

Multiextrapolação de Richardson e Verificação da Ordem de Acurácia de Esquemas Híbridos sobre a Equação 2D de Fourier com Termo Fonte

Ana Paula da S. Vargas,

Faculdades Integradas do Brasil – Unibrasil

82821-020, Curitiba, Paraná

Universidade Federal do Paraná - Departamento de Engenharia Mecânica

81531-980, Curitiba, Paraná

E-mail: vargas.apaulas@gmail.com

Carlos H. Marchi, Marcio A. V. Pinto

Universidade Federal do Paraná - Departamento de Engenharia Mecânica

81531-980, Curitiba, Paraná

E-mails: machi@pq.cnpq.br; marcio_villela@ufpr.br

Resumo: *Acurácia e previsões confiáveis em mecânica dos fluidos são os objetivos principais em CFD. O objetivo final de interesse científico é a validação de um modelo e para isso a verificação se faz necessária. Duas etapas da verificação são: a verificação do código e a verificação da solução. Em vista disso, este trabalho apresenta a solução da equação de Fourier 2D, com termo fonte e erro de truncamento combinando o método das soluções fabricadas (MSF) com a verificação da ordem de acurácia a priori e a posteriori. A estimativa a priori da ordem de acurácia é realizada por meio da dedução da ordem formal baseada na série de Taylor. Tal abordagem é utilizada com o objetivo de verificar efetivamente a ordem de acurácia das soluções numéricas calculada a posteriori pela utilização de técnicas híbridas. A estimativa a posteriori é realizada com base na estimativa do erro de discretização obtida por meio de Multiextrapolações de Richardson (MER). As soluções são obtidas com o emprego dos Métodos de Diferenças Finitas (MDF) e multigrid. Os resultados obtidos indicam que: i) o fator de mistura não altera a eficácia de MER; ii) a ordem de acurácia obtida a posteriori por meio de MER corrobora a ordem formal obtida a priori; iii) MER provê subsídios para os casos em que não se consegue estimar a priori ou a posteriori as ordens do erro numérico. Tópicos adicionais incluem a dedução das ordens verdadeiras do esquema numérico, análise da ordem aparente, efeito de parâmetro numérico em esquema híbrido e equação parabólica com termo fonte.*

Palavras-chave: Multiextrapolação de Richardson, termo fonte, ordem de acurácia, método das soluções fabricadas, verificação numérica, CFD, equação de Fourier 2D, esquemas híbridos.

1 Introdução

A necessidade de predizer com acurácia resultados numéricos que representem o comportamento de fluidos em movimento é de grande importância em CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Avanços têm sido observados em estudos e análises no desenvolvimento de sistemas complexos com difícil aferição de soluções analíticas e/ou numéricas com base em subsídios fornecidos nesta área.

Apesar disso, controvérsias existentes na literatura a respeito de esquemas mistos devem ser esclarecidas como, por exemplo, que a ordem assintótica de um esquema híbrido (ou misto) é variável [1]. Em [8] sugere-se usar a menor ordem entre dois esquemas puros. Há relatos que, mesmo em problemas unidimensionais, o erro se reduz de forma não-monotônica quando se usa pelo menos dois esquemas com ordens assintóticas diferentes [9].

É comum encontrar em trabalhos científicos de diversas áreas, especificamente em CFD, várias combinações de métodos de solução. O interesse em esquemas híbridos está em determinar um modelo numérico apropriado de forma a atender altos níveis de acurácia. Nesse sentido, a verificação da ordem de acurácia da solução numérica *versus* ordem de acurácia

formal da técnica numérica tem como objetivo identificar em que medida um modelo numérico é resolvido adequadamente. Para tanto, dois métodos são abordados: estimativa de erro *a priori* e estimativa de erro *a posteriori* [6].

A estimativa *a priori* da ordem de acurácia é realizada por meio da dedução da ordem formal baseada na série de Taylor. Tal abordagem é utilizada com o objetivo de verificar efetivamente a ordem de acurácia das soluções numéricas calculada *a posteriori* pela utilização de técnicas híbridas.

Para estimar, *a posteriori*, a magnitude da ordem do erro de discretização bem como a influência do parâmetro numérico de esquemas híbridos emprega-se o método de extrapolação de Richardson (ER) [7] de forma recursiva. Esse procedimento é conhecido por Multiextrapolação de Richardson (MER) (ou *Repeated Richardson Extrapolation* - RRE) [5]. ER também é bastante utilizada para reduzir o erro de discretização e aumentar a ordem de acurácia, pois cada aplicação representa um nível de extrapolação, a sua eficácia pode ser potencializada.

O objetivo final de interesse científico é a validação de um modelo e para isso a verificação se faz necessária [6,10]. Duas etapas da verificação são a verificação do código e a verificação da solução. A verificação do código examina se o algoritmo foi corretamente implementado [3,10], e para isso MSF é recomendado. A verificação da solução é usada para estimar os erros numéricos que ocorrem na simulação numérica [6]. O uso de ER, nesse caso, é indicado.

Com isso, os objetivos deste trabalho são (1) análise da ordem de acurácia da solução numérica *versus* ordem de acurácia formal da técnica numérica; (2) verificação do efeito do parâmetro numérico na solução e no erro numérico; (3) verificação da solução com o emprego de MER.

2 Conceitos e métodos

O erro da solução numérica, ou simplesmente erro numérico (E), é a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e sua solução numérica (ϕ) [4], ou seja,

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

O erro numérico é causado basicamente por quatro fontes, que são: erros de iteração, erros de truncamento, erros de arredondamento e erros de programação [4]. Quando as demais fontes são minimizadas ou inexistentes, o erro de truncamento passa a ser denominado erro de discretização (Eh). Similarmente à forma geral do erro de truncamento, Eh é dado por

$$Eh = c_1 h^{p_L} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \dots \quad \text{para } h \rightarrow 0 \quad (2)$$

onde o menor expoente de h na expressão de Eh na Eq. (2), p_L , chamamos ordem assintótica ou de acurácia de Eh . A ordem assintótica (p_L) e os expoentes dos termos não nulos na equação do erro de truncamento (p_2, p_3, \dots) são denominadas ordens verdadeiras (p_V). O conjunto representado por p_V e seus elementos são números reais e seguem a relação: $1 \leq p_L < p_2 < p_3 < \dots$. Todas as ordens verdadeiras são valores conhecidos. Os coeficientes reais c_1, c_2, c_3, \dots independem de h e podem ser positivos ou negativos e podem ser função da variável dependente e de suas derivadas. Tanto os coeficientes c_i como as ordens verdadeiras dependem das aproximações numéricas aplicadas.

A ideia básica de ER exige a solução numérica da variável de interesse em duas malhas com diferentes números de nós. Por exemplo, com base nas Eqs. (1) e (2), consideram-se as soluções aproximadas $\phi(h)$ e $\phi(rh)$ representadas por

$$\Phi - \phi(h) = c_1 h^{p_L} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (3)$$

$$\Phi - \phi(rh) = c_1 (rh)^{p_L} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (4)$$

Subtraindo a Eq. (4) da Eq. (3), obtém-se a expressão para o erro de truncamento:

$$c_1 h^{p_L} = \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_L} - 1} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (5)$$

Assim, substituindo a Eq. (5) na Eq. (3) chega-se a

$$\Phi = \phi(h) + \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_L} - 1} + \mathcal{O}(h^{p_2}) \quad (6)$$

A aplicação repetida da Eq. (6) é denominada por Multiextrapolação de Richardson (MER) [5] em que a primeira aplicação é considerada o primeiro nível de extrapolação, chegando-se a p_L . Com a aplicação sucessiva desse processo, definem-se os valores sequenciais das ordens por p_m , cada nível de malha por g e m o número de aplicações de ER pode-se reescrever a Eq. (6) como

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1} \quad (7)$$

em que $g = 2, \dots, G$, $r = h_{g-1}/h_g$ 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 é $m = 1, \dots, M$ onde $M = g - 1$. A acurácia de ϕ_M pode ser analisada com base nos conceitos de ordem efetiva (p_E) e ordem aparente (p_U), isto é,

$$p_{E,g,m} = \frac{\log \left[\frac{\Phi - \phi_{g-1,m-1}}{\Phi - \phi_{g,m}} \right]}{\log(r)} \quad e \quad p_{U,g,m} = \frac{\log \left[\frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}} \right]}{\log(r)} \quad (8)$$

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

3 Modelo Matemático

A equação do calor bidimensional transiente (equação de Fourier) com termo fonte é dada por [2]

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + S(x, y, t) \quad (9)$$

onde α é a difusividade térmica e $S(x, y, t)$ é o termo fonte. A Eq. (9) fornece a distribuição da temperatura T em domínio retangular, isto é, com $(x, y) \in \Omega = (0,1) \times (0,1)$, $t \in]0, t_f]$, t_f indica o tempo final e com condições de contorno de Dirichlet e iniciais dados por

$$T(0, y, t) = T(L, y, t) = T(x, 0, t) = T(x, L, t) = 0 \quad (10)$$

$$T(x, y, 0) = \text{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) \text{sen} \left(\frac{\pi y}{L} \right) \quad (11)$$

e termo fonte dado por

$$S(x, y, t) = \pi^2 \text{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) \text{sen} \left(\frac{\pi y}{L} \right) e^{-\pi^2 t} \quad (12)$$

Considerando $L = 1$ m e difusividade térmica $\alpha = 1$ m²/s, o termo fonte e as condições de contorno foram ajustados por meio do MSF [3] de forma a possibilitar a obtenção da solução analítica dada por

$$T(x, y, t) = \text{sen}(\pi x) \text{sen}(\pi y) e^{-\pi^2 t} \quad (13)$$

4 Modelo Numérico

O modelo numérico é caracterizado pelo uso do MDF com malhas uniformes. Com o intuito de verificar as ordens verdadeiras da solução numérica, *a priori* e *a posteriori*, o esquema θ é aplicado, fornecendo assim, a possibilidade de uma análise do comportamento da solução e de seu erro por meio da variação de seu valor. O esquema θ associa o parâmetro de mistura (θ) aos esquemas explícito ($\theta = 0$), totalmente implícito ($\theta = 1$) e Crank-Nicolson ($\theta = \frac{1}{2}$) [11].

A discretização da equação do calor transiente com termo fonte (equação de Fourier) é pouco discutida na literatura. Em [11], por exemplo, a única referência, se faz ao aplicar o método de Crank-Nicolson em que considera o cálculo da média do termo fonte em níveis de tempo subsequentes. O cálculo do termo fonte pode levar a interpretações equivocadas tanto no tratamento teórico como no tratamento numérico e computacional comprometendo uma análise futura. Nesse sentido, deve-se considerar a expressão

$$S(x, y, t) \cong \theta S_{i,j,k+1} + (1 - \theta) S_{i,j,k} \quad (14)$$

A discretização da equação do calor bidimensional com termo fonte com erro de truncamento é dada por

$$\begin{aligned} T_t^i - T_{xx}^{ii} - T_{yy}^{ii} - S = & -k \left[\frac{1}{2} T_{2t}^{ii} - \theta (T_{2xt}^{iii} + T_{yyt}^{iii} + S_t^i) \right] + T_{4x}^{iv} \frac{h_x^2}{12} + T_{4y}^{iv} \frac{h_y^2}{12} - \\ & k^2 \left[\frac{1}{6} T_{3t}^{iii} - \frac{\theta}{2} (T_{2x2t}^{iv} + T_{2y2t}^{iv} + S_{tt}^{ii}) \right] - k^3 \left[\frac{1}{24} T_{4t}^{iv} - \frac{\theta}{6} (T_{2x3t}^v + T_{2y3t}^v + S_{3t}^{iii}) \right] + \\ & + T_{6x}^{vi} \frac{h_x^4}{360} + T_{6y}^{vi} \frac{h_y^4}{360} - k^4 \left[\frac{1}{120} T_{5t}^v - \frac{\theta}{24} (T_{2x4t}^{vi} + T_{2y4t}^{vi} + S_{4t}^{iv}) \right] - \\ & - k^5 \left[\frac{1}{720} T_{6t}^{vi} - \frac{\theta}{120} (T_{2x5t}^{vii} + T_{2y5t}^{vii} + S_{5t}^v) \right] + T_{8x}^{viii} \frac{h_x^6}{20160} + T_{8y}^{viii} \frac{h_y^6}{20160} - \dots \\ & \theta \left(T_{4xt}^v \frac{kh_x^2}{12} + T_{4yt}^v \frac{kh_y^2}{12} + T_{4x2t}^{vi} \frac{k^2 h_x^2}{24} + T_{4y2t}^{vi} \frac{k^2 h_y^2}{24} + T_{4x3t}^{vii} \frac{k^3 h_x^2}{72} + T_{4y3t}^{vii} \frac{k^3 h_y^2}{72} + \right. \\ & \left. T_{6xt}^{vii} \frac{kh_x^4}{360} + T_{6yt}^{vii} \frac{kh_y^4}{360} + T_{6x2t}^{viii} \frac{k^2 h_x^4}{720} + T_{6y2t}^{viii} \frac{k^2 h_y^4}{720} + T_t^i 2 \frac{k}{h_x^2} + T_t^i 2 \frac{k}{h_y^2} + T_{2t}^{ii} \frac{k^2}{h_x^2} + \dots \right) + \dots \quad (15) \end{aligned}$$

onde a notação T_{xt}^{ii} , por exemplo, indica que a função é derivada duas vezes, uma vez na direção x e outra na direção t . Os parâmetros h_x e h_y referem-se ao espaçamento da malha na direção x e y , respectivamente e k se refere ao passo no tempo.

Com base na Eq. (15), da mesma forma como no caso unidimensional, pode-se concluir que o erro de truncamento, independente de θ , tem ordem de acurácia $O(h_x^2 + h_y^2 + k)$. Porém, verificando atentamente, nota-se que a primeira parcela do lado direito da igualdade é cancelada quando $\theta = \frac{1}{2}$. Portanto, quando $\theta = \frac{1}{2}$ a ordem de acurácia (ou assintótica) é $O(h_x^2 + h_y^2 + k^2)$, como esperado.

5 Resultados e Conclusão

As ordens de acurácia obtidas *a posteriori* com MER trazem grandes vantagens em relação à perspectiva do comportamento da solução numérica de um problema físico em estudo. Estas podem indicar efetivamente as ordens do erro, uma vez que as ordens de erro *a priori* devem ser confirmadas pelas ordens obtidas *a posteriori*. Esta ideia pode ser ampliada para a verificação da solução dos casos em que não há conclusões significativas na estimativa *a priori* ou a solução analítica é desconhecida.

A metodologia proposta foi aplicada a diversas variáveis de interesse, a saber, a temperatura no centro do domínio (T_c), a temperatura média (T_m), a taxa de transferência de calor ao leste (q_e) e a média da norma l_1 .

Resultados *a priori* e *a posteriori* são apresentados para a variável $T_c = T(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ na Tabela 1. Como observado na Eq. (15) não se consegue identificar uma sequência, *a priori*, para as ordens verdadeiras, pode-se concluir somente o valor da ordem assintótica.

Variável de interesse	Ordens verdadeiras <i>a priori</i>	Ordens verdadeiras <i>a posteriori</i>
T_c	$\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1$	$\theta = 1 \Rightarrow p_V = 1, 2, 3, 4, \dots$
	$\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2$	$\theta = \frac{1}{2} \Rightarrow p_V = 2, 4, 6, 8, \dots$
	p_V para $V = 2, 3, 4, \dots$ não identificado	

Tabela 1 Ordens verdadeiras obtidas *a priori* e *a posteriori* das aproximações para a equação de Fourier 2D e para a variável T_c .

Os resultados obtidos *a posteriori* podem ser verificados na Figura 1 os quais apresentam as três primeiras ordens verdadeiras obtidas com o emprego de MER para a variável $T_c = T(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ quando $\theta = 1$ e $\theta = \frac{1}{2}$.

O método de Crank-Nicolson é comumente empregado em diversas aplicações, confiando seu resultado somente ao conhecimento teórico da ordem assintótica. Verificou-se que a princípio só a ordem assintótica pode ser corroborada *a priori*, as outras ordens verdadeiras ainda não se pode afirmar corretamente a sua prioridade devido à aproximação de derivadas mistas envolvendo espaço e tempo. Com o emprego de MER o resultado de sua aplicação pode ser comprovado e, além disso, verificado seu comportamento com a redução sistemática da malha. Isto evita, por exemplo, custo computacional desnecessário.

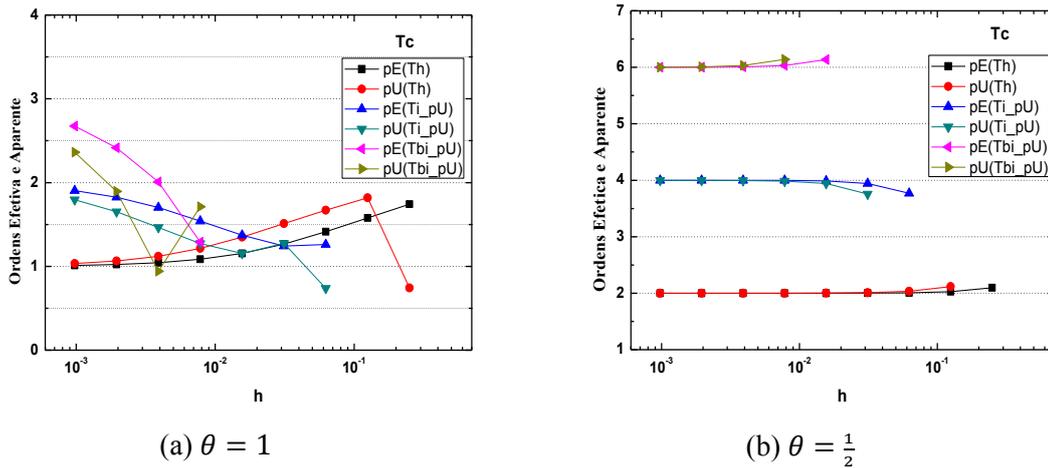


Figura 1: Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_c

A Figura 2 mostra o módulo do erro de discretização com MER ($Em1$) e sem MER (Eh) para a variável T_c . Considerando as ordens de magnitude dos erros, pode-se perceber que em geral, para $h \rightarrow 0$, $Eh(\theta = \frac{1}{2}) < Eh(\theta = 1)$ e $Em1(\theta = \frac{1}{2}) < Em1(\theta = 1)$, como era esperado. Conclui-se, portanto, que a eficiência de MER não é afetada pelo parâmetro θ utilizado.

Com a aplicação de MER a verificação do valor correto da ordem assintótica e de ordens verdadeiras do erro de discretização contribui para melhorar a qualidade (acurácia e confiabilidade) das soluções e das estimativas do erro de discretização proporcionando a utilização adequada de esquemas híbridos e parâmetros numéricos em CFD.

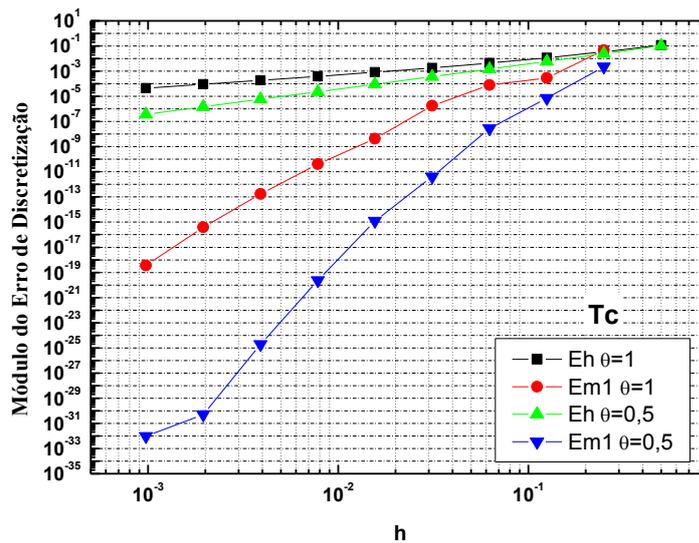


Figura 2: Módulo do erro de discretização com MER (Em1) e sem MER (Eh) para a variável T_c

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 segundo autor é bolsista do CNPq.

Referências

- [1] I. Celik, W. M. Zhang, Calculation of numerical uncertainty using Richardson extrapolation: Application to Some Simple Turbulent Flow Calculations. *Journal of Fluids Engineering*, vol. 117, n°3, pp. 439-445, (1995).
- [2] F. P. Incropera, D. P. Dewitt, T. L. Bergman, A. S. Lavine, “Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa”. Rio de Janeiro: LTC, 2008.
- [3] P. M. Knupp, K. Salari, “Verification of computer codes in computational science and engineering”. Chapman & Hall/CRC, 2003.
- [4] C. H. Marchi, “Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos”. Tese de doutorado, PGMEC-UFSC, Florianópolis, 2001.
- [5] C. H. Marchi, L. A. Novak, C. D. Santiago, A. P. S. Vargas, Highly accurate numerical solutions with repeated Richardson extrapolation for CHT and CFD. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. Elsevier, vol 37, pp. 7386–7397 (2013).
- [6] W. L. Oberkampf, T. G. Trucano, Verification and validation in computational fluid dynamics. *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 38, pp. 209-272, (2002).
- [7] L. F. Richardson, The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A*, vol. 210, p. 307-357, 1910.
- [8] P. J. Roache, Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. *ASME Journal of Fluids Engineering*, vol. 116, p. 405–413, (1994).
- [9] J. C. Roy. Grid Convergence error analysis for mixed-order numerical schemes. *AIAA Journal*, vol. 41, no 4, pp. 595-604, (2003).
- [10] J. C. Roy. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. *J. Comp. Phys*, vol. 205, p. 131 - 156, (2005).
- [11] J. C. Strikwerda, “Finite difference schemes and partial differential equations”. 2a ed., Philadelphia, SIAM, 2004.