ESTIMATIVA DE ERROS DE DISCRETIZAÇÃO MULTIDIMENSIONAL EM DINÂMICA DOS FLUIDOS

António Fábio Carvalho da Silva Carlos Henrique Marchi

IV SIMMEC Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional Uberlândia, MG, maio de 2000 pp. 497-504

Palavras-chave: estimativa de erros numéricos, CFD, volumes finitos, diferenças finitas, CDS.

ESTIMATIVA DE ERROS DE DISCRETIZAÇÃO MULTIDIMENSIONAL EM DINÂMICA DOS FLUIDOS

António Fábio Carvalho da Silva^{*}, Carlos Henrique Marchi^{**}

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

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

RESUMO

São apresentados procedimentos práticos para estimar erros de discretização multidimensional (espacial e temporal) com base na extrapolação de Richardson. Três modelos matemáticos são utilizados para testar estes procedimentos: equação de Laplace bidimensional; equação da condução de calor unidimensional transiente; e equações de Navier-Stokes bidimensionais. Estes modelos são resolvidos com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos, empregando-se malhas uniformes e funções de interpolação de segunda ordem. Os procedimentos propostos foram bem-sucedidos nos testes realizados.

1. INTRODUÇÃO

Os objetivos deste trabalho são: (i) testar e estender a problemas multidimensionais a teoria de Marchi e Silva (1999), que foi aplicada a problemas unidimensionais para estimar erros de discretização usando-se a extrapolação de Richardson (Richardson e Gaunt, 1927), e que permite prever limites inferior e superior dos erros de discretização, desde que sejam satisfeitas algumas condições; e (ii) testar a proposta de Roache (1994) para cálculo de erros de discretização de problemas multidimensionais, segundo a qual, o erro total é igual à soma dos erros de cada dimensão, onde as dimensões podem ser as três direções espaciais (X,Y,Z) e o tempo (t).

Os testes são realizados para três modelos matemáticos: (1) equação de Laplace bidimensional; (2) condução de calor unidimensional transiente; e (3) equações de Navier-Stokes bidimensionais. Estas equações são resolvidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos, empregando-se malhas uniformes, e o esquema CDS (Ferziger e Peric, 1996).

As estimativas de erro baseadas na extrapolação de Richardson utilizam soluções numéricas, das variáveis de interesse (Φ), obtidas em duas ou mais malhas diferentes, isto é, malhas com número diferente de volumes, pontos ou elementos. Desta forma, num problema

bidimensional, por exemplo, as malhas podem ser refinadas nas duas direções (X e Y) simultaneamente (refino multidimensional). Outra opção é realizar o refino em cada direção separadamente (refino unidimensional), isto é, primeiro refina-se a malha apenas na direção X, e depois na direção Y. Estes dois tipos de refino são abordados nas seções 3 e 4 com base nos resultados dos problemas-teste da seção 2, a seguir.

2. PROBLEMAS-TESTE

Os três problemas-teste empregados na verificação do uso da extrapolação de Richardson para estimar erros de discretização multidimensional são descritos abaixo.

Problema 1, equação de Laplace 2D com condições de contorno de Dirichlet nas quatro fronteiras de um domínio quadrado, sendo $T(x,1) = sen(\pi x)$ e T = 0 nas demais. A equação deste problema é

$$\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial Y^2} = 0 \tag{1}$$

Problema 2, condução de calor 1D transiente com condições de contorno de Dirichlet, nas duas fronteiras, iguais a T(x=0) = T(x=1) = 0, e condição inicial $T(x,0) = sen(\pi x)$. A solução do problema é obtida para o instante de tempo t = 0.1 e sua equação é

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} \tag{2}$$

Problema 3, equações de Navier-Stokes 2D, consiste numa cavidade quadrada cuja tampa se movimenta fazendo o fluido em seu interior escoar. O modelo matemático envolve as equações de conservação da massa, e da quantidade de movimento linear nas direções X e Y, com viscosidade e massa específica constantes. Acrescenta-se um termo fonte com o intuito de obter-se uma solução analítica do problema para suas três incógnitas: duas componentes de velocidade (u,v) e a pressão (p_r). Tanto o modelo matemático quanto sua solução analítica podem ser vistos na seção 2 do trabalho de Shih et al. (1989).

Os problemas 1 e 2 também apresentam soluções analíticas conhecidas para as duas **variáveis** de interesse, isto é, as variáveis para as quais os erros e suas estimativas foram analisados: a temperatura no centro do domínio e a temperatura média do campo. No caso do problema 3, as variáveis de interesse são u, v e p_r no centro do domínio, e o fluxo de massa (M) que circula na cavidade.

O método de diferenças finitas foi empregado nos problemas 1 e 2, e o método dos volumes finitos (Ferziger e Peric, 1996) no problema 3. Nos três problemas, as derivadas espaciais foram aproximadas por diferença central (CDS). A Eq. (2) foi aproximada através da formulação totalmente implícita. Nos problemas 1 e 3, para minimizar seus efeitos sobre os erros de discretização, as iterações foram realizadas até que os erros iterativos atingissem o erro de máquina. A solução do problema 2 é direta.

3. REFINO MULTIDIMENSIONAL

O refino multidimensional é caracterizado pelo refino simultâneo em todas as dimensões espaciais e temporal; um exemplo pode ser visto na Tabela I. Para problemas unidimensionais

e domínios discretizados com malhas uniformes, Marchi e Silva (1999) verificaram que a solução exata (Φ_A) de uma variável de interesse genérica Φ fica entre as soluções numéricas extrapoladas Φ^i_{∞} e Φ^a_{∞} , dadas por

$$\Phi_{\infty}^{i} = \Phi_{1} + \left(\frac{\Phi_{1} - \Phi_{2}}{q^{p_{i}} - 1}\right)$$
(3)

$$\Phi_{\infty}^{a} = \Phi_{1} + \left(\frac{\Phi_{1} - \Phi_{2}}{q^{p_{a}} - 1}\right)$$

$$\tag{4}$$

onde

$$p_a = \frac{\log\left(\frac{\Phi_2 - \Phi_3}{\Phi_1 - \Phi_2}\right)}{\log(q)}$$
(5)

e, Φ_1 , Φ_2 e Φ_3 são as soluções numéricas obtidas com as malhas fina, grossa e supergrossa, respectivamente; q é a razão de refino de malha, calculada por q = $h_2/h_1 = h_3/h_2$ onde h_1 , h_2 e h_3 representam o tamanho dos volumes de controle ou a distância entre dois pontos das malhas uniformes fina, grossa e supergrossa, respectivamente; p_i é a ordem de convergência teórica do erro de truncamento, obtida com expansões da série de Taylor sobre o modelo matemático discretizado (Ferziger e Peric, 1996); e p_a , a ordem aparente, prática ou observada em experimentos numéricos.

As Eqs. (3) e (4), que se constituem na extrapolação de Richardson generalizada (Roache, 1994), permitem calcular Φ_{∞}^{i} e Φ_{∞}^{a} que limitam a solução exata Φ_{A} quando a função $p_{a}(h)$ é convergente de acordo com a definição de Marchi e Silva (1999); conforme este trabalho, a Eq. (4) só é válida para $p_{a} > 0$. A razão de refino (q) não precisa ser só inteira e nem constante entre as três malhas; no caso de q variável, a ordem aparente deve ser obtida de outra equação dada no trabalho já mencionado.

3.1. Estimativa do erro da solução calculada

Uma possível representação da solução numérica (Φ_N) é usar a solução obtida na malha fina (Φ_1) mais a sua incerteza (U_1), que também é chamada de estimativa de erro, isto é,

$$\Phi_N = \Phi_1 + U_1 \tag{6}$$

onde a incerteza U_1 é igual à máxima diferença entre Φ_1 e os valores dados por Φ_{∞}^i e Φ_{∞}^a , já que estas duas variáveis estimam o valor da solução exata (Φ_A) e deseja-se que a incerteza seja maior que o erro real. Portanto,

$$U_{1} = sg(\Phi_{1} - \Phi_{2})MAX\left\{\left|\Phi_{\infty}^{i} - \Phi_{1}\right|; \left|\Phi_{\infty}^{a} - \Phi_{1}\right|\right\}$$
(7)

onde sg(Φ_1 - Φ_2) representa o sinal da diferença entre Φ_1 e Φ_2 , e MAX{}, o máximo dos módulos das diferenças que estão dentro dos parênteses. Com base nos dados da Tabela I, a coluna esquerda da Tabela II apresenta um exemplo de cálculo de refino multidimensional

para o problema da equação de Laplace 2D, Eq. (1), sendo o erro real (E) da solução numérica ($\Phi_{numérica}$) em relação à solução analítica (Φ_A) calculado com

$$E = \Phi_A - \Phi_{numérico} \tag{8}$$

Tabela I. Exemplo de refino multidimensional: soluções numéricas da Eq. (1) para $T(x=y=\frac{1}{2})$.

malha (X*Y)	solução numérica	outros
5 * 33	$T_3 = 0.206809183$	$\mathbf{q} = 2$
9 * 65	$T_2 = 0.201144859$	$p_i = 2$
17 * 129	$T_1 = 0.199736958$	$T_A = 0.199268408$

Tabela II. Exemplos de cálculo de incerteza para refino multidimensional com base nas soluções numéricas da Tabela I.

solução calculada	solução extrapolada
(Eq. 3) $T_{\infty}^{i} = 0.199267658$	$(Eq. 9) T_m = 0.199269462$
$(Eq. 5) p_a = 2.008358693$	(Eq.10) $U_m = \pm 0.000001804$
(Eq. 4) $T_{\infty}^{a} = 0.199271265$	$(Eq. 8) E_m = -0.000001054$
$(Eq. 7) U_1 = -0.000469300$	$U_{m}/E_{m} = 1.71$
$(Eq. 8) E_1 = -0.000468550$	$U_{\rm m}/U_1 = 0.00384$
$U_1/E_1 = 1.0016$	$U_1/U_m = 260$
(Eq. 6) $T_N = 0.199736958 - 0.000469300$	$(Eq.11) T_N = 0.199269462 \pm 0.000001804$

3.2. Estimativa do erro da solução extrapolada

Sabendo-se que para ordem aparente (p_a) convergente (Marchi e Silva, 1999) a solução exata está entre Φ_{∞}^{i} e Φ_{∞}^{a} , com os mesmos resultados numéricos Φ_{1} , Φ_{2} e Φ_{3} , é possível melhorar a solução de Φ_{1} , isto é, reduzir tanto o seu erro quanto a sua incerteza por meio de

$$\Phi_m = \frac{\Phi^i_{\infty} + \Phi^a_{\infty}}{2} \tag{9}$$

$$U_m = \frac{\left|\Phi^i_{\infty} - \Phi^a_{\infty}\right|}{2} \tag{10}$$

com a representação da solução numérica, antes dada pela Eq. (6), passando a ser

$$\Phi_N = \Phi_m \pm U_m \tag{11}$$

Ainda na Tabela II, através de um exemplo comparativo, mostra-se na coluna da direita o efeito de se extrapolar a solução numérica na redução do seu erro e da sua incerteza, conforme as Eqs. (9) a (11).

Para o problema da equação de Laplace 2D, a Fig. 1 apresenta as incertezas $U_1 e U_m$ da temperatura no centro do domínio, e seus respectivos erros de discretização $E_1 e E_m$; estes, obtidos pela diferença entre a solução exata (Φ_A) e as soluções numéricas calculadas (Φ_1) e extrapoladas (Φ_m), conforme a Eq. (8). Os resultados referem-se a malhas de 3x3 a 4097x4097 pontos, com h representando a distância entre dois pontos consecutivos da malha. Na Fig. 1, os resultados de E_m e U_m já estão afetados pelos erros de arredondamento para h < 10^{-3} e, portanto, as previsões de erro baseadas na extrapolação de Richardson não são mais confiáveis.

Na Tabela III são relacionados os valores da ordem aparente (p_a) de alguns casos, com p_i indicando a ordem teórica esperada, obtida do erro de truncamento deduzido com expansões da série de Taylor sobre o modelo matemático discretizado (Ferziger e Peric, 1996).

Tabela III. Orde	ens de convergenci	ia aparente (p _a) pa	ara q = 2, e ordens te	eoricas (p _i).	
problema	variável	malha	p _a	p_i	
Laplace 2D	T central	4097 x 4097	1.999999	2	
Laplace 2D	T média	4097 x 4097	1.999994	2	
Condução 1D-t	T central	4097 x 2048	1.000004	1	
Condução 1D-t	T média	4097 x 2048	0.999109	1	
Navier-Stokes 2D	u central	256 x 256	1.996552	2	
Navier-Stokes 2D	v central	256 x 256	1.982185	2	
Navier-Stokes 2D	fluxo de massa	256 x 256	2.012358	2	



Figura 1. Módulos da incerteza e do erro de T($x=y=\frac{1}{2}$), para a equação de Laplace 2D, com esquema CDS e q = 2.

Ressalta-se que os mesmos resultados obtidos por Marchi e Silva (1999), para problemas unidimensionais, foram verificados no presente trabalho em todos os problemas multidimensionais e variáveis considerados na seção 2.

As estimativas de erro dadas pelas Eqs. (7) e (10) são válidas apenas para a mesma razão de refino (q) em todas as dimensões, embora o número de pontos ou de volumes possa ser diferente em cada uma delas, o que pode ser percebido no exemplo da Tabela I. Razões de refino diferentes em cada dimensão podem ser empregadas com a técnica de refino unidimensional, explicada na seção abaixo.

4. REFINO UNIDIMENSIONAL

O refino unidimensional é caracterizado quando cada dimensão (espacial e temporal) é refinada separadamente das demais, com ordens teóricas (p_i) e razões de refino de malha (q) iguais ou diferentes em cada dimensão. Um exemplo é mostrado na Tabela IV. Alguns motivos que podem justificar o uso de refino unidimensional são: ordens teóricas (p_i) e razões de refino de malha (q) diferentes em cada dimensão, e a possibilidade de obter-se estimativas de erro com malhas menores do que aquelas necessárias para o refino multidimensional, considerando-se o mesmo limite de pontos em cada dimensão.

Tabela IV. Soluções numéricas da Eq. (2) para $T(x=\frac{1}{2})$ em t = 0.1.

· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	I I I	
refino em X ($q_x = 2$)	refino em t ($q_t = 1.5$)	outros
malha 33 * 750: $T_{3,x} = 0.373245017$	malha 65 * 500: $T_{3,t} = 0.373144380$	$p_{i,x} = 2$
malha 65 * 750: $T_{2,x} = 0.373023555$	malha 65 * 750: $T_{2,t} = 0.373023555$	$p_{i,t} = 1$
malha 129 * 750: $T_{1,x} = 0.372968193$	malha 65 * 1125: T _{1,t} = 0.372942967	$T_A = 0.372707839$

4.1. Estimativa do erro da solução calculada

Em problemas multidimensionais, existem diversas possibilidades de se fazer o refino unidimensional para estimar o erro de discretização de uma solução numérica. Uma delas, abordada a seguir, se baseia na proposta de Roache (1994) e nos resultados de Marchi e Silva (1999), principalmente com relação aos limites do erro. O procedimento consiste na obtenção de três soluções numéricas em cada dimensão, sendo que a malha grossa, ou a intermediária, é comum ao refino em todas as dimensões. Neste caso a representação da solução numérica (Φ_N) é

$$\Phi_N = \Phi_2 + U_2 \tag{12}$$

onde Φ_2 é a solução numérica da malha grossa (2), que deve ser a mesma em qualquer dimensão de refino; a sua incerteza (U₂) é obtida de

$$U_2 = \sum_{j} \left(U_j \right) \tag{13}$$

com

$$U_{j} = sg(\Phi_{1,j} - \Phi_{2})MAX\left\{\left|\Phi_{\infty,j}^{i} - \Phi_{2}\right|; \left|\Phi_{\infty,j}^{a} - \Phi_{2}\right|\right\}$$
(14)

onde $\Phi_{\infty,j}^{i}$ e $\Phi_{\infty,j}^{a}$ são calculados através das Eqs. (3) e (4) com Φ_{1} , Φ_{2} , Φ_{3} , q, p_i e p_a de cada dimensão j. Também é possível usar a solução numérica obtida na malha mais fina (1) de cada

dimensão, isto é, Φ_1 . Neste caso, Φ_2 e U₂ devem ser substituídos por Φ_1 e U₁ nas Eqs. (12) a (14), e a malha fina usada para obter Φ_1 deve ser a comum aos refinos em todas as dimensões.

Exemplificando, na Tabela IV são apresentadas as soluções numéricas do problema 2, calculadas para a temperatura no centro do domínio. Neste caso, U_2 envolve soluções numéricas obtidas em cinco malhas diferentes, com a malha 65x750 sendo a comum às duas dimensões. Através de análises do erro de truncamento (Ferziger e Peric, 1996) das aproximações numéricas feitas para discretizar a Eq. (2), determina-se que suas ordens de convergência teórica são $p_{i,x} = 2$ e $p_{i,t} = 1$. Com as Eqs. (3), (4), (5) e (14), $p_{i,x}$, $p_{i,t}$ e as soluções numéricas dadas na Tabela IV, chega-se aos resultados apresentados na Tabela V. Com estes resultados e as Eqs. (8), (12) e (13) são obtidos os resultados mostrados no lado esquerdo da Tabela VI. Deve-se notar que $U_2/E_2 > 1$, isto é, a incerteza U_2 é confiável porque superestima o erro E_2 .

Tabela V. Cálculo da incerteza para refino unidimensional com base nas soluções numéricas da Tabela IV.

refino em t
$\mathrm{T}^{i}_{_{\infty,t}}=~0.372862379$
$p_{a,t} = 0.998836779$
$T^{a}_{\infty,t} = 0.372781563$
$U_t = -0.000241992$

Tabela VI. Cálculo de incerteza para refino unidimensional com base nas soluções numéricas da Tabela IV e nos resultados da Tabela V.

solução calculada	solução extrapolada
(Eq. 13) $U_2 = -0.000315808$	(Eq. 9) $T_{m,x} = 0.372949740$
$(Eq. 12) T_{N} = 0.373023555 - 0.000315808$	(Eq.10) $U_{m,x} = \pm 0.000000001$
$(Eq. 8) E_2 = -0.000315716$	(Eq. 9) $T_{m,t} = 0.372821971$
$U_2/E_2 = 1.00029$	(Eq.10) $U_{m,t} = \pm 0.000040408$
	(Eq.15) T _M = 0.372748156
	(Eq.16) $U_M = \pm 0.000040409$
	(Eq.17) $T_N = 0.372748156 \pm 0.000040409$
	$(Eq. 8) E_{\rm M} = -0.000040317$
	$U_{M}/E_{M} = 1.0023$
	$U_{\rm M}/U_2 = 0.13$
	$U_2/U_M = 7.8$

4.2. Estimativa do erro da solução extrapolada

Conforme já visto na seção 3.2 para refino multidimensional, com os mesmos resultados numéricos usados para se obter U_2 é possível melhorar a solução Φ_2 , ou seja, diminuir o seu erro e, portanto, a sua incerteza. Isto é conseguido da seguinte forma:

$$\Phi_M = \Phi_2 + \sum_j \left(\Phi_{m,j} - \Phi_2 \right)$$
(15)

onde Φ_M é a solução extrapolada a partir de Φ_2 em cada dimensão j, e $\Phi_{m,j}$ é obtido da Eq. (9) para cada dimensão j. A incerteza de Φ_M é calculada através de

$$U_M = \sum_j \left(U_{m,j} \right) \tag{16}$$

onde $U_{m,j}$ é dado pela Eq. (10) para cada dimensão j. Finalmente, a representação da solução numérica extrapolada e sua incerteza é

$$\Phi_N = \Phi_M \pm U_M \tag{17}$$

Para o exemplo da seção 4.1, a partir dos mesmos resultados numéricos da Tabela IV, e dos parâmetros da Tabela V, obtêm-se os resultados mostrados na coluna direita da Tabela VI. Nesta tabela, pode ser observado que $U_M/E_M = 1.0023$, isto é, a incerteza U_M é confiável porque superestima o erro E_M ; e há redução significativa da incerteza U_M em relação a U_2 , já que, $U_M/U_2 = 0.13$.

5. CONCLUSÃO

Os procedimentos propostos neste trabalho para estimar erros de discretização multidimensional, tanto para refino de malha simultâneo quanto separado nas dimensões espaciais e temporal, foram bem-sucedidos nos testes realizados. Estes testes envolveram a equação de Laplace bidimensional, condução de calor unidimensional transiente e as equações de Navier-Stokes bidimensionais.

Agradecimentos

O segundo autor agradece a UFPR e CAPES pelo apoio, e a Fábio A. Schneider pela revisão deste trabalho.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ferziger, J. H. and Peric, M., 1996, Computational Methods for Fluid Dynamics, Springer, Berlin.

Marchi, C. H. e Silva, A. F. C., 1999, Condições Suficientes para Estimar com Acurácia e Confiabilidade Erros de Discretização em CFD, Anais do XX CILAMCE - Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia, CD-ROM.

Richardson, L. F. and Gaunt, J. A., 1927, The Deferred Approach to the Limit, Phylosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A, Vol. 226, pp. 299-361.

Roache, P. J., 1994, Perspective: a Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies, Journal of Fluids Engineering, Vol. 116, pp. 405-413.

Shih, T. M., Tan, C. H. and Hwang, B. C., 1989, Effects of Grid Staggering on Numerical Schemes, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 9, pp. 193-212.