

**PROCEDIMENTO PARA DIMINUIR E ESTIMAR ERROS DE
DISCRETIZAÇÃO BASEADO EM SOLUÇÕES NUMÉRICAS COERENTES**

Carlos Henrique Marchi

Antônio Fábio Carvalho da Silva

COBEM-99

XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica

Águas de Lindóia, SP, novembro de 1999.

CD-ROM

PROCEDIMENTO PARA DIMINUIR E ESTIMAR ERROS DE DISCRETIZAÇÃO BASEADO EM SOLUÇÕES NUMÉRICAS COERENTES

Carlos Henrique Marchi

Universidade Federal do Paraná, Depto. Eng. Mecânica
Curitiba, PR - marchi@cce.ufpr.br

Antônio Fábio Carvalho da Silva

Universidade Federal de Santa Catarina, Depto. Eng. Mecânica
Florianópolis, SC - fabio@sinmec.ufsc.br

***Resumo.** O procedimento proposto neste trabalho é baseado na comparação das soluções numéricas, obtidas numa mesma malha, mas com funções de interpolação de ordens de convergência espacial diferentes. A solução de ordem alta serve como referência para a solução de ordem baixa, que é usada tanto para diminuir quanto para estimar o erro de discretização através da extrapolação de Richardson. As variáveis podem ser locais ou globais. O procedimento foi testado usando soluções numéricas de modelos matemáticos com uma e quatro variáveis dependentes: equação de advecção-difusão e escoamento de fluidos compressíveis. As soluções numéricas foram obtidas com o método dos volumes finitos em domínios unidimensionais com malhas uniformes. O procedimento funcionou em todos os mais de 500 testes efetuados que incluíram ampla faixa de tamanho de malha, razões de refino de malha constantes e variáveis, e quatro funções de interpolação.*

***Palavras-chave:** erros numéricos, incerteza numérica, extrapolação de Richardson, simulação numérica, escoamentos de fluidos.*

1. INTRODUÇÃO

As soluções numéricas de qualquer variável de interesse (Φ_h), obtidas em malhas com dois ou três tamanhos de volumes de controle (h) diferentes, não permitem realizar estimativas confiáveis do erro de discretização, mesmo que os valores de Φ_h apresentem aparentemente tendência de convergência (Marchi e Silva, 1999).

Por exemplo, os resultados numéricos Φ_h em função da malha (h), de um problema unidimensional em regime permanente, são 26.00, 15.65 e 14.92, obtidos, respectivamente, em malhas com h igual a 0.5, 0.25 e 0.125. Para as duas malhas maiores, calculando-se a incerteza da solução numérica através do estimador GCI (Roache, 1994), obtém-se $GCI/erro = 0.37$, ou seja, o valor do erro é cerca de 3 vezes o valor da incerteza e, portanto, a incerteza da solução numérica dada pelo GCI subestima o valor do erro. Já as soluções obtidas com as duas malhas menores parecem indicar que há convergência (Ferziger e Peric, 1996) na

solução, no entanto, obtém-se $GCI/erro = 0.026$, isto é, o erro é aproximadamente 38 vezes o valor da incerteza. Neste caso, o GCI subestima, relativamente, ainda mais o erro. Portanto, ao refinar a malha, aparentemente há convergência se considerados os valores de Φ_h mas a estimativa do erro (incerteza) piora e muito. Além disso, a própria tendência aparente de convergência pode ser errônea, como no exemplo acima: os valores de Φ_h diminuem com o refinamento da malha mas deveriam aumentar (isto de fato ocorre para $h < 0.1$) já que o valor da solução analítica é 100.

Os tipos de erros que podem existir na solução numérica de um modelo matemático são (AIAA, 1998): erros de discretização, de iteração e de arredondamento, além de enganos. Os erros de discretização (E_h) representam a diferença entre a solução analítica exata do modelo matemático e a solução numérica exata das equações discretizadas, sem qualquer outro tipo de erro nestas soluções. Os erros de iteração (E_n) representam a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração, numa mesma malha, sem erros de arredondamento e enganos nestas soluções. Os erros de arredondamento (E_π) são os erros que ocorrem em virtude da representação finita dos números reais nas computações. E os enganos são erros cometidos por negligência e ignorância, por exemplo, na discretização do modelo matemático, e na implementação e uso do código computacional.

Marchi e Silva (1999) mostram quais são as condições suficientes para estimar com acurácia e confiabilidade erros de discretização em problemas unidimensionais: é necessário conhecer, para cada variável de interesse, a curva de ordem aparente (Roache, 1997) em função do tamanho característico da malha (h). Por ser este procedimento muito custoso computacionalmente, ele é mais apropriado para obter resultados de referência (*benchmarks*), mas não para aplicações práticas. Portanto, o objetivo deste trabalho é propor um procedimento mais prático, mas ainda com relativa confiabilidade, para estimar erros de discretização de soluções numéricas, bem como resultados que o corroboram. Este procedimento é baseado na comparação das soluções numéricas obtidas numa mesma malha mas usando funções de interpolação de ordens baixa e alta. A solução de ordem alta serve como referência para a solução de ordem baixa, que é usada tanto para diminuir quanto para estimar o erro de discretização. O fundamento teórico do procedimento tem por base que soluções numéricas obtidas com funções de interpolação diferentes têm que convergir para a mesma solução quando $h \rightarrow 0$.

O trabalho é desenvolvido considerando: (1) método dos volumes finitos (Ferziger e Peric, 1996); (2) problemas unidimensionais em regime permanente com uma e quatro variáveis dependentes; (3) os níveis dos erros de arredondamento e de iteração são muito pequenos em relação aos erros de discretização, e considera-se que não existem enganos; (4) as malhas são uniformes, isto é, o tamanho dos volumes de controle (h) é constante numa mesma malha; (5) as estimativas de erro são *a posteriori* da obtenção das soluções numéricas; (6) as estimativas de erro podem ser aplicadas a variáveis dependentes e a quaisquer variáveis secundárias obtidas por diferenciação ou integração das variáveis dependentes; estas variáveis secundárias podem ser do tipo local, para valor específico da variável independente, ou do tipo global, sobre parte ou todo o domínio de cálculo; e, (7) o uso da extrapolação de Richardson (Roache, 1994) para diminuir e estimar os erros de discretização; outras formas de estimar erros de discretização, no âmbito dos métodos de elementos finitos, podem ser vistas no trabalho de Babuska et al. (1997).

Apesar de se considerar apenas situações unidimensionais e volumes finitos, segundo Roache (1998), as estimativas de erro baseadas na extrapolação de Richardson podem ser aplicadas a situações multidimensionais e a todos os demais métodos numéricos que sejam consistentes (Ferziger e Peric, 1996), por exemplo, diferenças finitas e elementos finitos.

A seguir são apresentadas as definições matemáticas de erro de discretização, extrapolação de Richardson e ordens de convergência espacial. Estas definições são usadas na seção 3 onde apresenta-se o procedimento proposto neste trabalho para estimar erros de discretização. Nas seções 4 e 5, o procedimento é aplicado na solução de modelos matemáticos com uma e quatro variáveis dependentes.

2. FUNDAMENTOS

O **erro de discretização** da solução numérica em relação à solução analítica exata do modelo matemático é definido por (Ferziger e Peric, 1996)

$$E_h = \Phi_A - \Phi_h \quad (1)$$

onde E_h = erro de discretização de Φ_h ; Φ_h = solução numérica obtida com malha de dimensão característica h ; e, Φ_A = solução analítica exata. O símbolo Φ representa qualquer variável dependente (de campo), ou variáveis secundárias obtidas das variáveis dependentes. Para a Eq. (1) medir de fato o erro de discretização, a solução de Φ_h não deve conter outros tipos de erros (de iteração, de arredondamento ou enganos), ou pelo menos a magnitude deles deve ser muito inferior ao erro de discretização.

Os erros de discretização das soluções numéricas podem ser minimizados e estimados através da **extrapolação de Richardson** generalizada (Roache, 1994), dada por

$$\Phi_\infty = \Phi_1 + \frac{(\Phi_1 - \Phi_2)}{(q^p - 1)} \quad (2)$$

$$q = \frac{h_2}{h_1} \quad (3)$$

onde Φ_2 = solução numérica da malha grossa (h_2); Φ_1 = solução numérica da malha fina (h_1); Φ_∞ = solução numérica extrapolada; h_2 = comprimento dos volumes de controle da malha grossa; h_1 = comprimento dos volumes de controle da malha fina; q = razão de refino entre as malhas h_2 e h_1 ; e, p = ordem de convergência espacial teórica (p_t) ou aparente (p_a).

Um parâmetro que influencia diretamente a extrapolação de Richardson, Eq. (2), é a ordem de convergência espacial (p) da solução numérica. Podem ser definidos três tipos de ordem (Roache, 1997): teórica, aparente e assintótica. A **ordem teórica (p_t)** é obtida a partir da análise da discretização do modelo matemático empregado, ou do erro de truncamento, usando, por exemplo, a série de Taylor (Ferziger e Peric, 1996).

A **ordem aparente (p_a)** é calculada com base em três soluções numéricas obtidas em três malhas diferentes. Para razão de refino de malha constante entre as três malhas, tem-se (De Vahl Davis, 1983)

$$p_a = \frac{\ln\left(\frac{\Phi_2 - \Phi_3}{\Phi_1 - \Phi_2}\right)}{\ln(q)} \quad (4)$$

onde p_a = ordem de convergência espacial aparente; Φ_3 = solução numérica da malha supergrossa (h_3); h_3 = comprimento dos volumes de controle da malha supergrossa; e $h_3/h_2 =$

$h_2/h_1 = q$. Roache (1997) e Marchi e Silva (1999) apresentam expressões para calcular p_a quando a razão de refino de malha varia entre h_3 , h_2 e h_1 .

A **ordem assintótica** (p_∞), em geral, é igual à ordem teórica (p_t). Seu valor corresponde à ordem para a qual converge a ordem aparente (p_a) quando h tende a zero, ou seja,

$$p_\infty = \lim_{h \rightarrow 0} (p_a) \quad (5)$$

3. PROCEDIMENTO

O fundamento teórico do procedimento proposto neste trabalho tem por base que soluções numéricas obtidas com funções de interpolação diferentes devem tender à mesma solução quando $h \rightarrow 0$, ou seja, elas têm que ser consistentes.

Marchi e Silva (1999) mostram quais são as condições suficientes para estimar com acurácia e confiabilidade erros de discretização em problemas unidimensionais. Para uma função de interpolação específica, o uso da extrapolação de Richardson, Eq. (2), com ordens assintótica e aparente, permite obter dois valores que limitam a solução analítica exata da variável de interesse, isto é, o valor da solução analítica fica entre estes dois valores extrapolados. Mas isso ocorre somente quando a curva de ordem aparente encontra-se na faixa de convergência, na forma definida no trabalho mencionado. No entanto, para saber se num h específico a solução numérica já tem comportamento convergente, é necessário obter a curva de ordem aparente, isto é, a função $p_a(h)$, o que é muito custoso computacionalmente.

Para cada variável de interesse (Φ), o procedimento proposto aqui é baseado na comparação das soluções numéricas, obtidas numa mesma malha h , mas usando funções de interpolação de ordens baixa e alta. Para uma malha h e incógnita Φ específicos, a solução de ordem alta é usada para obter o intervalo de Φ dentro do qual espera-se que esteja a solução exata se a ordem aparente já for convergente para o h em consideração. Para a mesma malha h e a mesma incógnita Φ , usando a função de interpolação de ordem baixa, obtém-se o intervalo de Φ dentro do qual espera-se que esteja a solução exata se a sua ordem aparente também já for convergente. Se o intervalo de solução obtido com a função de interpolação de ordem alta estiver contido no intervalo de solução da função de interpolação de ordem baixa, considera-se que as **soluções numéricas** são **coerentes** para a variável Φ e malha h considerados. A solução de ordem alta serve como referência para a solução de ordem baixa, que é usada tanto para diminuir quanto para estimar o erro de discretização através da extrapolação de Richardson.

Definidas as funções de interpolação de ordem baixa (índice L) e alta (índice H), conhecidos os seus respectivos valores de ordem assintótica (p_∞^L e p_∞^H), e definidas as malhas (h_3 , h_2 e h_1) e respectiva razão de refino (q) entre elas, o procedimento recomendado para cada variável de interesse (Φ) é:

- 1) obter as soluções numéricas Φ_1 , Φ_2 e Φ_3 com as funções de interpolação de ordens baixa e alta;
- 2) com a Eq. (4), calcular a ordem aparente das soluções numéricas obtidas com as funções de interpolação de ordens baixa e alta; só são válidos valores positivos, isto é, $p_a > 0$ (Marchi e Silva, 1999); se $p_a \leq 0$ ou não existir, deve-se descartar as soluções da malha h_3 , obter novas soluções numa malha mais fina do que h_1 e refazer o item 2;

- 3) com as soluções numéricas Φ_1 e Φ_2 da função de interpolação de ordem baixa e suas ordens assintótica (p_∞^L) e aparente (p_a^L), calcular através da Eq. (2), respectivamente, os valores extrapolados $\Phi_{\infty,L}^i$ e $\Phi_{\infty,L}^a$;
- 4) com as soluções numéricas Φ_1 e Φ_2 da função de interpolação de ordem alta e suas ordens assintótica (p_∞^H) e aparente (p_a^H), calcular através da Eq. (2), respectivamente, os valores extrapolados $\Phi_{\infty,H}^i$ e $\Phi_{\infty,H}^a$;
- 5) verificar se as soluções numéricas são coerentes, isto é, se $\Phi_{\infty,H}^i$ e $\Phi_{\infty,H}^a$ estão entre $\Phi_{\infty,L}^i$ e $\Phi_{\infty,L}^a$; se não estão, recomenda-se obter soluções numéricas em uma malha mais fina do que h_1 e repetir o procedimento a partir do item 2; se estão, calcular o valor da solução numérica (Φ_q) com erro de discretização diminuído, e sua incerteza associada (U_q), com

$$\Phi_q = \frac{(\Phi_{\infty,L}^i + \Phi_{\infty,L}^a)}{2} \quad (6)$$

$$U_q = \frac{|\Phi_{\infty,L}^i - \Phi_{\infty,L}^a|}{2} \quad (7)$$

- 6) expressar a solução numérica relacionada à malha fina (h_1) através de $\Phi_q \pm U_q$.

Já que a solução exata deve estar entre $\Phi_{\infty,L}^i$ e $\Phi_{\infty,L}^a$ (Marchi e Silva, 1999), aproveita-se para melhorar a solução numérica Φ_1^L , ao diminuir seu erro de discretização, usando estes dois valores extrapolados, resultando em Φ_q , Eq. (6). A incerteza U_q , Eq. (7), é calculada para facilitar a sua representação, pois tem a mesma magnitude para mais e para menos de Φ_q , e é baseada no intervalo total onde espera-se que a solução exata esteja, isto é, entre $\Phi_{\infty,L}^i$ e $\Phi_{\infty,L}^a$.

A ordem de convergência espacial de Φ_q é igual à ordem dos valores extrapolados $\Phi_{\infty,L}^i$ e $\Phi_{\infty,L}^a$, o que pode ser previsto teoricamente através da série de Taylor ou obtido na prática por estudo do comportamento da ordem aparente destas soluções extrapoladas em função de h , ou seja, aplicando-se a Eq. (5). Por exemplo: se a função de interpolação de ordem baixa for o *Upwind Differencing Scheme-UDS* ($p_\infty=1$), a ordem assintótica de Φ_q será 2, que é igual ao p_∞ do *Central Differencing Scheme-CDS*.

O procedimento proposto acima é muito adequado quando são empregados códigos computacionais que usam (1) *multigrid* e (2) funções de interpolação de ordem alta com correção adiada. O primeiro resulta automaticamente na obtenção de soluções numéricas em diversas malhas diferentes. E, o segundo, permite com um único fator obter soluções numéricas com funções de interpolação de ordens baixa e alta.

Nas seções 4 e 5, a seguir, o procedimento descrito acima é aplicado na solução de modelos matemáticos com uma e quatro variáveis dependentes, que correspondem à equação de advecção-difusão e ao escoamento de fluidos compressíveis.

4. ADVECÇÃO-DIFUSÃO

O primeiro modelo matemático usado para testar o procedimento proposto se constitui na equação de advecção-difusão unidimensional, em regime permanente, com condições de contorno de Dirichlet:

$$Pe \frac{dT}{dx} = \frac{d^2T}{dx^2} \quad (8)$$

onde Pe , T e x são o número de Peclet, a temperatura e a coordenada espacial. As condições de contorno são: $T(x=0) = 0$ e $T(x=1) = 1$. A solução analítica exata da Eq. (8) é dada por Ferziger e Peric (1996).

Além da variável dependente do problema (T), na coordenada $x = 0.5$ (variável local), um exemplo de variável global é o comprimento da função (S) ao longo do domínio de cálculo, definido por

$$S = \int_0^1 \sqrt{1 + \left(\frac{dT}{dx}\right)^2} dx \quad (9)$$

O modelo numérico empregado para obter a solução numérica da Eq. (8) é caracterizado por: método dos volumes finitos; funções de interpolação UDS, CDS, QUICK e PLDS ou Power-Law (Patankar, 1980); solver: TDMA; malhas uniformes, isto é, com volumes de controle de comprimento (h) constante, exceto nos contornos onde são usados dois meio-volumes para aplicar as condições de contorno. Detalhes podem ser vistos no livro de Ferziger e Peric (1996).

Ao todo foram realizados 282 experimentos numéricos que envolveram: $Pe = 0.1, 1, 10$ e 100 ; razões de refino de malha constantes ($q = 2, 3$ e 4) e variáveis ($q = 1.06$ a 10); e número de volumes de controle $n = 3$ a 1062883 ou $h = 0.5$ a 9.4×10^{-7} . Cada experimento numérico se constitui num conjunto específico de Pe , n ou h e função de interpolação, e tem como resultados as duas variáveis de interesse: $T(x=0.5)$ e S .

Para o comprimento da função (S) e $Pe=100$, na Fig. 1 estão plotados os erros das soluções numéricas obtidas com as funções de interpolação de ordens baixa (UDS) e alta (CDS), o erro da solução numérica obtida com a Eq. (6), e a incerteza calculada com a Eq. (7), representados respectivamente por $(E_{h,L})$, $(E_{h,H})$, (E_q) e (U_q) . Apesar de se mostrar uma curva de U_q , na Fig. 1, o seu valor em cada h , obtido através do procedimento explicado na seção 3, é independente de U_q em outros valores de h .

$E_{h,L}$ é menor do que $E_{h,H}$ nos três valores maiores de h , o que gerou incoerência pelo procedimento adotado neste trabalho para obter a incerteza. No quarto maior valor de h (1.5×10^{-2}), a condição do item 5 do procedimento também não foi satisfeita. Em todas as figuras deste trabalho, os resultados de E_q e U_q são mostrados apenas quando a condição do item 5 do procedimento é satisfeita, ou seja, quando as soluções numéricas são coerentes e, assim, aplicam-se as Eqs. (6) e (7).

Em todos os pontos de h em que as soluções numéricas são consideradas coerentes, verifica-se que $U_q/|E_q| > 1$, conforme desejado para que a estimativa do erro (U_q) seja confiável em relação ao erro exato (E_q) da solução numérica Φ_q . De acordo com o previsto, a ordem de convergência do erro e da incerteza de Φ_q são iguais à ordem do CDS, o que pode ser observado na figura pelas inclinações das curvas: pode-se demonstrar que quanto maior a inclinação da curva de erro com a horizontal, maior é a ordem de convergência espacial.

No menor valor de h , os erros de arredondamento já são maiores do que os erros de discretização da solução numérica obtida com o CDS, pois o erro aumentou ao se reduzir h ; isso gerou incoerência em relação à solução do UDS.

Considerando as duas variáveis de interesse, $T(x=0.5)$ e S , as quatro funções de interpolação e os diversos Pe e h usados, ao todo foram realizados 494 testes do procedimento proposto. Em todos estes testes, sempre que os erros de discretização prevaleceram sobre os erros de arredondamento, o procedimento sempre resultou em $U_q/|E_q| > 1$, conforme desejado.

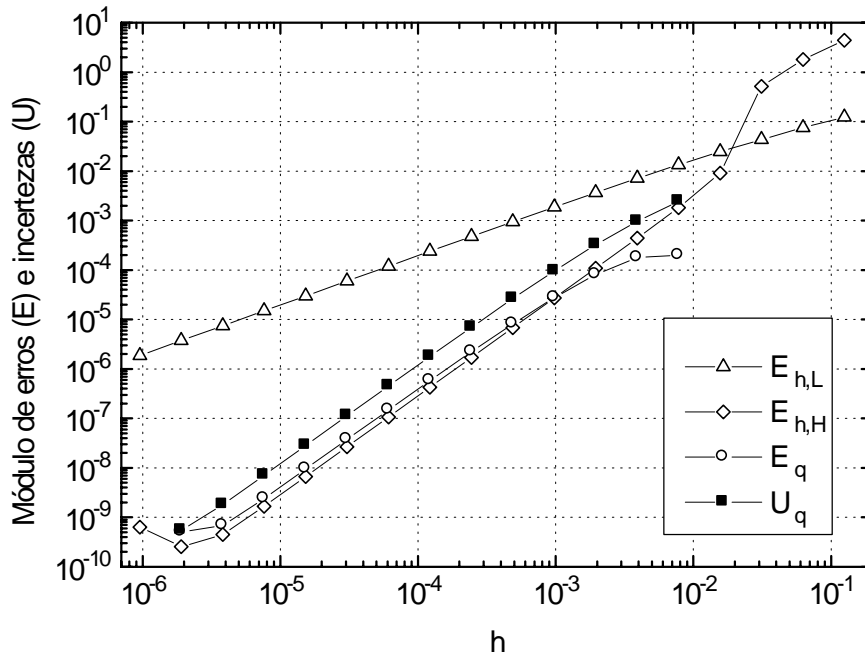


Figura 1. Erros e incertezas do comprimento da função (S).

5. ESCOAMENTO DE FLUIDOS COMPRESSÍVEIS

O segundo problema abordado envolve o escoamento subsônico-supersônico de fluido compressível invíscido num bocal do tipo convergente-divergente. O modelo matemático de quatro variáveis dependentes (ρ, u, p, T) usado nos experimentos numéricos realizados é:

$$\frac{d}{dx}(\rho u A) = 0 \quad (10)$$

$$\frac{d}{dx}(\rho u A u) = -A \frac{dp_r}{dx} \quad (11)$$

$$c_p \frac{d}{dx}(\rho u A T) = u A \frac{dp_r}{dx} \quad (12)$$

$$p_r = \rho R T \quad (13)$$

onde ρ = massa específica; u = velocidade; A = área da seção transversal a x ; p_r = pressão termodinâmica; c_p = calor específico à pressão constante; e , R = constante do gás.

As Eqs. (10) a (13) representam, respectivamente, as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia, e a equação de estado dos gases perfeitos. Elas são resolvidas para um bocal do tipo convergente-divergente simétrico cuja razão de áreas entre a saída do bocal ($x = L$) e a garganta (g) é 16, resultando em números de Mach iguais a 0.036 e 4.5 na entrada e na saída do bocal, respectivamente, para razão de calores específicos igual a 1.4.

As variáveis de interesse são: o fluxo de massa do escoamento ($F_M = \rho u A$); o empuxo na saída do bocal ($F_E = \rho u^2 A$); e o número de Mach na garganta (M_g). O escoamento é

subsônico na região convergente do bocal e supersônico na região divergente. A solução analítica das Eqs. (10) a (13) é dada por John (1984).

O modelo numérico adotado é o mesmo de Van Doormaal et al. (1987) mas com arranjo co-localizado de variáveis. As funções de interpolação usadas foram UDS e CDS com correção adiada. O solver empregado foi o TDMA e o domínio discretizado com malhas uniformes. Ao todo, foram realizados 38 experimentos numéricos que envolveram: q constante (2) e variável (2.0 a 1.25); e $n = 10$ a 81920 ou $h = 0.1$ a 1.22×10^{-5} . Cada experimento numérico é caracterizado por um conjunto específico de n ou h e função de interpolação, mantidos constantes os demais dados e geometria do bocal. Os resultados obtidos de cada experimento numérico foram as três variáveis de interesse: F_M , F_E e M_g .

Para o número de Mach na garganta (M_g), na Fig. 2 estão plotados os erros das soluções numéricas obtidas com as funções de interpolação de ordens baixa (UDS) e alta (CDS), o erro da solução numérica obtida com a Eq. (6), e a incerteza calculada com a Eq. (7), representados respectivamente por ($E_{h,L}$), ($E_{h,H}$), (E_q) e (U_q). Nos três maiores valores de h , a condição do item 5 do procedimento não foi satisfeita, isto é, as soluções numéricas são incoerentes; isto ocorreu devido ao comportamento oscilante de $E_{h,L}$, muito embora, evidentemente, o procedimento não use o valor do erro.

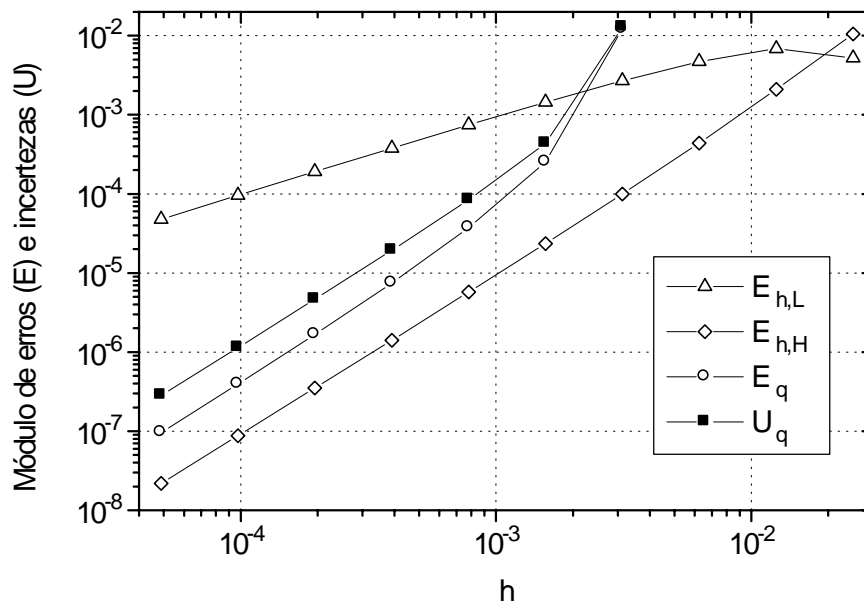


Figura 2. Erros e incertezas do número de Mach na garganta (M_g).

Em todos os pontos de h em que as soluções numéricas são consideradas coerentes, verifica-se que $U_q/|E_q| > 1$, como desejado para que a estimativa do erro (U_q) seja confiável em relação ao erro exato (E_q) da solução numérica Φ_q . Conforme esperado, a ordem de convergência do erro e da incerteza de Φ_q são iguais à ordem do CDS, como pode ser observado na figura pelas inclinações das curvas. Em h aproximadamente 3.1×10^{-3} , ou no valor plotado de U_q correspondente ao seu maior h , nota-se que U_q e E_q são maiores do que $E_{h,L}$; isto ocorre devido à grande diferença entre a ordem aparente (0.1) e a ordem assintótica (1.0) do UDS neste h ; fato semelhante ocorre no maior valor de h plotado na figura onde verifica-se que $E_{h,H} > E_{h,L}$.

Para o empuxo na saída do bocal (F_E), na Fig. 3 mostra-se um exemplo em que o refino de malha pode fornecer soluções numéricas incoerentes. No caso específico, para os valores de h em torno de 2.0×10^{-4} , 6.2×10^{-3} e 1.2×10^{-2} , as soluções numéricas são incoerentes devido aos valores de ordem aparente da função de interpolação de ordem alta. Nos demais valores de h , há coerência entre as soluções numéricas e, como pode-se ver na figura, $U_q/|E_q| > 1$. Conforme implícito no procedimento proposto na seção 3, deve-se perceber que para calcular o valor de U_q do maior h mostrado na Fig. 3 existem duas soluções numéricas obtidas em valores de h ainda maiores cujos erros não são mostrados nesta figura.

Considerando as três variáveis de interesse, F_M , F_E e M_g , as duas funções de interpolação e os diversos h usados, ao todo foram realizados 48 testes do procedimento proposto. Em todos estes testes, sempre que os erros de discretização prevaleceram sobre os erros de arredondamento, sempre obteve-se $U_q/|E_q| > 1$, conforme desejado.

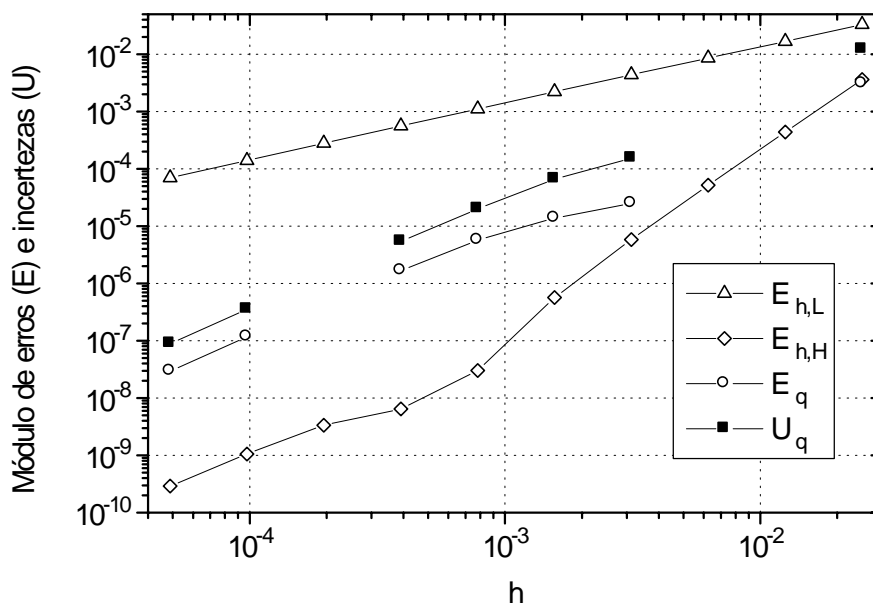


Figura 3. Erros e incertezas do empuxo na saída do bocal (F_E).

6. CONCLUSÃO

O procedimento proposto para estimar erros de discretização de soluções numéricas funcionou em todos os mais de 500 testes efetuados, não sendo observado nenhuma falha quando os erros de discretização prevalecem sobre os erros de arredondamento.

Estes testes envolveram: modelos matemáticos com uma e quatro variáveis dependentes; domínios unidimensionais com malhas uniformes; variáveis locais e globais; quatro funções de interpolação; tamanho dos volumes de controle $h \approx 1.0 \times 10^{-6}$ a 1.0×10^{-1} ; e razões de refino de malha constantes (2, 3 e 4) e variáveis (1,06 a 10).

Agradecimentos

O primeiro autor agradece o apoio financeiro e de infra-estrutura da Universidade Federal do Paraná (UFPR), da Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da

Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), e do Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC)/UFSC. Os autores agradecem ao Revisor B pelas suas sugestões, que foram acolhidas.

REFERÊNCIAS

- AIAA, 1998, Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations, AIAA G-077-1998, Reston, VA, USA.
- Babuska, I., Ihlenburg, F., Strouboulis, T. and Gangaraj, S. K., 1997, A Posteriori Error Estimation for Finite Element Solutions of Helmholtz' Equation. Part I: The Quality of Local Indicators and Estimators, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 40, pp. 3443-3462.
- De Vahl Davis, G., 1983, Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution, International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 3, pp. 249-264.
- Ferziger, J. H. & Peric, M., 1996, Computational Methods for Fluid Dynamics, Springer, Berlin.
- John, J. E. A., 1984, Gas Dynamics, 2 ed., Allyn & Bacon, Boston.
- Marchi, C. H. & Silva, A. F. C., 1999, Condições suficientes para estimar com acurácia e confiabilidade erros de discretização em CFD, Proceedings of the Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, November 3-5, São Paulo. (submetido)
- Patankar, S. V., 1980, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, New York.
- Roache, P. J., 1994, Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies, ASME - Journal of Fluids Engineering, vol. 116, pp. 405-413.
- Roache, P. J., 1997, Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics, Annual Reviews in Fluid Mechanics, vol. 29, pp. 123-160.
- Roache, P. J., 1998, Verification and Validation in Computational Science and Engineering, Hermosa, Albuquerque.
- Van Doormaal, J. P., Raithby, G. D. and McDonald, B. H., 1987, The Segregated approach to predicting viscous compressible fluid-flows, ASME - Journal of Turbomachinery, vol. 109, n.2, pp. 268-277.

A PROCEDURE BASED ON COHERENT NUMERICAL SOLUTIONS FOR DIMINISHING AND ESTIMATING DISCRETIZATION ERRORS

Abstract. *The proposed procedure is based on the comparison of numerical solutions obtained on the same grid but with low and high order schemes. The higher order solution is used as reference. The Richardson extrapolation is used for diminishing and estimating discretization errors with the low order solution. The unknowns may be local and global. The procedure is tested using numerical solutions of mathematical models with one and four unknowns: advection-diffusion equation and compressible fluid flows. The numerical solutions were obtained using finite-volume method in unidimensional domains with uniform grids. The procedure correctly worked in all 500 test cases that included large range of the grid parameter, constant and variable grid refinement factor, and four schemes.*

Keywords: *numerical errors, numerical uncertainty, Richardson extrapolation, numerical simulation, fluid flows.*