devido à propagação lenta da informação dentro da malha, resultando em um erro que não é dissipado rapidamente entre os pontos espaciais.

A dificuldade do WR em corrigir rapidamente tais erros no interior da malha pode ser solucionada pela combinação com métodos *multigrid* acelerando a dissipação do erro ao longo da malha ao permitir a transferência de informações entre diferentes níveis de refinamento. Esse acoplamento cria um método híbrido que combina a eficiência paralela do WR com a rápida convergência do *multigrid*, resultando em um algoritmo mais robusto e escalável para grandes domínios espaciais (HACKBUSCH, 1985; LUBICH; OSTERMANN, 1987; VANDEWALLE; VELDE, 1994). Isso torna o método WR uma técnica poderosa para lidar com sistemas de EDOs de grande porte. Para uma visão mais completa dos métodos paralelos no tempo, veja Vandewalle e Piessens (1991), Janssen (1997), Gander (2015), Franco *et al.* (2018b), Hu, Rodrigo e Gaspar (2020).

Os algoritmos Alg. 4 e Alg. 5 apresentam o esquema WR para os casos singlegrid e multigrid, respectivamente. Nota-se que é realizado um laço externo para as iterações η , um laço intermediário para percorrer os pontos da discretização espacial h e por fim, um laço interno para os passos de tempo n.

Algoritmo 4: Waveform Relaxation - singlegrid

| 1 | Entre com os dados de entrada, condição inicial e condições de contornos. |
|----------|---|
| 2 | while Não alcançar algum critério de parada do |
| 3 | $\mathbf{for} \ i = 1: N_x \ \mathbf{do}$ |
| 4 | Resolva a EDO discretizada correspondente à posição espacial i do sistema |
| | de equações. |
| 5 | end |
| 6 | end |

Algoritmo 5: Waveform Relaxation - multigrid

1 Entre com os dados de entrada, condição inicial e condições de contornos.

- 2 while Não alcançar algum critério de parada do
- Um ciclo multigrid com MG-FAS ciclo V(l) considerando engrossamento apenas no espaço em todos os passos de tempo. Para o processo de suavização, em cada nível de malha use o método descrito no Alg. 4

4 end

5 RESULTADOS

Este capítulo tem como objetivo apresentar os resultados das simulações numéricas realizadas com os métodos *Time-Stepping* com Newton-MG (TS Newton-MG) e *Waveform Relaxation* com *Full Approximation Scheme*, WR FAS, aplicados à equação do calor não linear unidimensional. Os problemas abordados foram detalhados no Capítulo 3, enquanto os métodos de solução foram descritos no Capítulo 4.

Para a análise dos resultados, consideraram-se diversos critérios, tais como o número médio de linearizações (it_{Lin}), o número médio de ciclos V(1,1) considerando todas as linearizações e todos os passos de tempo (\overline{it}_{MG}), o fator de convergência médio (ρ_m), a ordem de complexidade (p), o speed-up (S), o tempo de processamento (t_{CPU}), análise de erros e estimadores de erros para os métodos TS Newton-MG e WR FAS.

Os resultados apresentados foram obtidos utilizando os métodos singlegrid e multigrid com os esquemas TS Newton-MG e WR FAS, ambos com ciclo V(1,1) ($\nu_1 = \nu_2 = 1$), razão de engrossamento padrão (re = 2), suavizador Gauss-Seidel Red-Black, operador de restrição por ponderação completa e operador de prolongação por interpolação linear, precisão dupla para as simulações que envolvem t_{CPU} e quádrupla para as simulações que envolvem a análise de erros, e o critério de parada até atingir a tolerância estabelecida. Além disso, foram apresentados graficamente os resultados de cada critério analisado, a fim de permitir uma avaliação mais clara e precisa da robustez e eficiência dos métodos empregados.

Neste trabalho, comparam-se diferentes valores de condutividade térmica de referência (κ_0) e coeficiente de dependência de temperatura (χ) com o objetivo de avaliar a eficiência dos métodos propostos sob diversas combinações de parâmetros, ou seja, demonstrar sua robustez e a adaptabilidade, considerando sua aplicabilidade em contextos fisicamente realistas. Em relação ao trabalho de Filipov, Faragó e Avdzhieva (2022), as combinações aqui estudadas foram ampliadas, com variações mais abrangentes nos parâmetros analisados. A Tabela 2 apresenta as combinações utilizadas ao longo do corpo do texto, as demais combinações entre os casos de estão reunidas no Apêndice A.

| Caso | κ_0 | χ | | | |
|------|------------|----------|--|--|--|
| 1 | 0,1 | $0,\!5$ | | | |
| 2 | 0,1 | 2,0 | | | |
| 3 | 10,0 | 0,5 | | | |
| 4 | $10,\!0$ | 2,0 | | | |

TABELA 2 – Combinações de valores para $\kappa_0 \in \chi$

5.1 Verificação do código

Para verificar o código implementado, comparam-se os resultados numéricos obtidos com aqueles apresentados no estudo de Filipov e Faragó (2018). Uma haste homogênea fina será considerada ao longo do eixo x entre os pontos x = 1 e x = 3, sem fontes de calor e sem radiação. A densidade (ρ) e capacidade calorífica (c_p) são consideradas constantes unitárias. Além disso, consideraram-se os seguintes valores adicionais: c = 0,1(coeficiente médio de transferência de calor), $\kappa_0 = 0,1$ (condutividade térmica do silício) e $\chi = 0,5$ (coeficiente de dependência de temperatura). As condições de contorno, do tipo Dirichlet, serão dadas por u(1,t) = 2 e u(3,t) = 1, t > 0. A condição inicial foi definida como

$$u(x,0) = 2,0 - 0,5(x - 1,0) + (x - 1,0)(x - 3,0),$$
(5.1)

enquanto as estimativas para os pontos internos foram calculadas para t > 0. Essas configurações foram escolhidas com base nas condições do problema e no estudo prévio realizado pelos autores referenciados. As simulações foram implementadas em Fortran, compiladas no ambiente Visual Studio 2022 da Microsoft e executadas em um sistema com processador Intel[®] CoreTM i7 - 10510U, com CPU *Central Processing Unit* operando a 1,80 GHz e 16 GB de memória RAM.

Para as linearizações, empregou-se o método de Newton *multigrid*, adotando um critério de parada baseado na diferença entre os valores das soluções consecutivas ao longo do processo iterativo. Esse critério é definido pela seguinte expressão:

$$\sqrt{h} ||u(it_{Lin}) - u(it_{Lin} - 1)||_2 \le \varepsilon_1, \tag{5.2}$$

onde $||.||_2$ representa a norma euclidiana, $u(it_{Lin})$ é o valor de u no passo de linearização it_{Lin} , e ε_1 é o critério de tolerância adotado.

O critério de parada para os ciclos do método *multigrid* foi baseado no resíduo adimensionalizado em relação ao resíduo da estimativa inicial. Esse critério é descrito pela equação:

$$\frac{||r(it_{MG})||_{\infty}}{||r(0)||_{\infty}} < \varepsilon_2, \tag{5.3}$$

onde $||.||_{\infty}$ denota a norma infinito, $r(it_{MG})$ é o resíduo na estimativa it_{MG} , r(0) é o resíduo correspondente à estimativa inicial, e ε_2 é o critério de tolerância adotado.

Nesta seção, os parâmetros ε_1 e ε_2 foram configurados para valores suficientemente pequenos, permitindo que o erro atingisse o limite imposto pelo erro de máquina reduzindo ao máximo os erros de iteração e de arredondamento.

O primeiro teste realizado foi a análise comparativa entre as soluções numéricas obtidas neste trabalho e os resultados apresentados por Filipov e Faragó (2018). Para essa análise, foram considerados diferentes tempos finais, variando de $t_f = 1,0$ s a $t_f = 15,0$ s. As comparações foram realizadas utilizando os parâmetros definidos em Filipov e Faragó (2018), incluindo uma malha espacial composta por $N_x = 31$ pontos e uma malha temporal com $N_t = 41$ pontos. Além disso, foram mantidos os valores das constantes apresentadas no Caso 1 da Tab. 2 usando-se *multigrid* (MG-Caso1), assegurando consistência com as condições originais do problema.

Com base na análise ilustrada na Fig. 11, observa-se que a temperatura u varia significativamente ao longo do tempo para tempos finais próximos de $t_f = 1,0$ s, evidenciando que o sistema encontra-se em regime transiente. Com o aumento de t_f , observa-se uma redução progressiva dessas variações até que, em $t_f = 15,0$ s, há ínfima variação de temperatura u com relação ao tempo, o que indica que o sistema está muito próximo de atingir o regime permanente.



FIGURA 11 – Solução para diversos tempos finais

Fonte: A Autora (2025)

Como um dos objetivos desse trabalho é a análise de desempenho de diversas varreduras no tempo, para nossas simulações, adota-se o valor de $t_f = 2,0$ s, onde o processo encontra-se nitidamente regime transiente.

As simulações foram conduzidas em um domínio de comprimento L = 2,0, utilizando uma malha com $N_x = N_t$, onde N_x e N_t representam, respectivamente, o número de pontos no domínio espacial e no domínio temporal.

O principal objetivo desta análise foi verificar o código desenvolvido, e isto foi comprovado por meio da Fig. 12, onde comparou-se os resultados deste trabalho com os resultados fornecidos por Filipov e Faragó (2018). Nota-se que os resultados são consistentes e satisfatórios.



FIGURA 12 – Comparação dos métodos TS Newton-MG e WR FAS com a solução de Filipov e Faragó (2018) para $t_f=2,0~{\rm s}.$

Apesar de visualmente o gráfico não permitir distinguir claramente as curvas das soluções numéricas, uma análise utilizando-se norma infinito revela diferenças quantitativas importantes. Definindo-se

$$\|u_{\text{Filipov}} - u_{\text{WR-FAS}}\|_{\infty} = 2 \times 10^{-5}$$

confirma-se a alta precisão dos métodos numéricos avaliados, onde u_{Filipov} e $u_{\text{WR-FAS}}$ são, respectivamente, as soluções apresentadas em Filipov, Faragó e Avdzhieva (2022) e no presente trabalho.

Após a definição do t_f que melhor representa o problema e a verificação da solução com os resultados da literatura (FILIPOV; FARAGó, 2018), a próxima etapa do trabalho será o estudo dos métodos numéricos utilizando o método *multigrid* em conjunto com as estratégias TS Newton-MG e WR FAS objetivando avaliar sua eficiência e robustez, além de e apresentar uma análise de erros relacionada a tais abordagens utilizadas.

Para tanto, optou-se por aprofundar a análise considerando os estudos de Filipov, Faragó e Avdzhieva (2022). Nesse trabalho, os autores usam uma variação na condição de contorno, considerando uma condição de contorno convectiva (condição de contorno relaxante) dada pela Eq. (3.3), o que torna o problema mais realista ao modelar com maior precisão a transferência de calor na barra de silício. Essa adaptação permitirá investigar o desempenho dos métodos numéricos em um cenário mais próximo das aplicações práticas.

5.2 Time-Stepping Newton-MG

O método *Time-Stepping* (TS) utiliza a solução obtida no passo de tempo anterior como estimativa inicial para o próximo passo de tempo, resolvendo o sistema de equações a cada instante t_n . Uma de suas principais vantagens é a transformação da equação diferencial parabólica em uma sequência de equações diferenciais elípticas, ou seja em um problema estacionário a cada passo de tempo, o que possibilita o uso eficiente de técnicas numéricas avançadas, como o método *multigrid*. Como o método *multigrid* CS tem eficiência comprovada na resolução desse tipo de equação, ele reduz significativamente o número de iterações necessárias para a convergência (TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001), otimizando o desempenho computacional e tornando a solução do sistema mais eficiente.

O método Newton-MG é amplamente empregado na solução de sistemas de equações não lineares em problemas complexos. Sua abordagem baseia-se na técnica de linearização, que transforma equações não lineares em um conjunto de equações lineares, permitindo sua resolução eficiente pelo método *multigrid* CS. Como o *multigrid* CS é especialmente adequado para sistemas lineares, a combinação dessas técnicas melhora significativamente a eficiência computacional. Porém, o número de linearizações necessárias para obter a solução influencia diretamente o desempenho do método e a precisão da solução, pois cada etapa de linearização adiciona um custo computacional relevante.

A integração entre o TS e o método de Newton-MG é estratégica para a resolução eficiente de equações diferenciais parabólicas não lineares. Como já foi dito, o método TS reformula o problema parabólico em cada espaço de tempo, tornando-o elíptico, enquanto o método de Newton-MG lineariza as equações resultantes. Como o método *multigrid* acelera a solução de sistemas lineares, melhora a convergência e garante maior precisão e desempenho na solução do problema.

Os testes apresentados nesta seção foram realizados considerando os parâmetros listados na Tab. 2. Resultados adicionais, incluindo planilhas e gráficos que exploram diferentes combinações de κ_0 e χ , estão disponíveis no Apêndice A.

5.2.1 Número médio de linearizações

O número médio de linearizações (it_{Lin}) necessárias para resolver os sistemas gerados pelo método de Newton-MG foi determinado como a média das linearizações realizadas em cada passo de tempo, conforme a equação

$$\overline{it}_{Lin} = \sum_{t=1}^{N_t} \frac{it_{Lin}(t)}{N_t}.$$
(5.4)

O critério de parada para as linearizações foi estabelecido pela Eq. (5.2), adotandose $\varepsilon_1 = 10^{-8}$. Para os ciclos no método *multigrid*, o critério de parada foi estabelecido pela Eq. (5.3), com $\varepsilon_2 = 10^{-8}$ como limite para o erro residual, garantindo a precisão da solução numérica. No método TS Newton-MG, como critério de parada adicional, foi determinado um número máximo de ciclos *multigrid*, $it_{\text{Lin}} = it_{\text{MG}} = 50$, caso não ocorra convergência com o critério ε_1 para a Eq. (5.2) ou ε_2 para a Eq. (5.3).

Na Tab. 3 é apresentado o número médio de linearizações utilizadas em todos os passos de tempo no método TS Newton-MG, considerando um refinamento de malhas máximo correspondente para os parâmetros adotados.

TABELA 3 – Número médio de linearizações no método TS Newton-MG

| Casos | Número de Malhas | | | | | | | | | | | | | |
|-------|------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 |
| 1 | 3,3 | $_{3,0}$ | $_{3,0}$ | $_{3,0}$ | $_{3,0}$ | $_{3,0}$ | 2,5 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| 2 | 4,0 | 3,1 | $_{3,0}$ | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,6 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| 3 | 3,0 | $_{3,0}$ | $_{3,0}$ | 3,0 | 3,0 | 2,5 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| 4 | 3,0 | $_{3,0}$ | $_{3,0}$ | $_{3,0}$ | 2,8 | 2,3 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |

Fonte: A Autora (2025)

Observa-se que em malhas grosseiras (com menor número de malhas), o método requer um maior número de linearizações, porém essa necessidade diminui com o refinamento da malha, estabilizando-se em 2,0, independentemente dos valores de κ_0 e χ . Isso demonstra a robustez do método, mesmo quando se inicia com malhas grosseiras, assegurando que seu desempenho não seja significativamente afetado por alterações nesses parâmetros físicos analisados. Essa característica reforça a eficiência do método Newton-MG, demonstrando sua capacidade de resolver problemas de alta complexidade com um número limitado e previsível de linearizações, mesmo em malhas altamente refinadas.

5.2.2 Número médio de ciclos

No contexto do método *multigrid*, o número médio de ciclos V(1,1) necessários é calculado como a média aritmética do número de ciclos realizados em cada passo de tempo. Para resolver um sistema, aplica-se o método de Newton, que pode necessitar de um determinado número de ciclos *multigrid*. Assim

$$\overline{\overline{it}}_{MG} = \frac{1}{N_t} \sum_{t=1}^{N_t} \overline{it}_{MG}(t), \qquad (5.5)$$

onde $\overline{it}_{MG} = \frac{1}{it_{Lin}} \sum_{\nu=1}^{it_{Lin}} it_{MG}(\nu).$

Nesta fórmula, it_{MG} corresponde ao número de ciclos V(1,1) utilizados para resolver cada sistema linearizado, it_{Lin} é o número de linearizações realizadas em um dado passo de tempo, \overline{it}_{MG} é o número médio de ciclos V(1,1) por linearizações, N_t representa o número total de passos de tempo e \overline{it}_{MG} é a média do número de ciclos *multigrid* por linearizações ao longo de todos os passos de tempo.

Este procedimento permite avaliar a robustez do método *multigrid* em relação ao refinamento da malha e aos parâmetros físicos analisados.

A Tab. 4 apresenta \overline{it}_{MG} do método TS Newton-MG em função dos parâmetros $\kappa_0 \in \chi$, para diferentes níveis de refinamento de malha, variando de 2 a 15 malhas. Cada valor indica a quantidade de ciclos *multigrid* necessários para a convergência da solução, considerando as diferentes configurações de parâmetros e resoluções de malha.

| | Número de Malhas | | | | | | | | | | | | | |
|-------|------------------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Casos | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 |
| 1 | 6,1 | 7,3 | 8,9 | 10,4 | $11,\!5$ | 12,2 | $12,\! 0$ | 11,7 | $12,\!0$ | $12,\!3$ | $12,\!5$ | 12,7 | $13,\!0$ | $13,\!0$ |
| 2 | 7,2 | 9,2 | $10,\!0$ | 11,0 | $11,\!8$ | $12,\!3$ | $11,\!9$ | $11,\!6$ | $11,\!8$ | 12,1 | $12,\!3$ | $12,\!6$ | $12,\!8$ | $12,\!5$ |
| 3 | 24,1 | 19,5 | $14,\!3$ | 8,9 | 8,5 | 10,3 | 11,5 | $11,\!9$ | 12,2 | 12,5 | 12,4 | 12,0 | $11,\!8$ | 11,7 |
| 4 | 29,3 | 27,1 | $22,\!9$ | 18,1 | $13,\!9$ | $_{9,8}$ | 8,0 | 10,5 | $11,\!6$ | $11,\!8$ | $11,\!3$ | $11,\!3$ | $11,\!3$ | $11,\!8$ |

TABELA 4 – $\overline{\overline{it}}_{MG}$ no método TS Newton-MG

Fonte: A Autora (2025)

Os resultados descritos na Tab. 4 mostram que o número médio de ciclos V(1,1)demonstra uma leve variação em malhas mais grosseiras; contudo, à medida que ocorre o refinamento, essa quantidade tende a se estabilizar. Essa estabilidade indica que o método é robusto, apresentando independência tanto em relação ao número de malhas quanto aos parâmetros físicos analisados. Esse comportamento é semelhante ao observado na Tab. 3, reforçando a eficácia e robustez do método *multigrid* frente às variações de refinamento de malha e parâmetros físicos.

Os demais valores considerados para $\kappa_0 \in \chi$ estão detalhados no Apêndice A.

5.2.3 Tempo computacional, complexidade e Speed-up

O tempo computacional (t_{CPU}) é um dos parâmetros fundamentais para avaliar a eficiência de métodos numéricos, especialmente aqueles baseados em *multigrid*, que são projetados para resolver sistemas lineares de grande porte de maneira otimizada. E ele é crucial a ser considerado durante a análise de desempenho dos métodos.

Para a avaliação do tempo computacional, foi utilizada a função timef do Fortran-R 2022, que mede o tempo de execução em segundos (s). O t_{CPU} compreende todas as etapas do processo de resolução, incluindo a geração das malhas, a atribuição das condições iniciais, o cálculo dos coeficientes e a solução do sistema linear gerado pela discretização das equações diferenciais parciais (EDP), até que a tolerância estabelecida pelo critério de convergência seja alcançada.

Como o problema utiliza condição de contorno relaxante (Eq. (3.3)), que possue uma variável temporal, o tempo computacional é avaliado em relação ao número total de incógnitas do problema, dado por $\mathbf{N} = (N_x - 1)(N_t - 1)$, onde N_x e N_t representam as dimensões da malha nas direções espacial e temporal, respectivamente. Esta abordagem permite compreender como o t_{CPU} varia com a escala do problema e analisar o impacto dos parâmetros físicos κ_0 e χ na eficiência do método.

A Fig. 13 apresenta os resultados de t_{CPU} para o método TS Newton-MG, considerando as combinações dos parâmetros listadas na Tab. 2. As demais combinações desses parâmetros realizadas nesse trabalho estão disponíveis no Apêndice A.



FIGURA 13 – Tempo computacional para o método TS Newton-SG/MG.

Podemos notar pela Fig. 13 que, ao utilizar o método singlegrid, observa-se uma
variação significativa no tempo computacional com relação à variação dos parâmetros físicos, especialmente em situações onde a não linearidade torna-se mais forte. Por exemplo, na malha 12 (16.777.216 incógnitas), o caso SG-Caso4 requer $t_{CPU} \approx 125.000$ s de processamento, enquanto o SG-Caso1 é resolvido em $t_{CPU} \approx 397$ s. Em contrapartida, o método multigrid apresenta tempos praticamente iguais, girando em torno de 6 segundos, independentemente das variações dos parâmetros físicos pelos casos MG-Caso1 e MG-Caso4. Isso evidencia a robustez do método multigrid, que oferece tempos computacionais semelhantes para diferentes parâmetros físicos e sua eficiência, por apresentar um desempenho muito superior ao singlegrid. Note ainda a inclinação mais acentuada das curvas para o método singlegrid, em comparação ao multigrid, evidenciando a maior eficiência do método multigrid.

Esse comportamento impacta diretamente o speed-up do método multigrid em relação ao singlegrid. Como o tempo de resolução no multigrid permanece praticamente constante para uma mesma malha em todos os casos (variação dos parâmetros físicos), o speed-up será maior nos cenários em que o método singlegrid apresenta t_{CPU} elevado, como nos casos SG-Caso3 e SG-Caso4, casos onde há alta não linearidade. Por outro lado, quando o singlegrid converge em menos tempo, o speed-up do multigrid tende a ser menor. Os resultados evidenciam a vantagem do multigrid, especialmente nos casos mais desafiadores, onde o singlegrid apresenta maior tempo computacional.

Com o objetivo de avaliar o desempenho destes métodos numéricos (*multigrid* e *singlegrid*) em relação ao número de incógnitas, foi realizado um estudo da ordem de complexidade do método (p).

Para determinar esse parâmetro, foi efetuado um ajuste não linear conforme descrito em Burden, Burden e Faires (2016)

$$t_{CPU}(\mathbf{N}) = c\mathbf{N}^p,\tag{5.6}$$

onde c é o coeficiente do método, p representa a ordem de complexidade e N é o número total de incógnitas do problema.

Usando uma escala bilogarítmica, tal ajuste dos dados resulta em uma reta, na qual o coeficiente linear c representa o valor inicial da relação entre tempo de processamento e o número de incógnitas N, enquanto o coeficiente angular p indica a tendência de crescimento dessa relação (WESSELING, 1992; BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001) caracterizam o método multigrid como ideal quando $p \approx 1,0$ e $c \approx 0,0$.

A Tab. 5 apresenta os valores de c e p para os casos *multigrid* e *singlegrid* e que na prática representam uma medida da quantidade de recursos computacionais necessários para resolver o problema.

| | multi | grid | single grid | | | | | |
|-------|--------------|--------|-------------|------------|--|--|--|--|
| Casos | С | p | С | p | | | | |
| 1 | 6,87E-07 | 0,9719 | 2,88E-08 | 1,3870 | | | | |
| 2 | $8,\!49E-07$ | 0,9597 | 4,70E-08 | $1,\!4601$ | | | | |
| 3 | 2,23E-07 | 1,0323 | 5,51E-07 | $1,\!4825$ | | | | |
| 4 | 3,83E-07 | 1,0359 | 1,21E-06 | 1,5229 | | | | |

TABELA 5 – Ordem de Complexidade - TS Newton-MG

Fonte: A Autora (2025).

Os resultados apresentados na Tab. 5, derivados dos dados da Fig. 13, demonstram que o método *multigrid* apresenta um crescimento linear em relação ao número de incógnitas (**N**). Observa-se que, para o método *multigrid* temos os valores do expoente $p \approx 1,0$ e $c \approx 0$, o que está de acordo com a literatura. Por outro lado, os métodos *singlegrid* exibem um crescimento mais acentuado do tempo de execução, com valores de $p \approx 1,5$, tendência esperada quando utilizado o método de Newton para linearização, podendo chegar até 2,0 quando aplicados a problemas lineares resolvidos por métodos como o Gauss-Seidel (TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001; FRANCO, 2017; OLIVEIRA; FRANCO; PINTO, 2018; ALES *et al.*, 2025).

Essa diferença no valor de p destaca a vantagem do método *multigrid*, que, além de ser mais eficiente em termos de tempo de execução, também demanda menos recursos para resolver problemas de grande escala. Informações adicionais sobre as variações dos parâmetros encontram-se no Apêndice A.

Outra métrica importante na avaliação dos nossos métodos, é o *speed-up*. Tal métrica quantifica o ganho de desempenho do método *multigrid* em relação ao *singlegrid*. Essa métrica é calculada por meio da seguinte equação (GALANTE; RIZZI; DIVERIO, 2008; FRANCO, 2017)

$$S(\mathbf{N}) = \frac{t_{CPU}^{SG}(\mathbf{N})}{t_{CPU}^{MG}(\mathbf{N})},\tag{5.7}$$

onde t_{CPU}^{SG} e t_{CPU}^{MG} representam respectivamente o tempo computacional do *singlegrid* e do *multigrid*.

Na Fig. 14 é apresentado os resultados para o speed-up (S). A análise desta figura revela uma forte dependência de S em relação à combinação dos parâmetros físicos $\kappa_0 \in \chi$. Tais curvas apresentam um comportamento semelhante ao observado no t_{CPU} dado pela Fig. 13: enquanto o método singlegrid sofre variações significativas com a variação dos parâmetros, o método multigrid mantém desempenho praticamente constante com relação a essa variação dos parâmetros. Portanto, o que vai determinar maior ou menor speed-up será somente o maior ou menor tempo de singlegrid.

Por exemplo, para um problema fixo com $\mathbf{N} = 2048 \times 2048$ incógnitas e para os



FIGURA 14 – Speed-up para o método TS Newton-MG.

Fonte: A Autora (2025).

Casos 1 e 2, o speed-up cresce consideravelmente com o aumento de κ_0 , atingindo $S \approx 61$ no Caso1 e $S \approx 4097$ para Caso2. Esse efeito se intensifica para o Caso3, chegando a $S \approx 21400$. Isso significa que o método *multigrid* é cerca de 21.400 vezes mais rápido que o singlegrid, conforme ilustrado na própria figura. Tais resultados indicam uma relação não linear entre o speed-up e os parâmetros físicos, ressaltando a vantagem do *multigrid* em determinadas configurações. Note também que em todos os casos, os speed-ups são crescentes com relação ao refino de malha, propriedade altamente desejada.

Deve-se frisar que esses resultados de *speed-up* estão diretamente relacionados aos parâmetros físicos adotados nas simulações e, portanto, são específicos das condições estabelecidas neste trabalho.

5.2.4 Fator de convergência médio

O fator de convergência médio (ρ_m) é uma métrica amplamente utilizada para avaliar a eficiência e estabilidade dos métodos, pois indica a taxa média de redução do erro residual durante todo o processo iterativo. Portanto, valores próximos de zero indicam rápida convergência e menor esforço computacional.

Nesse estudo, tal métrica será avaliada apenas para o caso do método multigrid.

Segundo Briggs, Henson e McCormick (2000), o fator de convergência (ρ) pode ser estimado numericamente pela razão entre os resíduos sucessivos

$$\rho(it_{MG}) = \frac{||r(it_{MG})||_{\infty}}{||r(it_{MG} - 1)||_{\infty}},$$
(5.8)

onde it_{MG} é o número da iterada (ciclos V(1,1)) do método *multigrid*. O fator de convergência médio (ρ_m) é calculado a partir da média geométrica dos fatores de convergência individuais em cada ciclo *multigrid*. Portanto, tal fator é calculado por (BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001)

$$\rho_m = {}^{it_{MG}} \sqrt{\rho(1).\rho(2).\ldots.\rho(it_{MG})}.$$
(5.9)

A Fig. 15 apresenta a evolução do fator de convergência médio ρ_m em função do número de incógnitas $\mathbf{N} = (N_x - 1)(N_t - 1)$, considerando as diferentes combinações dos parâmetros físicos $\kappa_0 \in \chi$, como descrito na Tab. 2. Os resultados indicam que, para todas as configurações analisadas, o fator de convergência médio estabiliza-se em valores inferiores a 0,102 com o refino de malha. Além disso, nota-se que a variação dos parâmetros físicos $\kappa_0 \in \chi$ influencia levemente a taxa de convergência até se estabilizar.

De acordo com Briggs, Henson e McCormick (2000), a eficiência de esquemas multigrid está diretamente relacionada ao valor de ρ_m , assegurando que a solução numérica permanece com uma taxa de convergência desejada mesmo sob diferentes condições físicas e refino de malha. Portanto, os resultados reforçam a confiabilidade da abordagem *multigrid* empregada, destacando sua eficiência e robustez.

FIGURA 15 – Fator de convergência médio para o método TS Newton-MG.



5.3 Waveform Relaxation e Full Approximation Scheme

Nesta seção, investigamos o desempenho da varredura *Waveform Relaxation* (WR). Esse método permite a atualização progressiva das variáveis ao longo do tempo. A varredura WR é particularmente útil para problemas de grande escala, pois reduz a rigidez do sistema ao tratar cada variável em sua própria escala temporal. Esse recurso torna o método adequado para uma ampla gama de aplicações, especialmente quando combinado com o esquema *Full Approximation Scheme* (FAS) do *multigrid*, pois trabalha diretamente com a não linearidade na estrutura do método, utilizando soluções e resíduos em diferentes níveis de malha para melhorar a convergência da solução de problemas não lineares.

Os testes apresentados nesta seção foram realizados para as combinações de parâmetros $\kappa_0 \, e \, \chi$ apresentados na Tab. 2. No caso do método WR, os vetores são alocados tanto no espaço quanto no tempo, o que resulta em um maior uso de memória. Por essa razão, as simulações foram limitadas a nm = 14. No Apêndice B, encontram-se tabelas e gráficos adicionais com outras combinações de parâmetros $\kappa_0 \, e \, \chi$, permitindo uma análise mais abrangente do método. As demais especificações dos testes aqui realizados se comparam com os testes realizados na seção 5.2.

5.3.1 Número de ciclos V(1,1)

Diferentemente do método TS Newton-MG (CS), que depende da linearização, o método baseado no *Full Approximation Scheme* (WR FAS) lida diretamente com a não linearidade incorporada na estrutura do *multigrid*. Para isso, ele utiliza soluções aproximadas e resíduos em diferentes níveis de malha, o que acelera a convergência na resolução de problemas não lineares sem a necessidade de linearização prévia.

Na Tab. 6, encontram-se os resultados do número de ciclos V(1,1) necessários, utilizando o critério de parada dado pela Eq. (5.3) com $\varepsilon_2 = 10^{-8}$. Neste experimento, consideram-se os parâmetros $\kappa_0 \in \chi$ listados na Tab. 2.

| | | Número de malhas | | | | | | | | | | | |
|-------|---|------------------|---|----------|------|---|------|-----|--------|----|----|----|----|
| Casos | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 |
| 1 | 4 | 6 | 6 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 |
| 2 | 5 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 3 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 4 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | | | | For | nte: | A | Auto | ora | (2025) | 5) | | | |

TABELA 6 – Número de ciclos V(1,1) no método WR FAS.

Na Tab. 6, ao utilizar o método WR FAS, observou-se que, em malhas mais grosseiras, são necessários até seis ciclos V(1,1) para a convergência, como no MG-Caso1. Com o refinamento da malha, a quantidade de ciclos necessários diminui progressivamente, até que o problema seja resolvido já no primeiro ciclo *multigrid*. Em casos onde a não linearidade é mais acentuada, como no MG-Caso4, malhas mais grosseiras requerem duas iterações para a convergência. Isso ocorre porque o método *multigrid* reduz significativamente o resíduo já no início do processo iterativo.

Esses resultados indicam que o método é robusto em relação aos parâmetros físicos e ao refinamento da malha.

Outras variações dos parâmetros podem ser encontradas no Apêndice B.

5.3.2 Tempo computacional

Para a análise do tempo computacional, serão considerados os mesmos critérios utilizados em TS Newton-MG, permitindo uma comparação direta entre o desempenho dos métodos, essencial para avaliar a eficiência do método WR FAS em diferentes configurações.

A Fig. 16 apresenta a relação entre o tempo computacional (t_{CPU}) despendindo na solução do problema o número de incógnitas (**N**) comparando os métodos *multigrid* (MG) e *singlegrid* (SG), ou seja, os métodos WR FAS e WR SG, respectivamente.



FIGURA 16 – Tempo computacional nos métodos WR FAS e WR SG.

O método *multigrid* demonstra uma vantagem expressiva em relação ao *singlegrid* no tempo computacional (t_{CPU}) da simulação. Por exemplo, no MG-Caso1 (também analisado em Filipov, Faragó e Avdzhieva (2022)), para $N_x = N_t = 1025$, totalizando $\mathbf{N} = 1.048.576$ incógnitas, o *multigrid* levou aproximadamente 0,33 s para atingir o critério de parada, enquanto o *singlegrid* necessitou cerca de 3802 s.

Outra evidência da eficiência do *multigrid* pode ser observada no MG-Caso3, onde

temos parâmetros que intensificam a não linearidade do problema. Para a mesma quantidade de incógnitas $\mathbf{N} = 1.048.576$, o *multigrid* atingiu a convergência em aproximadamente 0.16 s, enquanto o *singlegrid* demandou cerca de 9892 s. Esse resultado demonstra que, à medida que a não linearidade aumenta, o método WR FAS torna-se ainda mais eficiente, reduzindo significamente o tempo computacional. Esse comportamento será analisado com mais detalhes nos dados de fator de convergência apresentados posteriormente.

Dessa forma, os resultados apresentados nesta seção destacam a superioridade do método *multigrid* em relação ao *singlegrid*. Além de reduzir significativamente os tempos de execução para diferentes parâmetros físicos, o *multigrid* demonstra maior robustez, tornando-se uma abordagem mais eficiente para a solução da equação do calor não linear 1D. À medida que **N** aumenta, a diferença de desempenho entre os dois métodos se acentua, reforçando a adequação do *multigrid* para problemas de maior complexidade computacional.

5.3.3 Speed-up

O speed-up S é uma métrica que avalia a razão entre os t_{CPU} dos métodos singlegrid e multigrid, ou seja, o ganho de desempenho computacional, comparando o tempo de execução destes métodos sob diferentes condições.

A Fig. 17 ilustra o comportamento do speed-up (S) versus **N**, considerando diferentes valores dos parâmetros. Pode-se ver nesta figura que, no MG-Caso1 (com os mesmos parâmetros utilizados em Filipov, Faragó e Avdzhieva (2022)), para **N** = 1025×1025 , tem-se $S \approx 11512$. Isso indica que o método multigrid é cerca de 11512 vezes mais rápido que o singlegrid, conforme ilustrado na própria figura.

FIGURA 17 – Speed-up para o método WR FAS.



Fonte: A Autora (2025).

Essa vantagem do *multigrid* se mantém mesmo para cenários com maior grau de não linearidade. No MG-Caso3, por exemplo, observa-se um *speed-up* ainda mais expressivo, com $S \approx 61825$, reforçando a eficiência do método.

Na Fig. 18 temos a comparação dos *speed-ups* dos métodos Ts Newton-MG e WR FAS. Pode perceber que o *speed-up* é mais acentuado no método WR FAS para todas as avaliações realizadas, evidenciando sua superioridade em termos de desempenho computacional.



FIGURA 18 – Speed-up comparativo para os métodos TS Newton-MG e WR FAS.

Fonte: A Autora (2025).

Por fim, observa-se o comportamento crescente das curvas, indicando que o valor de S aumenta à medida que **N** cresce, o que é uma propriedade altamente desejável.

5.3.4 Ordem de complexidade

Usando os dados derivados da Fig. 16 e a expressão dada pela Eq. (5.6), pode-se concluir a Tab. 7, onde observa-se um comportamento distinto entre os métodos *multigrid* e *singlegrid* na solução da equação do calor não linear 1D.

Os resultados apresentados na Tab. 7 evidenciam a eficiência do método *multigrid* em comparação com o *singlegrid*. Observa-se que, para o *multigrid*, os valores do expoente p permanecem próximos da unidade ($p \approx 1,0384$ a $p \approx 1,0721$) assim como os apresentados para o método TS Newton-MG (vide Tab. 5), além dos coeficientes $c \approx 0$ o que indica um crescimento linear do tempo em relação ao número de incógnitas (**N**); e que está de acordo com a literatura (WESSELING, 1992; BRIGGS; HENSON; MCCORMICK, 2000; TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001). Essa característica é ideal

| | multigrid | | single grid | |
|-------|-----------|----------|--------------|------------|
| Casos | С | p | с | p |
| 1 | 9,16E-07 | 1,0384 | 1,90E-09 | 2,0397 |
| 2 | 5,28E-07 | 1,0670 | 7,11E-09 | 2,0489 |
| 3 | 5,66E-07 | 1,0569 | 4,52E-07 | 1,7709 |
| 4 | 3,74E-07 | 1,0721 | $4,\!88E-07$ | $1,\!6876$ |
| | Fonte: | A Autora | (2025). | |

TABELA 7 – Ordem de Complexidade - WR FAS e WR SG.

tornando o método altamente eficiente e baixa demanda por recursos computacionais para problemas de larga escala.

Por outro lado, o método *singlegrid* apresenta $p \approx 2,0$ para o método WR SG onde foi utilizado o *solver* Gauss-Seidel *Red-Black* (TROTTENBERG; OOSTERLEE; SCHüLLER, 2001; FRANCO, 2017; OLIVEIRA; FRANCO; PINTO, 2018).

As demais variações dos parâmetros encontram-se no Apêndice B.

5.3.5 Fator de convergência médio

O fator de convergência médio ρ_m , como definido pela Eq. (5.8), é um indicador essencial para avaliar a eficiência de métodos numéricos. Como dito na seção 5.2.4, valores próximos de zero indicam rápida convergência.

A Fig. 19 apresenta a evolução de ρ_m em função do número de pontos na malha (**N**) para diferentes combinações dos parâmetros físicos $\kappa_0 \in \chi$, dados na Tab. 2.



FIGURA 19 – Fator de convergência no método WR FAS.

Observa-se que o método WR FAS apresenta um desempenho consistente, independentemente dos parâmetros analisados e do nível de refinamento da malha, evidenciando sua robustez. Além disso, nos casos MG-Caso3 e MG-Caso4, onde a não linearidade é mais pronunciada, ocorre uma significativa redução do fator de convergência (ρ_m) à medida que a malha é refinada. Esse comportamento faz com que, assim como nos demais casos, os valores de ρ_m permaneçam abaixo de 0,1, confirmando a alta eficiência do método.

Esse resultado indica que o WR FAS exige baixo esforço computacional, tornandose uma alternativa viável para a solução de problemas complexos que envolvem regime transiente e estratégia *multigrid*. Sua capacidade de manter um desempenho eficiente mesmo em cenários de alta não linearidade reforça sua aplicabilidade em diversas classes de problemas numéricos, especialmente aqueles que demandam grande refinamento de malha.

Outro aspecto relevante é que o refinamento da malha não compromete a taxa de convergência do método. O fato do ρ_m manter-se próximo de zero, demonstra que o WR FAS pode ser aplicado com eficiência em problemas de grande escala, sem um aumento significativo no custo computacional. Essa característica é altamente desejável em simulações de larga escala, onde a eficiência computacional é um fator determinante para a viabilidade do método.

5.4 Análise dos erros

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos com a aplicação da Múltipla Extrapolação de Richardson (MER), metodologia descrita na Seção 2, utilizada para a redução e estimativa do erro de discretização. Essa técnica, aplicada como um procedimento de pós-processamento, foi empregada tanto para variável local (valor da variável no centro do domínio) quanto para variável global (valor médio da variável), em diferentes malhas, no contexto da equação do calor não linear unidimensional. Toda a análise descrita aqui foi realizada com base nos resultados obtidos pelo método WR FAS, evidenciando a influência da MER na melhoria da precisão das soluções numéricas.

Para as análises desta seção, além das especificações prévias, adotou-se a precisão quádrupla com critério de parada do processo iterativo sendo o erro de máquina, para que dessa forma se minimize os efeitos dos erros de arredondamento e de iteração, assegurando assim maior rigor na avaliação dos resultados. Além disso, as simulações são feitas para o caso MG-Caso1 (veja Tab. 2). As demais variações dos parâmetros encontram-se no Apêndice C.

5.4.1 Ordem dos erros

O primeiro teste realizado foi a verificação das ordens aparentes p_U (Eq. (2.46)) para as soluções de u avaliada no ponto central do domínio (u_c) e também para u média (u_m). Como neste trabalho utilizamos o método CDS para a discretização espacial e o esquema de Crank-Nicolson para a discretização temporal, e ambos apresentam uma ordem assintótica de convergência, então a ordem assintótica geral da metodologia utilizada é $p_L = 2$ (FRANCO, 2017). Além disso, as ordens verdadeiras p_V formam uma progressão aritmética a partir da p_L .

Espera-se, portanto, que, à medida que a malha é refinada $(h \rightarrow 0)$, e ao se utilizar a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER), p_U convirja para os respectivos valores de p_V em cada nível de extrapolação, em conformidade com a teoria das discretizações espaciais e temporais adotadas e reforçando a confiabilidade do método na estimativa do erro de discretização em diferentes malhas.

A Fig. 20 apresenta tanto para a variável u_c como para u_m do MG-Caso1, a evolução das ordens p_U , evidenciando que, com o refinamento da malha, essas ordens convergem para os valores verdadeiros das ordens verdadeiras $p_V = 2, 4, 6$, respectivamente para os níveis de extrapolação m = 0, 1, 2. Esse comportamento demonstra a concordância com a literatura e a eficácia das extrapolações na melhoria da precisão das soluções numéricas.

Com base nesses resultados, daqui para frente adota-se p_V como referência nos códigos a fim de avaliar a precisão das soluções numéricas, pois valores seguem a progressão aritmética $p_V = 2, 4, 6, 8, 10, \ldots$ (ROACHE, 1998; MARCHI *et al.*, 2013).

5.4.2 Estimadores de erros

Para avaliar o comportamento do erro de discretização de uma solução numérica Φ para uma variável de interesse é necessário conhecer sua solução analítica exata ϕ , que não é o caso do problema avaliado neste trabalho. Nesses casos, uma estimativa para o erro, ou incerteza da solução numérica U, pode ser obtida. Nesta seção usa-se exclusivamente o estimador de Richardson sem e com MER, dados respectivamente pelas Eqs. (2.35) e (2.45).

A Fig. 21 apresenta a relação entre as estimativas dos erros de discretização sem o uso da MER (U_h) e com o uso da MER (U_m) e tamanho da malha (h) para as variáveis uc e um analisadas. Observa-se que a estimativa do erro com MER (U_m) diminui significativamente à medida que h se reduz, evidenciando a eficiência do método na mitigação do erro. Em particular, para a variável u_m , a aplicação da MER resulta em uma redução mais expressiva do erro nas primeiras trocas de malha, seguida por uma estabilização da redução em malhas mais refinadas.



FIGURA 20 – Ordem aparente p_U para os parâmetros do MG-Caso1 com WR FAS.

FIGURA 21 – Estimativa do erro de discretização para uc e um sem o uso da MER (U_h) e com o uso da MER (U_m) versus espaçamento h.



Os resultados demonstram que a ordem de acurácia esperada do método é mantida para malhas suficientemente refinadas. A comparação entre as variáveis $u_c e u_m$ evidencia a relevância do refinamento da malha na obtenção de soluções numéricas mais acuradas. Além disso, a aplicação da MER permite uma redução expressiva do erro já nas primeiras extrapolações, mostrando-se eficiente na otimização da precisão numérica sem exigir um número excessivo de refinamentos. Dessa forma, o método se apresenta como uma eficiente alternativa, possibilitando o uso de malhas menos refinadas sem comprometer a qualidade dos resultados, reduzindo assim o custo computacional, tornando a abordagem particularmente vantajosa para problemas complexos e de alta demanda computacional.

A eficiência do método WR FAS com o uso da MER na melhoria da acurácia das soluções numéricas torna-se evidente, por exemplo, ao observar que, para a variável u_m na malha (nm = 13 e $h = 1,2207 \times 10^{-4}$) (malha mais refinada), a estimativa do erro se reduz de $U_h \approx 10^{-10}$ para $U_m \approx 10^{-29}$, indicando um ganho expressivo.

A Fig. 22 reforça os resultados previamente discutidos, demonstrando que, com poucas extrapolações, o erro de discretização diminui drasticamente. Observa-se que para malhas mais refinadas, a redução do erro torna-se menos acentuada com o aumento do número de extrapolações, evidenciando que a solução se aproxima de um comportamento assintótico. Esse resultado reforça a eficiência do método em obter soluções acuradas com um número reduzido de extrapolações, otimizando o uso de recursos computacionais.

FIGURA 22 – Gráfico comparativo do refinamento de malhas com solução global u_m e solução local u_c para MER utilizando Estimador de Richardson e diversos níveis de extrapolação.



Dessa forma, a análise confirma a eficiência do método utilizado, garantindo que a precisão pode ser alcançada mesmo com refinamentos modestos, desde que os critérios

de extrapolação sejam adequadamente aplicados.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

6.1 Escopo do trabalho

Neste trabalho, foi realizado um estudo da solução numérica da equação de difusão do calor não linear unidimensional com condições de contorno relaxantes (condições convectivas) em um modelo matemático que foi aplicada a uma barra de silício, fina e homogênea. Para tanto, consideraram-se variações nos parâmetros físicos e numéricos.

Buscou-se explorar e desenvolver abordagens baseadas no método *multigrid*, com ênfase na aplicação do *Correction Scheme* (CS) em conjunto com o método de Newton para linearizar a equação diferencial e a varredura temporal do tipo *Time-Stepping* (TS). O outro método é o *multigrid* com o esquema de *Full Approximation Scheme* (FAS) associado à varredura *Waveform Relaxation* (WR). Utilizou-se a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) para reduzir e estimar o erro de discretização (U_h) .

Outro aspecto relevante deste trabalho foi a investigação das condições de contorno relaxantes, que aumentam a complexidade do problema não linear estudado.

Em todas as simulações que envolveram o método *multigrid*, foram empregados o ciclo V(1,1), a razão de engrossamento padrão, o operador de restrição por ponderação completa e o operador de prolongação por interpolação linear.

As soluções numéricas foram obtidas com precisão dupla para os métodos TS Newton-MG e WR FAS e precisão quádrupla para as análises de erros e critério de parada até que o erro fosse reduzido ao erro de arredondamento.

6.2 Principais conclusões

A partir dos testes realizados, conclui-se que:

- O uso das abordagens propostas demonstrou-se eficiente na melhoria da precisão das soluções numéricas para problemas de difusão de calor não linear.
- A combinação do método *multigrid* com as técnicas de varredura *Time-Stepping* e *Waveform Relaxation*, contribuiu para uma redução significativa do tempo de simulação.
- A aplicação de MER foi especialmente eficaz na redução de E_h proporcionando um aumento considerável na acurácia das soluções numéricas.
- O estudo da barra de silício, considerando suas propriedades térmicas específicas, mostrou que as abordagens propostas podem ser estendidas a uma análise e simulação de outros processos térmicos em Engenharia.

 A combinação das técnicas de *multigrid* e MER mostrou-se particularmente vantajosa na aceleração da convergência e na obtenção de resultados numéricos de alta precisão em um tempo computacional reduzido.

6.3 Principais contribuições

Mediante os resultados obtidos, considera-se que o objetivo geral deste trabalho foi alcançado. As contribuições podem ser sumarizadas como:

- Desenvolvimento e aprimoramento de métodos numéricos para resolver o problema de transferência de calor não linear unidimensional com condições de contorno relaxantes.
- Aplicação de técnicas de *multigrid*, *Time-Stepping*, *Waveform Relaxation* além da Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) para melhorar a precisão das soluções numéricas e reduzir o erro de discretização de uma forma eficiente.
- Investigação do comportamento térmico da barra de silício e as implicações das condições de contorno relaxantes na difusão de calor não linear.
- Criação de um método eficiente, robusto e acurado para resolver problemas não lineares.

6.4 Trabalhos futuros

Com a finalidade de complementar e expandir os estudos deste trabalho, os seguintes temas são sugeridos:

- Investigação de métodos numéricos para problemas bidimensionais de transferência de calor não linear, utilizando as técnicas e abordagens aqui desenvolvidas.
- Exploração de outras técnicas de varredura temporal, como a varredura *Space-Time*; ou outros tipos de ciclos *W* e *F*, no contexto de malhas refinadas e condições de contorno relaxantes.
- Aplicação de métodos como o Waveform Relaxation combinado com Newton-MG e Time-Stepping com Full Approximation Scheme em outros tipos de problemas de Engenharia e Ciências aplicadas.

REFERÊNCIAS

ALES, V. *et al.* A parallelizable space-time approach in the uzawa solver with multigrid for poroelasticity. *Mathematical Modelling of Engineering Problems*, v. 12, p. 385–394, 02 2025. Citado na página 72.

ALI, A.; ABBAS, A.; ABDELHAKEM, M. Comparative analysis of adams-bashforthmoulton and runge-kutta methods for solving ordinary differential equations using matlab. *Mathematical Modelling of Engineering Problems*, v. 11, p. 641–647, 03 2024. Citado na página 20.

BAKHVALOV, N. S. On the convergence of elaxation method with natural constraints on the elliptic operator. URSS Comp. Math. Phys, v. 1, n. 5, 1966. Citado na página 27.

BANK, R. E.; DUPONT, T. F.; YSERENTANT, H. The hierarchical basis multigrid method. *Numerische Mathematik*, Springer, v. 52, p. 427–458, 1988. Citado na página 25.

BAOKU, I.; OLAJUWON, B.; MUSTAPHA, A. Heat and mass transfer on a mhd third grade fluid with partial slip flow past an infinite vertical insulated porous plate in a porous medium. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 40, p. 81–88, 04 2013. Citado na página 30.

BASTIAN, P. *et al.* Numerical simulation and experimental studies of unsaturated water flow in heterogeneous systems. p. 579–597, 2007. Citado na página 26.

BAUSE, M.; RADU, F. A.; KÖCHER, U. Space-time finite element approximation of the biot poroelasticity system with iterative coupling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 320, p. 745–768, 2017. Citado na página 25.

BECKER, M. Nonlinear transient heat conduction using similarity groups. *Journal of Heat Transfer-transactions of The Asme - J HEAT TRANSFER*, v. 122, 02 2000. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.

BRABAZON, K.; HUBBARD, M.; JIMACK, P. Nonlinear multigrid methods for second order differential operators with nonlinear diffusion coefficient. *Computers Mathematics with Applications*, v. 68, n. 12, Part A, p. 1619–1634, 2014. ISSN 0898-1221. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 26.

BRADIE, B. *A Friendly Introduction to Numerical Analysis.* [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2006. (A Friendly Introduction to Numerical Analysis). ISBN 9788131709429. Citado na página 19.

BRANDT, A. Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems. *Mathematics of Computation*, v. 31, n. 138, p. 333–390, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 26.

BRIGGS, W. L.; HENSON, V. E.; MCCORMICK, S. F. *A Multigrid Tutorial.* 2nd. ed. Philadelphia: SIAM, 2000. Citado 14 vezes nas páginas 20, 21, 24, 25, 37, 38, 39, 41, 43, 54, 71, 73, 74 e 78.

BURDEN, A.; BURDEN, R.; FAIRES, D. *Análise Numérica*. [S.l.]: CENGAGE DO BRASIL, 2016. ISBN 9788522123407. Citado na página 71.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical Analysis.* 10th. ed. Boston: Cengage Learning, 2016. Citado 5 vezes nas páginas 20, 33, 34, 36 e 47.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.; BURDEN, A. M. *Numerical analysis.* 9. ed. [S.l.]: Cengage Learning, 2023. ISBN 978-1-337-55530-3. Citado na página 37.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. Introduction to Computing for Engineers. 2nd. ed. New York: McGraw-Hill College, 1994. Citado na página 46.

CHEMEDA, H. M.; MERGA, F. E. Fourth-order compact finite difference method combined with richardson extrapolation for onedimensional heat equation. v. 4, p. 50–63, Jun. 2021. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 29.

DA SILVA, L. *et al.* Robust rre technique for increasing the order of accuracy of sph numerical solutions. *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 199, p. 231–252, 2022. ISSN 0378-4754. Citado na página 29.

DAHLQUIST, G.; BJORCK, A. Numerical methods in scientific computing. Philadelphia: SIAM, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.

DONATELLI, M.; SEMPLICE, M.; SERRA-CAPIZZANO, S. Amg preconditioning for nonlinear degenerate parabolic equations on nonuniform grids with application to monument degradation. *Applied Numerical Mathematics*, Elsevier, v. 68, p. 1–18, 2013. Citado na página 26.

FALGOUT, R. D. *et al.* Parallel time integration with multigrid. *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 36, p. C625–C661, 2014. Citado na página 27.

FALGOUT, R. D. *et al.* Multigrid methods with space—time concurrency. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, v. 18, n. 4–5, 2017. ISSN 1432-9360. Citado 3 vezes nas páginas 28, 58 e 61.

FAZIO, R.; JANNELLI, A.; ROTONDO, T. Numerical study on gas flow through a micro-nano porous medium based on finite difference schemes on quasi-uniform grids. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, v. 105, p. 186–191, 2018. ISSN 0020-7462. Citado na página 30.

FEDORENKO, R. P. On the speed of convergence of an iteration process. USSR Comput. Math. and Math. Phys., n. 4, p. 227, 1964. Citado na página 37.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. 3rd. ed. New York: Springer, 2002. Citado 7 vezes nas páginas 19, 20, 25, 32, 34, 44 e 45.

FILIPOV, S. M.; FARAGÓ, I. Implicit euler time discretization and fdm with newton method in nonlinear heat transfer modeling. *Internacional Scientific Journal "Mathematical Modeling"*, p. 94–98, 2018. Citado 10 vezes nas páginas 8, 20, 24, 35, 52, 53, 54, 64, 65 e 66.

FILIPOV, S. M.; FARAGÓ, I.; AVDZHIEVA, A. Mathematical modelling of nonlinear heat conduction with relaxing boundary conditions. In: SPRINGER. *International Conference on Numerical Methods and Applications*. [S.l.], 2022. p. 146–158. Citado 7 vezes nas páginas 22, 24, 52, 63, 66, 76 e 77.

FORTUNA, A. O. Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: conceitos básicos e aplicações. 2nd. ed. São Paulo: Edusp, 2000. Citado na página 34.

FRANCO, S. R. *Métodos multigrid espaço-tempo para resolver as equações do calor e da poroelasticidade*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2017. Citado 8 vezes nas páginas 21, 25, 41, 42, 43, 72, 79 e 81.

FRANCO, S. R. *et al.* Multigrid method based on a space-time approach with standard coarsening for parabolic problems. *Applied Mathematics and Computation*, v. 317, p. 1339–1351, 2018a. Citado 3 vezes nas páginas 21, 26 e 27.

FRANCO, S. R.; PINTO, M. A. V. A space-time multigrid method for poroelasticity equations with random hydraulic conductivity. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, Taylor & Francis, v. 85, n. 9, p. 1226–1235, 2024. Citado na página 25.

FRANCO, S. R. *et al.* A multigrid waveform relaxation method for solving the poroelasticity equations. *Computational and Applied Mathematics*, v. 37, n. 4, p. 4805–4820, 2018b. Citado 6 vezes nas páginas 21, 26, 27, 43, 59 e 61.

GALANTE, G.; RIZZI, R. L.; DIVERIO, T. A. Métodos Multigrid Paralelos em Malhas Não Estruturadas Aplicados à Simulação de Problemas de Dinâmica de Fluidos Computacional e Transferência de Calor. 27–34 p. Dissertação (Mestrado), 2008. Citado na página 72.

GANDER, M. J. 50 years of time parallel time integration. *Springer International Publishing*, p. 69–113, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 61.

GANDER, M. J.; NEUMüLLER, M. Analysis of a new space-time parallel multigrid algorithm for parabolic problems. *SIAM J. SCI. COMPUT*, v. 38, n. 4, p. A2173–A2208, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.

GASKELL, P. *et al.* Efficient and accurate time adaptive multigrid simulations of droplet spreading. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 45, n. 11, p. 1161–1186, 2004. Citado na página 26.

GASPAR, F. J.; RODRIGO, C. Local fourier analysis of vanka smoother based multigrid for staggered discretization of biot's consolidation problem. *Australian Journal of Basic* and Applied Sciences, v. 9, n. 28, p. 18–25, 2015. Citado na página 27.

GASPAR, F. J.; RODRIGO, C. Multigrid waveform relaxation for the time-fractional heat equation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 39, p. A1201– A1224, 2016. Citado na página 23.

GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 48, n. 3, p. 387–411, 1982. Citado na página 25.

GOLUB, G.; LOAN, C. V. Matrix computations. *Johns Hopkins Press*, 1989. Citado na página 20.

GOLUB, G. H.; ORTEGA, J. M. Scientific Computing and Differential Equations: an Introduction to Numerical Methods. [S.l.]: Academic Press, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 37.

GREEN, J. *et al.* An adaptive, multilevel scheme for the implicit solution of threedimensional phase-field equations. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Wiley Online Library, v. 27, n. 1, p. 106–120, 2011. Citado na página 26.

HACKBUSCH, W. *Multi-grid Methods and Applications*. Berlin: Springer-Verlag, 1985. Citado na página 61.

HENSON, V. E. Multigrid methods nonlinear problems: an overview. In: BOUMAN, C. A.; STEVENSON, R. L. (Ed.). *Computational Imaging*. [S.l.]: SPIE, 2003. v. 5016, p. 36 – 48. Citado 4 vezes nas páginas 25, 26, 35 e 54.

HIRSCH, C. Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics. 2nd. ed. New York, USA: John Wiley Sons, 2007. Citado na página 35.

HORTON, G.; VANDEWALLE, S. A space time multigrid method for parabolic partial differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 16, n. 4, p. 848–864, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 27.

HU, X.; RODRIGO, C.; GASPAR, F. J. Using hierarchical matrices in the solution of the time-fractional heat equation by multigrid waveform relaxation. *Journal of Computational Physics*, v. 416, p. 109540, 2020. Citado na página 61.

HUGHES, T. J.; HULBERT, G. M. Space-time finite element methods for elastodynamics: formulations and error estimates. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 66, n. 3, p. 339–363, 1988. Citado na página 25.

INCROPERA, F. P. et al. Fundamentos de Transferência de Calor e Massa. 6nd. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008. Citado na página 22.

IQBAL, S.; ZEGELING, P. A. An efficient nonlinear multigrid scheme for 2d boundary value problems. *Applied Mathematics and Computation*, v. 372, p. 124898, 2020. ISSN 0096-3003. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 26.

JANSSEN, J. Acceleration of Waveform Relaxation Methods for Linear Ordinary and Partial Differential Equations. Tese (Doutorado) — Katholieke Universiteit Leuven, Heverlee, Belgium, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 61.

KARIMI, M. S. *et al.* Probabilistic cfd computations of gas turbine vane under uncertain operational conditions. *Applied thermal engineering*, Elsevier, v. 148, p. 754–767, 2019. Citado na página 23.

KARTHIKEYAN, J. *et al.* Effect of temperature abuse on frozen army rations. part 1: Developing a heat transfer numerical model based on thermo-physical properties of food. *Food research international*, Elsevier, v. 76, p. 595–604, 2015. Citado na página 23.

KREYSZIG, E. *Advanced Engineering Mathematics*. 8nd. ed. Wiley: Springer, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 34.

LELARASMEE, E.; RUEHLI, A. E.; VINCENTELLI, S. A. L. The waveform relaxation method for time domain analysis of large scale integrated circuits theory and applications. *IEEE Trans. Comput. Aided Design Integr. Circ. Systems*, n. 1, p. 131–145, 1982. Citado na página 59.

LENT, J. V. Multigrid Method for Time-Dependent Partial Differential Equations. Tese (Doutorado) — Katholieke Universiteit Leuven, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 58.

LENT, J. V.; VANDEWALLE, S. Multigrid waveform relaxation for anisotropic partial differential equations. *Numerical Algorithms*, v. 31, p. 361–380, 2002. Citado na página 27.

LI, H.; LEUNG, W. T.; WHEELER, M. F. Sequential local mesh refinement solver with separate temporal and spatial adaptivity for non-linear two-phase flow problems. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 403, p. 109074, 2020. Citado na página 25.

LIU, J.; JIANG, Y.-L. Waveform relaxation for reaction-diffusion equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 17, p. 5040–5055, 2011. Citado na página 27.

LUBICH, C.; OSTERMANN, A. Multigrid dynamic iteration for parabolic equations. *BIT*, v. 27, n. 2, p. 216–234, 1987. Citado 3 vezes nas páginas 27, 59 e 61.

LUO, P. *et al.* Multigrid method for nonlinear poroelasticity equations. *Computing and Visualization in Science*, Springer, v. 17, n. 5, p. 255–265, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 19, 21, 25 e 26.

MALACARNE, M. F.; PINTO, M. A. V.; FRANCO, S. R. Performance of the multigrid method with time-stepping to solve 1d and 2d wave equations. *International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mechanics*, Taylor Francis, v. 23, n. 1, p. 45–56, 2022. Citado na página 25.

MALACARNE, M. F.; PINTO, M. A. V.; FRANCO, S. R. Subdomain method in time with waveform relaxation in space applied to the wave equation combined with the multigrid method. *Rev. int. métodos numér. cálc. diseno ing.*, v. 38, n. 4, p. 39, 2022. Citado 5 vezes nas páginas 26, 58, 59, 60 e 61.

MALACARNE, M. F.; PINTO, M. A. V.; FRANCO, S. R. A parallelizable method for two-dimensional wave propagation using subdomains in time with multigrid and waveform relaxation. *Acta Scientiarum Technology*, v. 47, p. 1–19, 2024. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 60.

MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacionais.* 2nd. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.

MARCHI, C. H. Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 51.

MARCHI, C. H. *et al.* Repeated richardson extrapolation applied to the two-dimensional laplace equation using triangular and square grids. *Applied Mathematical Modelling*, v. 37, n. 7, p. 4661–4675, 2013. Citado 4 vezes nas páginas 21, 25, 50 e 81.

MARCHI, C. H.; GERMER, E. M. Effect of ten cfd numerical schemes on repeated richardson extrapolation (rre). *Journal of Applied Computational Mathematics*, v. 2, n. 128, p. 1–8, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 48.

MARCHI, C. H. *et al.* Polynomial interpolation with repeated richardson extrapolation to reduce discretization error in CFD. *Applied Mathematical Modelling*, v. 40, p. 8872–8885, 2016. Citado 6 vezes nas páginas 21, 22, 28, 30, 46 e 48.

MARCHI, C. H.; SUERO, R.; ARAKI, L. K. The lid-driven square cavity flow: numerical solution with a 1024 x 1024 grid. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences an Engineering*, v. 31, n. 3, p. 186–198, 2009. Citado na página 49.

MARTINS, M. A. Multiextrapolação de Richardson com interpolação para reduzir e estimar o erro de discretização em CFD. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 47 e 50.

MARTINS, M. A.; MARCHI, C. H. Estimate of iteration errors in computational fluid dynamics. *Numerical Heat Transfer, Part B*, v. 53, p. 234–245, 2008. Citado na página 28.

MEHTA, U. B. Guide to credible computer simulations of fluid flows. *Journal of Propulsion and Power*, v. 15, p. 940–948, 1996. Citado na página 46.

MIEKKALA, U.; NEVANLINNA, O. Iterative solution of systems of linear differential equations. *Acta Numerica*, Cambridge University Press, v. 5, p. 259–307, 1996. Citado na página 61.

MOHAMMADI, A.; RAISEE, M. Effects of operational and geometrical uncertainties on heat transfer and pressure drop of ribbed passages. *Applied Thermal Engineering*, Elsevier, v. 125, p. 686–701, 2017. Citado na página 23.

NIEVERGELT, J. The solution of finite difference equations by orthogonal transformations. *Journal of the ACM (JACM)*, n. 11, p. 252–268, 1964. Citado na página 26.

OBERKAMPF, W. L.; ROY, C. J. Verification and validation in scientific computing. Cambridge: Cambridge University Press, 2010. Citado na página 48.

OLIVEIRA, F.; FRANCO, S. R.; PINTO, M. A. V. The effect of multigrid parameters in a 3d heat diffusion equation. *International Journal of Applied Mechanics and Engineering*, v. 23, p. 213–221, 02 2018. Citado 2 vezes nas páginas 72 e 79.

OLIVEIRA, M. de *et al.* Modified picard with multigrid method for two-phase flow problems in rigid porous media. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 125, n. 5, p. e7397, 2024. Citado na página 25.

PARLANGE, J.-Y. *et al.* Approximate analytical solution of the nonlinear diffusion equation for arbitrary boundary conditions. *Transport in Porous Media*, Springer, v. 30, p. 45–55, 1998. Citado na página 23.

PINTO, M. A. V.; MARCHI, C. H. Optimum parameters of a geometric multigrid for the two-dimensional laplace's equation. *Proceedings of COBEM*, 2007. Citado na página 21.

PINTO, M. A. V. *et al.* On the robustness of ilu smoothers on triangular grids. *Applied Numerical Mathematics*, v. 106, p. 37–52, 2016. ISSN 0168-9274. Citado na página 25.

RICHARDSON, L. F.; GAUNT, J. A. The deferred approach to the limit. *Philosophical Proceedings of the Royal Society of London*, v. 226, p. 299–361, 1927. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 48.

ROACHE, P. J. *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Albuquerque, USA: Hermosa Publishers, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 81.

RODRIGUES, S. *et al.* Reducing the discretization error for a poroelasticity problem in variables having extreme values. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 44, 04 2022. Citado 6 vezes nas páginas 23, 28, 29, 30, 46 e 47.

ROY, C. J.; OBEEKAMPF, W. L. A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing. *Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng.*, v. 200, p. 2131–2144, 2011. Citado na página 21.

SAAD, Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. 2nd. ed. Philadelphia: PWS, 2003. Citado na página 20.

SANTIAGO, C. D. *et al.* A multigrid waveform relaxation method for solving the pennes bioheat equation. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, Taylor Francis, v. 83, n. 9, p. 976–990, 2023. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 59.

SCHAUM, A. *et al.* Observer design for a nonlinear heat equation: Application to semiconductor wafer processing. *Journal of Process Control*, v. 119, p. 34–43, 2022. ISSN 0959-1524. Citado na página 23.

SEA1D, M. Multigrid newton-krylov method for radiation in diffusive semitransparent media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 203, n. 2, p. 498–515, 2007. ISSN 0377-0427. Special Issue: The first Indo-German Conference on PDE, Scientific Computing and Optimization in Applications. Citado na página 23.

SIDI, A. *Practical Extrapolation Methods; Theory and Applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. Citado na página 21.

SILVA, L. P. da *et al.* High order of accuracy for poisson equation obtained by grouping of repeated richardson extrapolation with fourth order schemes. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, Tech Science Press, v. 128, n. 2, p. 699–715, 2021. Citado 7 vezes nas páginas 21, 22, 23, 28, 29, 30 e 46.

SONG, H. *et al.* Development of a food temperature prediction model for real time food quality assessment. *International Journal of Refrigeration*, Elsevier, v. 98, p. 468–479, 2019. Citado na página 23.

STRIKWERDA, J. C. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations.* 2nd. ed. Pacific Grove, CA: SIAM, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.

STüBEN, K. A review of algebraic multigrid. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 128, n. 1, p. 281–309, 2001. ISSN 0377-0427. Numerical Analysis 2000. Vol. VII: Partial Differential Equations. Citado na página 25.

SUERO, R. *et al.* Analysis of algebraic multigrid parameters for two-dimensional steadystate heat diffusion equations. *Applied Mathematical Modelling*, v. 36, n. 7, p. 2996–3006, 2012. ISSN 0307-904X. Citado na página 25.

TA-ASAN, S.; ZHANG, H. On the multigrid waveform relaxation method. *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 16, n. 5, p. 1092–1104, 1995. Citado na página 59.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer.* 2nd. ed. Washington: Taylor Francis, 1997. Citado 4 vezes nas páginas 27, 33, 35 e 58.

TROTTENBERG, U.; OOSTERLEE, C.; SCHüLLER, A. *Multigrid.* San Diego: Academic Press, 2001. Citado 16 vezes nas páginas 20, 21, 24, 25, 37, 38, 39, 41, 43, 54, 67, 71, 72, 74, 78 e 79.

VANDEWALLE, S.; HORTON, G. Multicomputer-multigrid solution of parabolic partial differential equations. In: HEMKE, P. W.; WESSELIN, P. (Ed.). *Multigrid Methods IV: Proceedings of the Fourth European Multigrid Conference*. Amsterdam: Springer Basel AG, 1993. p. 97–109. Citado 4 vezes nas páginas 21, 26, 58 e 59.

VANDEWALLE, S.; HORTON, G. Fourier mode analysis of the multigrid waveform relaxation and time-parallel multigrid methods. *Computing*, v. 54, p. 317–330, 1995. Citado na página 59.

VANDEWALLE, S.; PIESSENS, R. Numerical experiments with nonlinear multigrid waveform relaxation on a parallel processor. *Applied Numerical Mathematics*, Elsevier, v. 8, n. 2, p. 149–161, 1991. Citado 4 vezes nas páginas 23, 26, 59 e 61.

VANDEWALLE, S.; PIESSENS, R. Efficient parallel algorithms for solving initial-boundary value and time-periodic parabolic partial differential equations. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, v. 13, p. 1330–1346, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 24, 27 e 59.

VANDEWALLE, S. G.; VELDE, E. F. Van de. Space-time concurrent multigrid waveform relaxation. *Annals of Numerical Mathematics*, v. 1, n. 1-4, p. 347–360, 1994. Citado na página 61.

WANG, X. *et al.* Predicting the equivalent thermal conductivity of pyramidal lattice core sandwich structures based on monte carlo model. *International Journal of Thermal Sciences*, Elsevier, v. 161, p. 106701, 2021. Citado na página 23.

WESSELING, P. An Introduction to Multigrid Methods. Chichester: John Wiley Sons, 1992. Citado 6 vezes nas páginas 25, 37, 39, 41, 71 e 78.

WESSELING, P.; OOSTERLEE, C. Multigrid with applications to computational fluid dynamics. *Comput. Appl. Math.*, v. 128, p. 311–334, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.

ZARBA, R. L. *A numerical investigation of unsaturated flow*. Tese (Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, 1988. Citado na página 20.

ZEL'DOVICH, Y. B.; RAIZER, Y. P. *Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena.* [S.l.]: Courier Corporation, 2002. Citado na página 23.

ZEN, P. D.; PINTO, M. A. V.; FRANCO, S. R. A multigrid waveform relaxation method for solving the nonlinear silicon problem with relaxing boundary conditions. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, Taylor & Francis, v. 0, n. 0, p. 1–16, 2024. Citado 3 vezes nas páginas 24, 26 e 52.

ZHUANG, C.; XIONG, Z.; DING, H. Temperature-constrained topology optimization of nonlinear heat conduction problems. *Journal of Computational Design and Engineering*, v. 8, n. 4, p. 1059–1081, 06 2021. ISSN 2288-5048. Citado na página 24.

ÖZIşIK, M. et al. Finite difference methods in heat transfer: Second Edition. [S.l.: s.n.], 2017. 1-578 p. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 35.

Apêndices

APÊNDICE A – MÉTODO TIME-STEPPING NEWTON-MG

Este apêndice apresenta os testes realizados para avaliar o desempenho do método *Time-Stepping* com *multigrid* em conjunto com o método de linearização de Newton (Ts Newton-MG), considerando diferentes combinações dos parâmetros físicos $\kappa_0 \in \chi$. Os valores adotados para κ_0 foram $0,01;0,1;0,5;1,0;2,0;10,0 \in 100,0$, enquanto que para χ foram testados $-2,0;-1,0;-0,5;0,0;0,5;1,0 \in 2,0$.

Os testes têm como objetivo complementar as análises apresentadas sobre a influência dessas variações nos tempos de convergência e na eficiência do método na solução da equação do calor não linear unidimensional, além de evidenciar sua robustez. Para cada combinação de $\kappa_0 \in \chi$, foram registrados dados sobre o número médio de linearizações, número médio de ciclos V(1,1) necessários para a convergência, o tempo de CPU total de execução, ordem de complexidade, fator de convergência e o *speed-up* do método.

Os resultados apresentados neste apêndice complementam as análises discutidas no corpo principal da tese, seção 5.2, permitindo uma avaliação mais detalhada do comportamento do TS Newton-MG com diferentes parâmetros físicos.

A.1 Número médio de linearizações

O comportamento apresentado na Tab. A.1 complementa os resultados discutidos anteriormente. Observa-se que, independentemente dos valores de κ_0 e χ , o número médio de linearizações converge para 2,0 à medida que o número de malhas aumenta. Essa tendência sugere que o método mantém um desempenho consistente, mesmo diante de variações nos parâmetros físicos analisados.

| κ_0 χ 22 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 $-2,0$ 11.8 $4,0$ 3.5 3.3 3.1 3.0 3.0 2.9 2.5 2.3 2.2 2.3 2.0 | | | | | | | | Nún | nero d | e Mal | has | | | | | |
|--|------------|--------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| -2.0 11.8 4.0 3.5 3.3 3.0 3.0 2.9 2.3 2.2 2.0 2.0 2.0 2.0 -1.0 4.8 3.0 3.0 3.0 3.0 3.0 3.0 2.0 <td>κ_0</td> <td>χ</td> <td>2</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>5</td> <td>6</td> <td>7</td> <td>8</td> <td>9</td> <td>10</td> <td>11</td> <td>12</td> <td>13</td> <td>14</td> <td>15</td> | κ_0 | χ | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 |
| -1.0 4.8 3.6 3.2 3.0 3.0 2.9 2.5 2.3 2.0 2.0 2.0 2.0 2.0 0.01 0.0 2.0 <td></td> <td>-2,0</td> <td>11,8</td> <td>4,0</td> <td>3,5</td> <td>3,3</td> <td>3,1</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>2,9</td> <td>2,3</td> <td>2,2</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> | | -2,0 | 11,8 | 4,0 | 3,5 | 3,3 | 3,1 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,3 | 2,2 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| -0,5 3,0 3,0 3,0 3,0 2,6 2,4 2,1 2,0 <td></td> <td>-1,0</td> <td>4,8</td> <td>3,6</td> <td>3,2</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>2,9</td> <td>2,5</td> <td>2,3</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> | | -1,0 | 4,8 | 3,6 | 3,2 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,5 | 2,3 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| 0.01 0.0 2.0 <td></td> <td>-0,5</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>2,6</td> <td>2,4</td> <td>2,1</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> | | -0,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,6 | 2,4 | 2,1 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 0,01 | 0,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| 1,0 3,8 3,0 3,0 3,0 3,0 3,0 2,7 2,4 2,0 <td></td> <td>0,5</td> <td>3,8</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>3,0</td> <td>2,8</td> <td>2,6</td> <td>2,4</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> <td>2,0</td> | | 0,5 | 3,8 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,8 | 2,6 | 2,4 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$ | | 1,0 | 3,8 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,7 | 2,4 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2,0 | 3,8 | 3,5 | 3,2 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,8 | 2,5 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 3,8 | 3,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,8 | 2,5 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,6 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -0,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,7 | 2,2 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 0,1 | 0,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 0,5 | 3,3 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,5 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 1,0 | 3,8 | 3,1 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,6 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2,0 | 4,0 | 3,1 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,6 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 3,5 | 3,5 | 3,2 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,8 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 3,8 | 3,1 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,8 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -0,5 | 3,3 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,4 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 0,5 | 0,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 0,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,7 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$ | | 1,0 | 3,3 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,8 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2,0 | 3,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,6 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 4,0 | 3,6 | 3,1 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,7 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 3,8 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,7 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 1.0 | -0,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 1,0 | 0,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 0,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,5 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 1,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,5 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,8 | 2,3 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 4,0 | 3,3 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,8 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 3,5 | 3,1 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 0.0 | -0,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 2,0 | 0,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| $\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $ | | 0,5 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| | | 1,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |
| | | 2,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 3,0 | 2,9 | 2,3 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 | 2,0 |

TABELA A.1 – \overline{it}_{Lin} no método TS Newton-MG

Fonte: A Autora (2025).

A.2Número médio de ciclos V(1,1)

Na Tab. A.2, são apresentados os números médios de ciclos V(1,1) para as variações de parâmetros físicos, permitindo uma análise mais abrangente do impacto desses valores no desempenho do método.

Esses resultados são semelhantes aos apresentados no corpo do texto, proporcionando uma visão mais detalhada sobre a influência de κ_0 e χ na convergência e eficiência do processo de linearização.

| | | | | | | | Nún | iero d | le Ma | lhas | | | | | |
|------------|----------|----|----|----|----|----|-----|--------|-------|------|----|----|----|----|----|
| κ_0 | χ | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 |
| | -2,0 | 4 | 5 | 5 | 5 | 6 | 6 | 7 | 8 | 10 | 12 | 15 | 16 | 17 | 18 |
| | -1,0 | 4 | 4 | 5 | 5 | 6 | 8 | 9 | 11 | 13 | 15 | 16 | 17 | 18 | 18 |
| | -0,5 | 4 | 4 | 5 | 6 | 8 | 9 | 11 | 13 | 14 | 16 | 17 | 18 | 18 | 18 |
| 0,01 | 0,0 | 6 | 6 | 8 | 8 | 10 | 12 | 14 | 16 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 |
| , | 0,5 | 5 | 5 | 6 | 8 | 10 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 17 | 18 | 18 | 18 |
| | 1.0 | 6 | 6 | 7 | 9 | 12 | 14 | 15 | 15 | 16 | 17 | 17 | 18 | 18 | 18 |
| | 2,0 | 7 | 8 | 10 | 12 | 15 | 16 | 15 | 15 | 16 | 17 | 17 | 18 | 18 | 18 |
| | -2,0 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 11 | 13 | 13 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 18 |
| | -1,0 | 5 | 6 | 7 | 9 | 11 | 13 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 18 |
| | -0,5 | 6 | 7 | 8 | 11 | 13 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 18 | 18 |
| 0,1 | 0,0 | 8 | 10 | 12 | 16 | 16 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 |
| <i>,</i> | $0,\!5$ | 8 | 9 | 11 | 13 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 18 | 17 |
| | 1,0 | 9 | 11 | 12 | 13 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 18 | 17 |
| | 2,0 | 9 | 13 | 13 | 14 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 |
| | -2,0 | 6 | 8 | 9 | 10 | 12 | 13 | 14 | 15 | 14 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 |
| | -1,0 | 8 | 10 | 10 | 12 | 14 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 |
| | -0,5 | 9 | 10 | 12 | 14 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 18 | 17 |
| 0,5 | 0,0 | 12 | 14 | 16 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 |
| , | 0,5 | 8 | 12 | 13 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 18 | 17 | 17 |
| | 1,0 | 10 | 11 | 13 | 14 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 | 17 |
| | 2,0 | 19 | 10 | 11 | 14 | 14 | 14 | 14 | 15 | 15 | 16 | 17 | 17 | 17 | 16 |
| | -2,0 | 7 | 9 | 11 | 11 | 13 | 14 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 |
| | -1,0 | 9 | 9 | 11 | 13 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 |
| | -0,5 | 8 | 11 | 13 | 14 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 | 17 |
| 1,0 | 0,0 | 10 | 16 | 16 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 |
| , | 0,5 | 10 | 11 | 13 | 15 | 15 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 | 17 |
| | 1,0 | 13 | 7 | 12 | 14 | 15 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 | 16 |
| | 2,0 | 22 | 16 | 11 | 12 | 14 | 13 | 14 | 15 | 15 | 16 | 17 | 17 | 16 | 16 |
| | -2,0 | 9 | 11 | 10 | 12 | 13 | 14 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 |
| | -1,0 | 10 | 11 | 12 | 14 | 15 | 15 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 |
| | -0,5 | 7 | 11 | 13 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 | 17 |
| 2,0 | 0,0 | 16 | 14 | 16 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 |
| | $0,\!5$ | 16 | 9 | 12 | 14 | 14 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 | 16 |
| | 1,0 | 20 | 14 | 9 | 13 | 14 | 14 | 14 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 16 | 16 |
| | 2,0 | 28 | 23 | 18 | 11 | 11 | 13 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 16 | 15 | 16 |
| | -2,0 | 9 | 10 | 12 | 13 | 14 | 15 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 |
| | -1,0 | 15 | 9 | 12 | 14 | 14 | 14 | 14 | 15 | 16 | 16 | 17 | 17 | 17 | 16 |
| | -0,5 | 21 | 15 | 8 | 13 | 13 | 14 | 15 | 15 | 16 | 17 | 17 | 17 | 16 | 16 |
| 10,0 | 0,0 | 30 | 23 | 16 | 12 | 16 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 |
| | $0,\!5$ | 31 | 26 | 19 | 12 | 10 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 17 | 16 | 16 | 16 |
| | 1,0 | 34 | 30 | 24 | 16 | 9 | 11 | 14 | 15 | 16 | 16 | 16 | 15 | 16 | 16 |
| | 2,0 | 39 | 35 | 32 | 25 | 17 | 12 | 10 | 13 | 15 | 15 | 15 | 15 | 16 | 16 |
| | -2,0 | 27 | 22 | 16 | 9 | 12 | 13 | 14 | 15 | 15 | 16 | 16 | 17 | 16 | 16 |
| | -1,0 | 36 | 32 | 27 | 19 | 11 | 10 | 13 | 15 | 16 | 16 | 16 | 15 | 16 | 16 |
| | -0,5 | 40 | 36 | 30 | 21 | 16 | 10 | 12 | 14 | 16 | 16 | 15 | 16 | 16 | 17 |
| 100,0 | 0,0 | 44 | 40 | 36 | 32 | 25 | 18 | 11 | 16 | 17 | 18 | 18 | 18 | 18 | 18 |
| , | 0,5 | 42 | 38 | 32 | 29 | 25 | 20 | 14 | 10 | 14 | 14 | 15 | 16 | 16 | 17 |
| | 1,0 | 44 | 40 | 33 | 31 | 28 | 24 | 19 | 12 | 12 | 14 | 15 | 16 | 16 | 17 |
| | 2,0 | 43 | 35 | 35 | 34 | 33 | 32 | 27 | 21 | 15 | 9 | 13 | 15 | 16 | 16 |
| | | | | | | | | (0 | | | | | | | |

TABELA A.2 – $\overline{\overline{it}}_{Lin}$ no método TS Newton-MG

Fonte: A Autora (2025).

A.3 Tempo de CPU

Na Fig. A.1 são apresentados os tempos computacionais necessários até alcançar a tolerância definida, considerando as diferentes combinações de parâmetros físicos analisadas.

FIGURA A.1 – t_{CPU} para o método TS Newton-MG: (a) para $\kappa = 0,01; 0,1; 0,5$ e (b) para $\kappa = 1,0; 2,0; 10,0; 100,0.$



Fonte: A Autora (2025).

Esses resultados complementam a análise anterior, evidenciando o impacto de κ_0 e χ no desempenho do método.

A.4 Ordem de complexidade

Para avaliar o desempenho dos métodos numéricos em função do número de incógnitas, foi analisada a ordem de complexidade p, que indica os recursos computacionais necessários para resolver o problema.

| $ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$ | Parâmetros | | Multi | grid | Single | grid |
|---|------------|--------|----------------------|------------------|----------------------|------------------|
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | κ_0 | χ | с | p | c | p |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 9,82E-07 | 0,9425 | 7,29E-09 | 1,1940 |
| $\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 3,76E-07 | 1,0047 | 1,77E-09 | 1,3352 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -0,5 | 2,84E-07 | 1,0224 | 1,41E-08 | 1,2253 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 0,01 | 0.0 | 5,53E-07 | 0,9871 | 6,00E-10 | 1,4655 |
| $ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 0,5 | 6,82E-07 | 0,9739 | 7,53E-10 | $1,\!4860$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 1,0 | 4,28E-07 | 0,9985 | 1,08E-09 | $1,\!4979$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2,0 | 2,83E-06 | 0,8895 | 8,27E-09 | $1,\!4334$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 5,39E-07 | 0,9858 | 5,08E-09 | 1,3367 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 4,71E-07 | 0,9929 | 5,39E-09 | 1,3955 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -0,5 | 5,82E-07 | 0,9840 | 1,89E-09 | $1,\!4984$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 0,1 | 0,0 | 5,24E-07 | 0,9913 | 2,89E-09 | 1,5035 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 0,5 | 6,87E-07 | 0,9719 | 2,88E-08 | $1,\!3870$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 1,0 | 8,14E-07 | 0,9603 | 2,43E-08 | $1,\!4317$ |
| $\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$ | | 2,0 | 8,49E-07 | 0,9597 | 4,70E-08 | $1,\!4601$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 1,24E-06 | 0,9392 | 1,71E-08 | 1,3566 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 9,76E-07 | 0,9525 | 1,14E-08 | $1,\!4500$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -0,5 | 6,34E-07 | 0,9759 | 2,29E-08 | $1,\!4350$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | $_{0,5}$ | 0,0 | 3,35E-07 | 1,0138 | 1,41E-08 | 1,5025 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 0,5 | 6,92E-07 | 0,9725 | 4,09E-08 | 1,4654 |
| $\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$ | | 1,0 | 7,73E-07 | 0,9674 | 7,39E-08 | 1,4603 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2,0 | 9,68E-07 | 0,9526 | 1,49E-07 | $1,\!4784$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 1,87E-07 | 1,0483 | 1,32E-08 | 1,4163 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 7,95E-07 | 0,9661 | 2,08E-08 | $1,\!4532$ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -0,5 | 6,9E-07 | $0,\!9738$ | 3,52E-08 | $1,\!4517$ |
| $ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$ | 1,0 | 0,0 | 8,25E-07 | 0,9651 | 3,88E-08 | 1,4795 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 0,5 | 5,07E-07 | 0,9885 | 5,89E-08 | 1,4864 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 1,0 | 5,1E-07 | 0,9868 | 9,52E-08 | 1,4878 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2,0 | 5,43E-07 | 0,9817 | 3,97E-07 | 1,4550 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 8,60E-07 | 0,9599 | 2,83E-08 | 1,4110 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 8,34E-07 | 0,9612 | 5,26E-08 | 1,4370 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 0.0 | -0,5 | 8,36E-07 | 0,9617 | 8,42E-08 | 1,4383 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 2,0 | 0,0 | 4,85E-07 | 0,9943 | 1,04E-07 | 1,4580 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 0,5 | 2,05E-07 | 1,0398 | 2,05E-07 | 1,4453 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 1,0 | 3,03E-07 | 1,0082 | 3,84E-07 | 1,4301 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2,0 | 4,32E-07 | 0,9964 | 0,4E-07 | 1,4008 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2,0 | 3,03E-07 | 1,0050 | 0,00E-00 | 1,4440 1,4202 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -1,0 | 4,20E-07 | 1,0009 | 2,00E-07 | 1,4525 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 10.0 | -0,5 | 4,10E-07 | 1,0000 | 3,10E-07 | 1,4500 1.470 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 10,0 | 0,0 | 4,27E-07 | 1,0022 | 5,00E-07 | 1,479 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 1.0 | 2,23E-07 1.02E.07 | 1,0323 | 754E07 | 1,4020 1,4026 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | 2.0 | 1,321-07 3.83E 07 | 1,0350 1.0350 | 1,94D-07 1.91E.06 | 1,4920 1 5990 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -2.0 | 2.09E-07 | 1.0373 | 6.02E-07 | 1 4621 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | _1 0 | 2,00E-07 | 0.9989 | 8 40E-07 | 1,1021 1,5040 |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | | -0.5 | 4 23E-07 | 0.9964 | $1.21E_{-06}$ | 1,5040 1,5144 |
| $\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 100.0 | | 2.48E-07 | 1.0324 | 1,210-00 1.83E-06 | 1,5114 |
| 1.0 $3.78E_07$ 0.0071 $2.33E_07$ 1.5294 | 100,0 | 0.5 | 2,95E-07 | 1,0024 1,0157 | 2.36E-06 | 1,5114 1,5254 |
| 1 + 1 + 0 + 1 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + | | 1.0 | 3.78E-07 | 0.9971 | 2.23E-06 | 1.5518 |
| $\begin{vmatrix} 2,0 \\ 2,0 \end{vmatrix}$ $\begin{vmatrix} 1,83E-06 \\ 0,8923 \end{vmatrix}$ $\begin{vmatrix} 2,522 \\ 1,81E-06 \\ 1.6119 \end{vmatrix}$ | | 2,0 | 1,83E-06 | 0.8923 | 1.81E-06 | 1.6119 |

TABELA A.3 – Ordem de complexidade para o método TS Newton-MG

Fonte: A Autora (2025).

Conclui-se que os resultados apresentados na Tab. A.3 são consistentes com os da Tab. 5, reforçando a eficiência do método e demonstrando sua estabilidade diante das variações analisadas.

A.5 Fator de convergência médio

Utilizado como uma medida de desempenho dos métodos *multigrid*, a Fig. ?? apresenta o fator de convergência médio para os demais parâmetros avaliados. Observa-se que, para $\kappa_0 = 100,0$, um caso caracterizado por alta não linearidade, o método tende a diminuir à medida que ocorre o refinamento de malha.

FIGURA A.2 – ρ_m para o método TS Newton-MG: (a) para $\kappa=0,01;\,0,1;\,0,5$ e (b) para $\kappa=1,0;\,2,0;\,10,0;\,100,0.$



Fonte: A Autora (2025).

A.6 Speed-up

A análise do comportamento das retas ajustadas apresentadas na Fig. A.3 é semelhante à observada na Fig. 14, comprovando a eficiência do método *multigrid* em comparação com o método *singlegrid*.

FIGURA A.3 – Speed-up para o método TS Newton-MG: (a) para $\kappa=0,01;~0,1;~0,5$ e (b) para $\kappa=1,0;~2,0;~10,0;~100,0.$



Fonte: A Autora (2025).

APÊNDICE B – WAVEFORM RELAXATION-FULL APPROXIMATION SCHEME

Semelhante ao método TS Newton-MG, este apêndice foi elaborado com o objetivo de apresentar os testes realizados para o método *Waveform Relaxation* com *Full Approximation Scheme* (WR FAS). Aqui são disponibilizadas as tabelas e gráficos que complementam o estudo, fornecendo uma análise detalhada sobre o desempenho do WR FAS em diferentes condições, incluindo a influência dos parâmetros físicos considerados, além de evidenciar sua robustez.

B.1 Número de ciclos V(1,1)

Observa-se, na Tab. B.4 que a quantidade de ciclos V(1,1) seguem o mesmo padrão apresentado em Tab. 6, indicando uma tendência consistente no comportamento do método. Essa similaridade reforça a estabilidade e a eficiência do WR FAS na solução dos problemas analisados, mesmo diante das variações nos parâmetros físicos considerados.

| | | Número de Malhas | | | | | | | | | | | | |
|------------|----------|------------------|----|----|----|----------------|----|----|----|----------------|----------------|----|----|----|
| κ_0 | χ | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 |
| | -2.0 | 100 | 25 | 15 | 10 | 9 | 10 | 11 | 11 | 11 | 10 | 10 | 9 | 10 |
| | -1,0 | 9 | 7 | 5 | 5 | $\overline{7}$ | 7 | 7 | 6 | 6 | 5 | 7 | 9 | 10 |
| | -0,5 | 5 | 4 | 5 | 6 | 7 | 7 | 6 | 5 | 5 | 4 | 8 | 8 | 9 |
| 0,01 | 0,0 | 5 | 6 | 6 | 7 | $\overline{7}$ | 6 | 6 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 |
| | 0,5 | 6 | 6 | 6 | 7 | 6 | 6 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 |
| | 1,0 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 |
| | 2,0 | 6 | 5 | 6 | 5 | 5 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 2 | 1 |
| | -2,0 | 7 | 5 | 5 | 7 | 8 | 8 | 8 | 8 | 10 | 9 | 9 | 9 | 10 |
| | -1,0 | 4 | 4 | 7 | 7 | $\overline{7}$ | 6 | 6 | 8 | 9 | 9 | 12 | 8 | 7 |
| | -0,5 | 4 | 5 | 7 | 6 | 6 | 5 | 5 | 8 | 9 | 8 | 10 | 8 | 7 |
| 0,1 | 0.0 | 4 | 6 | 7 | 6 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 |
| | 0,5 | 4 | 6 | 6 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 |
| | 1,0 | 5 | 6 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 |
| | 2,0 | 5 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | -2,0 | 4 | 6 | 7 | 7 | 7 | 8 | 9 | 9 | 9 | 8 | 8 | 8 | 7 |
| | -1,0 | 5 | 7 | 6 | 6 | 6 | 9 | 9 | 9 | 8 | 8 | 7 | 8 | 7 |
| | -0,5 | 6 | 6 | 6 | 5 | 5 | 8 | 9 | 8 | 8 | $\overline{7}$ | 7 | 7 | 7 |
| 0,5 | 0,0 | 6 | 6 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 |
| | 0,5 | 5 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 1,0 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 2,0 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | -2,0 | 4 | 7 | 7 | 6 | 8 | 10 | 9 | 9 | 8 | 8 | 7 | 8 | 7 |
| | -1,0 | 6 | 6 | 6 | 5 | 8 | 9 | 10 | 8 | $\overline{7}$ | $\overline{7}$ | 7 | 7 | 6 |
| | -0,5 | 6 | 6 | 6 | 5 | $\overline{7}$ | 9 | 8 | 8 | $\overline{7}$ | $\overline{7}$ | 7 | 6 | 6 |
| 1,0 | 0,0 | 5 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 0,5 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 1,0 | 4 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 2,0 | 3 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | -2,0 | 5 | 6 | 6 | 8 | 9 | 8 | 8 | 8 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| | -1,0 | 5 | 6 | 5 | 8 | 9 | 8 | 8 | 7 | 7 | $\overline{7}$ | 7 | 7 | 6 |
| | -0,5 | 5 | 6 | 5 | 5 | 7 | 8 | 8 | 7 | 7 | 7 | 7 | 6 | 6 |
| 2,0 | 0,0 | 5 | 5 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 0,5 | 4 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 1,0 | 4 | 4 | 3 | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 2,0 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | -2,0 | 5 | 6 | 8 | 9 | 9 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 6 | 6 | 6 |
| | -1,0 | 4 | 5 | 6 | 8 | $\overline{7}$ | 6 | 8 | 8 | 7 | 6 | 6 | 6 | 5 |
| | -0,5 | 4 | 4 | 4 | 5 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 6 | 6 | 6 | 5 |
| 10,0 | 0,0 | 3 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 0,5 | 3 | 3 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 1,0 | 2 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 2,0 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | -2,0 | 4 | 5 | 5 | 6 | 7 | 7 | 7 | 7 | 6 | 6 | 6 | 5 | 5 |
| | -1,0 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 5 | 5 | 4 |
| | -0,5 | 2 | 2 | 2 | 2 | 6 | 6 | 6 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 100,0 | 0,0 | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 100,0 | 0,5 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 1,0 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | 2,0 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| | <u> </u> | | | | | | | | | | | | | |

TABELA B.4 – \overline{it}_{MG} no método WR FAS

Fonte: A Autora (2025).

B.2 Tempo de CPU

O tempo de CPU é um fator essencial para medir o desempenho computacional do método WR FAS. A Fig. B.4 apresenta os tempos registrados para diferentes configurações, permitindo uma análise comparativa da eficiência do método em diferentes cenários. Essa avaliação é crucial para determinar a viabilidade prática da abordagem em aplicações que demandam alta performance computacional.

FIGURA B.4 – t_{CPU} para o método WR FAS: (a) para $\kappa=0,01;\,0,1;\,0,5$ e (b) para $\kappa=1,0;\,2,0;\,10,0;\,100,0.$



Fonte: A Autora (2025).
B.3 Speed-up

O speed-up é uma métrica importante para avaliar o ganho de desempenho do método WR FAS. A Fig. B.5 apresenta os resultados obtidos, permitindo verificar a eficiência do método e sua capacidade de aproveitar eficientemente os recursos computacionais disponíveis. Essa análise, complementa a apresentada em Fig. 17, seguindo a característica evidenciada anteriormente.

FIGURA B.5 – Speed-up para o método WR FAS: (a) para $\kappa = 0,01; 0,1; 0,5$ e (b) para $\kappa = 1,0; 2,0; 10,0; 100,0.$



Fonte: A Autora (2025).

| Parâmetros | | Multigrid | | Singlegrid | |
|------------|------|-----------|------------|------------|------------|
| κ_0 | - χ | c | p | C | <u>p</u> |
| 0 | -2.0 | 1.30E-10 | 1.8853 | 8.24E-07 | 1.0590 |
| | -1.0 | 4.11E-11 | 2.0450 | 1.86E-07 | 1.1320 |
| 0.01 | -0.5 | 1.60E-10 | 1.9764 | 1.35E-07 | 1.1488 |
| | 0.0 | 1.73E-10 | 1.9866 | 6.78E-07 | 0.9886 |
| -) - | 0.5 | 2.83E-10 | 2.0123 | 6.57E-07 | 0.9953 |
| | 1.0 | 4.91E-10 | 2.0119 | 5.82E-07 | 0.9966 |
| | 2.0 | 1.30E-09 | 2.0169 | 4,45E-07 | 0.9935 |
| | -2.0 | 4.85E-10 | 1.9350 | 2.11E-07 | 1.1395 |
| 0,1 | -1.0 | 8.27E-10 | 1.9803 | 2.02E-07 | 1.1257 |
| | -0.5 | 7.97E-10 | 2.0261 | 2.46E-07 | 1.1209 |
| | 0.0 | 1.01E-09 | 2.0264 | 1.27E-06 | 0.9104 |
| | 0.5 | 1.90E-09 | 2.0397 | 6.85E-07 | 0.9582 |
| | 1.0 | 3.13E-09 | 2.0399 | 4.07E-07 | 0.9891 |
| | 2.0 | 7.11E-09 | 2.0489 | 2.00E-07 | 1.0160 |
| | -2.0 | 3.97E-09 | 1.8122 | 4.52E-07 | 1.0873 |
| | -1.0 | 3.92E-08 | 1.7179 | 9.09E-07 | 1.0426 |
| | -0.5 | 3.28E-08 | 1.7979 | 9.16E-07 | 1.0384 |
| 0,5 | 0.0 | 7.83E-09 | 1.9878 | 3.83E-07 | 0.9712 |
| | 0.5 | 1.64E-08 | 1.9819 | 4.17E-07 | 0.9742 |
| | 1.0 | 1.45E-08 | 2.0333 | 1.64E-07 | 1.0256 |
| | 2.0 | 1.53E-07 | 1.8587 | 4.66E-08 | 1.0960 |
| | -2.0 | 4.24E-08 | 1.6325 | 9.64E-07 | 1.0395 |
| | -1.0 | 7.99E-08 | 1.6834 | 6.13E-07 | 1.0606 |
| | -0.5 | 8.36E-08 | 1.7585 | 6.90E-07 | 1.0230 |
| 1,0 | 0.0 | 9.91E-09 | 2.0149 | 1.20E-06 | 0.8973 |
| | 0.5 | 2,22E-08 | 2.0106 | 1.81E-07 | 1.0217 |
| | 1.0 | 5.34E-08 | 1.9618 | 8.96E-08 | 1.0596 |
| | 2.0 | 8.89E-07 | 1.6869 | 1.08E-07 | 1.0490 |
| | -2,0 | 7.07E-08 | 1.6340 | 9.46E-07 | 1,0362 |
| | -1,0 | 4,81E-08 | 1,7879 | 7,46E-07 | 1,0479 |
| | -0,5 | 1,06E-07 | 1,7962 | 5,28E-07 | 1,0670 |
| 2,0 | 0,0 | 2,33E-08 | 1,9973 | 1,33E-07 | 1,0225 |
| | 0,5 | 6,76E-08 | 1,9549 | 2,83E-07 | 0,9915 |
| | 1,0 | 3,56E-07 | 1,8046 | 1,12E-07 | 1,0465 |
| | 2,0 | 3,85E-07 | 1,7535 | 7,49E-08 | 1,0690 |
| | -2,0 | 6,92E-08 | 1,7724 | 5,16E-07 | 1,0665 |
| 10,0 | -1,0 | 1,78E-07 | 1,8128 | 6,47E-07 | 1,0493 |
| | -0,5 | 2,59E-07 | 1,8436 | 5,66E-07 | 1,0569 |
| | 0,0 | 2,45E-07 | 1,8529 | 9,75E-08 | 1,0407 |
| | 0,5 | 4,52E-07 | 1,7709 | 4,90E-08 | 1,0955 |
| | 1,0 | 8,72E-07 | 1,6721 | 3,27E-08 | 1,1176 |
| | 2,0 | 4,88E-07 | 1,6876 | 3,90E-08 | 1,1101 |
| | -2,0 | 5,37E-07 | 1,7659 | 5,17E-07 | 1,0600 |
| | -1,0 | 2,75E-07 | 1,8500 | 5,96E-07 | 1,0453 |
| | -0,5 | 1,20E-07 | 1,9516 | 3,74E-07 | 1,0721 |
| 100,0 | 0,0 | 1,14E-06 | 1,5882 | 1,21E-07 | 1,0273 |
| | 0,5 | 1,40E-06 | 1,5124 | 1,25E-07 | 1,0373 |
| | 1,0 | 1,24E-04 | 0,9766 | 4,09E-08 | 1,1049 |
| | 2,0 | 4,67E-03 | $0,\!3557$ | 1,04E-07 | $1,\!0515$ |
| | | | | | |

TABELA B.5 – Ordem de complexidade para o método WR FAS

Fonte: A Autora (2025).

B.4 Ordem de complexidade

A Tab. B.5 apresenta os resultados obtidos, possibilitando uma análise quantitativa da taxa de crescimento do custo computacional em função do refinamento da malha. Esses dados complementam os apresentados no texto, exibindo caraterísticas semelhantes aos casos analisados anteriormente, o que é fundamental para validar a aplicabilidade do método em problemas de grande escala e para orientar futuras otimizações no algoritmo.

B.5 Fator de convergência médio

A Tab. D.10 complementa à apresentada anteriormente, permitindo uma análise detalhada da eficiência do método em relação ao aumento da resolução do problema.

FIGURA B.6 – ρ_m para o método WR FAS: (a) para $\kappa=0,01;\,0,1;\,0,5$ e (b) para $\kappa=1,0;\,2,0;\,10,0;\,100,0.$



Fonte: A Autora (2025).

APÊNDICE C – MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

Neste apêndice, são apresentados os resultados referentes às ordens aparentes e estimativas de erro de discretização com e sem o uso da Múltipla Extrapolação de Richardon (MER). O estudo considera diferentes combinações dos parâmetros físicos κ_0 e χ , àqueles descritos na Tab. 2, permitindo uma compreensão detalhada da influência dessas variáveis na eficiência do processo iterativo. A partir dos testes realizados, busca-se verificar a estabilidade e a robustez do método, bem como sua adequação para a solução do problema proposto.

C.1 Outras variações de parâmetros $\kappa_0 \in \chi$

A Fig. C.7 apresenta o MG-Caso2, no qual há uma variação dos parâmetros κ_0 e χ . A ordem aparente analisada tende para as ordens assintóticas, embora de maneira menos pronunciada. Em relação ao erro de discretização, observamos que, para ambas parâmetros, o estimador de Richardson sem a utilização do MER permanece constante, indicando uma precisão semelhante para as duas variáveis.



FIGURA C.7 – MG-Caso2: $\kappa_0 = 0.1$ e $\chi = 2.0$ para o método WR FAS.

Os resultados indicam que o refinamento da malha leva à convergência dos valores esperados, mas com um efeito menos acentuado. A técnica se mostrou eficiente para a melhoria progressiva da solução, especialmente na primeira extrapolação, destacando-se a robustez da abordagem para esta configuração de parâmetros.

A Fig. C.8 apresenta o MG-Caso3. A ordem aparente analisada tende para as ordens assintóticas, embora de maneira menos pronunciada.

Os resultados demonstram que o refinamento da malha influencia a redução do



FIGURA C.8 – MG-Caso3: $\kappa_0 = 0.1 \text{ e } \chi = 0.5 \text{ o WR FAS.}$

erro, mas de forma gradual e previsível. A estabilidade na redução do erro sugere que esta configuração é adequada para aplicações onde a regularidade da solução seja um fator crítico.

A Fig. C.9 apresenta o MG-Caso4. Comparando-se os resultados obtidos, observase que o refinamento da malha tem um impacto significativo na melhoria da precisão da solução. A aplicação da MER resultou em uma redução acentuada do erro de discretização.

FIGURA C.9 – MG-Caso4: $\kappa_0 = 10,0 \text{ e } \chi = 2,0 \text{ o WR FAS}.$



Fonte: A Autora (2025)

A aplicação da MER se mostrou extremamente eficiente para reduzir o erro de discretização. Para esta configuração de $\kappa_0 \in \chi$, a redução do erro foi significativa mesmo para malhas menos refinadas, evidenciando a vantagem do método para problemas computacionalmente intensivos. Os resultados obtidos nos diferentes casos analisados confirmam a eficácia da Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) na redução do erro de discretização mesmo não sendo uma redução tão acentuada. Isso pode ser explicado pelo fato de algumas ordens aparentes p_U ainda não estarem na faixa monotônica, onde a MER tem seus melhores resultados.

A influência dos parâmetros $\kappa_0 \in \chi$ foi determinante para a taxa de convergência, demonstrando que o refinamento da malha aliado à extrapolação pode melhorar bastante a acurácia da solução numérica sem um aumento excessivo do custo computacional. Dessa forma, a técnica se apresenta como uma abordagem robusta e vantajosa para aplicações em problemas complexos.

APÊNDICE D – SPEED-UP COMPARATIVO ENTRE OS MÉTODOS TIME STEPPING E WAVEFORM RELAXATION

Nesta seção apresenta-se o Speed-up entre os métodos Time Stepping e Waveform Relaxation, ou seja, $S = \frac{t_{CPU}(TS)}{t_{CPU}(WR)}$.



FIGURA D.10 – Gráfico do Speed-up entre os métodos Time Stepping e Waveform Relaxation.

Fonte: A Autora (2025).