

3. VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO (V&V) EM CFD

3.1 Erros Verdadeiros (E)

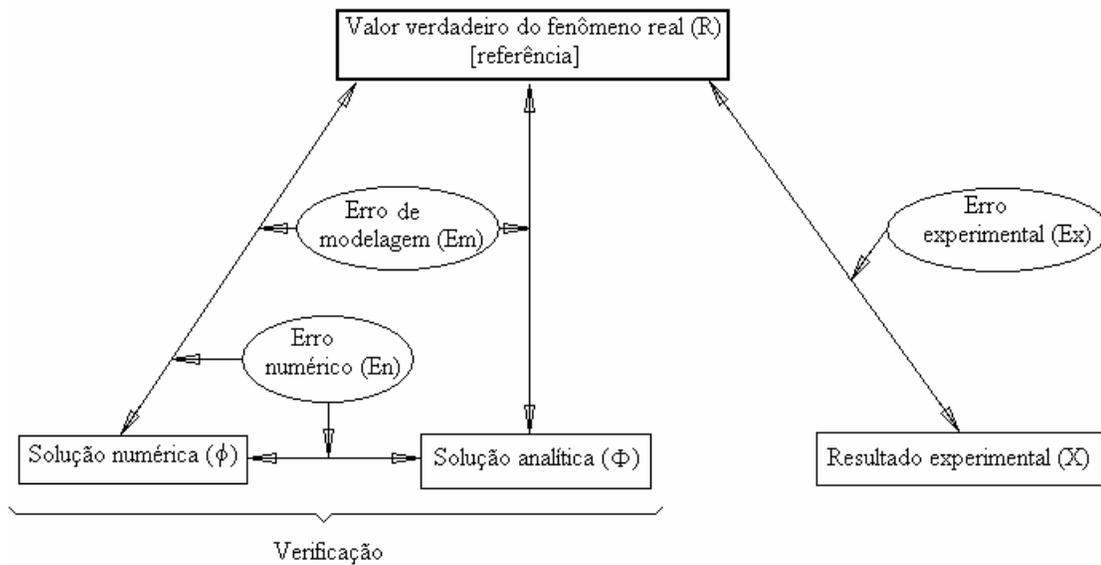


Figura 3.1: Erros verdadeiros (E) inerentes aos métodos da engenharia.

Erro experimental:

$$E_x(X) = R - X \quad (3.1)$$

O erro experimental é causado, entre outros motivos, por erros de transformação de uma grandeza em outra (por ex., termômetros: $\alpha \rightarrow T$).

Erro de modelagem:

$$E_m(\Phi) = R - \Phi \quad (3.2)$$

O erro de modelagem é causado por: (1) simplificações feitas sobre o fenômeno real para obter o modelo matemático (escoamento compressível \rightarrow incompressível, turbulento \rightarrow laminar ou invíscido, 3D \rightarrow 2D ou 1D, etc.); (2) incerteza nos dados (CC turbulentas, propriedades de sólidos e fluidos, etc.).

As soluções analíticas e numéricas sempre possuem erros de modelagem, pois ambas são obtidas a partir de um modelo matemático.

Erro numérico:

$$E_n(\phi) = \Phi - \phi \quad (3.3)$$

O erro numérico é causado por erros de: (1) discretização (E_h); (2) iteração (E_i); (3) arredondamento (E_π); (4) outros (E_o). Simbolicamente: $E_n = f(E_h, E_i, E_\pi, E_o)$. Existe apenas na solução numérica. Geralmente E_h é a principal fonte do erro numérico.

Verificação: é o processo usado para quantificar o erro numérico. Ele mede o quão bem o modelo matemático é resolvido numericamente. Não tem como objetivo o fenômeno real. É um processo puramente matemático.

3.2 Erros Estimados (U)

Na prática, R e Φ são desconhecidos, portanto E deve ser estimado (U).

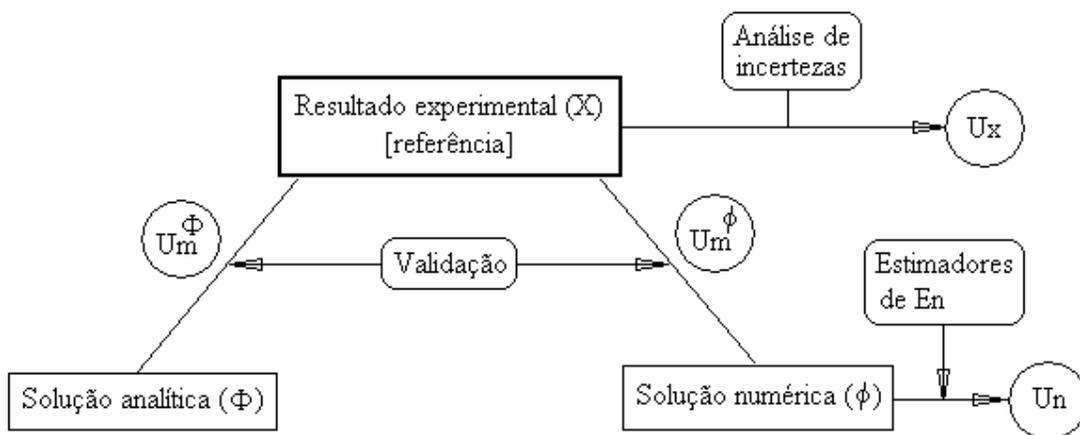


Figura 3.2: Erros estimados (U) e seus processos.

U_x : estimativa de E_x , obtida pelo processo chamado "Análise de incertezas".

U_n : estimativa de E_n , obtida através de estimadores de erros numéricos.

Estimativa do E_m da solução analítica (se for conhecida):

$$U_m^\Phi = X - \Phi \quad (3.4)$$

Estimativa do E_m da solução numérica:

$$U_m^\phi = X - \phi \quad (3.5)$$

Validação: é o processo usado para quantificar o erro de modelagem. Ele mede o quão bem o modelo matemático representa a realidade. É um processo puramente físico.

A magnitude aceitável para os erros depende:

- da finalidade (exercício acadêmico, pré-projeto, projeto, etc.);
- do tempo disponível para realizar as simulações;
- dos recursos computacionais disponíveis (memória e processador);
- dos recursos financeiros disponíveis.

Importância de se estimar erros:

- 1) Se $E >$ aceitável [50%,1%]: solução numérica sem confiabilidade (por ex., no C_L das asas de um avião, pode levar à queda do avião);
- 2) Se $E <$ necessário [0,001%,1%]: há desperdício de recursos [memória e t_{cpu} são proporcionais a $(1/E)$];
- 3) Validar ou melhorar modelos matemáticos (por ex., escoamentos turbulentos), para isto deve-se ter $E_n \ll E_m$;
- 4) Otimizar a malha pela homogeneização do erro.

A qualidade de U pode ser avaliada através da:

$$\text{- acurácia: } \frac{U}{E} \approx 1 \quad (3.6)$$

O quão próximo de 1 depende do problema; quanto mais próximo de 1, mais acurado é U .

$$\text{- confiabilidade: } \frac{U}{E} \geq 1 \quad (3.7)$$

Neste caso, U é confiável.

3.3 Erro de Discretização (E_h)

E_h é causado pelas aproximações numéricas feitas sobre o modelo matemático. Com a série de Taylor, pode-se mostrar que

$$E_h(\phi) = c_1 h^{p_L} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \dots \quad (3.8)$$

onde

h : tamanho dos volumes de controle; em 1D, malha uniforme, $h = \Delta x$;

$c_1, c_2, c_3 \dots$: coeficientes que dependem de Φ , mas independem de h ;

$p_L, p_2, p_3 \dots$: ordens verdadeiras (p_V) de E_h ; geralmente números inteiros ≥ 1 ; série aritmética: $p_L < p_2 < p_3 \dots$

p_L : ordem assintótica de E_h ; inclinação da curva no gráfico $\log|E_h|$ versus $\log(h)$ para $h \rightarrow 0$.

Se ϕ contém apenas E_h (sem E_i, E_π, E_o),

$$E_h(\phi) = E_n(\phi) = \Phi - \phi \quad (3.9)$$

Em geral, é assim que se mede E_h .

3.3.1 Estimativas *a priori*

E_h pode ser estimado *a priori*, isto é, antes de se obter a solução numérica.

Objetivo: obter p_L e p_V .

Método: série de Taylor

Utilidade: prever qual é a melhor aproximação numérica e sua eficiência na redução de E_h com a redução de h .

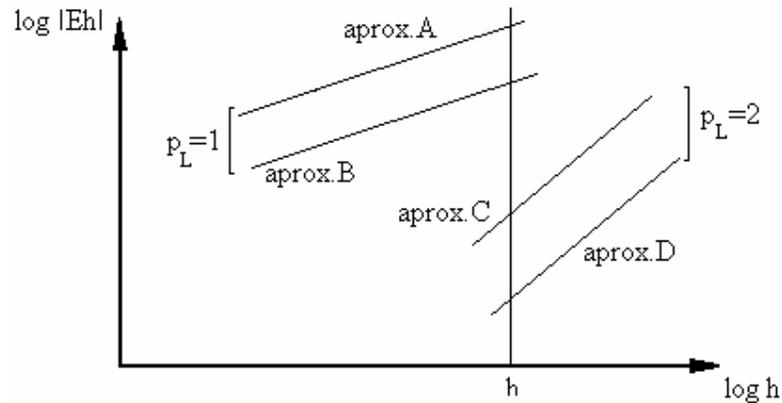


Figura 3.3: Efeito de p_L sobre E_h .

Quanto maior p_L , menor E_h para um mesmo h .

Aproximações diferentes com o mesmo p_L resultam em E_h diferentes, devido a c_1 diferentes.

Para $h \rightarrow 0$, a eq.(3.8) se reduz a

$$E_h(\phi) = c_1 h^{p_L} \quad (h \rightarrow 0) \quad (3.10)$$

Para 2 malhas diferentes ($h_1 =$ fina e $h_2 =$ grossa), cujas soluções numéricas são respectivamente ϕ_1 e ϕ_2 , tem-se

$$E_h(\phi_1) = c_1 h_1^{p_L}$$

$$E_h(\phi_2) = c_1 h_2^{p_L}$$

ou

$$\frac{E_h(\phi_1)}{E_h(\phi_2)} = \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^{p_L} = \left(\frac{1}{r}\right)^{p_L} = \frac{1}{r^{p_L}}$$

ou

$$E_h(\phi_1) = \frac{E_h(\phi_2)}{r^{p_L}} \quad (3.11)$$

onde

$$r = \left(\frac{h_2}{h_1} \right) \quad (\text{razão de refino da malha}) \quad (3.12)$$

Por exemplo, se $p_L = 2$ e $r = 2$, da eq.(3.11),

$$E_h(\phi_1) = \frac{E_h(\phi_2)}{4} \quad (h \rightarrow 0)$$

Já, se $p_L=1$ e $r=2$

$$E_h(\phi_1) = \frac{E_h(\phi_2)}{2} \quad (h \rightarrow 0)$$

3.3.2 Verificação de p_L

O valor teórico deduzido para p_L pode ser confirmado através da:

1) Ordem efetiva (p_E):

$$p_E(h_1) = \frac{\log\left(\frac{E_h(\phi_2)}{E_h(\phi_1)}\right)}{\log(r)} \quad (3.13)$$

Para calcular p_E é necessário conhecer E_h e, portanto, a solução analítica Φ .

2) Ordem aparente (p_U):

$$p_U(h_1) = \frac{\log\left(\frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2}\right)}{\log(r)} \quad (3.14)$$

onde ϕ_3 é a solução numérica obtida com a malha h_3 supergrossa, e

$$r = \left(\frac{h_2}{h_1} \right) = \left(\frac{h_3}{h_2} \right) \quad (3.15)$$

Para calcular p_U não é necessário conhecer E_h ou Φ .

p_L teórico é confirmado se p_E e/ou $p_U \rightarrow p_L$ para $h \rightarrow 0$.

3.3.3 Estimativas *a posteriori*

E_h é estimado efetivamente *a posteriori*, isto é, depois da obtenção da solução numérica.

Objetivo: calcular U_h , que representa o valor estimado de E_h .

Método: existem vários métodos; em CFD, com diferenças finitas (DF) e volumes finitos (VF), U_h é baseado em soluções numéricas obtidas em malhas diferentes (com h 's diferentes).

Estimadores: existem vários; em CFD, para DF e VF, um muito utilizado e confiável é o estimador GCI (Grid convergence index), que é baseado na extrapolação de Richardson, e é dado por

$$U_h^{\text{GCI}}(\phi_1) = F_S \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(r^p - 1)} \quad (3.16)$$

onde

$$p = \min(p_L, p_U), \text{ para } p_U > 0. \quad (3.17)$$

$$F_S = 3 \text{ (fator de segurança para confiança de 95\%).} \quad (3.18)$$

Se $p_U < 0$ ou não existe, calcula-se $U_h^{\text{GCI}}(\phi_1)$ com $p = p_L$, informando isso, ou refina-se mais a malha h_1 para tentar obter novo $p_U > 0$.

Se p_L for desconhecido, deve-se usar $p_L = 1$, por segurança.

3.3.4 Apresentação da solução numérica

Uma solução numérica deve ser apresentada da seguinte forma:

$$\phi = \phi_1 \pm U_h^{\text{GCI}}(\phi_1) \quad (3.19)$$

3.3.5 Exemplo de cálculo

Dados: $L = 1\text{m}$, $p_L = 2$, $F_S = 3$

N(VC)	$h = L/N$	índice da malha	ϕ
10	0,100	3	61,667
20	0,050	2	40,625
40	0,025	1	36,719

$$\downarrow \\ r = 2$$

$$\downarrow \\ p_U = 2,43$$

$$p = \min(2; 2,43) = 2$$

$$\text{Portanto } U_h^{\text{GCI}}(\phi_1) \cong 3,9 \quad \text{e} \quad \phi = 36,7 \pm 3,9$$

3.4 Erro de Iteração (E_i)

$$E_i(\phi) = \phi_{i \rightarrow \infty} - \phi_i \quad (3.20)$$

onde

ϕ_i : variável de interesse na iteração i

$\phi_{i \rightarrow \infty}$: variável de interesse sem E_i .

Causas de E_i :

- 1) emprego de métodos iterativos (Gauss-Seidel, por ex.) para resolver o sistema de equações $AT=B$;
- 2) problemas não-lineares, quando a matriz A depende de T ($k(T)$, por ex.);
- 3) modelos matemáticos com duas ou mais equações que são resolvidas separadamente (Navier-Stokes, por ex., c/ 3 equações para p , u e v).

Características de E_i :

- a) em geral diminui com o aumento de i ;
- b) para $i \rightarrow \infty$, $E_i \rightarrow 0$;
- c) para $i \rightarrow \infty$ e convergência monotônica,

$$E_i(\phi) = \frac{C}{10^{ip_L}} \quad (3.21)$$

onde

C : coeficiente que depende de ϕ mas independe de i ,

p_L : ordem assintótica de E_i ; inclinação da curva no gráfico $\log |E_i|$ versus i para $i \rightarrow \infty$.

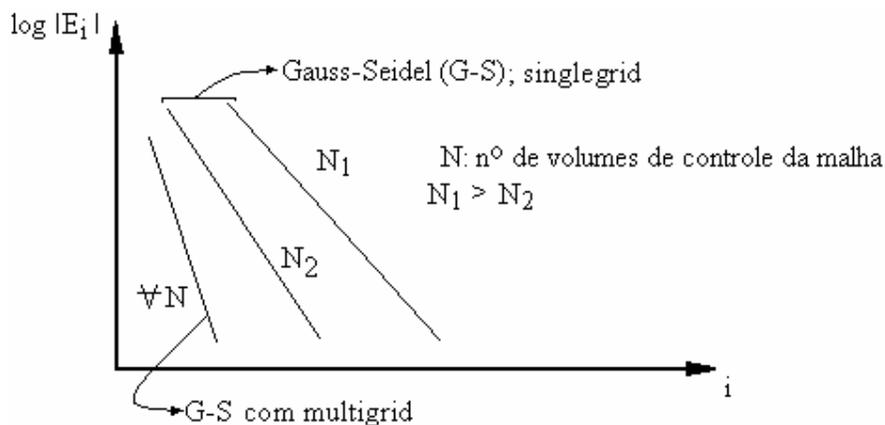


Figura 3.4: Efeito de i sobre E_i para $i \rightarrow \infty$.

Na literatura existem vários critérios de convergência, que não estimam E_i efetivamente. São procedimentos usados para interromper o processo iterativo. Se baseiam na

queda do resíduo de $AT = B$ ou na variação de $\phi_i - \phi_{i-1}$, calculados por alguma norma (L_1 , L_2 , L_∞ , etc.).

Para aplicar a eq.(3.20), deve-se conhecer a solução de ϕ sem erro de iteração (E_i). Uma alternativa é usar a solução de ϕ_i iterada até ser atingido o erro de arredondamento de máquina (E_π).

3.4.1 Procedimento recomendado

Monitorar a variação de $\Delta\phi_i = \phi_i - \phi_{i-1}$ ao longo das iterações até que ela fique constante com i , por maior que seja i , conforme a fig.3.5. Assim,

$$|E_i(\phi)| \leq |E_\pi(\phi)| \quad (3.22)$$

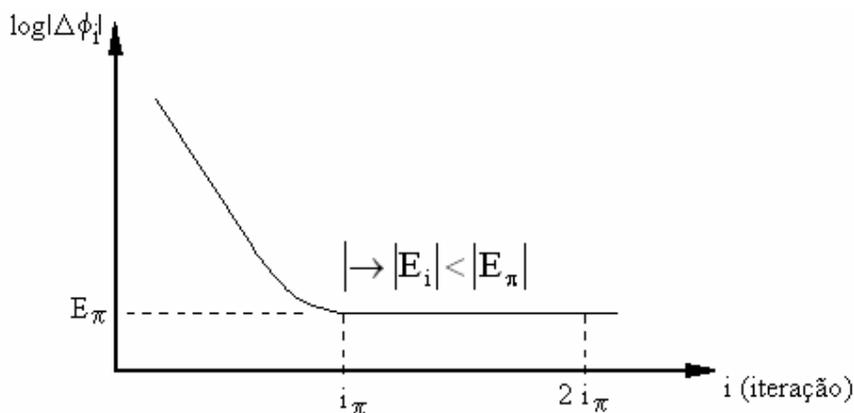


Figura 3.5: Minimização de E_i .

3.5 Erro de Arredondamento (E_π)

$$E_\pi(\phi) = \Phi - \phi \quad (3.23)$$

onde

Φ : solução analítica exata da variável de interesse
 ϕ : solução numérica apenas com E_π , sem E_h , E_i , E_o .

A causa de E_π é a representação finita dos números reais nas computações. Estes números são representados com uma certa precisão (em Fortran com 7, 15 ou 31 algarismos significativos), que depende do *software* e do *hardware*. O valor de E_π também é causado ou aumentado pelo:

- 1) Número de cálculos: quanto maior o número de nós N da malha, maior E_π .
- 2) Cancelamento subtrativo: subtração entre dois números com valores próximos; por ex., na eq.(3.16).

Modelo simples para estimar a perda de precisão máxima (Δp_{\max}) devido ao número de cálculos:

$$\Delta p_{\max} = \theta(N) \text{ a } \theta(N^2) \quad (3.24)$$

onde

$\theta(N)$: ordem de grandeza de N

Exemplo:

$$N = 100 = 10^2 \rightarrow \theta(N) = 2$$

$$N^2 = (100)^2 = 10^4 \rightarrow \theta(N^2) = 4$$

Se $\phi = 1,234567 \times 10^3$, então de 2 a 4 algarismos do lado direito de ϕ podem ter E_π .

Exemplo de cancelamento subtrativo: soluções numéricas em 2 malhas e a diferença entre elas:

$$\phi_1 = 1,234567 \times 10^3$$

$$\phi_2 = 1,234456 \times 10^3$$

$$\phi_1 - \phi_2 = 1,11 \times 10^{-1} \rightarrow \text{perda de 4 algarismos do lado esquerdo do número}$$

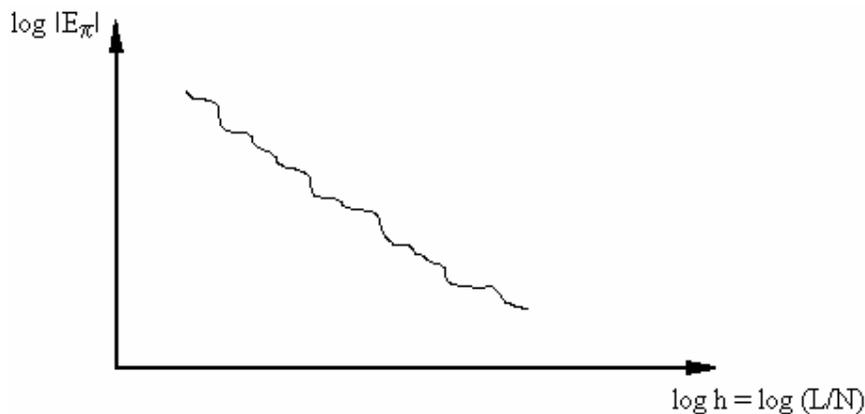


Figura 3.6: Comportamento de E_π com h e N.

3.6 Outros Erros (E_o)

São causados:

1) Pela implementação incorreta do modelo numérico no programa computacional. Exemplo: deveria ser $a = b/2$ e usa-se $a = b/3$.

2) Pelo uso incorreto de um modelo numérico na aproximação do modelo matemático. Exemplo: deveria ser CDS mas por um erro de dedução usa-se UDS; na Verificação obtém-se $p_E \rightarrow 1$ e não 2.

3) Pelo uso incorreto do programa computacional na obtenção da solução numérica. Exemplo: deveria ser o k do cobre e usa-se o da madeira.

4) Por qualquer outra eventual fonte de erro.

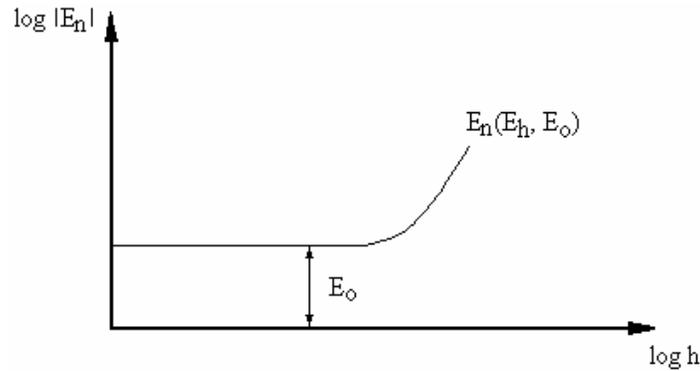


Figura 3.7: Indício de E_0 .

3.7 Método das Soluções Fabricadas

Exemplo:

Equação original:

$$\frac{d^2T}{dx^2} + x \frac{dT}{dx} + T^2 - x = 0 \quad (3.25)$$

$$\text{Solução proposta: } T = x^2 \quad (3.26)$$

$$\text{Portanto, } \frac{dT}{dx} = 2x \quad \text{e} \quad \frac{d^2T}{dx^2} = 2 \quad (3.27)$$

$$\text{Com (3.26) e (3.27) em (3.25), } 2 + x2x + (x^2)^2 - x \neq 0$$

ou $x^4 + 2x^2 + 2 - x \neq 0$, ou ainda,

$$R = \text{resíduo} = x^4 + 2x^2 + 2 - x \quad (3.28)$$

$$\text{Portanto, } \frac{d^2T}{dx^2} + x \frac{dT}{dx} + T^2 - x = R \cdot C \quad (3.29)$$

é satisfeita para (3.26)

A constante C é definida nos dados:

- Se $C = 1 \rightarrow$ a eq. (3.29) é resolvida
- Se $C = 0 \rightarrow$ a eq. (3.25) é resolvida

3.8 Composição de Erros

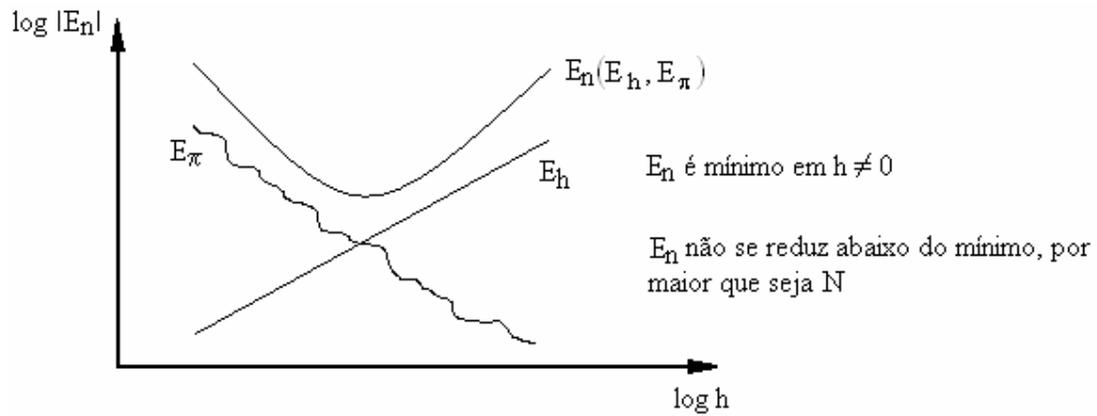


Figura 3.8: E_n causado apenas por E_h e E_π .

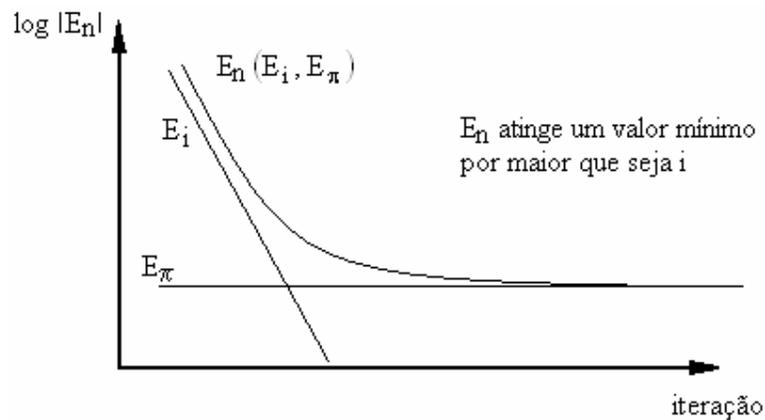


Figura 3.9: E_n causado apenas por E_i e E_π para uma malha com N volumes.

Média da norma l_1 do erro numérico:

$$\bar{l}_1(E_n) = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N |\Phi_p - \phi_p| \quad (3.30)$$