VERIFICAÇÃO DE ESQUEMAS ADVECTIVO-DIFUSIVOS 1D COM E SEM MÚLTIPLAS EXTRAPOLAÇÕES DE RICHARDSON

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

Eduardo Matos Germer
emgermer@gmail.com
Universidade Federal do Paraná (UFPR)
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PG-Mec)
Curitiba, PR, Brasil

Resumo. *O objetivo do presente trabalho é avaliar o efeito de aproximações numéricas sobre a redução do erro de discretização de soluções obtidas com MER (múltiplas extrapolações de Richardson). Para tanto, resolve-se a equação de advecção-difusão unidimensional com o método de volumes finitos. É considerado um domínio de cálculo de comprimento unitário, discretizado com malhas uniformes. São empregados dez tipos de aproximações numéricas de primeira, segunda e terceira ordens de acurácia, condições de contorno de Dirichlet, solver tridiagonal, malhas com até milhões de nós, precisão quádrupla, número de iterações suficiente para atingir o erro de arredondamento de máquina e até quatorze extrapolações de Richardson. São obtidos resultados para as seguintes variáveis: temperatura no centro do domínio; média do campo de temperaturas; e derivada de primeira ordem da temperatura no contorno. Verificou-se que: (1) MER é extremamente eficiente na redução do erro de discretização para todas as variáveis e aproximações numéricas testados; (2) a redução do erro resultante do uso de MER é maior quanto maior é o número de nós da malha e quanto maior é o número de extrapolações; e (3) o esquema de diferença central de 2ª ordem é o que apresenta, em geral, o menor erro.*

Palavras-chave: *aproximação numérica, função de interpolação, métodos numéricos, CFD, volumes finitos.*

1 INTRODUÇÃO

A técnica de múltiplas extrapolações de Richardson (MER) foi criada há muito tempo (Richardson, 1910; e Richardson e Gaunt, 1927) com o objetivo de reduzir o erro de discretização (Roache, 1998) de soluções numéricas. Para usar MER é necessário ter a solução numérica da variável de interesse em três ou mais malhas com número de nós diferentes. MER pode ser usado de duas formas. A primeira, para obter o mesmo erro de discretização com uma malha que tem muito menos nós, resultando na redução do esforço computacional (memória e tempo de CPU). A segunda, para reduzir o erro de discretização em uma malha com o mesmo número de nós, resultando em erro muito menor e maior confiabilidade da solução; esta forma é indicada especialmente para se obter *benchmarks*.

Alguns trabalhos (Benjamin e Denny, 1979; Schreiber e Keller, 1983; Erturk *et al*., 2005) obtiveram ótimos resultados ao empregar MER, motivando a realização do presente trabalho. Porém, estes autores utilizaram este procedimento com no máximo quatro malhas, resultando em até três extrapolações para a malha mais fina usada; e só empregaram esquemas de 2ª ordem de acurácia. Estes trabalhos não tinham como objetivo aperfeiçoar a técnica de MER.

O presente trabalho faz parte de uma linha de pesquisa sobre MER que vem sendo desenvolvida pelos autores. Resultados iniciais podem ser vistos em Marchi et al. (2008) e Marchi et al. (2009). O objetivo do presente trabalho é avaliar o efeito de aproximações numéricas sobre a redução do erro de discretização de soluções obtidas com MER. Para tanto, resolve-se a equação de advecção-difusão unidimensional com o método de volumes finitos e dez tipos de aproximações numéricas de primeira, segunda e terceira ordens de acurácia (Versteeg e Malalasekera, 2007). São usadas malhas com até milhões de nós, resultando em até quatorze extrapolações de Richardson. São obtidos resultados para as seguintes variáveis: temperatura no centro do domínio; média do campo de temperaturas; e derivada de primeira ordem da temperatura no contorno.

2 MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático considerado neste trabalho é a equação de advecção-difusão unidimensional, com condições de contorno de Dirichlet, muito utilizada em testes de novos modelos matemáticos e funções de interpolação (Ferziger e Peric, 2001), sendo definida por

$$Pe\frac{dT}{dx} = \frac{d^2T}{dx^2}, \qquad T(0)=0, \qquad T(1)=1, \tag{1}$$

onde Pe = número de Peclet, x = direção coordenada e T = temperatura.

As variáveis de interesse neste trabalho são: (1) a temperatura no centro do domínio, isto é, em x=½, representada por Tc; (2) a média do campo de temperaturas, representada por Tm; (3) a derivada de primeira ordem de T em x=1, representada por I; e (4) a média da norma l_1 do erro de discretização, representada por L. A variável Tc foi escolhida por ser a variável dependente na equação diferencial do problema, ou seja, a variável primária do problema. As variáveis Tm e I foram escolhidas por representarem variáveis secundárias de T, pós-processadas, e que muitas vezes são de interesse por serem, respectivamente, uma média do campo de T e para calcular um fluxo de calor no contorno. A variável L foi escolhida por representar uma média do erro de discretização do campo de T.

A variável L é definida na seção 3. As variáveis Tm e I são definidas matematicamente por

$$Tm = \int_0^1 T(x)dx\,, \tag{2}$$

$$I = \left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=1}. \tag{3}$$

A solução analítica da Eq. (1) é

$$T = \frac{e^{xPe} - 1}{e^{Pe} - 1}. \tag{4}$$

3 MODELO NUMÉRICO

Com o método dos volumes finitos (Versteeg e Malalasekera, 2007), integrando-se a Eq. (1) sobre o volume de controle genérico P da Fig. 1, obtém-se

$$Pe\left(T\big|_e - T\big|_w\right) = \left.\frac{dT}{dx}\right|_e - \left.\frac{dT}{dx}\right|_w. \tag{5}$$

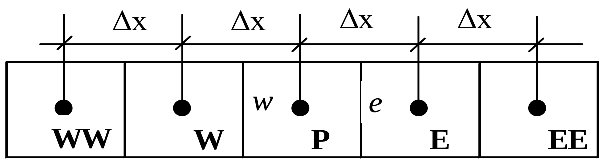

Figura 1 – Malha uniforme 1D com o volume finito genérico P e seus vizinhos

Para aproximar T nas faces oeste (w) e leste (e) de cada volume P, necessários na Eq. (5), foram utilizados os seguintes esquemas, indicando-se junto suas ordens de acurácia:

- UDS (*Upstream Difference Scheme*), 1ª ordem
- Alfa, 1ª ordem
- CDS-2 (*Central Difference Scheme*), 2ª ordem
- UDS-2 (*Upstream Difference Scheme – 2nd order*), 2ª ordem
- QUICK (*Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics*), 3ª ordem
- ADS (*Adaptable Difference Scheme*), 2ª ordem
- TVD (*Total Variation Diminishing*), 2ª ordem

Para aproximar a derivada de primeira ordem de T nas faces oeste (w) e leste (e) de cada volume P, necessários na Eq. (5), foram utilizados os seguintes esquemas:

- CDS-2 (*Central Difference Scheme – 2nd order*), 2ª ordem
- CDS-4 (*Central Difference Scheme – 4th order*), 4ª ordem

Para aproximar T e sua derivada de primeira ordem nas faces oeste (w) e leste (e) de cada volume P, necessários na Eq. (5), foram utilizados os seguintes esquemas:

- WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*), 2ª ordem
- PLDS (*Power Law Difference Scheme*), 2ª ordem

Com estes sete esquemas advectivos e dois esquemas difusivos, acima, foram formados oito esquemas advectivo-difusivos. Estes juntos com o WUDS e PLDS resultaram nos dez esquemas advectivo-difusivos testados no presente trabalho, que estão resumidos na Tabela 1. Nesta tabela também é apresentado o valor esperado para a ordem assintótica (acurácia) do erro de discretização da solução de *T*. Daqui em diante, cada esquema advectivo-difusivo é referenciado por sua sigla da Tabela 1.

A forma como os esquemas UDS, CDS2, PLDS e QUICKCDS2 foram usados no presente trabalho pode ser vista em Versteeg e Malalasekera (2007); os esquemas WUDS, TVD e ADS em Marchi (1993); e o esquema Alfa em Marchi et al. (1998). O esquema QUICKCDS4 também envolve esquemas de 3ª ordem para avaliar as derivadas de 1ª ordem da Eq. (5) nas faces próximas aos contornos, nas quais o esquema CDS-4 não pode ser aplicado.

Tabela 1 – Esquemas advectivo-difusivos testados

Sigla	Advecção	Difusão	Ordem assintótica
UDS	UDS	CDS-2	1
ALFA	ALFA	CDS-2	1
CDS2	CDS-2	CDS-2	2
UDS2	UDS-2	CDS-2	2
WUDS	WUDS	WUDS	2
PLDS	PLDS	PLDS	2
ADS	ADS	CDS-2	2
TVD	TVD	CDS-2	2
QUICKCDS2	QUICK	CDS-2	2
QUICKCDS4	QUICK	CDS-4	3

A solução numérica da variável *Tc* é obtida diretamente dos respectivos nós da malha após a obtenção da solução numérica da Eq. (1); isso é possível porque foram usadas malhas com número ímpar de nós. A solução numérica da Eq. (2), para *Tm*, foi obtida através de integração numérica pela regra do retângulo (Kreyszig, 1999). A solução numérica da Eq. (3), para *I* foi obtida através do esquema UDS-2. A média da norma l_1 do erro de discretização (E) foi calculada através de

$$L = \frac{\sum_{P=1}^{N} |E_P|}{N} = \frac{\sum_{P=1}^{N} \left| T_P^{analítico} - T_P^{numérico} \right|}{N}, \tag{6}$$

onde *P* representa cada um dos *N* nós da malha.

O método TDMA - *TriDiagonal Matrix Algorithm* (Patankar, 1980) foi usado para resolver os sistemas de equações algébricas. Para os esquemas UDS, ALFA, CDS2, WUDS e PLDS, o TDMA resolve os sistemas de forma direta. No caso dos outros cinco esquemas, a solução é iterativa; para estes esquemas, o processo iterativo foi realizado até ser atingido o erro de arredondamento de máquina.

A solução numérica em cada malha, obtida com o método TDMA, conforme descrito acima, é denominada neste trabalho uma solução sem MER. Utilizando-se estas soluções em diversas malhas e o procedimento descrito em Marchi et al. (2008), são obtidas as soluções numéricas com MER.

4 RESULTADOS

As soluções numéricas foram obtidas com um programa computacional implementado em linguagem Fortran 95 e precisão quádrupla (REAL*16). As simulações foram feitas em um computador que contém um processador Intel Core 2 Quad, 2,4 GHz, 8 GB RAM e Windows XP 64 bits. Para cada um dos dez esquemas, foram obtidas soluções em 15 malhas com N = 5, 15, 45, ... até 23.914.845 nós. Para o esquema Alfa, considerou-se o coeficiente alfa = 0,05.

4.1 Resultados sem MER

Variável Tc. A Fig. 2 mostra o módulo do erro (E) da solução numérica da variável Tc, para os dez esquemas, em 15 malhas diferentes. Nesta figura e nas seguintes, h representa o tamanho dos volumes de controle (Δx) de cada malha usada. A análise destes resultados mostra que:

- Os esquemas UDS e ALFA têm os maiores erros por serem de 1ª ordem de acurácia.
- O esquema QUICKCDS4 tem os menores erros por ser de 3ª ordem de acurácia.
- Os esquemas UDS2, CDS2, WUDS, PLDS, ADS, TVD e QUICKCDS2 têm níveis de erro intermediários por serem de 2ª ordem de acurácia.

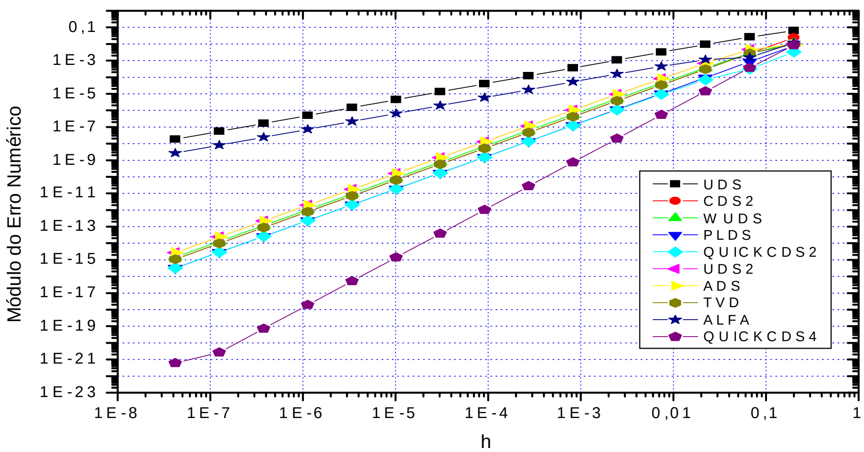

Figura 2 – Erro da solução numérica de *Tc* sem MER

Variável Tm. A Fig. 3 mostra o módulo do erro (E) da solução numérica da variável Tm. A análise destes resultados mostra que:

- Os esquemas UDS e ALFA novamente têm os maiores erros por serem de 1ª ordem de acurácia.
- O esquema QUICKCDS4 degenerou sua ordem de acurácia para 2ª devido ao erro da integração retângulo ser desta ordem.
- Os demais esquemas continuam a ser de 2ª ordem de acurácia.

Variável I. A Fig. 4 mostra o módulo do erro (E) da solução numérica da variável I. A análise destes resultados, mostra que:

- Os esquemas UDS e ALFA são de 1ª ordem de acurácia.

- O esquema QUICKCDS4 degenerou sua ordem de acurácia para 2ª devido ao erro da aproximação UDS-2 usada no cálculo de *I* ser desta ordem.
- O esquema QUICKCDS2 continua a ser de 2ª ordem de acurácia.
- Os demais esquemas de 2ª ordem (UDS2, CDS2, WUDS, PLDS, ADS e TVD) degeneraram sua ordem de acurácia para 1ª.

Variável L. A Fig. 5 mostra o módulo do erro (*E*) do cálculo da variável *L*. Para ela, valem os mesmos comentários da variável *Tc*.

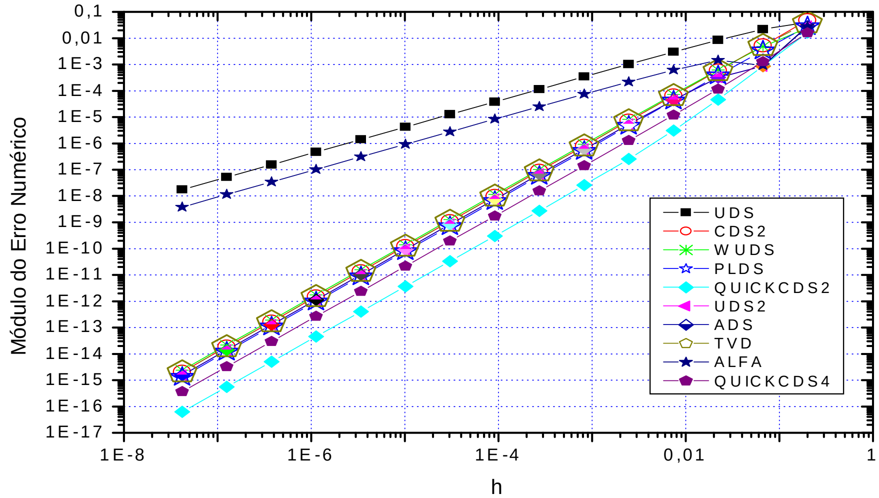

Figura 3 – Erro da solução numérica de *Tm* sem MER

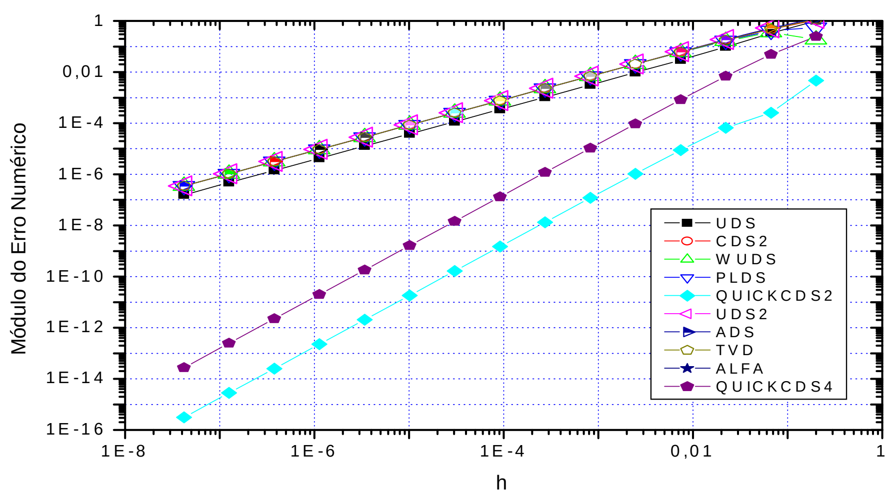

Figura 4 – Erro da solução numérica de *I* sem MER

4.2 Resultados com MER

Para facilitar a visualização do efeito de MER, foram selecionados três esquemas: um esquema de 1ª ordem (UDS), um de 2ª ordem (CDS-2) e outro de 3ª ordem (QUICKCDS4).

Variável Tc. A Fig. 6 mostra o módulo do erro (*E*) da solução numérica da variável *Tc*, para três esquemas sem MER (já mostrados na Fig. 2), denotados por Eh, e os mesmos três esquemas com MER, denotados por Emer. A análise destes resultados, e de outros não apresentados, mostra que:

- Comparando-se as curvas de Eh com Emer da Fig. 6 fica evidente que o uso de múltiplas extrapolações de Richardson (MER) é extremamente eficiente na redução do erro de discretização. Esta redução do erro é maior quanto menor h. Para os esquemas não mostrados na Fig. 6, suas curvas de erro com MER ficam entre as curvas do UDS e CDS2.
- Para h entre 10^{-4} e 10^{-5} m, isto é, entre 10 mil e 100 mil nós, todos os esquemas com MER atingem o nível mínimo do erro numérico, mesmo com precisão quádrupla. Para valores menores de h, o erro de arredondamento passa a dominar o erro numérico. Isso não acontece nos esquemas sem MER: mesmo para o menor h, $4{,}2\text{x}10^{-8}$ m, o erro de arredondamento não aumenta o erro numérico.
- Até mesmo o esquema UDS com MER passa a ter erro menor do que o esquema mais elaborado sem MER, o QUICKCDS4, em malhas com h menor do que $8{,}2\text{x}10^{-4}$ m ou N > 1215 nós.
- Exceto nos dois pontos com maior h na Fig. 6, o esquema CDS2 é o que tem o melhor desempenho com MER, isto é, para um mesmo h ele tem o menor erro, até em relação ao esquema QUICKCDS4. A provável explicação para isso é que já na segunda extrapolação (terceiro ponto com maior h na Fig. 6), a ordem teórica da extrapolação do esquema CDS2 já é seis enquanto que a do esquema QUICKCDS4 é cinco. A cada nova extrapolação, a ordem do esquema CDS2 cresce em duas unidades e a do esquema QUICKCDS4, em uma, aumentando a diferença entre as curvas de erro.

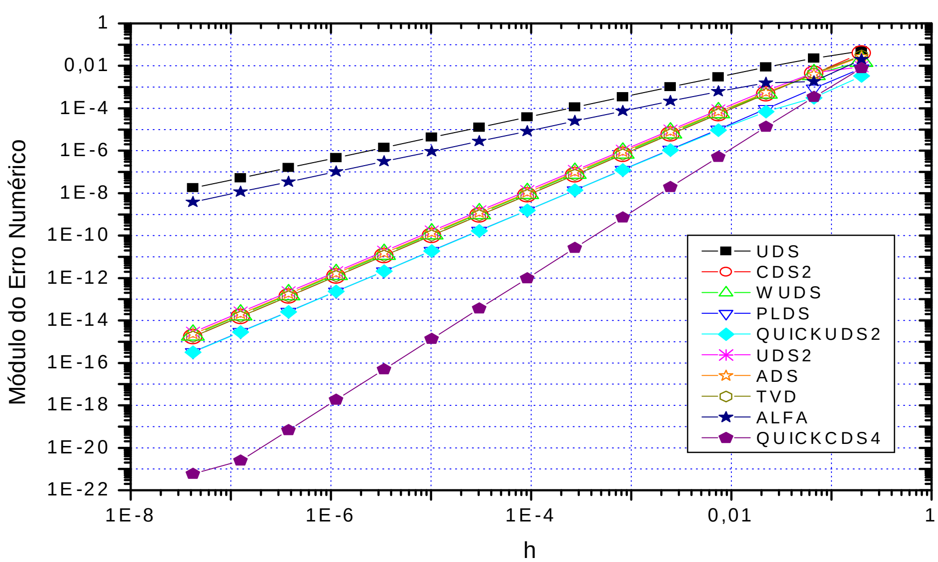

Figura 5 – Erro de *L* sem MER

As Tabelas 2 e 3 ajudam a mostrar o efeito do uso de MER na redução do erro para a variável *Tc*; nestas duas tabelas, a letra "E" representa a notação científica para números. Para três níveis de erro específicos, a Tabela 2 mostra o efeito de MER na redução do número de nós de uma malha para obter o mesmo erro. Por exemplo, para o nível de erro 1E-11, sem MER é necessário usar a malha com 98.415 nós para atingir aproximadamente este nível de erro, e a malha com 135 nós com MER (três extrapolações); portanto, com MER é necessário uma malha com 729 vezes menos nós. Esta razão entre o número de nós das malhas de Eh e Emer indica o nível de redução do esforço computacional (memória e tempo de CPU) ao seu usar MER em relação a não usá-lo.

Para três malhas específicas, a Tabela 3 mostra o efeito da redução do erro de discretização ao se usar MER, medido pela razão Eh/Emer. Por exemplo, para a malha com 45 nós, mesmo com apenas duas extrapolações, o erro com MER já é reduzido em cerca de 2.400 vezes em relação à solução sem MER.

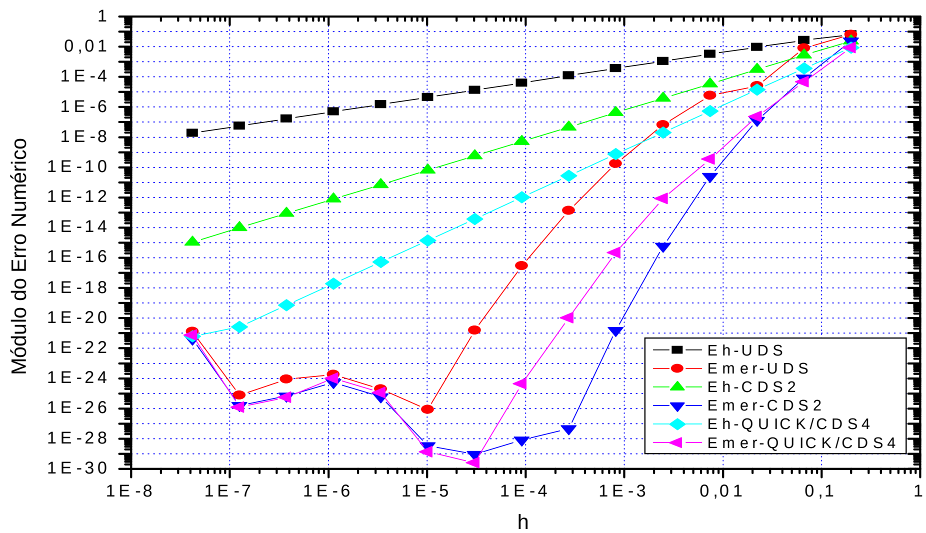

Figura 6 - Erro da solução numérica de *Tc* com e sem MER

Tabela 2 - Redução de nós de malha para erros fixos, CDS2 e variável *Tc*

Nível do erro	1E-7	1E-11	1E-15
Malha necessária sem MER (N)	1.215	98.415	7.971.615
Erro sem MER	4,2E-7	6,4E-11	9,8E-15
Malha necessária com MER (N)	45	135	405
Número de extrapolações	2	3	4
Erro com MER	1,3E-7	2,5E-11	5,8E-16
Razão entre o número de nós das malhas sem e com MER	27	729	19.683

Variável Tm. A Fig. 7 mostra o módulo do erro (*E*) da solução numérica da variável *Tm*, para três esquemas sem MER (já mostrados na Fig. 3), denotados por Eh, e os mesmos três esquemas com MER, denotados por Emer. Pode-se observar que os resultados da Fig. 7 são qualitativamente os mesmos da Fig. 6. Portanto, para a variável *Tm* e Fig. 7, valem os mesmos comentários da variável *Tc* e Fig. 6.

Tabela 3 - Redução do erro para malhas fixas, CDS2 e variável *Tc*

Malha	45	1.215	32.805
Erro sem MER (Eh)	3,1E-4	4,2E-7	5,8E-10
Erro com MER (Emer)	1,3E-7	1,6E-21	9,3E-30
Número de extrapolações	2	5	8
Razão Eh/Emer	2,4E3	2,6E14	6,2E19

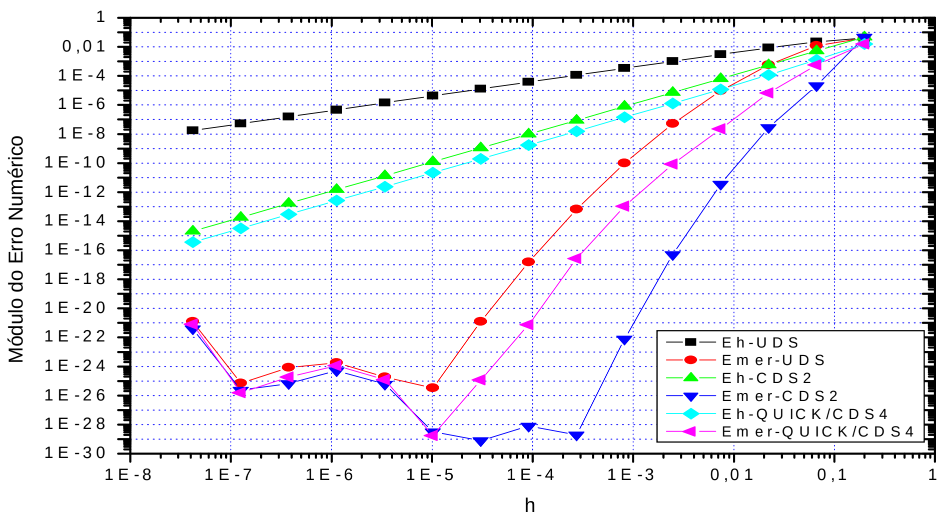

Figura 7 - Erro da solução numérica de *Tm* com e sem MER

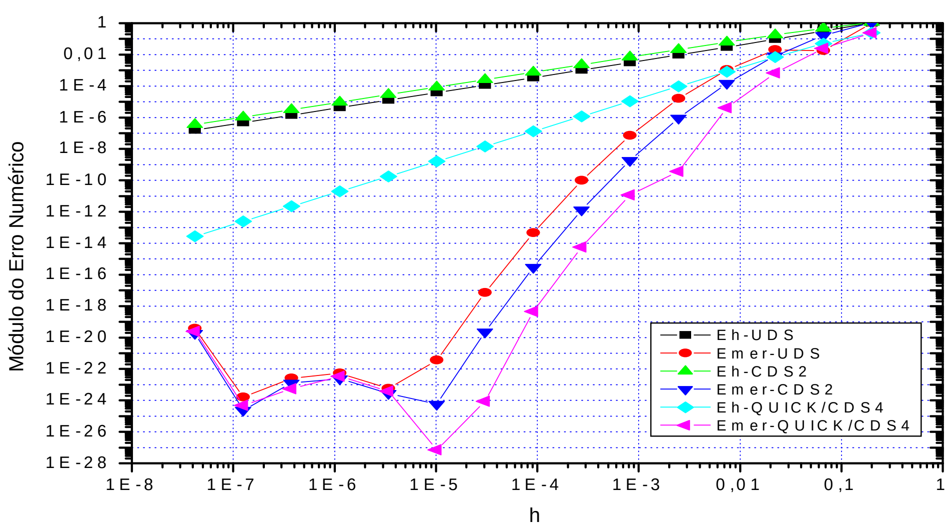

Figura 8 - Erro da solução numérica de *I* com e sem MER

Variável I. A Fig. 8 mostra o módulo do erro (*E*) da solução numérica da variável *I* para três esquemas sem MER (já mostrados na Fig. 4), denotados por Eh, e os mesmos três esquemas com MER, denotados por Emer. Pode-se observar que os resultados da Fig. 8 são qualitativamente os mesmos da Fig. 6, exceto que o esquema QUICKCDS4 com MER tem erro menor do que o CDS2 com MER; provavelmente isso se deva ao fato de que a solução do CDS2 sem MER é de 1ª ordem e a do QUICKCDS4 é de 2ª ordem. Mesmo assim, o esquema CDS2 deve ser preferido em relação ao QUICKCDS4 porque este é muito mais complexo do que o CDS2 e seu uso requer um processo iterativo, o que não ocorre com o CDS2. No restante, para a variável *I* e Fig. 8, valem os mesmos comentários da variável *Tc* e Fig. 6.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, testou-se a técnica de múltiplas extrapolações de Richardson (MER) para reduzir o erro de discretização na solução da equação de advecção-difusão 1D. MER foi empregado em três variáveis de interesse cujas soluções numéricas foram obtidas com dez esquemas advectivo-difusivos.

Com a realização deste trabalho, verificou-se que:

1) MER é extremamente eficiente na redução do erro de discretização para todas as variáveis e esquemas advectivo-difusivos testados.
2) A redução do erro resultante do uso de MER é maior quanto maior é o número de nós da malha e quanto maior é o número de extrapolações.
3) O erro de arredondamento limita a redução do erro numérico ao se usar MER. Para minimizar este problema, deve-se usar precisão quádrupla nos cálculos.
4) Em geral, o esquema CDS2 é o que tem o melhor desempenho com MER, isto é, para uma mesma malha ele tem o menor erro.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro do Programa UNIESPAÇO, da AEB (Agência Espacial Brasileira), e da Fundação Araucária (Paraná). O primeiro autor é bolsista do CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, do Brasil).

REFERÊNCIAS

Benjamin, A. S., & Denny, V. E., 1979. On the convergence of numerical solutions for 2-D flows in a cavity at large Re. Journal of Computational Physics, vol. 33, pp. 340-358.

Erturk, E., Corke, T. C., & Gökçöl, C., 2005. Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers. Int. J. Numer. Meth. Fluids, vol. 48, pp. 747-774.

Ferziger, J. H., & Peric, M., 2001. Computacional Methods for Fluid Dynamics. 3 ed. Springer–Verlag.

Kreyszig, E., 1999. Advanced Engeneering Mathematics. 8 ed. Wiley.

Marchi, C. H., 1993. Esquemas de alta ordem para a solução de escoamentos de fluidos sem dispersão numérica. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences, vol. XV, pp. 231-249.

Marchi, C. H., Maliska, C. R., & Souza, S. M. A. G. U., 1998. Avaliação de algumas funções de interpolação para escoamentos de fluidos usando volumes finitos. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences, vol. XX, pp. 340-352.

Marchi, C. H., Novak, L. A., & Santiago, C. D., 2008. Múltiplas extrapolações de Richardson para reduzir e estimar o erro de discretização da equação de Laplace 2D. XXIX CILAMCE, Maceió.

Marchi, C. H., Suero, R., & Araki, L. K., 2009. The lid-driven square cavity flow: numerical solution with a 1024x1024 grid. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, vol. XXXI, 13 pp. (Aceito para ser publicado em 2009.)

Patankar, S. V., 1980. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Taylor & Francis.

Richardson, L. F., 1910. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. Phylosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A, vol. 210, pp. 307-357.

Richardson, L. F., & 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., 1998. Verification and Validation in Computational Science and Engineering. Hermosa.

Schreiber, R., & Keller, H. B., 1983. Driven cavity flows by efficient numerical techniques. Journal of Computational Physics, vol. 49, pp. 310-333.

Versteeg, H. K., & Malalasekera, W., 2007. An Introduction to Computational Fluid Dynamics, The Finite Volume Method. 2 ed. Pearson.