

XXV CILAMCE

CONGRESSO IBERO LATINO-AMERICANO DE
MÉTODOS COMPUTACIONAIS EM ENGENHARIA

RECIFE, 2004

**SOBRE A DEFINIÇÃO DA RAZÃO DE REFINO DE
MALHAS UNIDIMENSIONAIS NÃO-UNIFORMES**

Fábio Alencar Schneider

schneider@unicenp.br

Curso de Engenharia Mecânica, Centro Universitário Positivo

R. Prof. Pedro Viriato Parigot de Souza, 5300, 81280-310, Curitiba - PR – Brasil

fabioas@cefetpr.br

Departamento Acadêmico de Mecânica, Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná

R. Sete de Setembro, 3165, 81280-330, Curitiba – PR – Brazil

Carlos Henrique Marchi

marchi@demec.ufpr.br

Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná

Caixa postal 19040, 81531-980, Curitiba - PR – Brazil

***Resumo.** O objetivo deste trabalho é analisar a definição usual da razão de refino empregada com malhas irregulares (não-estruturadas, não-ortogonais e não-uniformes). Sua importância reside no seguinte: a razão de refino de malhas é um parâmetro que afeta diretamente a estimativa do erro de discretização feita pelos estimadores mais empregados na literatura; e malhas irregulares são amplamente utilizadas na obtenção de soluções numéricas. Os modelos matemáticos usados neste trabalho são a advecção unidimensional de um escalar e a média da integral de funções polinomiais, resolvidos através do método de diferenças finitas. Verificou-se que a definição usual de razão de refino empregada com malhas irregulares é incorreta até mesmo para a malha irregular mais simples, que é a unidimensional não-uniforme. Mas ela é correta quando uma malha não-uniforme é refinada de modo uniforme.*

***Palavras-chave:** Erro numérico, CFD, Diferenças finitas, Simulação numérica*

1. INTRODUÇÃO

O erro numérico verdadeiro (E) de uma variável de interesse é a diferença entre a sua solução analítica exata (Φ) e a sua solução numérica (ϕ), isto é, (Ferziger e Peric, 2001)

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (1)$$

Portanto, a solução numérica ideal é igual à solução analítica exata do problema, ou seja, é aquela em que o erro numérico é nulo. Exemplos de variáveis de interesse em dinâmica dos fluidos são: velocidade, temperatura, pressão, massa específica, vazão, fluxo de massa, fluxo de calor e força.

O valor do erro numérico verdadeiro independe de resultados experimentais mas só pode ser obtido quando a solução analítica do modelo matemático é conhecida. Porém, em termos práticos, isto é, para soluções numéricas de modelos matemáticos cuja solução analítica é desconhecida, não é possível obter o erro numérico. Nestes casos é necessário estimar o valor da solução analítica. Assim, em vez do erro numérico verdadeiro calcula-se o erro numérico estimado (U), que é avaliado pela diferença entre a solução analítica estimada (ϕ_∞) e a solução numérica (ϕ), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (2)$$

Pode-se considerar que o erro numérico é causado pelas seguintes fontes (Marchi e Silva, 2002):

- 1) Erro de truncamento: origina-se das aproximações numéricas empregadas na discretização de um modelo matemático (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998). Em geral, este erro se reduz com a diminuição do tamanho dos elementos da malha, isto é, com a diminuição da distância entre dois nós consecutivos da malha.
- 2) Erro de iteração: é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração (Ferziger e Peric, 2001). As equações discretizadas resultam das aproximações numéricas feitas sobre um modelo matemático. De forma geral, o erro de iteração se reduz com o aumento do número de iterações.
- 3) Erro de arredondamento: ocorre principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações. Ele aumenta com a redução do tamanho dos elementos da malha, isto é, com o aumento do número de nós, elementos ou volumes da malha.
- 4) Erro de programação: inclui os erros causados por pessoas na implementação e no uso de um programa computacional.

O presente trabalho considera apenas os efeitos do erro de truncamento sobre as soluções numéricas. Nesse caso, o erro numérico calculado através da Eq. (1) passa a ser denominado de erro de discretização (Ferziger e Peric, 2001). Nos problemas abordados neste trabalho, não existem erros de iteração, os erros de arredondamento são cerca de 15 ordens de grandeza inferiores aos erros de truncamento e, devido à grande simplicidade dos problemas, acredita-se que não existam erros de programação.

As duas principais metas em dinâmica dos fluidos computacional são obter soluções numéricas acuradas e confiáveis (Shyy *et al.*, 2002). Ambas dependem da estimativa do erro numérico. A magnitude aceitável para o erro numérico é função, entre outros fatores, da finalidade da solução numérica, dos recursos financeiros envolvidos, do tempo permitido ou disponível para realizar as simulações e dos recursos computacionais existentes. Sabendo-se que as soluções numéricas contêm erros, entre outros motivos, é importante estimá-los porque quando o erro é maior do que o aceitável compromete-se a confiabilidade do uso da solução numérica.

Uma forma de estimar o erro de discretização de soluções numéricas é através do estimador de Richardson (Marchi e Silva, 2002)

$$U_{Ri}(\phi_f) = \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^p - 1)} \quad (3)$$

onde ϕ_f e ϕ_g são soluções numéricas obtidas em duas malhas com número diferente de elementos, e cada uma destas malhas pode ser representada pelo tamanho dos seus elementos (h), isto é, h_f = malha fina e h_g = malha grossa; p representa a ordem assintótica ou formal (p_L) do erro de discretização (Roache, 1994) ou a ordem aparente (p_U); e q é a razão de refino entre as duas malhas, que no caso de malhas unidimensionais uniformes é definida por

$$q = \frac{h_g}{h_f} = \frac{N_f}{N_g} \quad (4)$$

onde N_f e N_g representam, respectivamente, o número de elementos das malhas fina e grossa. No caso de q ser constante entre três malhas, a ordem aparente (p_U) resulta em (De Vahl Davis, 1983)

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_g - \phi_{sg}}{\phi_f - \phi_g}\right)}{\log(q)} \quad (5)$$

onde ϕ_{sg} é a solução numérica obtida na malha supergrossa (h_{sg}). O caso de q variável entre três malhas é abordado por Roache (1998).

Outra forma de estimar o erro de discretização de soluções numéricas é através do estimador GCI (*Grid Convergence Index*) (Roache, 1994). Ele pode ser aplicado através de

$$U_{GCI}(\phi_f) = F_s |U_{Ri}(\phi_f)| \quad (6)$$

onde F_s é um fator de segurança com valor igual a três para aplicações em geral.

A definição usual da razão de refino empregada em malhas irregulares (não-uniformes, não-ortogonais e não-estruturadas) é dada por (Roache, 1994; Celik, 2004)

$$q = \left(\frac{N_f}{N_g}\right)^{\frac{1}{D}} \quad (7)$$

onde D é a dimensão espacial do problema, sendo igual a 1, 2 ou 3, respectivamente, para os casos uni, bi e tridimensional. Essa definição é uma extrapolação direta daquela usada em malhas multidimensionais uniformes. Para ver isso, basta compará-la com a Eq. (4) para o caso unidimensional, no qual $D = 1$.

O objetivo deste trabalho é mostrar: (i) que a definição usual da razão de refino empregada com malhas irregulares, Eq. (7), só é correta no caso limite de malhas uniformes; (ii) que ela é incorreta até mesmo para a malha irregular mais simples, que é a unidimensional não-uniforme; (iii) se existe algum tipo misto de malha entre uniforme e irregular na qual a Eq. (7) é válida; e (iv) se existe e qual é a métrica adequada a se usar em gráficos de erro para

variáveis locais e globais. Não se conhece qualquer trabalho da literatura que tenha abordado estas questões.

A importância deste trabalho reside no seguinte: (i) a razão de refino de malhas é um parâmetro que afeta diretamente a estimativa do erro de discretização feita pelos estimadores de Richardson e GCI, Eqs. (3) e (6); (ii) estes dois estimadores são os recomendados (Celik, 2004) pela *Fluids Engineering Division* da ASME (*American Society of Mechanical Engineers*); e (iii) malhas irregulares são amplamente utilizadas na obtenção de soluções numéricas.

Este texto está organizado da seguinte forma: a próxima seção apresenta a metodologia aplicada neste trabalho; na seção 3 são apresentados os resultados numéricos; e na seção 4, a conclusão deste trabalho.

2. METODOLOGIA

2.1 Aproximações numéricas

O método numérico empregado neste trabalho é o método das diferenças finitas (*MDF*) (Tannehill *et al.*, 1997). Seu princípio é aproximar através da série de Taylor (Kreyszig, 1999) cada termo do modelo matemático de um problema, em cada nó da malha. Por exemplo, a aproximação numérica $(T_{UDS}^i)_j$ no nó j da malha, Fig. 1, para a derivada de primeira ordem com um nó a montante, é dada por

$$(T_{UDS}^i)_j = \frac{(T_j - T_{j-1})}{h_j} \quad (8)$$

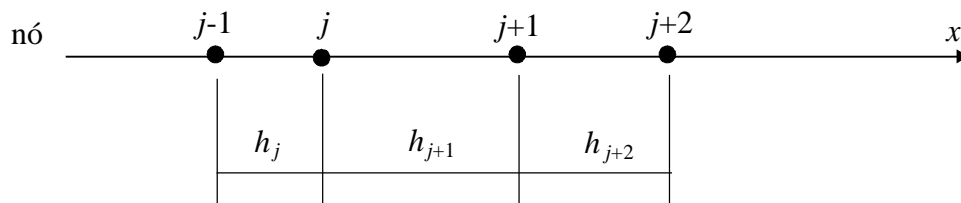


Figura 1 - Malha unidimensional não-uniforme.

O erro de truncamento (ε) desta aproximação é

$$\varepsilon(T_{UDS}^i)_j = T_j^{ii} \frac{h_j}{2} - T_j^{iii} \frac{h_j^2}{6} + T_j^{iv} \frac{h_j^3}{24} - \dots \quad (9)$$

onde os superíndices indicam, respectivamente, derivadas de 2^a, 3^a e 4^a ordens de T no nó j ; h_j é a distância entre dois nós consecutivos da malha; e os três pontos indicam uma série infinita.

A aproximação numérica (T_{int}) para a média de uma variável de campo, obtida através da regra do trapézio (Kreyszig, 1999), é dada por

$$T_{int} = \frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N h_j (T_{j-1} + T_j) \quad (10)$$

onde L é o comprimento do domínio e N é o número de nós da malha. Seu erro de truncamento é

$$\varepsilon(T_{\text{int}}) = -\sum_{j=1}^N \left(T_{j-1/2}^{ii} \frac{h_j^2}{12} + T_{j-1/2}^{iv} \frac{h_j^4}{480} + T_{j-1/2}^{vi} \frac{h_j^6}{53760} + \dots \right) \quad (11)$$

onde $(j-1/2)$ é o ponto médio entre os nós (j) e $(j-1)$.

2.2 Ordens verdadeira, assintótica e efetiva

Por analogia às expressões dos erros de truncamento, Eqs. (9) e (11), admite-se que o erro de discretização $E(\phi)$ é dado por (Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998)

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots \quad (12)$$

onde

ϕ = variável de interesse

h = tamanho dos elementos da malha

C_1, C_2, C_3, \dots = coeficientes que independem de h

p_L, p_2, p_3, \dots = ordens verdadeiras do erro de discretização; números inteiros e positivos

p_L = ordem assintótica do erro de discretização; $p_L \geq 1$; é a inclinação da curva do erro num gráfico $\log(|E|)$ versus $\log(h)$ para $h \rightarrow 0$

A ordem efetiva do erro verdadeiro é definida por (Marchi, 2001)

$$p_E = \frac{\log \left[\frac{E(\phi_g)}{E(\phi_f)} \right]}{\log(q)} \quad (13)$$

Conforme a Eq. (13), a ordem efetiva (p_E) é função do erro verdadeiro da variável de interesse e também da razão de refino (q) entre as malhas. Para os problemas cujas soluções analíticas são conhecidas, ela pode ser usada para verificar se $p_E \rightarrow p_L$ à medida que $h \rightarrow 0$. Ou seja, com base nas soluções numéricas, a ordem efetiva (p_E) pode ser usada para verificar se, à medida que $h \rightarrow 0$, obtém-se a ordem assintótica (p_L) do erro de discretização, que é um resultado obtido sem qualquer solução numérica.

2.3 Definição dos problemas

Os modelos matemáticos usados neste trabalho são a advecção unidimensional de um escalar e a média da integral de funções polinomiais, representados pelas seguintes equações

$$\frac{dT^A}{dx} = 2x \quad (14)$$

$$T_{\text{int}} = \frac{1}{L} \int T dx \quad (15)$$

onde as funções polinomiais a integrar são

$$T^B = x^2 \quad (16)$$

$$T^C = x^3 \quad (17)$$

Nas Eqs. (14) a (17), os superíndices representam os problemas A , B e C ; T é a variável dependente e x é a variável independente; a condição de contorno do problema A é $T(0) = 0$; e o comprimento do domínio de cálculo é $L = 1$.

As soluções analíticas exatas dos problemas A , B e C são

$$T^A = x^2 \quad (18)$$

$$T_{\text{int}}^B = \frac{1}{3} \quad (19)$$

$$T_{\text{int}}^C = \frac{1}{4} \quad (20)$$

2.4 Discretização dos modelos matemáticos

Aplicando-se a aproximação numérica $(T_{UDS}^i)_j$, dada na Eq. (8), ao problema A , Eq. (14), obtém-se

$$T_j^A = 2x_j h_j + T_{j-1}^A \quad (21)$$

E aplicando-se a aproximação numérica $(T_{\text{int}})_j$, dada na Eq. (10), aos problemas B e C , Eq. (15) a (17), obtém-se respectivamente

$$T_{\text{int}}^B = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N h_j (x_{j-1}^2 + x_j^2) \quad (22)$$

$$T_{\text{int}}^C = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N h_j (x_{j-1}^3 + x_j^3) \quad (23)$$

Estes problemas foram escolhidos porque: (i) não há dúvida alguma na literatura de que a ordem assintótica (p_L) é $p_L = 1$ no caso do problema A e $p_L = 2$ para os problemas B e C , sejam as malhas uniformes ou não-uniformes; (ii) o problema A representa um caso de variável local; e (iii) os problemas B e C representam dois casos de variável global.

Para o problema A , com sua solução analítica, Eq. (18), e o erro de truncamento (ε) da aproximação numérica $(T_{UDS}^i)_j$, Eq. (9), pode-se obter para o erro de discretização

$$E(T^A)_j = (C_1)_j h_j \quad (24)$$

E para os problemas B e C , com suas funções, Eqs. (16) e (17), e o erro de truncamento (ε) da aproximação numérica $(T_{\text{int}})_j$, Eq. (11), pode-se obter para o erro de discretização

$$E(T_{\text{int}}) = \sum_{j=1}^N (C_1)_{j-1/2} h_j^2 \quad (25)$$

onde C_1 é um coeficiente particular de cada problema. Portanto, a equação do erro de discretização, Eq.(12), possui apenas um termo para cada um dos três problemas. Conseqüentemente, a ordem efetiva (p_E) tem que ser igual à ordem assintótica (p_L) para qualquer tamanho (h) dos elementos da malha. Portanto, no caso do problema A, $p_E = 1$ e para os problemas B e C, $p_E = 2$, qualquer que seja h .

3 RESULTADOS

3.1 Malha grossa uniforme

Inicialmente, os resultados foram obtidos partindo-se de uma malha uniforme de comprimento unitário, que pode ser vista na Fig. 2. Para entender o efeito do refino de malha na ordem do erro de discretização, manteve-se a coordenada do ponto 2 fixa nas malhas grossa (h_g) e fina (h_f) e variou-se apenas a posição do ponto flutuante (F), da malha fina, entre $a = 0$ e $a = L/2$. Assim, quando $a = L/4$, o refino de malha é uniforme, caso contrário o refino é dito não-uniforme. Como a solução analítica exata também é conhecida para cada caso, aplicou-se a Eq.(13) para calcular a ordem efetiva (p_E) no ponto 2. Para o cálculo da razão de refino (q), utilizou-se a Eq. (7).

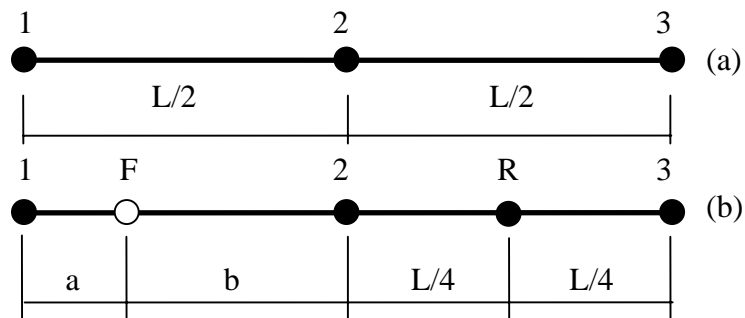


Figura 2 – a) malha grossa uniforme (h_g); b) malha fina não-uniforme (h_f).

As Figs. 3 e 4 apresentam os resultados de T e p_E no ponto 2 para o problema A. As Figs. 5 a 7 apresentam os resultados de T e p_E dos problemas B e C. Em todos os casos, a ordem efetiva (p_E) se iguala à ordem assintótica (p_L) somente quando $a = L/4$, ou seja, quando o refino é uniforme. Observa-se que quanto mais próxima a solução numérica está da solução analítica, maior é o valor da ordem efetiva (p_E).

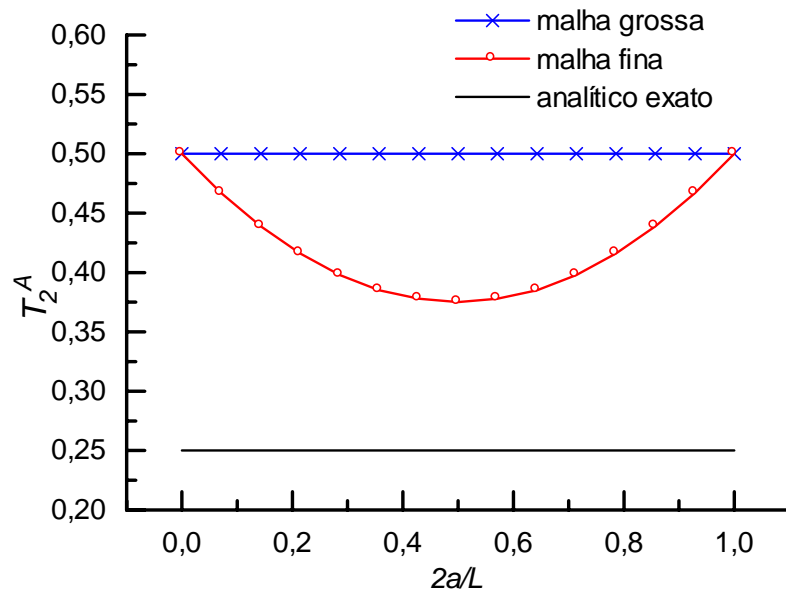


Figura 3 – Soluções do problema A (T^A) no ponto 2 para as malhas da Fig. 2.

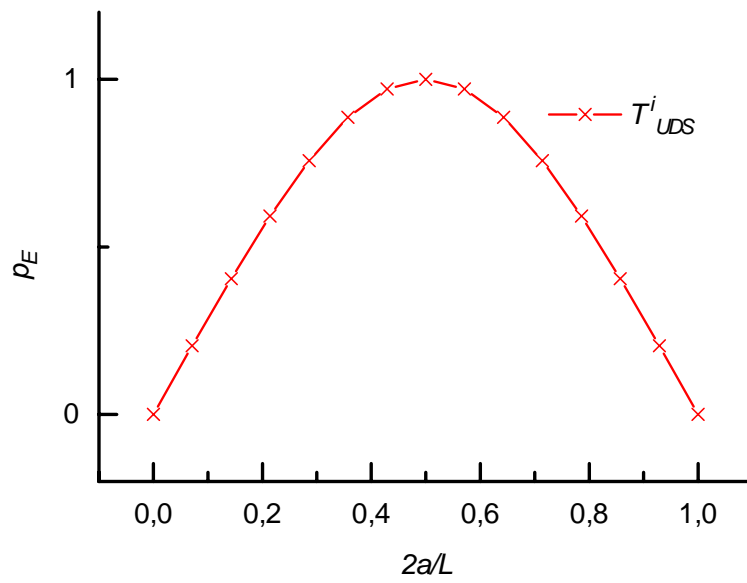


Figura 4 – Ordem efetiva (p_E) do problema A no ponto 2 para as malhas da Fig. 2.

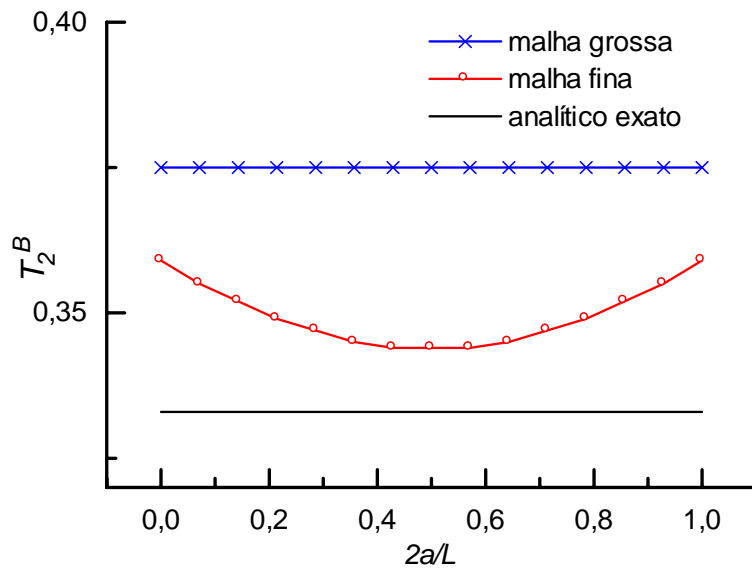


Figura 5 – Soluções do problema B (T^B) para as malhas da Fig. 2.

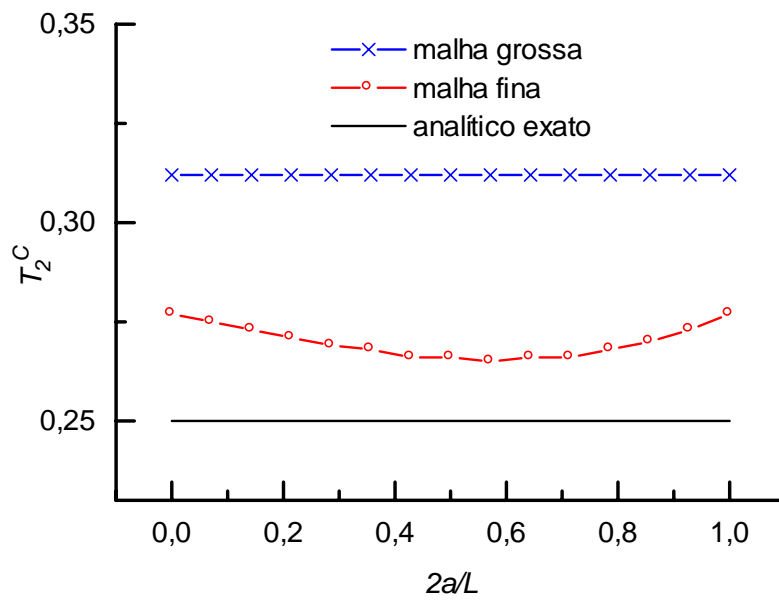


Figura 6 – Soluções do problema C (T^C) para as malhas da Fig. 2.

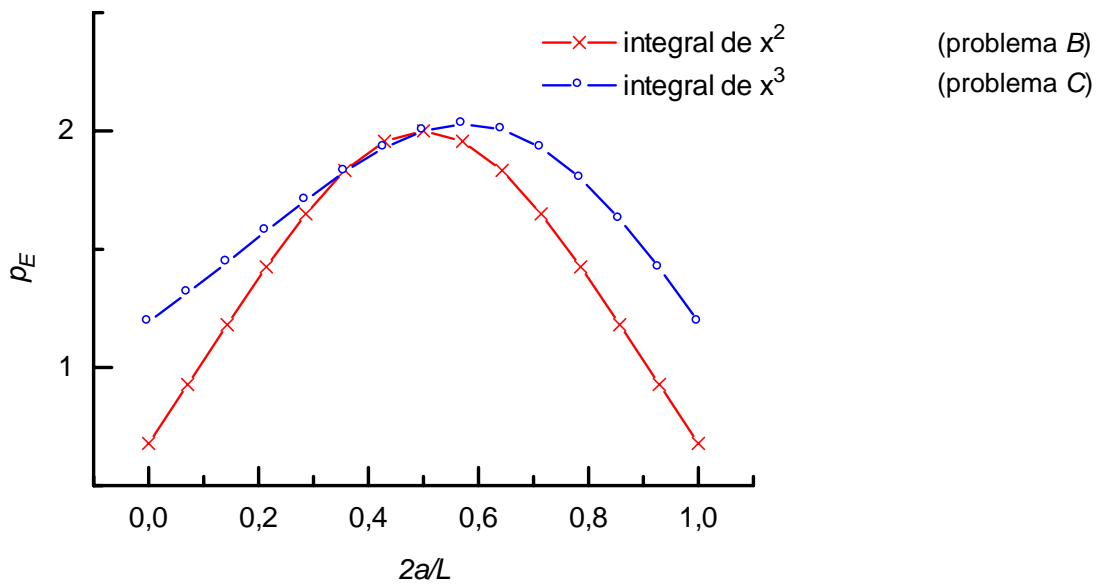


Figura 7 – Ordem efetiva (p_E) dos problemas B e C para as malhas da Fig. 2.

3.2 Malha grossa não-uniforme

Como a malha grossa da Fig. 2 é uma malha uniforme, a etapa seguinte dos testes se concentrou no refino representado na Fig. 8. A malha grossa é não-uniforme e sofre refino uniforme e não-uniforme, conforme os valores de c , a e b .

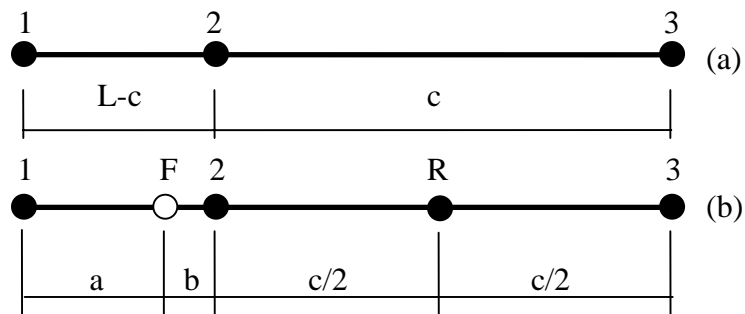


Figura 8 – a) malha grossa não-uniforme (h_g); b) malha fina não-uniforme (h_f).

A Figura 9 apresenta os resultados obtidos para a ordem efetiva (p_E) nos três problemas estudados, com $c = 3L/4$. Para finalizar os testes, através da Eq. (13), extraiu-se para cada problema qual seria o valor correto da razão de refino (q) que resultaria no valor da ordem assintótica (p_L). A Fig. 10 apresenta estes resultados. Verificou-se que para cada problema em particular existe uma curva distinta para o valor de (q) e, portanto, não existe uma regra única para o seu cálculo. Porém, no caso do refino ser uniforme, isto é, $a = (L-c)/2$, todas as curvas passam pelo ponto onde $q = 2$.

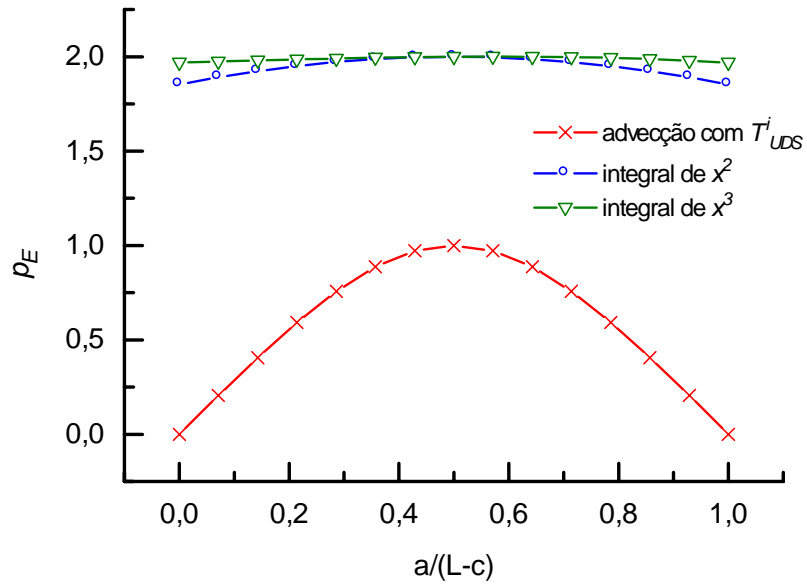


Figura 9 – Ordem efetiva (p_E) dos problemas A, B e C para as malhas da Fig. 8 e $c = 3L/4$.

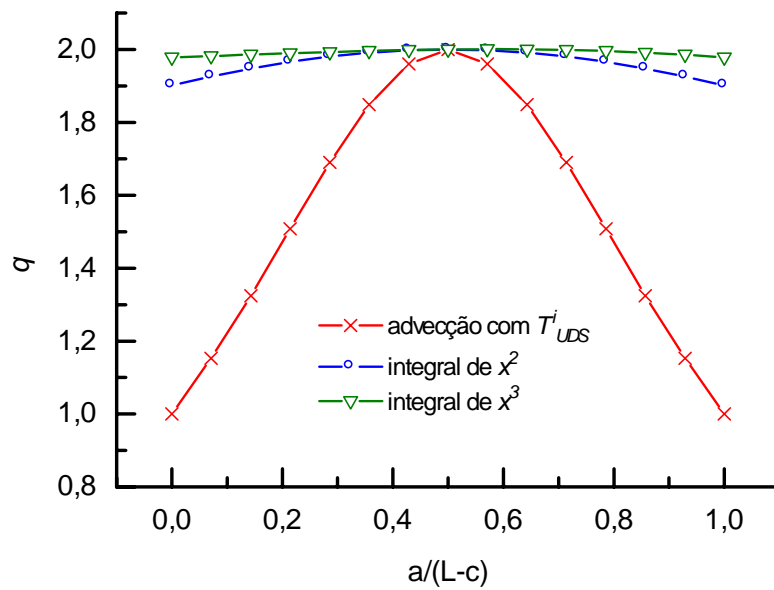


Figura 10 – Valor da razão de refino (q) que reproduz a ordem assintótica (p_L), para as malhas da Fig. 8 e $c = 3L/4$.

4. CONCLUSÃO

Para a definição usual de razão de refino empregada com malhas irregulares, Eq. (7), mostrou-se que:

- 1) Ela é incorreta até mesmo para a malha irregular mais simples, que é a unidimensional não-uniforme.
- 2) Ela é correta quando uma malha não-uniforme é refinada de modo uniforme, ou seja, quando cada elemento da malha grossa é dividido em um número inteiro de segmentos de igual tamanho para gerar a malha fina, sendo este número constante ao longo da malha e igual à própria razão de refino (q).

Com base nos resultados deste trabalho, especula-se que os dois pontos acima também se aplicam ao refino de malhas irregulares multidimensionais (não-ortogonais, não-estruturadas e não-uniformes).

Quando o objetivo é calcular ordens efetiva e aparente, e estimar o valor do erro de discretização, recomenda-se realizar refino uniforme de malhas irregulares. Neste caso, a métrica adequada para fazer gráficos de erro *versus* h , ou ordem *versus* h , pode ser o menor ou o maior tamanho (h) dos elementos de cada malha.

REFERÊNCIAS

- Celik, I. B., 2004. Procedure for estimation and reporting of discretization error in CFD applications. *ASME Journal of Fluids Engineering*. Disponível em: <www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumAccuracy.pdf>. Acesso em 1 June 2004.
- 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., 2001. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3. ed. Springer.
- Kreyszig, E., 1999. *Advanced Engineering Mathematics*. 8th ed. Wiley.
- Marchi, C. H., 2001. *Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos*. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis.
- Marchi, C. H., Silva, A. F. C., 2002. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 42, pp. 167-188.
- Roache, P. J., 1994. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. *Journal of Fluids Engineering*, vol. 116, pp. 405-413.
- Roache, P. J., 1998. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. Hermosa.
- Shyy, W., Garbey, M., Appukuttan, A., & Wu, J., 2002. Evaluation of Richardson extrapolation in computational fluid dynamics. *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 41, pp. 139-164.

Tannehill, J. C., Anderson, D. A., & Pletcher, R. H., 1997. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 2. ed. Taylor & Francis.