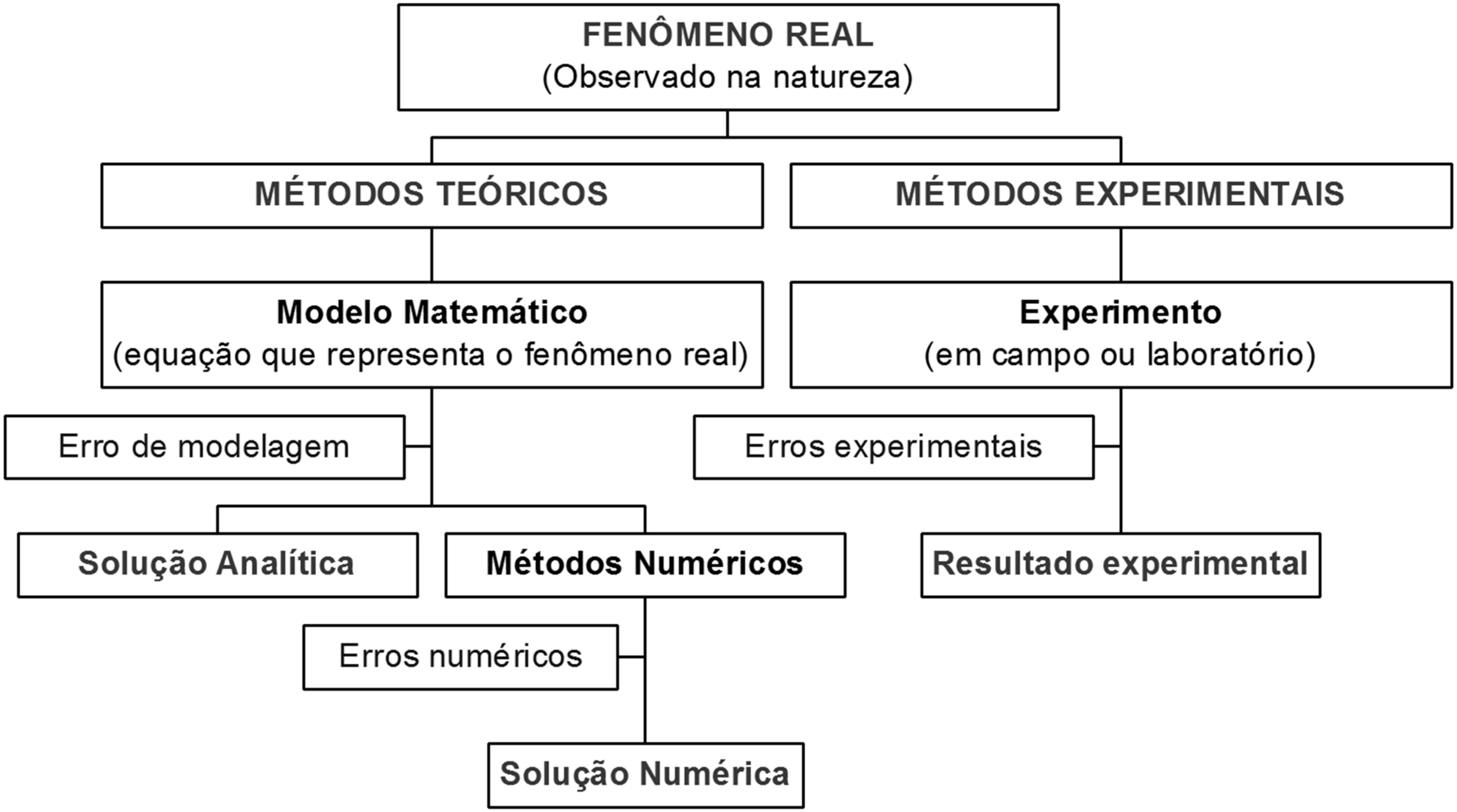
DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

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).

$$E_m(\Phi) = R - \Phi$$

- 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).

$$E_n(\phi) = \Phi - \phi$$

- 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 homogeinização 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:

$$\frac{U}{E} \approx 1$$

  - Solução confiável:

$$\frac{U}{E} \geq 1$$

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:

$$E(\phi) = C_0 h^{P0} + C_1 h^{P1} + C_2 h^{P2} + C_3 h^{P3} + \cdots$$

- Nesse caso, tem-se:
  - C_0, C_1, C_2, C_3 ... são coeficientes que dependem de Φ mas independem de *h*.

Erros de discretização

- $P0$, $P1$, $P2$, $P3$ ... são as ordens verdadeiras de $E(ø)$. Geralmente são números inteiros positivos, que constituem uma progressão aritmética na qual $P0 < P1 < P2 < P3 < \ldots$
- O menor valor entre as ordens verdadeiras ($P0$) é denominado de ordem assintótica. Ela representa a inclinação do erro - $E(ø)$ – em um gráfico bilogaritmico do tipo $E(ø)$ *versus* h, para $h \rightarrow 0$.
- ø 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.

Erros de discretização

- Estimativas a priori:
  - Objetivo: obter as ordens assintóticas do erro de discretização. Quando $h \rightarrow 0$, espera-se que

$$E(\phi) = C_0 h^{P0}$$

  - 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:

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi$$

  - Sendo: ø a solução numérica; $ø_\infty$ a solução analítica estimada e *U*(ø) a estimativa do erro numérico em *h*.
  - Considerando-se, ainda, que *U*(ø) possa ser escrita como:

$$U(\phi) = K_U h^{P0}$$

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 $P0$ 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:

$$\phi_\infty - \phi_1 = K_U h^{P0}$$

$$\phi_\infty - \phi_2 = K_U h^{P0}$$

Erros de discretização

- Isolando-se, das equações anteriores ϕ_∞ obtém-se:

$$\phi_\infty(P0) = \phi_2 + \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{(r^{P0} - 1)}$$

- Sendo *r* a chamada razão de refino de malha, avaliada como:

$$r = \frac{h_1}{h_2}$$

Erros de discretização

- E a estimativa de erro é dada por:

$$U_{RI}(P0) = \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{(r^{P0} - 1)}$$

- Estimador de Richardson baseado na ordem aparente (*Pu*).
  - 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

- Considerando-se as malhas 1, 2 e 3 (grossa, intermediária e fina, respectivamente):

$$\phi_\infty - \phi_1 = K_U h^{Pu}$$

$$\phi_\infty - \phi_2 = K_U h^{Pu}$$

$$\phi_\infty - \phi_3 = K_U h^{Pu}$$

- Admitindo-se uma razão de refino constante, ou seja,

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

Erros de discretização

- Isolando-se, das equações anteriores ϕ_∞ obtém-se:

$$\phi_\infty(Pu) = \phi_3 + \frac{(\phi_3 - \phi_2)}{(r^{Pu} - 1)}$$

- Sendo a ordem aparente (*Pu*) avaliada como:

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

Erros de discretização

- Espera-se que para

$$h \to 0, \qquad Pu \to P0$$

- Tem-se, assim, que:

$$U(\phi_3, Pu) = \frac{(\phi_3 - \phi_2)}{(r^{Pu} - 1)}$$

- 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:

$$U(\phi_3, P0) = Fs \left| \frac{(\phi_3 - \phi_2)}{(r^{P0} - 1)} \right|$$

  - Ou com base na ordem aparente:

$$U(\phi_3, Pu) = Fs \left| \frac{(\phi_3 - \phi_2)}{(r^{Pu} - 1)} \right|$$

Erros de discretização

- Sendo os índices 2 e 3 referentes a malhas intermediária e fina, respectivamente, e *Fs* 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,

$$\phi = \phi_3 \pm U_{GCI}$$

Erros de discretização

- Estimador Delta:
  - Usado por Demirdzic et al. (1992), possui a seguinte forma:

$$U_{\Delta}(\phi_3) = |\phi_3 - \phi_2|$$

  - 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:

$$E(\phi_2) = C{h_2}^{PE}$$

$$E(\phi_1) = C{h_1}^{PE}$$

Erros de discretização

- Das equações anteriores, ao se isolar *PE*, obtém-se a seguinte expressão:

$$PE = \frac{\log\left[\frac{E(\phi_1)}{E(\phi_2)}\right]}{\log(r)}$$

- Assim como no caso da ordem aparente, espera-se que *PE* $\rightarrow$ *P*0 quando *h* $\rightarrow$ 0.

Erros de discretização

- Determinar, a priori, a ordem assintótica das aproximações numéricas empregadas na discretização do modelo matemático. Caso $P0$ seja desconhecida, empregar $P0$ 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 (*Pu*).
- Estimar o erro numérico, empregando-se o estimador GCI:

$$U(\phi_3, P) = Fs\left|\frac{(\phi_3 - \phi_2)}{(r^P - 1)}\right|$$

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

$$\phi = \phi_3 \pm U(\phi_3, P)$$

Erros de iteração

- O erro de iteração de uma variável de interesse é definido como a diferença entre a solução exata ($\phi_{i\to\infty}$) do sistema e a solução obtida em uma iteração *i* (ϕ_i), ou seja,

$$E(\phi_i) = \phi_{i\to\infty} - \phi_i$$

- 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 $i \rightarrow \infty$,

$$E(\phi_i) = \frac{C}{10^{i\,PL}}$$

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, $E(ø_i)$, 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:

$$U(\phi_i) = \frac{K}{10^{i\,Pu}}$$

  - 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*)

$$\phi_\infty - \phi_{i-2} = K\,10^{-(i-2)Pu}$$

$$\phi_\infty - \phi_{i-1} = K\,10^{-(i-1)Pu}$$

$$\phi_\infty - \phi_i = K\,10^{-i\,Pu}$$

Erros de iteração

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

$$\phi_\infty = \phi_i + \frac{(\phi_i - \phi_{i-1})}{(10^{Pu} - 1)}$$

$$Pu = \log\left(\frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\phi_i - \phi_{i-1}}\right)$$

Erros de iteração

- Critério de parada baseado no resíduo.
  - Considerando-se o sistema de equações a seguir:

$$[A][\lambda] = [B]$$

  - Ao se resolver o sistema acima por meio de um método iterativo, pode-se estimar o resíduo do sistema de equações através da relação:

$$R^i = B - A\,\lambda^i$$

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:

$$\frac{L^i}{L^0} \leq tol$$

- 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.