

Efeito do tipo de norma sobre a ordem de acurácia do erro de soluções numéricas em CFD

Márcio A. Martins

Depto. de Matemática, Universidade Estadual do Centro Oeste, UNICENTRO
85040-080, C.P. 3010, Guarapuava, PR; E-mail: mandre@unicentro.br

Carlos H. Marchi, Marcio A. V. Pinto, Luciano K. Araki, Simone F. T. Gonçalves

Depto. de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná, UFPR, Curitiba, PR
E-mails: marchi@ufpr.br; marcio_villela@ufpr.br; lucaraki@ufpr.br; simone.tg@ufpr.br

Luciane Grossi, Giuliano G. La Guardia

Depto. de Matemática e Estatística, Universidade Estadual de Ponta Grossa, UEPG, Ponta Grossa, PR
E-mails: lg_bombacini@yahoo.com.br; gg_la_guardia@yahoo.com.br

Resumo: Neste trabalho analisa-se o emprego de sete tipos de normas vetoriais (baseadas nas normas l_1 , l_2 e l_∞) sobre o erro de discretização em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). Constatou-se que, apesar dessas normas serem equivalentes, a ordem de acurácia resultante pode ser distinta. As deduções analíticas foram corroboradas pelos resultados numéricos. Os modelos matemáticos considerados foram: equação de advecção-difusão 1D, equação de Poisson 2D e equações de Burgers 2D. Os métodos numéricos empregados foram: Diferenças Finitas (MDF) e Volumes Finitos (MVF), com aproximações de diversas ordens (P). Verificou-se que o emprego das normas investigadas pode manter, degenerar ou aumentar P . As normas que mantêm o valor de P são: a média da norma l_1 , a norma l_2 da média dos quadrados dos erros nodais e a norma l_∞ .

Palavras-chave: erro de discretização, norma vetorial, ordem de acurácia, equação de Burgers, equação de advecção-difusão.

1 Introdução

Na literatura vigente é comum a utilização de normas vetoriais em procedimentos de verificação numérica onde se estima, basicamente, o erro numérico (E) envolvido e sua ordem de acurácia (P) [7]. A determinação de P é importante, sobretudo, nos seguintes aspectos: 1) utilização de estimadores de E , como GCI (*Grid Convergence Index*) [6] e Richardson [3]; 2) para confirmação de P teórica do modelo numérico utilizado; e 3) para a estimativa de P quando o resultado teórico é desconhecido. Ao se investigar P , para um número fixo de variáveis e intervalo de discretização, a escolha da norma a ser empregada pode acarretar diferentes resultados, e isso pode levar a interpretações equivocadas.

O objetivo deste trabalho é, então, avaliar o uso de sete tipos de normas na verificação de soluções numéricas em CFD. Mais especificamente, pretende-se mostrar que, no presente contexto (espaços vetoriais reais de dimensão finita), as normas vetoriais podem revelar diferentes P , e identificar quais são as que mantêm P teórica do modelo numérico adotado. Para tanto, são abordados alguns aspectos teóricos sobre E e normas vetoriais, e são apresentados resultados de experimentos numéricos considerando-se o emprego de malhas uniformes em domínios uni e bidimensionais (1D e 2D). Como trabalho futuro, pretende-se abordar também outros tipos de malhas.

2 Verificação numérica em CFD

O erro numérico (E) pode ser definido como a diferença entre a solução analítica (Φ) de uma variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ), entretanto ao se considerar o emprego de um método de discretização em um domínio de cálculo Ω , o erro de discretização pode ser considerado a principal fonte de E [7], e com essa perspectiva, segue a sua representação [3, 6]

$$E = \Phi - \phi = k_0 h^{p_0} + k_1 h^{p_1} + k_2 h^{p_2} + k_3 h^{p_3} + \dots, \quad (1)$$

em que os coeficientes $k_j, j = 0, 1, 2, 3, \dots$ são números reais obtidos em função da variável dependente (do problema) e de suas derivadas, mas independem de h (espaçamento entre os pontos nodais da malha Ω^h).

Por definição, as ordens verdadeiras, p_V , são os expoentes de h na Eq. (1) e, são números reais que seguem a relação: $1 \leq p_0 < p_1 < p_2 < p_3 \dots$. O menor expoente, p_0 , é denominado ordem assintótica e, muitas vezes, é tratada na literatura por ordem do erro ou ordem de acurácia e denotada por P [7]. Quando $h \rightarrow 0$, a primeira parcela da Eq. (1) é a principal componente de E , isto é, domina o seu valor total [3]; admite-se então, E de ordem $P = p_0$, para $h \rightarrow 0$ (refinamento de Ω^h), isto é,

$$E = \Phi - \phi \cong k_0 h^{p_0} = c h^P. \quad (2)$$

P pode ser calculada através das ordens efetiva (P_E) e/ou aparente (P_U). Para isso, consideram-se as soluções numéricas ϕ_F, ϕ_G , e ϕ_{SG} obtidas nas malhas fina (Ω^{h_F}), grossa (Ω^{h_G}), e supergrossa ($\Omega^{h_{SG}}$), respectivamente, geradas com razão de refino constante $r = h_G / h_F = h_{SG} / h_G$ [3]; $E(\phi_F)$ e $E(\phi_G)$ correspondem aos respectivos E de ϕ_F e ϕ_G ;

$$P_E = \frac{\log[E(\phi_G) / E(\phi_F)]}{\log(r)}, \quad \text{e} \quad P_U = \frac{\log[(\phi_G - \phi_{SG}) / (\phi_F - \phi_G)]}{\log(r)}. \quad (3)$$

Em cada ponto i de Ω^h , tem-se um E associado (E_i), entretanto, busca-se normalmente quantificar E e P inerente a todos os pontos nodais de Ω^h . Nesse caso, E é denominado erro de discretização global (E_g) [7].

Para Ω^h 1D com N pontos nodais, E_g pode ser expresso por

$$E_g = \Lambda_{i=1}^N c_i h^P \quad (4)$$

em que o operador Λ envolve todos os valores locais (nodais) (Eq. (2)) $E_i = c_i h^P, i = 1, \dots, N$.

Para Ω^h 2D, são considerados: os eixos cartesianos x e y ; $h_x = h_y = h$; $P_x = P_y = P$; as Eqs. (2) e (4), e o texto [4], de maneira que se obtém

$$E = c_x h^{P_x} + c_y h^{P_y} = c_x h^P + c_y h^P = (c_x + c_y) h^P = d_{x,y} h^P = d h^P \Rightarrow E_g = \Lambda_{i=1}^N d_i h^P, \quad (5)$$

em que $N = n_x \times n_y = n \times n = n^2$ pontos nodais de Ω^h (2D).

Usualmente Λ corresponde a uma norma vetorial. Considera-se então, E_g com as normas dadas na Tabela 1.

| Norma | $\ E\ _1$ | $\ \bar{E}\ _1$ | $\ E\ _2$ | $\ \bar{E}\ _2$ | $\ E/N\ _2$ | $\ E\ _\infty$ | $\ \bar{E}\ _\infty$ |
|-----------|----------------------|-----------------|-----------------------------|-----------------|---------------------------------|--------------------------|----------------------|
| Expressão | $\sum_{i=1}^N E_i $ | $\ E\ _1 / N$ | $\sqrt{\sum_{i=1}^N E_i^2}$ | $\ E\ _2 / N$ | $\sqrt{\sum_{i=1}^N E_i^2} / N$ | $\max_{1 < i < N} E_i $ | $\ E\ _\infty / N$ |

Tabela 1: Definição das normas para $E \in R^N$

3 Problemas-modelo

Nos problemas considerados adotou-se $\Omega = [0,1]$ (1D) no caso 1, e $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ (2D) nos casos 2 e 3 (Tabela 2).

| Caso | Equações | Solução analítica |
|----------------------------|---|--|
| (1) Advecção difusão | $Pe \frac{dT}{dx} = \frac{d^2T}{dx^2}; T(0) = 0; T(1) = 1.$ | $T(x) = \frac{e^{Pe x} - 1}{e^{Pe} - 1}.$ |
| (2) Poisson | $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = S; \begin{cases} T(0, y) = T(1, y) = 0, \\ T(x, 0) = T(x, 1) = 0. \end{cases}$ | $T(x, y) = (x^4 - x^2)(y^4 - y^2),$ S proposto em [5]. |
| (3) Burgers | $\frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right),$ $\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - S;$ $\begin{cases} u(x, 0) = u(0, y) = u(1, y) = v(x, 0) = v(0, y) = 0 \\ v(1, y) = v(x, 1) = 0, u(x, 1) = 16(x^4 - 2x^3 + x^2). \end{cases}$ | $u(x, y) = 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(4y^3 - 2y),$ $v(x, y) = -8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(y^4 - y^2),$ p e S propostos em [8]. |

Tabela 2: Definição dos Problemas-modelo

As soluções numéricas foram obtidas: no caso 1 com MVF e $P = 1, 2$ e 3 [1]; no caso 2 com MDF e $P = 2$ [5]; e no caso 3 com MVF e $P = 2$ [2].

4 Resultados e Conclusão

Em todos os esquemas numéricos adotados observou-se que, para o ponto nodal situado no centro de Ω , $P_E \cong P_U \cong P$, $h \rightarrow 0$; ou seja, há confirmação de P teórica de E local. Sobre E_g , com base nas Eqs. (4) e (5), e na Tabela 1, são considerados os próximos itens.

i) $\|E\|_1$ e $\|\bar{E}\|_1$:

para $\Omega = [0,1]$, $\|E\|_1 = \bar{c} h^{P-1} \Rightarrow \|\bar{E}\|_1 = \bar{c} h^{P-1} / N = \bar{c} h^{P-1} h = \bar{c} h^P$, em que \bar{c} é determinado com base no conceito de limite superior (maior valor de aderência), isto é, $\bar{c} = \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |c_i| < \infty$ (1D);

e para $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, $\|E\|_1 = \bar{d} h^{P-2} \Rightarrow \|\bar{E}\|_1 = \bar{d} h^{P-2} / N = \bar{d} h^{P-2} h^2 = \bar{d} h^P$, onde

$$\bar{d} = \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |d_i| < \infty \quad (2D).$$

ii) $\|E\|_\infty$ e $\|\bar{E}\|_\infty$:

para $\Omega = [0,1]$, $\|E\|_\infty = c^* h^P \Rightarrow \|\bar{E}\|_\infty = \|E\|_\infty / N = c^* h^P h = c^* h^{P+1}$, com $c^* = \lim_{N \rightarrow \infty} (\max_{1 \leq i \leq N} |c_i|) < \infty$ (1D);

e para $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, $\|E\|_\infty = d^* h^P \Rightarrow \|\bar{E}\|_\infty = \|E\|_\infty / N = d^* h^P h^2 = d^* h^{P+2}$, em que

$$d^* = \lim_{N \rightarrow \infty} (\max_{1 \leq i \leq N} |d_i|) < \infty \quad (2D).$$

iii) $\|E/N\|_2$, $\|E\|_2$ e $\|\bar{E}\|_2$:

para $\Omega = [0,1]$, $\|E/N\|_2 = \sqrt{\hat{c}} h^P$, $\|E\|_2 = \sqrt{\hat{c}} h^{P-1/2}$, $\Rightarrow \|\bar{E}\|_2 = \sqrt{\hat{c}} h^{P+1/2}$, em que

$$\hat{c} = \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^2 < \infty \quad (1D);$$

e para $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, $\|E/N\|_2 = \sqrt{\hat{d}} h^P$, $\|E\|_2 = \sqrt{\hat{d}} h^{P-1}$, $\|\bar{E}\|_2 = \sqrt{\hat{d}} h^{P+1}$, com

$$\hat{d} = \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_i^2 < \infty \quad (2D).$$

Os resultados numéricos obtidos corroboram essas deduções analíticas, e indicam que $\|\bar{E}\|_1$, $\|E\|_\infty$ e $\|E/N\|_2$, mantêm P teórica do modelo numérico adotado. Como ilustração, na Tabela 3, consideram-se $\|\bar{E}\|_1$ (mantém P) e $\|E\|_2$ (degenera P) sobre os casos 2 e 3; e na Figura 1, consideram-se $\|E/N\|_2$ (mantém P) e $\|E\|_\infty$ (eleva P) sobre o caso 1 com $P = 1, 2$ e 3.

| Ω^h $n \times n$ | Ordem de $\ \bar{E}\ _1$ | | | | Ordem de $\ E\ _2$ | | | |
|----------------------------|--------------------------|--------|--------|--------|--------------------|--------|--------|--------|
| | Caso 2 | | Caso 3 | | Caso 2 | | Caso 3 | |
| | P_E | P_U | P_E | P_U | P_E | P_U | P_E | P_U |
| 4×4 | -- | -- | -- | -- | -- | -- | -- | -- |
| 8×8 | 1,8535 | -- | 2,7044 | -- | 0,9305 | -- | 1,7146 | -- |
| 16×16 | 1,9653 | 1,8129 | 1,6771 | 3,0051 | 1,0000 | 0,9860 | 0,7516 | 2,4906 |
| 32×32 | 1,9914 | 1,9564 | 1,6527 | 1,6883 | 1,0001 | 1,0000 | 0,7091 | 0,8159 |
| 64×64 | 1,9978 | 1,9893 | 1,8462 | 1,5706 | 1,0000 | 1,0002 | 0,8498 | 0,5121 |
| 128×128 | 1,9994 | 1,9973 | 1,9285 | 1,8157 | 1,0000 | 1,0000 | 0,9264 | 0,7596 |
| 256×256 | 1,9998 | 1,9993 | 1,9655 | 1,9156 | 1,0000 | 1,0000 | 0,9639 | 0,8860 |
| 512×512 | 1,9999 | 1,9998 | 1,9830 | 1,9595 | 1,0000 | 1,0000 | 0,9821 | 0,9449 |
| 1024×1024 | 1,9999 | 1,9999 | 1,9916 | 1,9801 | 1,0000 | 1,0000 | 0,9911 | 0,9730 |
| 2048×2048 | 1,9999 | 1,9999 | 1,9958 | 1,9902 | 1,0000 | 1,0000 | 0,9955 | 0,9866 |

Tabela 3: Ordens práticas para a resolução numérica dos casos 2 e 3 (Tabela 2), com $P = 2$

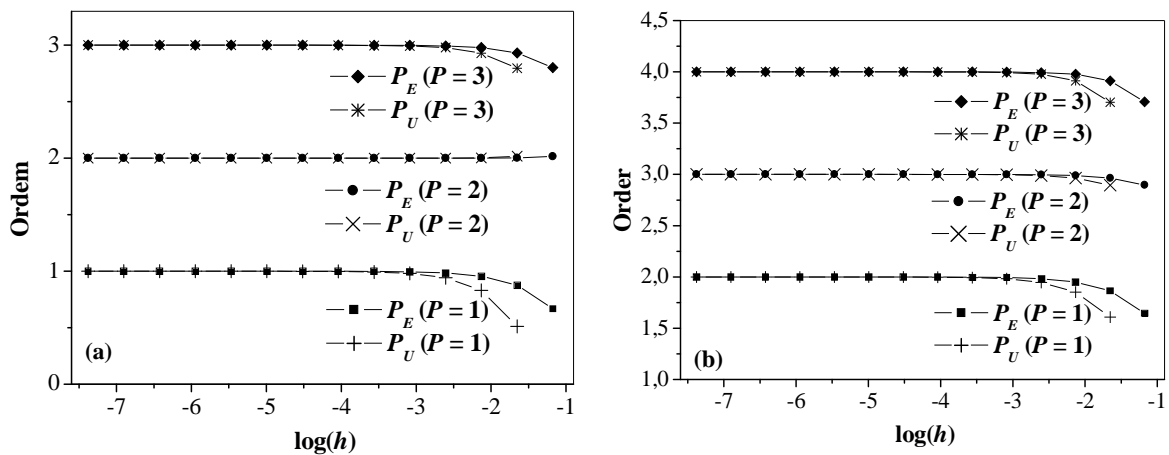


Figura 1: Ordens práticas de (a) $\|E/N\|_2$ e (b) $\|E\|_\infty$ na resolução numérica do caso 1

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. O segundo autor é bolsista do CNPq.

Referências

- [1] E. M. Germer, “Verificação de funções de interpolação em advecção-difusão 1D com Volumes Finitos”, Dissertação de Mestrado, PGMEC-UFPR, Curitiba, 2009.
- [2] S. F. T. Gonçalves, “Estudo de parâmetros do método multigrid geométrico para equações 2D e volumes finitos”, Tese de doutorado, PGMEC-UFPR, Curitiba, 2013.
- [3] C. H. Marchi, A. F. C. Silva, Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order, Num. Heat Transfer, Part. B, vol. 42, pp. 167-188, (2002).
- [4] C. H. Marchi, A. F. C. Silva, Multi-dimensional discretization error estimation for convergent apparent order, Journal of the Brazilian Soc. of Mech. Sc. and Eng., vol. 27, pp. 432-439, (2005).
- [5] F. Oliveira, “Efeito de malhas anisotrópicas bidimensionais sobre o desempenho do método multigrid geométrico”, Tese de doutorado, PGMEC-UFPR, Curitiba, 2010.
- [6] P. J. Roache, “Verification and validation in computational science and engineering”, Hermosa, Albuquerque, 1998.
- [7] 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).
- [8] T. M. Shih, C. H. Tan, B. C. Hwang, Effects of grid staggering on numerical scheme, International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 9, pp. 193-212, (1989).