Proceedings of the 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering -- ENCIT 2006
Braz. Soc. of Mechanical Sciences and Engineering -- ABCM, Curitiba, Brazil, Dec. 5-8, 2006

Paper CIT06 – 0385

SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMA TERMOELÁSTICO COM ESTIMATIVA DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Orestes Hacke
Universidade do Contestado (UnC), Mafra, SC
oresteshacke@brturbo.com

Carlos Henrique Marchi
Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná (UFPR), Curitiba, PR
marchi@demec.ufpr.br

Resumo. *Neste trabalho, verifica-se o erro numérico da solução de um problema de condução de calor e estima-se o erro de um problema termoelástico; ambos bidimensionais. As soluções numéricas são obtidas empregando-se o método de diferenças finitas com aproximações numéricas de segunda ordem de acurácia. São avaliados o erro (E) verdadeiro de discretização e sua estimativa (U) além das ordens efetiva e aparente.U é obtido com os estimadores de Richardson e GCI. São utilizadas malhas uniformes com até 1024x1024 elementos. Verificou-se que o estimador GCI é confiável e as ordens efetiva e aparente tendem à ordem assintótica, prevista a priori, quando o tamanho dos elementos tende a zero.*

Palavras-chave: diferenças finitas, GCI, extrapolação de Richardson, condução de calor, termoelasticidade.

1. Introdução

Com relação às estimativas dos erros numéricos envolvidos nos resultados de simulações numéricas, atualmente os trabalhos encontrados na literatura podem ser classificados em quatro conjuntos: (1) nenhuma estimativa é realizada e a solução numérica é obtida sobre uma única malha; (2) nenhuma estimativa é realizada mas são apresentadas soluções numéricas obtidas sobre duas ou mais malhas, geralmente fazendo-se comparações gráficas de perfis de variáveis de campo nas diversas malhas; (3) são feitas estimativas mas com base em estimadores de erro pouco confiáveis ou inadequados, como o estimador delta (Roache, 1998); e (4) são feitas estimativas com base no estado-da-arte, isto é, com os melhores estimadores de erro disponíveis, como o estimador *GCI* (Grid Convergence Index) (Roache, 1994).

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.

Neste trabalho é resolvido um problema de condução de calor e um de termoelasticidade linear, ambos com o método de diferenças finitas, com malhas uniformes e aproximações numéricas de 2ª ordem de acurácia. O modelo numérico segue basicamente o de Demirdzic e Martinovic (1993), que empregaram o método de volumes finitos em problemas termoelásticos, entre outros. Porém, eles não fizeram estimativa do erro de discretização. Assim, os objetivos do presente trabalho são: (1) verificar (Roache, 1998) as soluções numéricas para o problema térmico cuja solução analítica é conhecida; (2) obter soluções numéricas altamente acuradas, com malhas de até 1024x1024 elementos; (3) utilizar os estimadores de Richardson e *GCI* para estimar o erro de discretização das variáveis de interesse; (4) avaliar o desempenho destes estimadores para o caso em que a solução analítica é conhecida; e (5) comprovar a ordem de acurácia das soluções numéricas.

O trabalho está assim dividido: na seção 2 são apresentados os estimadores de erro; na seção 3 é definido o problema térmico, seu modelo numérico e apresentados os resultados; na seção 4, o mesmo para o problema termoelástico; e na seção 5, a conclusão do trabalho.

2. Erro de discretização

Erro numérico (E) é a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ), isto é, (Marchi e Silva, 2002)

$$E(\phi) = \Phi - \phi \tag{1}$$

onde E é causado por quatro fontes de erros: truncamento, iteração, arredondamento e programação. Quando as outras fontes são inexistentes ou muito pequenas em relação aos erros de truncamento, E também pode ser denominado de erro de discretização.

Em situações práticas, uma solução numérica é obtida porque a solução analítica é desconhecida. Por conseqüência, o valor verdadeiro do erro numérico também é desconhecido. Portanto, o erro numérico tem que ser estimado. Pelo número de citações e amplo uso que vem sendo feito dele, e segundo a experiência de um dos autores deste trabalho, o *GCI* (*Grid Convergence Index*) de Roache (1994) pode ser considerado o mais confiável dos estimadores atuais para erros de discretização. Segundo o *GCI*, o erro de discretização estimado (U) é dado por

$$U_{GCI}(p,\phi_1) = F_s \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(r^p - 1)} \tag{2}$$

onde

$$p = Min(p_L, p_U > 0) \tag{3}$$

$$p_U = \frac{\log\left(\dfrac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2}\right)}{\log(r)} \tag{4}$$

$$r = \frac{h_3}{h_2} = \frac{h_2}{h_1} \tag{5}$$

ϕ_1, ϕ_2 e ϕ_3 = soluções numéricas obtidas respectivamente com malhas fina (h_1), grossa (h_2) e supergrossa (h_3), h = tamanho dos elementos da malha, isto é, a distância entre dois nós consecutivos, r = razão de refino de malha, Min = valor mínimo entre os argumentos, F_s = fator de segurança (três, neste trabalho), p_L = ordem assintótica (Roache, 1998) do erro prevista para cada variável de interesse, p_U = ordem aparente (De Vahl Davis, 1983; Marchi e Silva, 2002) do erro calculada para cada variável de interesse.

A Eq. (2) resulta dos trabalhos de Roache (1994) e Marchi e Silva (2002). O cálculo da ordem p do erro, segundo a Eq. (3), aumenta a confiabilidade do erro estimado pela Eq. (2). Se $p_U \le 0$ ou indefinido, a Eq. (2) não deve ser aplicada (Marchi, 2001).

Teoricamente (Marchi, 2001), espera-se que p_E e $p_U \rightarrow p_L$ para $h \rightarrow 0$. Isto é, espera-se que as ordens práticas (p_E e p_U), que são calculadas com as soluções numéricas de cada variável de interesse, tendam à ordem teórica (p_L), prevista *a priori*, quando o tamanho dos elementos da malha (h) tende a zero.

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

$$p_E = \frac{\log\left[\dfrac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)}\right]}{\log(r)} \tag{6}$$

Conforme a Eq. (6), a ordem efetiva (p_E) é função do erro verdadeiro da variável de interesse. Assim, para os problemas cuja solução analítica é conhecida, ela pode ser usada para verificar *a posteriori* se, à medida que $h \rightarrow 0$, $p_E \rightarrow p_L$.

O estimador de Richardson, baseado nas ordens assintótica (p_L) e aparente (p_U), é dado por

$$U_{Ri}(p_L,\phi_1) = \frac{\phi_1 - \phi_2}{r^{p_L} - 1} \tag{7}$$

$$U_{Ri}(p_U,\phi_1) = \frac{\phi_1 - \phi_2}{r^{p_U} - 1} \tag{8}$$

3. Condução de calor bidimensional

3.1. Modelo matemático

O problema da condução de calor bidimensional em regime permanente é governado pela equação de Laplace, isto é,

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \tag{9}$$

onde x e y são as direções coordenadas e T é a temperatura. As condições de contorno são do tipo Dirichlet e dadas por: $T(x,0) = T(0,y) = T(1,y) = 0$ e $T(x,1) = \text{sen}(\pi x)$.

As variáveis de interesse, isto é, as variáveis para as quais é obtida a solução numérica e verificado seu erro de discretização e suas ordens são:

(a) Temperatura (T) em $x = y = 3/4$: variável dependente, primária, local, incógnita principal do problema que é obtida a partir da solução da Eq. (9), que é uma equação diferencial parcial (EDP), linear, de segunda ordem. Sua solução analítica é

$$T(x,y) = sen(\pi x)\frac{senh(\pi y)}{senh(\pi)} \tag{10}$$

(b) Taxa de transferência de calor (q): variável secundária, obtida a partir da seguinte definição

$$q = -\int_0^1 kW \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{x,y=1} dx \tag{11}$$

onde k = condutividade térmica do material (constante), W = espessura do material (constante). Para a Eq. (10), a solução analítica da Eq. (11) é

$$q = -2kW\coth(\pi) \tag{12}$$

3.2. Modelo numérico

O modelo numérico é caracterizado pelo uso do método de diferenças finitas, malhas uniformes e o método de Gauss-Seidel (Kreyszig, 1999) para resolver o sistema de equações. A linguagem de programação usada é *C++ Builder* 6.0, com precisão dupla para todas as variáveis reais. Os dois termos da Eq. (9) foram aproximados com o esquema de diferença central (CDS) (Tannehill *et al.*, 1997). O processo iterativo foi levado até ser atingido o erro de máquina para minimizar o erro de iteração e utilizou-se estimativa inicial nula. A variável taxa de transferência de calor (q) foi obtida com o esquema de diferença à montante de segunda ordem (UDS-2) (Tannehill *et al.*, 1997). Considerando-se as aproximações numéricas acima, a ordem assintótica prevista para cada variável de interesse é $p_L = 2$.

3.3. Resultados

Para obter as soluções numéricas deste trabalho foi utilizado um computador com processador Pentium 4, 2.8 GHz e 512 MB de memória RAM. Considerou-se $k = 1$ W/m.K e $W = 1$ m. As malhas utilizadas são uniformes com 2, 4, 8, ... até 1024 elementos em cada direção. Para a malha mais refinada, o número de iterações para atingir o erro de máquina foi de $\approx 2{,}8\text{x}10^6$, que resultou no tempo de CPU de quase três dias (71 horas).

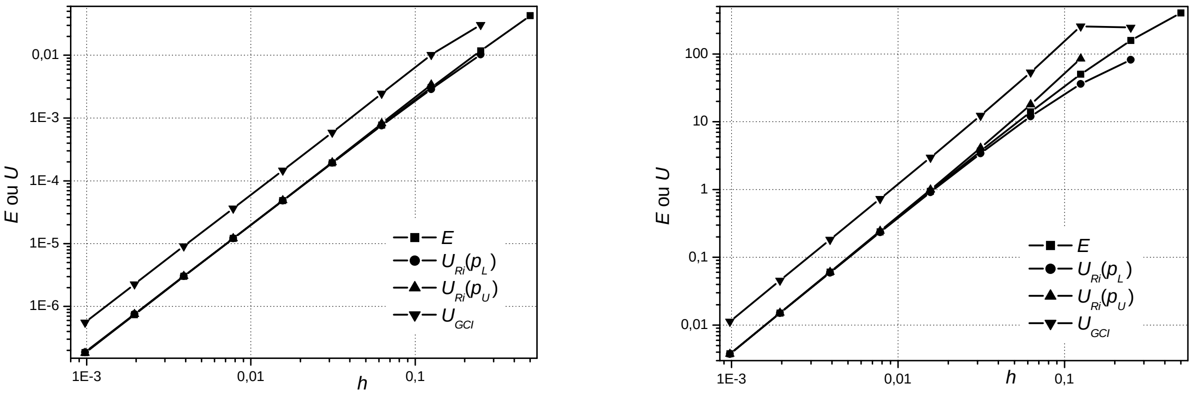
A Tab. 1 apresenta a solução analítica e numérica para as duas variáveis de interesse, para a malha 1024x1024 elementos. Nesta malha, para as duas variáveis, o estimador *GCI* é confiável. Isto é, a solução analítica está contida no intervalo compreendido pela solução numérica (ϕ) $\pm U_{GCI}$.

Tabela 1. Solução numérica com malha 1024 x 1024 do problema térmico.

Variável	Solução analítica (Φ)	Solução numérica (ϕ) e seu U_{GCI}
T(3/4,3/4) [K]	0,32009852	$0{,}32009872 \pm 5{,}6\text{x}10^{-7}$
q [W]	–805,001	$-804{,}997 \pm 1{,}1\text{x}10^{-2}$

Para as duas variáveis de interesse, a Fig. 1 apresenta o módulo do erro verdadeiro (E), e a sua estimativa (U) baseada nas Eqs. (2), (7) e (8). Percebe-se que o estimador GCI é confiável em qualquer malha, isto é, $U/E \geq 1$. Além disso, E se reduz monotonicamente à medida que $h \to 0$.

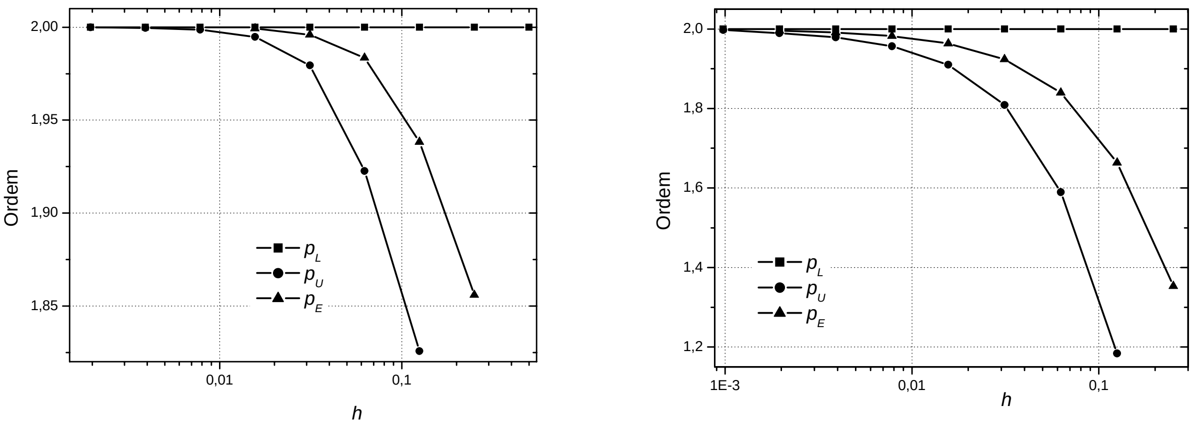
A Fig. 2 apresenta as ordens assintótica (p_L), efetiva (p_E) e aparente (p_U) do erro. Nota-se que p_E e $p_U \to p_L$ monotonicamente à medida que $h \to 0$. Para não comprometer a análise dos resultados, foram eliminados alguns pontos que, sabidamente, já sofrem efeito do erro de arredondamento; no caso em análise, isso ocorre em geral para $h < 4\text{x}10^{-2}$. Todos os resultados de p_E e p_U , apresentados neste trabalho, foram obtidos com as Eqs. (4) e (6) com razão de refino (r) igual a 2.



a) Temperatura T(3/4,3/4).

b) Taxa de transferência de calor q.

Figura 1. Condução de calor: módulo do erro (E) e de sua estimativa (U).



a) Temperatura T(3/4,3/4).

b) Taxa de transferência de calor q.

Figura 2. Condução de calor: ordens assintótica (p_L), efetiva (p_E) e aparente (p_U) do erro.

4. Termoelasticidade bidimensional

4.1. Modelo matemático

O problema termoelástico linear, bidimensional, em regime permanente é governado pelas seguintes equações (Timoshenko e Goodier, 1970):

$$C_u \cdot \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}\right)+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=2.C_u \cdot \beta \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \tag{13}$$

$$C_u \cdot \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}\right)+\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}=2.C_u \cdot \beta \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \tag{14}$$

onde $C_\mu = \frac{1+\mu}{1-\mu}$, μ = razão de Poisson, x e y = direções coordenadas, T = temperatura, β = coeficiente de expansão térmica, e u e v = deslocamentos nas direções x e y. As condições de contorno são do tipo Dirichlet e dadas por u e v = 0 em todos os quatro contornos. A parte térmica do problema é governada pela Eq. (9).

As variáveis de interesse são:

(a) Deslocamento na direção x (u) em $x = y = 3/4$: variável dependente, primária, local, incógnita principal do problema que é obtida a partir da solução das Eqs. (13) e (14), que é um sistema de equações diferenciais parciais, acopladas, de segunda ordem.
(b) Força na direção x no contorno direito (F_X): variável secundária, obtida a partir da seguinte definição

$$F_X \quad = \quad \int_0^1 W\left(\sigma_X\right)_{x=1,y} dy \tag{15}$$

onde a tensão normal σ_x é dada por

$$\sigma_X = \frac{E}{1+\mu} \cdot \left[\frac{\mu}{1-\mu} \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial u}{\partial x} - C_\mu \cdot \beta \cdot \left(T - T_O \right) \right] \tag{16}$$

com E = módulo de Young e T_O = temperatura de referência, nula.

4.2. Modelo numérico

O modelo numérico é caracterizado pelo uso do método de diferenças finitas e malhas uniformes. O método de Gauss-Seidel (Kreyszig, 1999) é usado para resolver os três sistemas de equações originados da discretização das Eqs. (9), (13) e (14). A linguagem de programação usada é *C++ Builder* 6.0, com precisão dupla para todas as variáveis reais. Os termos das equações foram aproximados com o esquema de diferença central (CDS) (Tannehill *et al.*, 1997). O processo iterativo foi levado até ser atingido o erro de máquina para minimizar o erro de iteração e utilizou-se estimativa inicial nula para as três variáveis primitivas: T, u e v. A variável força na direção x no contorno direito (F_X) foi obtida com o esquema UDS-2, de segunda ordem (Tannehill *et al.*, 1997). Considerando-se as aproximações numéricas acima, a ordem assintótica prevista para cada variável de interesse é $p_L = 2$.

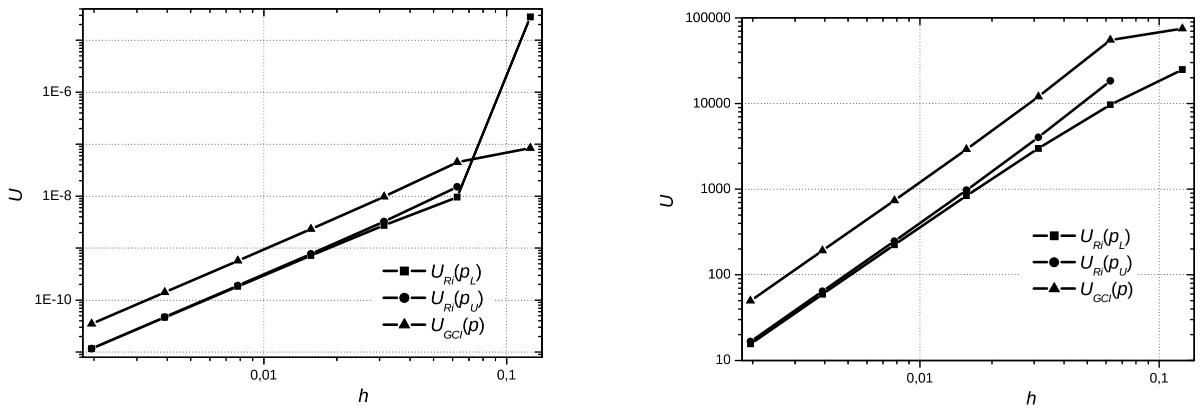
4.3. Resultados

As soluções numéricas foram obtidas para $\beta = 16\text{x}10^{-6}$ K^{-1}, $E = 10^9$ N/m, $W = 1$ m e $\mu = 0{,}32$. As malhas utilizadas são uniformes com 2, 4, 8, ... até 512 elementos em cada direção. Para a malha mais refinada, o número de iterações para atingir o erro de máquina foi de $\approx 6{,}4\text{x}10^5$ que resultou no tempo de CPU de quase 18 horas. A Tab. 2 apresenta a solução numérica das duas variáveis de interesse, para a malha 512x512 elementos.

Tabela 2. Solução numérica com malha 512 x 512 do problema termoelástico.

Variável	Solução numérica (ϕ) e seu U_{GCI}
u(3/4,3/4) [m]	$5{,}24863\text{x}10^{-7} \pm 3{,}5\text{x}10^{-11}$
F_X [N]	-404877 ± 50

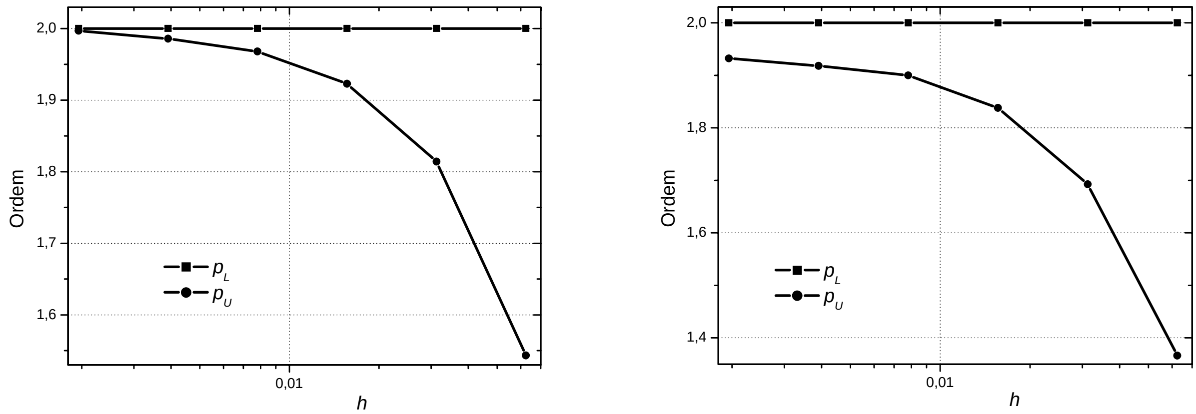
Para as duas variáveis de interesse, a Fig. 3 apresenta a estimativa do erro de discretização (U) baseada nas Eqs. (2), (7) e (8). A Fig. 4 apresenta as ordens assintótica (p_L) e aparente (p_U) do erro. Nota-se que $p_U \rightarrow p_L$ monotonicamente à medida que $h \rightarrow 0$.



a) Deslocamento u(3/4,3/4).

b) Força F_X.

Figura 3. Termoelasticidade: módulo da estimativa do erro (U).



a) Deslocamento $u(3/4,3/4)$.　　b) Força F_X.

Figura 4. Termoelasticidade: ordens assintótica (p_L) e aparente (p_U) do erro.

5. Conclusão

Para o problema de condução de calor, cuja solução analítica é conhecida, verificou-se que:

- À medida que a malha é refinada, os valores das ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) tendem monotonicamente ao valor (2) teórico da ordem assintótica (p_L) para as variáveis de interesse.
- A estimativa do erro (U_{GCI}) é confiável em todos os pontos em que se comparou U com E, isto é, a solução analítica está contida no intervalo compreendido pela solução numérica (ϕ) ± U_{GCI}.

Para o problema termoelástico, cuja solução analítica não é conhecida, verificou-se que à medida que a malha é refinada, os valores de p_U tendem monotonicamente ao valor (2) teórico de p_L para as variáveis de interesse. Apresentou-se a solução numérica obtida com a malha 512x512 e a estimativa (U) do seu erro de discretização.

6. Agradecimentos

O segundo autor é bolsista do CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico).

7. Referências

Demirdzic, I. Martinovic, D., 1993, "Finite volume method for thermo-elasto-plastic stress analysis", Computer Methods im Applied Mechanics and Engineering, v. 109, p. 331-349.

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, v. 3, p. 249-264.

Kreyszig, E., 1999, "Advanced Engineering Mathematics", 8th ed., New York: Wiley.

Marchi, C. H., Silva, A. F. C., 2002, "Unidimensional Numerical Solution Error Estimation for Convergent Apparent Order", Numerical Heat Transfer, v. 42, p. 167-188.

Marchi, C. H., 2001, "Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos", Tese Doutorado em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

Roache, P. J., 1994, "Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies", ASME Journal of Fluids Engineering, v. 116, p. 405-413.

Roache, P. J., 1998, "Verification and validation in computational science and engineering", Hermosa.

Tannehill, J. C., Anderson, D. A., Pletcher, R. H., 1997, "Computational fluid mechanics and heat transfer", Taylor & Francis.

Timoshenko, S. P., Goodier, J. N., 1970, "Theory of elasticity", Japan: McGraw-Hill.

NUMERICAL SOLUTION OF THERMOELASTIC PROBLEM WITH DISCRETIZATION ERROR ESTIMATION

Orestes Hacke
Universidade do Contestado – UnC
Mafra, SC, Brazil
oresteshacke@brturbo.com

Carlos Henrique Marchi
Department of Mechanical Engineering
Federal University of Paraná
Curitiba, PR, Brazil
marchi@demec.ufpr.br

Abstract. The main objective of this work is verify the error of numerical solution of a thermoelastic problem in two-dimensions. It is used the finite difference method with numerical approaches of second order. The true error (E) of dicretization and its estimative (U) are evaluated. It is used the Richardson and GCI estimators. It were used uniform grids with 2 up to 1024 elements in each direction. It was verified that the GCI estimator supplies reliable uncertainty. The value of the effective and apparent orders approaches the asymptotic order monotonically as $h \to 0$.

Keywords: finite difference, GCI, Richardson extrapolation, heat conduction, thermoelasticity.