

Estimativa para o erro de discretização com o emprego de Multiextrapolação de Richardson em CFD

Márcio A. Martins

Departamento de Matemática, Universidade Estadual do Centro Oeste (UNICENTRO-PR)
85040-080, Guarapuava, PR; E-mail: mandre@unicentro.br

Carlos H. Marchi, Luciano K. Araki, Marcio A. V. Pinto,

Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná (UFPR), Curitiba, PR
E-mails: marchi@ufpr.br; lucaraki@ufpr.br; marcio_villela@ufpr.br;

Resumo: Neste trabalho são abordadas estimativas para o erro de discretização considerando-se o emprego de Multiextrapolação de Richardson (MER). Analisa-se o desempenho de alguns estimadores disponíveis na literatura, sendo que as suas expressões são adaptadas para MER. Uma nova proposta de estimador é apresentada. Tal abordagem baseia-se na ordem de acurácia prática, calculada a posteriori das soluções numéricas. Através do cálculo dessa ordem, definiu-se um critério para o emprego efetivo de MER. São tratados os casos em que a variável de interesse possui localização nodal fixa, em todas as malhas adotadas, ou localização nodal móvel. Como problemas-modelo são considerados: equações de Poisson e de Advecção-difusão em domínio unidimensional, e equações de Burgers em domínio bidimensional. A discretização dessas equações é obtida com o emprego dos métodos de Diferenças Finitas (MDF) para os problemas unidimensionais com aproximações numéricas de primeira, segunda e quarta ordens; e de Volumes Finitos (MVF) para o problema bidimensional com aproximações numéricas de primeira e segunda ordens. Os resultados obtidos indicam que: i) em soluções numéricas obtidas sem o emprego de MER, o estimador multicoeficiente apresenta níveis de acurácia e confiabilidade significativos; ii) para soluções numéricas obtidas com o emprego de MER, o estimador proposto neste trabalho é recomendado por destacar-se com relação a acurácia e confiabilidade.

Palavras-chave: verificação numérica, Multiextrapolação de Richardson, ordem de acurácia, CFD, equação de Poisson, equação de Advecção-difusão, equações de Burgers.

1 Introdução

As demandas atuais em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) requerem o uso de métodos que forneçam soluções numéricas acuradas. Entretanto, de modo geral, as soluções numéricas podem ser afetadas por erros numéricos. Nesse contexto, os procedimentos de verificação numérica são abordados com o objetivo de identificar em que medida um modelo matemático é resolvido adequadamente com o emprego de um método numérico [9].

Nesse sentido, o interesse principal é a quantificação do erro numérico (E) e a determinação da sua ordem de acurácia (p_A) [8]. E pode ser causado por diversas fontes, conforme especificado na seção 2.1. Dentre elas, a decorrente do emprego dos métodos de discretização, ou erro de discretização (E_h), é considerada a mais significativa [8].

A determinação de E_h depende da obtenção da solução analítica para determinado modelo matemático, ou variável de interesse. Porém, em termos práticos, isso nem sempre é possível. Nesse caso é necessário se obter uma estimativa (U_h) para o E_h envolvido [4]. U_h pode ser obtida considerando-se as soluções numéricas calculadas em duas ou mais malhas (Ω^h), através do emprego de métodos de extrapolação, dos quais a Extrapolação de Richardson (ER) é a mais utilizada [7].

ER também é bastante utilizada para se reduzir E_h e aumentar p_A . Com o emprego recursivo de ER, em que cada aplicação representa um nível de extrapolação, a sua eficácia pode ser potencializada. Esse processo é conhecido por Multiextrapolação de Richardson (MER) ou por *Repeated Richardson extrapolation* (RRE) [3, 6].

Contudo, não é comum se encontrar na literatura a determinação de U_h para soluções obtidas com MER. Nesse encaixe, em [5] são propostos dois estimadores. Essa abordagem é adequada, porém, para variáveis que possuem a mesma localização nodal ao se considerar um processo de refinamento de

malha. E tais estimativas têm a sua acurácia comprometida em se tratando de variáveis que possuem localização dependente da malha adotada, como exemplo: pontos extremos (max ou min). Além disso, não são adequadas para soluções numéricas obtidas com MER ao se considerar o nível máximo de extrapolação (maior nível de acurácia), o que caracteriza uma limitação para o seu emprego.

Nesse âmbito, o presente trabalho apresenta alternativas para a determinação de Uh inerente às soluções numéricas obtidas com e sem o emprego de MER, para variáveis que possuem coordenadas fixas ou móveis, ao se considerar um processo de refinamento de malha. Os modelos matemáticos considerados para análise da metodologia proposta são: equação de Poisson e equação de Advecção-difusão com domínio unidimensional, e equações de Burgers com domínio bidimensional. As soluções numéricas são obtidas com o emprego dos métodos de Diferenças Finitas (MDF) para os casos unidimensionais e de Volumes Finitos (MVF) para o caso bidimensional, com aproximações numéricas de diversas ordens.

2 Conceitos e métodos

Erro numérico e ordem de acurácia: o erro numérico E é definido pela diferença entre a solução analítica (Φ) e a solução numérica (ϕ), para determinada variável de interesse. E pode ser causado por quatro fontes [2]: truncamento, iteração, arredondamento e programação. Quando as demais fontes são minimizadas ou inexistentes, e o erro de truncamento representa a parcela mais expressiva, E passa a ser denominado erro de discretização (Eh). Similarmente à forma geral do erro de truncamento, Eh é dado por

$$Eh = c_0 h^{p_0} + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \dots, \quad (1)$$

onde os coeficientes c_j , $j = 0, 1, 2, 3, \dots$, são números reais que são obtidos em função da variável dependente e de suas derivadas, mas independem de h ; e h corresponde ao espaçamento entre os pontos nodais envolvidos no processo de discretização. Considerando-se um domínio unitário Ω , na abordagem unidimensional adotada, para N pontos nodais tem-se $h = 1/(N - 1)$ (MDF) e na abordagem bidimensional, para N pontos nodais em cada direção coordenada (malha $N \times N$), tem-se $h = 1/N^2$ (MVF). Por definição, as ordens verdadeiras (p_m) são os expoentes de h na Eq. (1). Esses expoentes são números reais que seguem a relação: $p_0 < p_1 < p_2 < p_3 < \dots$, e normalmente compõem uma progressão aritmética. O menor expoente, p_0 , é chamado ordem assintótica ou ordem de acurácia de Eh e também é denotado na literatura por p_A . Quando $h \rightarrow 0$, $c_0 h^{p_0}$ na Eq. (1) é a principal componente de Eh [4]. Teoricamente p_0 é obtida a partir da Eq. (1), no limite, quando $h \rightarrow 0$. Entretanto, na prática, considera-se a tendência gerada, com a diminuição de h , para o cálculo das ordens efetiva (p_E) e/ou aparente (p_U) [2], obtidas a partir da razão de refino $r > 1$.

Extrapolação de Richardson: a Extrapolação de Richardson (ER) pode ser aplicada sempre que se saiba que uma técnica de aproximação tem um termo indicativo de erro de forma previsível. Para cada valor de $h \neq 0$ tem-se uma fórmula $\phi(h)$ que aproxima um valor desconhecido Φ pela expressão $\Phi - \phi(h) = k_0 h^{p_0} + k_1 h^{p_1} + k_2 h^{p_2} + k_3 h^{p_3} + \dots$, onde $k_0, k_1, k_2, k_3, \dots$ são constantes desconhecidas. O objetivo da ER é combinar aproximações, com a variação de h , de modo a se aumentar a p_A resultante. Nesse enfoque, consideram-se as soluções $\phi(h)$ e $\phi(rh)$ correspondendo às malhas com espaçamento h e rh entre os nós vizinhos, respectivamente; e assim

$$\begin{aligned} \begin{cases} \phi(h) = \Phi - (k_0 h^{p_0} + k_1 h^{p_1} + k_2 h^{p_2} + k_3 h^{p_3} + \dots) \\ \phi(rh) = \Phi - [k_0 (rh)^{p_0} + k_1 (rh)^{p_1} + k_2 (rh)^{p_2} + k_3 (rh)^{p_3} + \dots] \end{cases} &\Rightarrow \begin{cases} \phi(h) = \Phi - k_0 h^{p_0} + O(h^{p_1}) \\ \phi(rh) = \Phi - k_0 (rh)^{p_0} + O(h^{p_1}) \end{cases} \\ \Rightarrow \Phi = \left[\phi(h) + \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_0} - 1} \right] + O(h^{p_1}) = \phi(h, rh) + O(h^{p_1}), & \quad (2) \end{aligned}$$

$\phi(h, rh)$ é a combinação entre $\phi(h)$ e $\phi(rh)$ e resulta em uma aproximação com $O(h^{p_1})$.

Multiextrapolação de Richardson: o processo denominado Multiextrapolação de Richardson (MER) é obtido pela aplicação repetida da Eq. (2). Entretanto, p_0 é considerada apenas no primeiro nível de extrapolação, nos demais níveis consideram-se os valores sequenciais de p_m . Dessa forma, ϕ em uma malha Ω^{h_g} , onde g indica o nível de malha, com m aplicações de ER é dada por [3]

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1}, \quad (3)$$

em que $g = 2, \dots, G$, $r = h_g/h_{g-1}$ e $m = 1, \dots, g-1$; e $\phi_{g,0}$ representa ϕ sem o emprego de ER. Teoricamente, quanto maior o valor de m mais próximo $\phi_{g,m}$ estará de Φ . O valor máximo de m permitido em Ω^{h_g} é $m = g-1$, e considera-se como foco a sequência: $\phi_M = \{\phi_{2,1}, \phi_{3,2}, \dots, \phi_{g,g-1}, \dots, \phi_{G,G-1}\}$, com erro Em . A acurácia de ϕ_M pode ser analisada com base nos conceitos de p_E e p_U [6], isto é,

$$(p_{E,M})_g = \frac{\log \left[\frac{\Phi - \phi_{g-1,m-1}}{\Phi - \phi_{g,m}} \right]}{\log(r)}; \quad (p_{U,M})_g = \frac{\log[\psi]}{\log(r)}, \quad \psi = \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}; \quad (4)$$

assumindo-se $g = 2, \dots, G$ para $(p_{E,M})_g$, e $g = 3, \dots, G$ para $(p_{U,M})_g$ ($m = g-1$).

3 Estimadores para o erro de discretização

Estimador delta: ao se considerar ϕ_M para um conjunto de G malhas distintas, em [5] propõe-se a estimativa para Em na malha mais fina adotada (Ω^{h_G}), da seguinte forma:

$$U_{\Delta}(\phi_{G,m}) = |\phi_{G,m-1} - \phi_{G-1,m-1}|. \quad (5)$$

Estimador pm: para $\{\phi_{2,0}, \phi_{3,1}, \dots, \phi_{g,g-2}, \dots, \phi_{G,G-2}\}$, pode-se considerar a expressão proposta em [3] para estimativa do erro numérico associado, dada por

$$U_{pm}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}{r^{p_m} - 1}. \quad (6)$$

Estimador pm corrigido: como U_{pm} não é capaz de estimar Em associado à ϕ_M , considera-se o seu cálculo com o fator de correção r^{p_m} , e denota-se U_{pmc} como sendo a estimativa para Em dada por

$$U_{pmc}(\phi_{g,m}) = r^{p_m} U_{pm}(\phi_{g+1,m}). \quad (7)$$

Estimador psi: considerando-se a série de Richardson (R_{∞}) [4], em que $\psi \in \Re$ corresponde à razão de convergência, neste trabalho propõe-se:

$$U_{\psi}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi - 1}, \quad \psi = \psi_g = \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}; \quad g = 3, \dots, G, \quad (m = g-1). \quad (8)$$

Estimador psi corrigido: percebe-se que ψ envolve as soluções numéricas obtidas em três malhas distintas, logo é aceitável atribuir o seu resultado à malha intermediária do trio; com essa abordagem propõe-se

$$U_{\psi^*}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi^* - 1}, \quad \psi^* = \psi_{g+1}; \quad g = 2, \dots, G-1. \quad (9)$$

Estimador GCI: o estimador *GCI* (*Grid Convergence Index*) foi concebido, inicialmente, em [7]; com base nessa proposta e por analogia aos estimadores para *Em* apresentados anteriormente, considera-se

$$U_{GCI}(\phi_{g,m}) = FS \frac{|\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}|}{r^P - 1}, \quad g = 2, \dots, G; m = g - 1; \quad (10)$$

em que $P = \min\{p_m, (p_{U,M})_g\}$, $FS = 3$ para $g = 2$ e $FS = 1,25$ para $g > 2$.

Estimador multicoeficiente: considera-se aqui a obtenção de estimativa para *Eh* com o estimador multicoeficiente (U_{mc}) [2], mediante o cálculo de ϕ_M . A concepção de U_{mc} admite que a estimativa para *Eh* é composta por $m = g - 1$ termos, com base na Eq. (1). Propõe, então: para $g = 2$ $Eh(\phi_2) \approx \phi_{2,1} - \phi_2 = c_0 h_2^{p_0}$ (estimativa monocoeficiente); para $g = 3$ $Eh(\phi_3) \approx \phi_{3,2} - \phi_3 = c_0 h_3^{p_0} + c_1 h_3^{p_1}$ (estimativa bicoeficiente); e assim por diante, as estimativas para $Eh(\phi_g)$ são dadas por

$$U_{mc}(\phi_g) = \phi_{g,m} - \phi_g; \quad g = 2, \dots, G; m = g - 1. \quad (11)$$

Critério para o emprego efetivo de MER: nos casos em que a solução analítica Φ não é conhecida, torna-se extremamente importante o estabelecimento de um critério para o emprego efetivo de MER; nesse enfoque, pode-se dizer que a convergência de ϕ_M , através da condição $|\psi| > 1 \Leftrightarrow (p_{U,M})_g > 0$ garante o emprego efetivo de MER, e a não verificação dessa condição caracteriza, especialmente, o momento em que a aplicação de MER perde a sua eficácia sobre a redução do erro numérico.

Efetividade de uma estimativa de erro: de modo geral, a qualidade de uma estimativa (U) para o erro numérico (E), pode ser avaliada através de sua efetividade (θ), que é definida pela razão entre U e E [2]. Uma estimativa de erro ideal é aquela em que $\theta = 1$, isto é, quando $U = E$. Entretanto, em situações realísticas, onde $\theta \neq 1$, U é considerada confiável quando $\theta \geq 1 \Rightarrow U \geq E$; e acurada quando $\theta \approx 1 \Rightarrow U \approx E$ [2].

4 Problemas-modelo

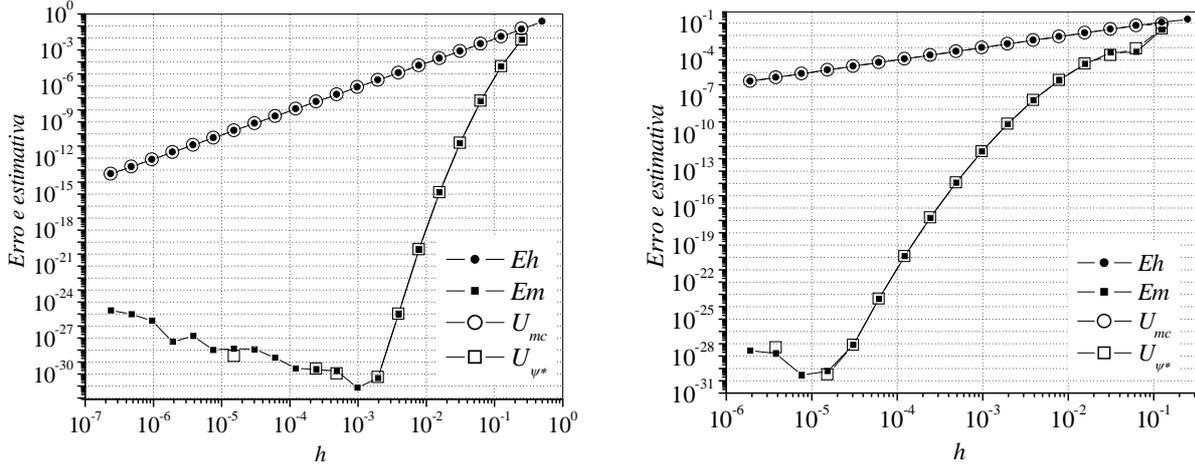
Caso	Equações	Solução analítica
(1) Poisson	$\frac{d^2 T}{dx^2} = S;$	$T(x) = -\frac{1}{5}e^{3x} + 3x + 2.$
(2) Advecção- difusão	$Pe \frac{dT}{dx} = \frac{d^2 T}{dx^2}$	$T(x) = \frac{e^{Pe x} - 1}{e^{Pe} - 1}$
(3) Burgers	$\frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right),$ $\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - S;$	$u(x, y) = 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(4y^3 - 2y),$ $v(x, y) = -8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(y^4 - y^2),$ p e S dados em [10].

Tabela 1: Definição dos problemas-modelo.

Os modelos matemáticos considerados, bem como as soluções analíticas adotadas, para análise da metodologia proposta são apresentados na Tabela 1. Nos casos 1 e 2, as soluções numéricas foram obtidas com o emprego do MDF sobre o domínio $\Omega = [0,1]$ (1D). No caso 3 considerou-se o MVF, sobre $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ (2D) [1].

5 Resultados e Conclusão

Nos casos 1 a 3, analisou-se a metodologia proposta sobre diversas variáveis. A Figura 1 (a) e (b) representa os resultados obtidos, em variável que possui localização fixa e nodal ($T(1/2)$) em todas as malhas adotadas, nos casos 1 e 2, respectivamente.



(a) ϕ com localização nodal (fixa), caso 1

(b) ϕ com localização nodal (fixa), caso 2

Figura 1: Eh (sem MER), Em (com MER) e suas respectivas estimativas.

Conforme ilustrado na Figura 1, constatou-se que U_{mc} e U_{ψ^*} estimam Eh e Em (MER), respectivamente, com níveis de acurácia significativos.

Como representado na Tabela 2, observa-se que os estimadores para Em analisados mostraram-se confiáveis ($\theta \geq 1$), de modo geral, entretanto os resultados mais acurados ($\theta \cong 1$) foram alcançados com o emprego de U_{pmc} e U_{ψ^*} . Sendo que U_{ψ^*} mostrou-se totalmente confiável.

h	U_{Δ} / Em	U_{pmc} / Em	U_{ψ} / Em	U_{ψ^*} / Em	U_{GCI} / Em
5,000E-01					
2,500E-01	2,511253E+01	9,767151E-01		1,006062E+00	1,395141E+01
1,250E-01	1,058976E+02	1,001340E+00	4,841112E+00	1,005715E+00	1,383010E+01
6,250E-02	6,696916E+02	1,000311E+00	4,482687E+00	1,001093E+00	1,483014E+01
3,125E-02	3,193988E+03	1,000074E+00	4,293244E+00	1,000237E+00	1,574624E+01
1,563E-02	1,394677E+04	1,000018E+00	4,189599E+00	1,000054E+00	1,644814E+01
7,813E-03	5,874386E+04	1,000004E+00	4,129974E+00	1,000013E+00	1,697111E+01
3,906E-03	2,431046E+05	1,000004E+00	4,093762E+00	1,000004E+00	1,736598E+01
1,953E-03	2,305184E+06	1,156305E+00	9,906425E-01	1,011050E+00	4,300672E+00

Tabela 2: Efetividade de U_{Δ} , U_{pmc} , U_{ψ} , U_{ψ^*} e U_{GCI} ; $\phi = T(1/2)$, caso 1.

Na Tabela 3, com a determinação de $(p_{U,M})_g$, verifica-se o critério para o emprego efetivo de MER, isto é, a ocorrência de $(p_{U,M})_g < 0$ indica a elevação da magnitude de Em ; bem como representa um impedimento para o cálculo de U_{ψ^*} ($\psi < 1$). Ainda nessa tabela, observa-se a efetividade dos estimadores U_{mc} e U_{ψ^*} durante o cálculo do valor mínimo de u no caso 3.

h	U_{mc} / Eh	U_{ψ^*} / Em	Eh	Em	$(p_{U,M})_g$
1,250E-01			6,234521E-03		
6,250E-02	7,423481E-01	1,178493E+00	1,931960E-03	4,977731E-04	
3,125E-02	9,680204E-01	1,130518E+00	5,410102E-04	1,730131E-05	3,577709E+00
1,563E-02	1,015922E+00	1,027474E+00	1,418254E-04	2,258136E-06	4,618515E+00
7,813E-03	9,982875E-01	1,016285E+00	3,622905E-05	6,204087E-08	3,075559E+00
3,906E-03	1,000110E+00	1,007873E+00	9,150575E-06	1,010332E-09	5,201567E+00
1,953E-03	9,999965E-01	1,003922E+00	2,299096E-06	7,954734E-12	5,952308E+00
9,766E-04	1,000000E+00	1,001958E+00	5,761922E-07	3,119710E-14	6,994467E+00
4,883E-04	1,000000E+00	1,000981E+00	1,442245E-07	6,109203E-17	7,997082E+00
2,441E-04	1,000000E+00	1,000113E+00	3,607811E-08	5,991813E-20	8,997620E+00
1,221E-04	1,000000E+00	9,991336E-01	9,022275E-09	6,752145E-24	9,995028E+00
6,104E-05	1,000000E+00		2,255912E-09	4,434787E-20	-1,340705E+00

Tabela 3: Efetividade de U_{mc} e U_{ψ^*} , magnitude de Eh e Em , e ordem $(p_{U,M})_g$, durante o cálculo de $\phi = u \min$ (valor mínimo de u), no caso 3.

Recomenda-se, portanto: i) a utilização do estimador U_{mc} em soluções numéricas obtidas sem o emprego de MER, devido à identificação de níveis de acurácia e confiabilidade significativos; ii) para soluções numéricas obtidas com o emprego de MER, U_{ψ^*} é indicado por destacar-se com relação a acurácia e confiabilidade, sobre os demais estimadores; iii) pode-se dizer que MER é eficaz na redução de Eh , desde que a condição $|\psi| > 1 \Leftrightarrow (p_{U,M})_g > 0$ seja satisfeita.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro do CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), AEB (Agência Espacial Brasileira) através do Programa Uniespaço, Fundação Araucária (Paraná) e CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior). O primeiro autor agradece a UNICENTRO-PR. O segundo autor é bolsista do CNPq.

Referências

- [1] S. F. T. Gonçalves, “Estudo de parâmetros do método multigrid geométrico para equações 2D e volumes finitos”, Tese de doutorado, PGMEC-UFPR, Curitiba, 2013.
- [2] C. H. Marchi. “Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos”. Tese de doutorado, PGMEC-UFSC, Florianópolis, 2001.
- [3] C. H. Marchi, L. K. Araki, A. C. Alves, R. Suero, S. F. T. Gonçalves, M. A. V. Pinto, Repeated Richardson extrapolation applied to the two-dimensional Laplace equation using triangular and square grids, Appl. Math. Mod., vol. 37, pp. 4661-4675, (2013).
- [4] C. H. Marchi, A. F. C. Silva, Multidimensional discretization error estimation for convergent apparent order. J. Braz. Soc. Mech. Sc. Eng., vol. 27, pp. 432 - 439, (2005).
- [5] C. H. Marchi, R. Suero, L. K. Araki, The lid-driven square cavity flow: numerical solution with a 1024 x 1024 grid, J. Braz. Soc. Mech. Sc. Eng., vol. 31, pp. 186-198, (2009).
- [6] M. A. Martins, C. H. Marchi, L. A. Novak, M. A. V. Pinto, L. K. Araki, S. F. T. Gonçalves. Multiextrapolação de Richardson com interpolação para reduzir o erro de discretização em CFD, em “Congresso de Matemática Aplicada e Computacional, CMAC-SE”, SBMAC, Bauru-SP, 2013.
- [7] P. J. Roache. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. ASME J. Flds. Eng., vol. 116, pp. 405 - 413, (1994).
- [8] J. C. Roy. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. J. Comp. Phys, vol. 205, pp. 131 - 156, (2005).
- [9] J. C. Roy, W. L. Oberkampf, A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing, Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng., vol. 200, pp. 2131-2144, (2011).
- [10] T. M. Shih, C. H. Tan, B. C. Hwang, Effects of grid staggering on numerical scheme, Int. J. Num. Meth. Fld., vol. 9, pp. 193-212, (1989).