

**PREVISÃO DE ERROS DE TRUNCAMENTO DE
MODELOS NUMÉRICOS EM MALHAS NÃO-UNIFORMES**

Carlos Henrique Marchi
Antônio Fábio Carvalho da Silva

IV SIMMEC
Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional
Uberlândia, MG, maio de 2000
pp. 481-488

Palavras-chave: erros numéricos, CFD, malhas não-uniformes, diferenças finitas, CDS.

PREVISÃO DE ERROS DE TRUNCAMENTO DE MODELOS NUMÉRICOS EM MALHAS NÃO-UNIFORMES

Carlos Henrique Marchi*, António Fábio Carvalho da Silva**

*Universidade Federal do Paraná
Departamento de Engenharia Mecânica
81531-990 – Curitiba – PR
e-mail: marchi@cce.ufpr.br

**Universidade Federal de Santa Catarina
Departamento de Engenharia Mecânica
88040-900 – Florianópolis – SC

RESUMO

De acordo com diversas fontes da literatura, quando se empregam malhas uniformes com o esquema de diferença central, a ordem teórica do erro de truncamento de problemas difusivos é igual a dois e degenera para a unidade em malhas não-uniformes. Entretanto, verifica-se através de experimentos numéricos que não ocorre esta degeneração de ordem. Esta mesma discrepância entre análise teórica e verificação prática existe para problemas advectivos. Este trabalho apresenta um procedimento teórico geral para prever o erro de truncamento, e sua ordem, das aproximações numéricas normalmente usadas nos métodos de diferenças finitas e volumes finitos, para malhas uniformes e não-uniformes, e que se constitui numa adaptação do procedimento já existente. O novo procedimento é aplicado ao esquema de diferença central, apresentando-se expressões para o erro de truncamento das aproximações numéricas geralmente utilizadas em termos advectivos e difusivos. São apresentados também resultados experimentais do erro de discretização e de sua ordem, em função do tamanho da malha empregada, que corroboram as previsões feitas com base no procedimento teórico apresentado neste trabalho, o qual é válido para os métodos de diferenças finitas e volumes finitos.

1. INTRODUÇÃO

Segundo a teoria vigente (Tannehill et al., 1997), a ordem do erro de truncamento da solução numérica de problemas difusivos, como por exemplo,

$$\frac{d^2T}{dX^2} = -1 - \frac{3}{2}X \quad (1)$$

é igual a dois para malhas uniformes (Fig. 1a) e à unidade para malhas não-uniformes (Fig. 1b e 1c) quando se emprega o esquema de diferença central (CDS), ou seja, quando o modelo matemático (Eq. 1) é discretizado com funções lineares para a incógnita (T), entre os pontos

nodais da malha, ao longo da variável independente (X). Deve-se perceber que a malha não-uniforme de faces centradas entre os nós (Fig. 1b) é o tipo de malha normalmente empregado com o método de diferenças finitas, ainda que não se trabalhe explicitamente com o conceito de faces ou volumes de controle neste método.

Entretanto, com base em resultados numéricos obtidos com o esquema CDS sobre malhas não-uniformes (Fig. 1b), verifica-se que a ordem do erro se mantém igual a dois. Esta discrepância entre ordem teórica e prática também é observada na literatura com relação aos termos advectivos dos modelos matemáticos: Ferziger e Peric (1996) demonstram que sua ordem é unitária para o esquema CDS em malhas não-uniformes; já Tannehill et al. (1997) demonstram que a ordem é dois; também neste caso, verifica-se com experimentos numéricos que a ordem é dois.

A previsão correta do erro de truncamento e de sua ordem permite avaliar e otimizar os modelos numéricos e estimar com maior acurácia o erro de discretização das soluções numéricas. Portanto, na seção 2, introduz-se um procedimento geral para prever o erro de truncamento e sua ordem de convergência de aproximações numéricas feitas sobre malhas não-uniformes. Nas seções 3 e 4, este procedimento é aplicado a termos advectivos e difusivos para o esquema CDS nos três tipos de malhas unidimensionais da Fig. 1. Resultados numéricos obtidos com o método de diferenças finitas que corroboram a teoria proposta são apresentados na seção 5.

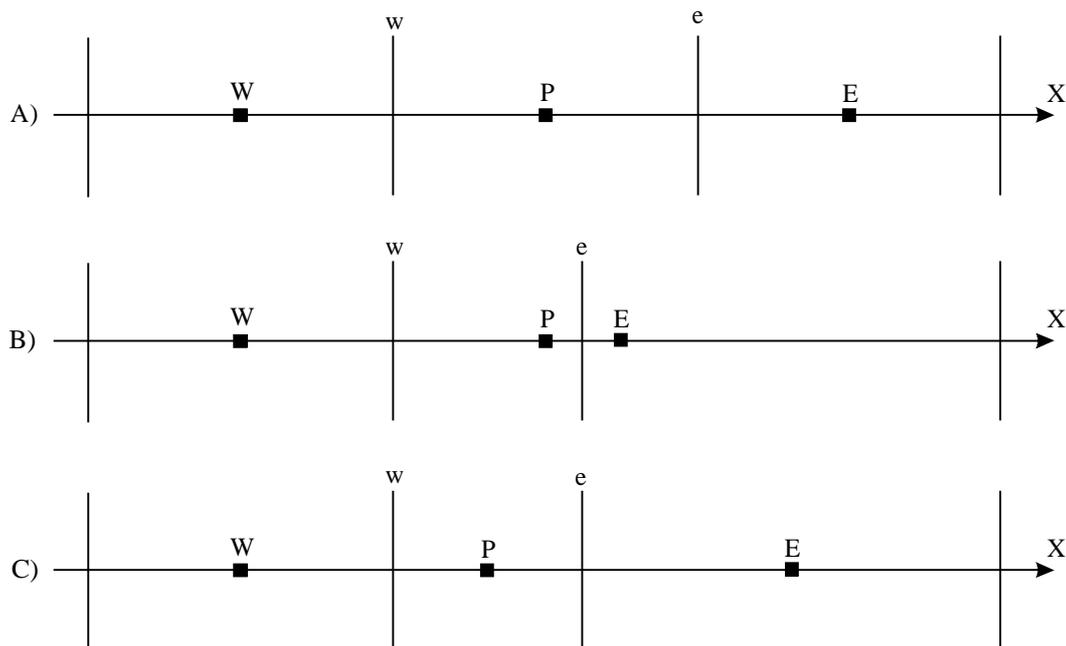


Figura 1. Volumes de controle em domínios unidimensionais: a) malha uniforme; b) malha não-uniforme de faces centradas entre nós; c) malha não-uniforme de faces não-centradas entre nós.

2. PROCEDIMENTO GERAL

O ponto-chave do procedimento proposto é que as magnitudes dos erros de truncamento e suas ordens de convergência são dominadas pelas aproximações numéricas feitas nas faces

dos volumes de controle, e não através da expansão da série de Taylor (Kreyszig, 1999) do volume de controle P (Fig. 1) para os seus vizinhos (W,E), conforme ocorre no procedimento adotado habitualmente (Tannehill et al., 1997).

Muitos modelos matemáticos da transferência de calor e da mecânica dos fluidos podem ser representados para uma variável genérica T através de (Patankar, 1980)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \vec{\nabla}(\rho \vec{u} T) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma \vec{\nabla} T) + S \quad (2)$$

Para facilitar a explicação, considere-se o caso da equação de advecção-difusão unidimensional:

$$Pe T' = T'' \quad (3)$$

onde T' e T'' representam as derivadas de 1ª e 2ª ordens de T em relação à direção X, e Pe é o número de Peclet. Integrando-se a Eq. (3) sobre o volume de controle P da Fig. 1 e usando-se o teorema da divergência de Gauss (Kreyszig, 1999) obtém-se

$$Pe (T_e - T_w) = T'_e - T'_w \quad (4)$$

onde T_e e T_w representam a incógnita T avaliada nas faces leste (e) e oeste (w) do volume de controle P da Fig. 1; e T'_e e T'_w , a derivada de 1ª ordem de T nas faces leste e oeste.

O ponto a se destacar aqui é que a Eq. (4) foi obtida com o teorema da divergência, isto é, sem qualquer aproximação numérica do seu modelo matemático, Eq. (3). Portanto, o erro de truncamento e sua ordem de convergência devem se basear nas aproximações numéricas feitas para se obter T e T' nas faces dos volumes de controle, e não sobre T' e T'' da Eq. (3). Esse mesmo raciocínio é válido para modelos matemáticos mais complexos, exemplificados pela Eq. (2), onde os coeficientes são variáveis e não-lineares.

O procedimento sugerido para se obter o erro de truncamento e sua ordem de convergência de um modelo numérico é:

1. aplicar o teorema da divergência de Gauss sobre o modelo matemático de interesse;
2. verificar quais as aproximações numéricas que devem ser feitas em cada face do volume de controle;
3. definir as funções de interpolação a empregar;
4. obter o erro de truncamento e sua ordem de convergência de cada aproximação numérica necessária em cada face do volume de controle; e
5. a ordem de convergência do modelo numérico será igual a menor das ordens entre todas as aproximações numéricas feitas em cada face do volume de controle; isso também é válido igualmente para modelos matemáticos compostos por mais de uma equação diferencial.

3. APROXIMAÇÃO DA INCÓGNITA NAS FACES

Para os termos advectivos das equações de conservação do tipo da Eq. (2), é necessário aproximar numericamente a incógnita (T) nas faces dos volumes de controle. Um exemplo desta necessidade é dado pelas equações de Euler.

Com o esquema de diferença central (CDS), o valor da incógnita na face leste do volume de controle P (Fig. 1) é aproximado por meio de

$$T_e^* = (1 - F_e)T_P + F_e T_E \quad (5)$$

onde

$$F_e = \frac{(X_e - X_P)}{(X_E - X_P)} \quad (6)$$

e T_P e T_E são os valores da incógnita nos dois nós (P,E) adjacentes à face leste (e). A expressão de T_e^* é válida para os três tipos de malha da Fig. 1, mas para malhas uniformes (Fig. 1a) e malhas não-uniformes de faces centradas entre os nós (Fig. 1b), o fator geométrico vale $F_e = 1/2$.

Expandindo-se a série de Taylor (Kreyszig, 1999) para os pontos “P” e “E” da Fig. 1 a partir do valor exato da incógnita na face leste, T_e , obtêm-se

$$T_P = T_e - T_e' F_e \Delta X_e + T_e'' F_e^2 \frac{\Delta X_e^2}{2} - \dots \quad (7)$$

$$T_E = T_e + T_e'(1 - F_e) \Delta X_e + T_e''(1 - F_e)^2 \frac{\Delta X_e^2}{2} + \dots \quad (8)$$

onde

$$\Delta X_e = X_E - X_P \quad (9)$$

e, T_e' e T_e'' representam as derivadas de 1ª e 2ª ordens de T_e no ponto “e”. Multiplicando-se a Eq. (7) por $(1 - F_e)$, e a Eq. (8) por F_e , a adição dos dois resultados fornece

$$T_e = (1 - F_e)T_P + F_e T_E - T_e'' F_e (1 - F_e) \frac{\Delta X_e^2}{2} + T_e''' F_e (1 - F_e) (2F_e - 1) \frac{\Delta X_e^3}{6} - \dots \quad (10)$$

A partir dos valores exatos de T_P , T_E e das derivadas de T_e , a Eq. (10) resulta no valor exato de T_e , isto é, sem erro de truncamento.

Definindo-se o erro de truncamento (ε) pela diferença entre o valor exato T_e e o valor da aproximação numérica T_e^* , ou seja, a Eq. (10) menos a Eq. (5), tem-se

$$\varepsilon(T_e^*) = -T_e'' F_e (1 - F_e) \frac{\Delta X_e^2}{2} + T_e''' F_e (1 - F_e) (2F_e - 1) \frac{\Delta X_e^3}{6} - \dots \quad (11)$$

A ordem de convergência teórica (p_t) pode ser definida pelo valor do menor expoente ao qual está elevado o tamanho dos volumes de controle (ΔX) na expressão do erro de truncamento; o termo que define p_t é o que domina o valor de ε à medida que ΔX tende a zero quando a malha é refinada. Portanto, conclui-se com a Eq. (11) que a aproximação numérica do esquema CDS para T_e , dada pela Eq. (5), é de 2ª ordem ($p_t = 2$) em qualquer tipo de malha da Fig. 1: uniforme ou não-uniforme. Contudo, no caso particular de $F_e = 1/2$, isto é, para malhas

uniformes (Fig. 1a) e malhas não-uniformes de faces centradas entre os nós (Fig. 1b), o erro de truncamento de T_e^* , dado pela Eq. (11), se reduz a

$$\varepsilon(T_e^*, F_e = 1/2) = -T_e'' \frac{\Delta X_e^2}{8} - T_e^{iv} \frac{\Delta X_e^4}{384} - \dots \quad (12)$$

ou seja, a ordem teórica é a mesma ($p_t = 2$) mas o valor do erro de truncamento para $F_e = 1/2$ é presumivelmente menor que para $F_e \neq 1/2$ porque se anulam os termos com ordens ímpares de ΔX_e da Eq. (11).

4. APROXIMAÇÃO DA DERIVADA DA INCÓGNITA NAS FACES

Para os termos difusivos das equações de conservação do tipo da Eq. (2), é necessário aproximar numericamente a derivada da incógnita (T_e') nas faces dos volumes de controle. Exemplos desta necessidade são os termos difusivos das equações de Navier-Stokes e a equação de Laplace.

Com o esquema de diferença central (CDS), o valor da derivada primeira da incógnita na face leste do volume de controle P (Fig. 1) é aproximado através de

$$(T_e')^* = \frac{(T_E - T_P)}{\Delta X_e} \quad (13)$$

O valor exato de T_e' é obtido subtraindo-se a Eq. (7) da Eq. (8), o que resulta em

$$T_e' = \frac{(T_E - T_P)}{\Delta X_e} + T_e''(2F_e - 1)\frac{\Delta X_e}{2} - T_e'''[F_e^3 + (1 - F_e)^3]\frac{\Delta X_e^2}{6} + \dots \quad (14)$$

Subtraindo-se a Eq. (13) da Eq. (14) chega-se ao erro de truncamento de $(T_e')^*$,

$$\varepsilon[(T_e')^*] = T_e''(2F_e - 1)\frac{\Delta X_e}{2} - T_e'''[F_e^3 + (1 - F_e)^3]\frac{\Delta X_e^2}{6} + \dots \quad (15)$$

Portanto, conclui-se com a Eq. (15) que a aproximação numérica do esquema CDS para T_e' , dada pela Eq. (13), é de 1ª ordem ($p_t = 1$) em malhas não-uniformes de faces não-centradas entre nós (Fig. 1c), isto é, para $F_e \neq 1/2$. Porém, no caso particular de $F_e = 1/2$, ou seja, para malhas uniformes (Fig. 1a) e malhas não-uniformes de faces centradas entre os nós (Fig. 1b), o erro de truncamento da Eq. (15) se reduz a

$$\varepsilon[(T_e')^*, F_e = 1/2] = -T_e''' \frac{\Delta X_e^2}{24} - T_e^{v} \frac{\Delta X_e^4}{1920} - \dots \quad (16)$$

e, então, a ordem da aproximação numérica da Eq. (13) passa a ser dois, ou $p_t = 2$.

5. APLICAÇÃO

Foram realizados experimentos com 11 modelos matemáticos diferentes, todos unidimensionais e com apenas uma variável dependente (T), sendo alguns lineares e outros não-lineares, envolvendo apenas advecção, ou difusão, e advecção-difusão. Especificamente, alguns modelos usados foram as Eqs. (1) e (3), e a Eq. (17) dada por

$$\frac{d}{dX} \left(e^T \frac{dT}{dX} \right) = 0 \quad (17)$$

Após aplicar o teorema da divergência de Gauss sobre o modelo matemático de interesse, conforme o procedimento da seção 2, os termos advectivos e difusivos são aproximados com o esquema CDS através das Eqs. (5) e (13), e equações semelhantes para a face oeste (w) do volume de controle P (Fig. 1). Isso resulta num sistema de equações algébricas que é resolvido pelo método TDMA (Ferziger e Peric, 1996). No caso da Eq. (17), o termo e^T , que equivale a uma condutividade térmica variável, é aproximado através do procedimento de Patankar (1980). Para os problemas não-lineares, o sistema de equações algébricas foi resolvido até alcançar o nível do erro de máquina, normalmente em menos de 200 iterações.

Malhas com oito distribuições de pontos diferentes foram usadas nos experimentos numéricos. Três delas, que representam os três tipos da Fig. 1, estão caracterizadas na Tabela I, sendo: Un, malha uniforme; NC, malha não-uniforme de faces centradas entre os nós; e, NN, malha não-uniforme de faces não-centradas entre os nós. São mostrados os valores que representam as coordenadas dos nós das malhas (X_p) e de suas respectivas faces leste (X_e), bem como o fator geométrico F_e da malha NN; para as malhas Un e NC, $F_e = 1/2$.

As malhas da Tabela I, que têm apenas cinco pontos nodais ($n=5$), foram refinadas até 17 vezes com razão de refino de malha $q = 2$, resultando em $n = 524289$ pontos para as malhas mais finas. O processo de refino utilizado foi o de dividir ao meio as distâncias entre os nós da malha grossa e manter os mesmos F_e locais desta. Também testou-se o processo de refino de malha baseado em progressão geométrica, conforme sugerido por Ferziger e Peric (1996).

Tabela I. Malhas-base.

ponto nodal	malha Un		malha NC		malha NN		
	X_p	X_e	X_p	X_e	X_p	X_e	F_e
1	0	0.125	0	0.025	0	0.03	0.6
2	0.25	0.375	0.05	0.125	0.05	0.07	0.133
3	0.5	0.625	0.2	0.35	0.2	0.48	0.933
4	0.75	0.875	0.5	0.75	0.5	0.55	0.1
5	1	-	1	-	1	-	-

A Fig. 2 exibe o erro de discretização (E_h) das soluções numéricas da Eq. (3) para $T(X=1/2)$, $Pe=10$, condições de contorno $T(X=0)=0$ e $T(X=1)=1$, e para as três malhas da Tabela I, com

$$E_h = T_A - T_h \quad (18)$$

onde T_A e T_h representam, respectivamente, as soluções analítica e numéricas. A distância média entre os nós das malhas, h , é calculada por meio de $h = 1/(n-1)$.

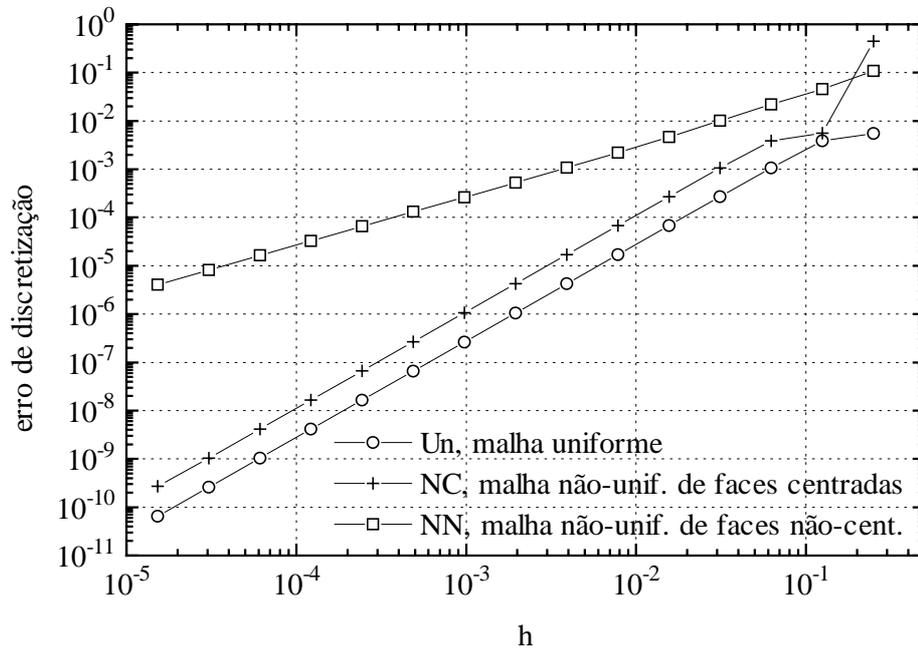


Figura 2. Erro de discretização de $T(X=1/2)$ da Eq. (3) para $Pe=10$.

Na Fig. 3 é mostrada a ordem efetiva (p_e) do erro de discretização da Fig. 2. A ordem efetiva é uma comprovação experimental da ordem teórica (p_i), representa a inclinação da curva do erro de discretização, e é calculada através de

$$p_e = \frac{\log\left(\frac{E_{h,2}}{E_{h,1}}\right)}{\log(q)} = \frac{\log\left(\frac{T_A - T_{h,2}}{T_A - T_{h,1}}\right)}{\log(q)} \quad (19)$$

onde $T_{h,1}$ e $T_{h,2}$ referem-se às soluções numéricas das malhas fina e grossa, respectivamente, sendo $q = h_2/h_1$.

Percebe-se, na Fig. 2, que o nível de erro das malhas NC é muito próximo das malhas uniformes (Un), enquanto que o nível de erro das malhas NN é maior que os dois anteriores, e cada vez mais à medida que h diminui.

Na Fig. 3, constata-se claramente que as ordens efetivas das malhas uniformes (Un) e não-uniformes de faces centradas (NC) tendem a dois à medida que h é reduzido; e à unidade para as malhas não-uniformes de faces não-centradas (NN). Estes são exatamente os resultados esperados de acordo com a teoria exposta nas seções 2 a 4. Os mesmos resultados de $T(X=1/2)$ foram obtidos para a temperatura média do campo, e para os demais modelos matemáticos testados e que não são mostrados.

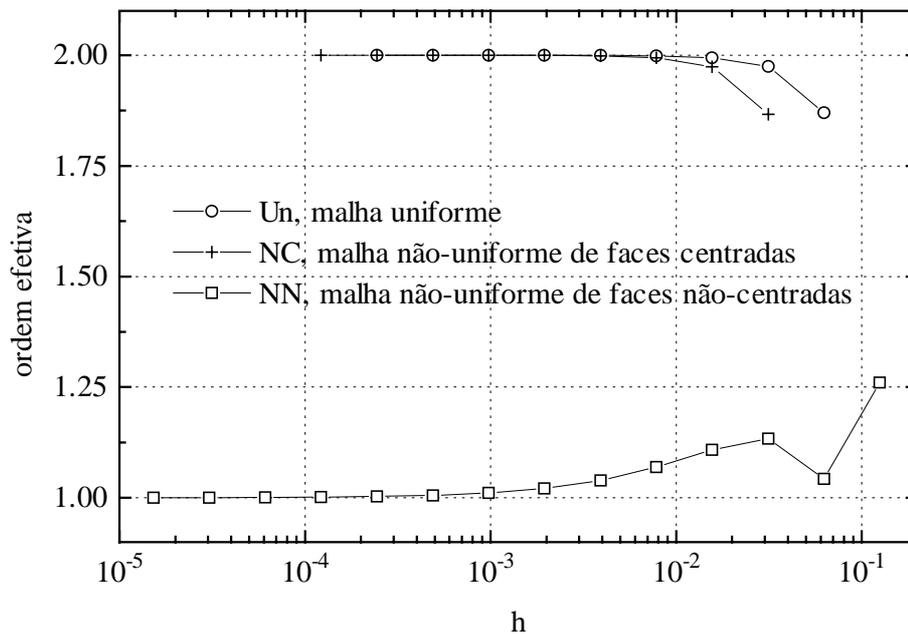


Figura 3. Ordem efetiva do erro de discretização da Fig. 2.

6. CONCLUSÃO

As aproximações numéricas de termos difusivos, feitas com funções lineares entre pontos nodais (esquema de diferença central, CDS), são de 2^a ordem tanto em malhas uniformes (Un) quanto em malhas não-uniformes de faces centradas entre nós (NC), mas degeneram para 1^a ordem nas malhas não-uniformes de faces não-centradas (NN), que inclui as malhas não-uniformes de nós centrados entre faces. No caso de termos advectivos, as aproximações numéricas feitas com o esquema CDS são de 2^a ordem em malhas uniformes (Un) e não-uniformes (NC e NN). Estas previsões de ordem do erro de truncamento foram corroboradas por experimentos numéricos realizados com diversos modelos matemáticos unidimensionais, lineares e não-lineares, envolvendo apenas advecção ou difusão e advecção-difusão, com e sem termos fontes.

Agradecimentos

O primeiro autor agradece a UFPR, CAPES, POSMEC/UFSC e SINMEC/UFSC pelos apoios financeiro e de infra-estrutura, e a Fábio A. Schneider pela revisão deste trabalho.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ferziger, J. H. and Peric, M., 1996, Computational Methods for Fluid Dynamics, Springer, Berlin.
- Kreyszig, E., 1999, Advanced Engineering Mathematics, 8th ed., Wiley, New York.
- Patankar, S. V., 1980, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere, Washington.
- Tannehill, J. C., Anderson, D. A. and Pletcher, R. H., 1997, Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, 2nd ed., Taylor & Francis, Washington.