

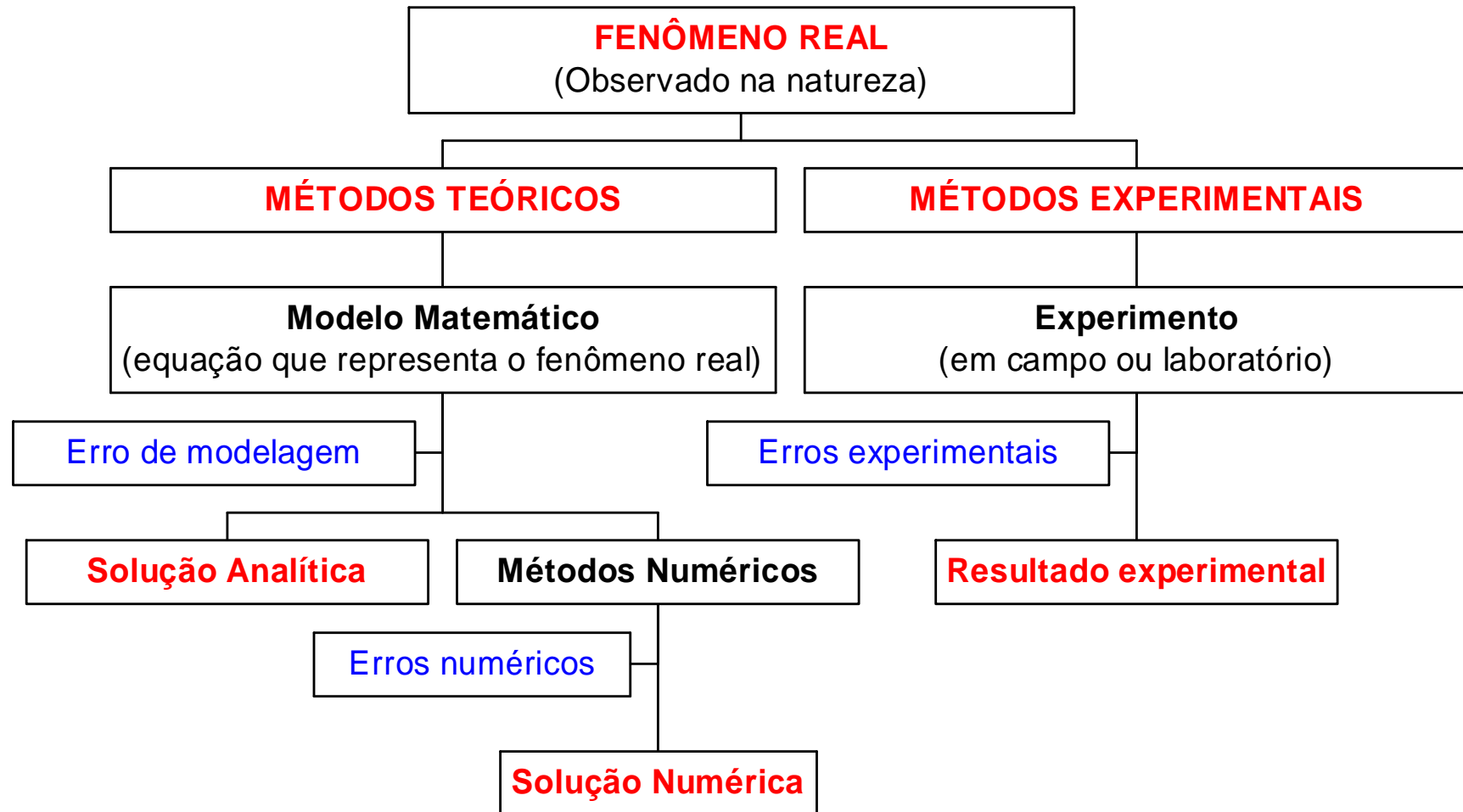
DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

Cap. 03: Verificação e
Validação em CFD

Problemas de engenharia

- Métodos analíticos
- Métodos experimentais
- Métodos numéricos

Problemas de engenharia



Erros verdadeiros (E)

- Resultados experimentais: incertezas (erros) experimentais.
- Soluções analíticas: erros de modelagem.
- Soluções numéricas: erros de modelagem e erros numéricos.

Erros verdadeiros (E)

- Erro experimental: Diferença entre o valor verdadeiro (R) de uma variável de interesse e seu valor experimental (X).

$$E_x(X) = R - X$$

- Pode estar relacionada, entre outros fatores, a: fatores de escala, conversão de sinais, calibração de equipamentos.

Erros verdadeiros (E)

- Erro de modelagem: Diferença entre o valor verdadeiro (R) de uma variável de interesse e sua solução analítica exata (Φ).
- Suas causas incluem: simplificações sobre o fenômeno real; incerteza nos dados.
- Afetam soluções analíticas e numéricas.

Erros verdadeiros (E)

- Erro numérico: Diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e sua solução numérica (ϕ).
- É composto por várias parcelas: erros de truncamento, de arredondamento, de iteração e de outras naturezas.

Erros verdadeiros (E)

- O processo utilizado para quantificar o erro numérico é conhecido como verificação. Esse processo visa estabelecer quão bem um modelo matemático (equação ou sistema de equações) é solucionado numericamente.
- Já o processo para quantificar o erro de modelagem é conhecido como validação. Ele avalia quão bem um modelo matemático representa a realidade.

Erros verdadeiros (E)

- A magnitude admissível do erro numérico depende de vários fatores, entre os quais citam-se:
 - A finalidade da solução numérica.
 - Os recursos financeiros e/ou computacionais disponíveis.
 - O tempo disponível para as simulações.

Erros estimados (U)

- Na prática, o valor verdadeiro (R) é desconhecido. Assim, é possível apenas realizar-se uma estimativa do erro (U), seja ele experimental ou de modelagem.
- No caso de soluções numéricas, em situações práticas, também a solução analítica não é conhecida, de modo que é necessário estimar o erro numérico cometido.

Erros estimados (U)

- A importância de se conhecer o erro numérico está relacionada às seguintes situações:
 - Se o erro é maior que o aceitável: não há confiabilidade no resultado numérico.
 - Se o erro é (muito) menor que o aceitável: há desperdício de recursos computacionais (processador, tempo de processamento, memória computacional).

Erros estimados (U)

- A importância de se conhecer o erro numérico está relacionada às seguintes situações:
 - Quando se deseja validar, melhorar e desenvolver modelos matemáticos, é necessário que os erros numéricos obtidos sejam muito inferiores aos erros de modelagem, de modo a avaliar corretamente a qualidade dos modelos matemáticos distintos.
 - Otimizar o uso da malha através da homogeneização do erro.

Erros estimados (U)

- A qualidade de uma solução numérica pode ser avaliada através da razão entre o erro estimado (U) e o erro verdadeiro (E):
 - Solução acurada:
 - Solução confiável:

Erros de discretização

- É a parcela do erro numérico causada pelas aproximações adotadas durante o processo de discretização do modelo matemático, originando o modelo discreto.
- Confunde-se, assim, ao erro de truncamento, em especial para o caso de malhas cartesianas. No caso de malhas não-ortogonais e não-estruturadas, não apenas o truncamento de termos da série de Taylor é responsável pelo erro de discretização.

Erros de discretização

- Assume-se que, quando é a única (ou principal) fonte de erro numérico, os erros de discretização podem ser expressos através de uma série de Taylor:
- Nesse caso, tem-se:
 - $C_0, C_1, C_2, C_3 \dots$ são coeficientes que dependem de Φ mas independem de h .

Erros de discretização

- $P_0, P_1, P_2, P_3 \dots$ são as ordens verdadeiras de $E(\emptyset)$. Geralmente são números inteiros positivos, que constituem uma progressão aritmética na qual $P_0 < P_1 < P_2 < P_3 < \dots$
- O menor valor entre as ordens verdadeiras (P_0) é denominado de ordem assintótica. Ela representa a inclinação do erro - $E(\emptyset)$ - em um gráfico bilogaritmico do tipo $E(\emptyset)$ versus h , para $h \rightarrow 0$.
- \emptyset é a variável de interesse e h é a métrica de malha (tamanho dos volumes de controle da malha, no caso 1D).

Erros de discretização

- Tipos de estimativas de erro:
 - A priori.
 - A posteriori.
- A priori: obtida sem a necessidade da solução numérica, a partir de expansões de séries de Taylor.
- A posteriori: obtida a partir do pós-processamento da solução numérica, utilizada para confirmar se as ordens obtidas a priori são realmente alcançadas.¹⁷

Erros de discretização

- Estimativas a priori:
 - Objetivo: obter as ordens assintóticas do erro de discretização. Quando $h \rightarrow 0$, espera-se que
 - No caso de volumes finitos, deve-se expandir a série de Taylor em torno das faces de cada volume de controle, utilizando-se os nós envolvidos em cada aproximação numérica.
 - Sua utilidade está na previsão de qual é a melhor aproximação numérica e qual o comportamento da redução do erro com a redução do tamanho dos elementos de malha.

Erros de discretização

- Estimativas a posteriori:
 - Utilizadas para avaliar, efetivamente, o comportamento e a magnitude do erro de discretização.
 - No método de volumes finitos, é baseada em soluções numéricas obtidas em múltiplas malhas.
 - Existem vários estimadores de erros, porém, quase todos são variantes do estimador de Richardson.

Erros de discretização

- Estimador de Richardson, baseado na ordem assintótica:
 - Admitindo-se que:
 - Sendo: ϕ a solução numérica; ϕ_∞ a solução analítica estimada e $U(\phi)$ a estimativa do erro numérico em h .
 - Considerando-se, ainda, que $U(\phi)$ possa ser escrita como:

Erros de discretização

- No qual K_U é um coeficiente que se supõe não depender de h ; h é a métrica da malha (tamanho dos elementos de malha, no caso 1D); e P_0 é a ordem assintótica do erro numérico.
- Aplicando-se, então, a expressão anterior a duas malhas distintas, grossa e fina, de índices 1 e 2, respectivamente, obtém-se:

Erros de discretização

- Isolando-se, das equações anteriores ϕ_∞ obtém-se:
- Sendo r a chamada razão de refino de malha, avaliada como:

Erros de discretização

- E a estimativa de erro é dada por:
- Estimador de Richardson baseado na ordem aparente (P_u).
 - Diferentemente da ordem assintótica, obtida a priori, a ordem aparente é avaliada tendo-se por base a solução numérica obtida.
 - Devem ser consideradas a solução numérica em três malhas distintas.

Erros de discretização

- Isolando-se, das equações anteriores θ_∞ obtém-se:
- Sendo a ordem aparente (Pu) avaliada como:

Erros de discretização

- Espera-se que para
- Tem-se, assim, que:
- Que se constitui na estimativa de erro da solução numérica na malha fina.

Erros de discretização

- Estimador GCI (Grid Convergence Index)
 - Proposto por Roache (1994).
 - Pode ser empregado com a ordem assintótica:
 - Ou com base na ordem aparente:

Erros de discretização

- Sendo os índices 2 e 3 referentes a malhas intermediária e fina, respectivamente, e F_s um fator de segurança, que apresenta o valor igual a três, para a maioria das aplicações.
- O estimador GCI apresenta uma banda ou intervalo de erro em torno da solução numérica, ou seja,

Erros de discretização

- Estimador Delta:
 - Usado por Demirdzic et al. (1992), possui a seguinte forma:
 - Sendo os índices 3 e 2 referentes a soluções numéricas em duas malhas diferentes (fina e intermediária, respectivamente).
 - Não leva em consideração a razão de refino.

Erros de discretização

- Ordem efetiva (PE):
 - Pode ser avaliada apenas se a solução analítica do modelo matemático for conhecida.
 - Neste caso, considera-se as seguintes expressões para avaliar o erro numérico em duas malhas, fina e intermediária, de índices 2 e 1, respectivamente:

Erros de discretização

- Das equações anteriores, ao se isolar PE , obtém-se a seguinte expressão:
- Assim como no caso da ordem aparente, espera-se que $PE \rightarrow P0$ quando $h \rightarrow 0$.

Erros de discretização

- Determinar, a priori, a ordem assintótica das aproximações numéricas empregadas na discretização do modelo matemático. Caso P_0 seja desconhecida, empregar P_0 igual a 1.
- Obter a solução numérica em três malhas distintas e de preferência, mantendo-se uma razão de refino constante: uma grossa (índice 1), uma intermediária (índice 2) e uma fina (índice 3).

Erros de discretização

- Calcular a ordem aparente (P_u).
- Estimar o erro numérico, empregando-se o estimador GCI:

- Sendo P o mínimo (menor valor) entre P_0 e P_u , para $P_u > 0$. Expressar a solução numérica e sua incerteza como:

Erros de iteração

- O erro de iteração de uma variável de interesse é definido como a diferença entre a solução exata ($\phi_{i \rightarrow \infty}$) do sistema e a solução obtida em uma iteração i (ϕ_i), ou seja,
- Possíveis causas do erro de iteração:
 - Emprego de métodos iterativos, como o de Gauss-Seidel ou o Jacobi.

Erros de iteração

- Problemas não-lineares, nos quais os coeficientes são dependentes da solução.
- Modelos matemáticos constituídos por mais de uma equação, quando os mesmos são resolvidos de modo segregado (cada equação resolvida separadamente).
- Uso de métodos multigrid para a solução do sistema.

Erros de iteração

- Características:
 - Em geral, diminuem com o aumento do número de iterações.
 - Quando o número de iterações tende ao infinito, os erros de iteração devem tender a zero.
 - Para convergência monotônica e $i \rightarrow \infty$,

Erros de iteração

- Sendo: i o número de iterações, C um coeficiente que independe da iteração e PL a ordem assintótica do erro de iteração.
- O valor da ordem assintótica do erro de iteração representa a inclinação da curva do erro de iteração em um gráfico logarítmico para o erro de iteração, $E(\phi_i)$, versus o número de iterações.
- Observa-se, contudo, que o valor de PL só pode ser avaliado a priori para casos muito simples.

Erros de iteração

- Estimativas a posteriori:
 - Considerando-se que a estimativa do erro de iteração (U) possa ser avaliada através da seguinte expressão:
 - Sendo K uma constante (independente da iteração), i o número da iteração e Pu a ordem aparente da estimativa do erro de iteração.

Erros de iteração

- Considerando-se a solução numérica obtida em três iterações distintas e sucessivas ($i-2$, $i-1$, i)

Erros de iteração

- Solucionando-se o sistema anterior, obtém-se:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,25 \\ 0,25 \end{pmatrix}$$

Erros de iteração

- Critério de parada baseado no resíduo.
 - Considerando-se o sistema de equações a seguir:
 - Ao se resolver o sistema acima por meio de um método iterativo, pode-se estimar o resíduo do sistema de equações através da relação:

Erros de iteração

- A partir do resíduo da expressão anterior, deve-se, então, calcular a norma do resíduo. Para tanto, pode-se utilizar as normas zero, um ou dois (entre outras). Deve-se, também, calcular o resíduo na iteração zero (ou seja, antes de se iniciar o processo iterativo). O processo deve ser interrompido quando:
 - Sendo tol uma tolerância admitida.

Erros de arredondamento

- Causado pela representação finita dos números reais através de cálculos / computações numéricas.
- Cada conjunto sistema operacional / compilador / linguagem de programação apresenta uma precisão: simples, dupla ou quádrupla, que resulta em 7, 15 ou 31 algarismos significativos.

Erros de arredondamento

- Há dois motivos básicos para a perda de algarismos significativos:
 - Número de cálculos, que provoca a perda de precisão no lado direito dos números.
 - Cancelamento subtrativo dos cálculos, que ocorre quando dois números muito próximos são subtraídos, e que provoca a perda de precisão no lado esquerdo dos números.

Erros de outras naturezas

- Podem ser causados:
 - Pelo uso incorreto de um modelo numérico para a aproximação de um modelo matemático. Por exemplo, ao invés de se utilizar um método de segunda ordem de acurácia, como o CDS, emprega-se um método de primeira ordem, como o UDS.
 - Pela implementação incorreta do modelo numérico no código computacional.
 - Pelo uso incorreto do código para a obtenção da solução numérica.
 - Por outras fontes de erro quaisquer.

Erros de outras naturezas

- Sugestões gerais para evitá-los:
 - Implementar códigos enxutos, específicos, para após generalizá-los.
 - Implementar códigos em módulos, para facilitar a detecção de eventuais erros.
 - Testar o solver para sistemas de equações simples que possuam soluções exatas conhecidas.
 - Utilizar uma malha grosseira, de modo a verificar se o erro de iteração atinge o erro de arredondamento ou erro de máquina.
 - Utilizar um problema de solução fabricada.

Erros de outras naturezas

- Método de soluções fabricadas:
 - Consiste em obter um problema semelhante ao problema de interesse, mas que possua solução analítica conhecida.
 - Neste caso, a solução analítica é fornecida e, em geral, adapta-se o termo-fonte da equação governante de modo que a expressão da solução analítica satisfaça ao modelo matemático.
 - Uma vez que a solução analítica é conhecida, pode-se avaliar as ordens assintótica, aparente e efetiva do modelo implementado.