PROTOCOLO PARA ESTIMAR ERROS DE DISCRETIZAÇÃO EM CFD: VERSÃO 1.1

Carlos Henrique Marchi

Curitiba, UFPR, setembro de 2005.

O objetivo deste protocolo é padronizar o processo de Verificação de soluções numéricas em Dinâmica dos Fluidos Computacional no âmbito do grupo de pesquisa em CFD da UFPR.

Este protocolo aplica-se a:

(a) Problemas unidimensionais com malhas de qualquer tipo que sejam refinadas de modo uniforme
(b) Problemas multidimensionais com malhas de qualquer tipo que sejam refinadas de modo uniforme e com refino simultâneo em todas as dimensões
(c) Problemas com ou sem solução analítica

Este protocolo estabelece roteiro para:

1) Definir um problema em consideração
2) Apresentar a solução analítica
3) Definir o modelo numérico
4) Identificar as simulações numéricas
5) Apresentar a solução numérica em cada malha
6) Calcular ordens práticas da solução numérica
7) Estimar o erro de discretização da solução numérica
8) Apresentar a solução numérica com o seu erro estimado

Todos os valores apresentados devem ter o número de algarismos compatível com a fonte (referência), incerteza, precisão e tolerância. No caso de resultados numéricos obtidos com precisão dupla, por exemplo, o número máximo de algarismos é 16; mas, em geral, devido aos erros de máquina (arredondamento), ele é menor. A precisão de resultados analíticos deve ser maior ou igual aos numéricos.

1. DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

O problema deve ser definido de forma completa para que outros possam obter os mesmos resultados. Esta definição deve se restringir apenas à parte matemática do problema, ou seja, à definição do modelo matemático do problema. Nenhuma menção deve ser feita sobre a parte numérica.

1) Apresentar texto definindo o problema
2) Apresentar texto definindo cada uma das variáveis de interesse e o símbolo que a representa
3) Apresentar texto definindo os meios sólidos e fluidos envolvidos
4) Apresentar todas as hipóteses simplificativas consideradas para se chegar ao modelo matemático de cada variável de interesse
5) Apresentar o modelo matemático de cada uma das variáveis de interesse, incluindo equações, condições de contorno e condições iniciais, e equações para todas as outras variáveis ou parâmetros envolvidos
6) Apresentar a geometria do domínio de cálculo, incluindo figura, sistema de coordenadas e dimensões relevantes
7) Apresentar numa única tabela o valor de todos os dados fixos do problema, isto é, dados que não são função de parâmetros variáveis, como o número de Reynolds
8) Apresentar numa única tabela, o nome dos casos do problema e o valor de todos os parâmetros variáveis que distinguem cada caso; por exemplo: caso 1, número de Reynolds = 1; e caso 2, número de Reynolds = 10
9) Definir todos os símbolos pertinentes
10) Citar as fontes usadas para extrair as equações e os dados

2. SOLUÇÃO ANALÍTICA

Para cada variável de interesse:

1) Descrever os métodos analíticos usados para obter a solução analítica
2) Apresentar equações com a solução analítica conhecida
3) Apresentar numa única tabela o valor da solução analítica para todos os casos do problema
4) Informar sobre como foi obtido o valor da solução analítica, incluindo: *software* usado, sua versão e data, linguagem, precisão dos cálculos, dados do *hardware* empregado etc
5) Definir todos os símbolos pertinentes
6) Citar as fontes usadas para extrair a solução analítica

3. DEFINIÇÃO DO MODELO NUMÉRICO

Deve-se definir o modelo numérico empregado na obtenção da solução numérica de cada variável de interesse. Isto é, devem ser definidos todos os métodos, esquemas e procedimentos específicos usados para resolver numericamente cada variável de interesse. A descrição do modelo numérico deve ser suficientemente completa para que outros possam obter os mesmos resultados numéricos.

1) Informar o tipo de método numérico usado
2) Descrever o tipo de malha usado e incluir figuras para ilustrar
3) Informar os tipos de aproximações numéricas usados
4) Listar todas as hipóteses simplificativas consideradas para se chegar às equações discretizadas de cada variável de interesse
5) Apresentar as expressões dos coeficientes e termos fontes dos sistemas de equações discretizados e todas as outras expressões envolvidas em seus cálculos
6) Apresentar todas as expressões envolvidas na solução numérica das variáveis de interesse
7) Apresentar numa única tabela o valor previsto para a ordem assintótica (p_L) de todas as variáveis de interesse, justificando seu valor
8) Descrever o método de solução das equações (*solver*) empregado
9) Informar as variáveis e o critério de convergência usados para monitorar o processo iterativo e apresentar suas equações associadas. Deve-se levar o processo iterativo até atingir o erro de máquina, no caso do objetivo do estudo envolver erros de discretização. Se o objetivo estiver relacionado a erros de iteração, uma tolerância adequada deve ser usada.
10) Apresentar o algoritmo do programa computacional
11) Informar o nome do programa computacional implementado ou usado (e o nome do fabricante), número da versão e data de geração, tipo de projeto, tipo de versão (debug ou release) etc
12) Informar se o programa computacional (próprio ou não) empregado está disponível. Se sim, informar o site e o que está disponível (programa executável, fontes, arquivos de dados, de resultados etc)
13) Descrever a linguagem de programação, precisão (deve-se usar no mínimo, precisão dupla) e compilador (nome e versão) usados
14) Descrever o *hardware* empregado
15) Apresentar numa única tabela o valor de todos os dados numéricos fixos do problema envolvidos na obtenção das soluções numéricas, isto é, dados que não são função do número de

elementos ou de volumes de controle ou de parâmetros variáveis do problema, como o número de Reynolds

16) Descrever a forma de obtenção da memória computacional de cada simulação
17) Descrever a forma de obtenção do tempo de processamento, a que parte do algoritmo ele corresponde e qual a sua incerteza
18) Definir todos os símbolos usados no modelo numérico
19) Citar as fontes usadas no modelo numérico

4. IDENTIFICAÇÃO DAS SIMULAÇÕES

Para cada caso do problema, apresentar numa única tabela as seguintes informações mínimas que caracterizam cada simulação realizada:

1) Nome da simulação
2) Data da simulação
3) Número de elementos ou volumes de controle em cada dimensão espacial
4) Para problemas transientes, número de avanços no tempo
5) Valor de parâmetros variáveis que definem cada caso do problema, como o número de Reynolds, e de parâmetros numéricos que distinguem soluções numéricas de um mesmo caso, por exemplo: solução 1 obtida com o esquema UDS; e solução 2 obtida com o esquema CDS
6) Valor do passo de tempo ou de coeficientes de relaxação
7) Memória computacional
8) Número total de iterações externas
9) Tempo de processamento
10) Valor da métrica (h) que representa cada malha

No título desta tabela, deve ser informado o nome do caso do problema.

Para cada caso do problema, cada simulação é caracterizada por um conjunto único de dados nos 10 itens da tabela acima.

A métrica (h) que representa cada malha pode ser obtida através de

$$h = \left(\frac{D}{N}\right)^{\frac{1}{d}} \qquad (1)$$

onde D representa o valor do domínio discreto de cálculo do problema (ele corresponde ao comprimento, à área ou ao volume discreto do domínio de cálculo respectivamente para problemas uni, bi ou tridimensionais); d representa a dimensão do problema (ele vale 1, 2 ou 3 respectivamente para problemas uni, bi ou tridimensionais); e N é o número total de elementos ou volumes de controle reais que discretizam o domínio espacial de cálculo.

Todos os arquivos de dados, de resultados e outros secundários, envolvidos em cada simulação, devem ser guardados para eventual análise e divulgação posterior. Seus nomes devem estar associados ao nome do problema, do caso e da simulação.

5. SOLUÇÃO NUMÉRICA

Para cada caso e variável de interesse do problema, apresentar numa única tabela as seguintes informações mínimas:

1) Nome da simulação
2) Valor da métrica (h) que representa cada malha
3) Valor da solução numérica (ϕ)
4) Número de algarismos significativos sem erro de máquina
5) Número aproximado de iterações externas que foi necessário para atingir o erro de máquina
6) Valor do erro numérico verdadeiro (E) da solução numérica

No título desta tabela, devem ser informados o nome do caso do problema, o nome da variável de interesse e o valor da solução analítica exata (Φ) da variável de interesse.

O erro numérico verdadeiro (E) é a diferença entre a solução analítica exata (Φ) da variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ), isto é,

$$E(\phi) = \Phi - \phi \tag{2}$$

Considerando que o processo iterativo tenha sido levado até o nível do erro de máquina, que este seja muito pequeno e que não existam erros de programação, o erro numérico verdadeiro (E), definido na Eq. (2), também pode ser denominado de erro de discretização. A partir daqui, isso é considerado.

6. ORDENS PRÁTICAS DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

Objetivo: verificar se a ordem efetiva (no caso da solução analítica ser conhecida) e a ordem aparente tendem ao valor da ordem assintótica (p_L) (valor teórico) à medida que a malha é refinada.

Para cada caso e variável de interesse do problema, apresentar numa única tabela as seguintes informações mínimas:

1) Nome da simulação

2) Valor da métrica (h) que representa cada malha

3) Valor da razão de refino (r_{21}) entre a malha fina atual e a grossa anterior

4) Valor da ordem efetiva (p_E)

5) Valor da ordem aparente (p_U)

No título desta tabela, devem ser informados o nome do caso do problema, o nome da variável de interesse e o valor da ordem assintótica (p_L) da variável de interesse.

A razão de refino (r_{21}) entre uma malha fina (h_1) e uma malha grossa (h_2) é definida por

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1} \qquad (3)$$

Recomenda-se usar r_{21} = 2 ou aproximadamente 2.

A ordem efetiva (p_E) do erro verdadeiro na malha h_1 (fina) é definida por

$$p_E(h_1) = \frac{\log\left[\frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)}\right]}{\log(r_{21})} \qquad (4)$$

onde $E(\phi_1)$ e $E(\phi_2)$ representam o erro verdadeiro das soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2, obtidas respectivamente com duas malhas diferentes, h_1 = fina e h_2 = grossa.

A ordem aparente (p_U) do erro estimado na malha h_1 (fina) é definida por

$$p_U(h_1) = \frac{\log\left[\psi_U \frac{(r_{21}^{p_U} - 1)}{(r_{32}^{p_U} - 1)}\right]}{\log(r_{21})} \qquad \text{(para } r \text{ variável: } r_{21} \neq r_{32}) \qquad (5)$$

onde ψ_U é a razão de convergência da solução numérica para a solução analítica, definida por

$$\psi_U = \frac{(\phi_2 - \phi_3)}{(\phi_1 - \phi_2)} \qquad (6)$$

e ϕ_1, ϕ_2 e ϕ_3 representam as soluções numéricas obtidas respectivamente com três malhas diferentes, h_1 = fina, h_2 = grossa e h_3 = supergrossa; r_{32} é a razão de refino (r) entre as malhas supergrossa (h_3) e grossa (h_2), definido por

$$r_{32} = \frac{h_3}{h_2} \tag{7}$$

No caso particular da razão de refino de malha (r) ser constante, isto é, $r_{21} = r_{32}$, tem-se

$$p_U(h_1) = \frac{\log(\psi_U)}{\log(r)} \qquad \text{(para } r \text{ constante)} \tag{8}$$

Na tabela acima, se o argumento do logaritmo nas Eqs. (4), (5) ou (8) for negativo ou zero, deve-se indicar que a ordem é indefinida, isto é, não existe.

No caso de r variável, deve-se informar a técnica numérica usada para resolver a Eq. (5) e os valores dos parâmetros envolvidos: número de iterações, tolerância etc.

Para cada caso e variável de interesse, apresentar numa única figura o valor da ordem assintótica (p_L), ordem efetiva (p_E) e ordem aparente (p_U) em função do logaritmo decimal da métrica (h) que representa cada malha. Nos casos em que o argumento do logaritmo é negativo ou zero, a ordem é indefinida; assim, deve-se usar por convenção o valor zero para representar o valor da ordem na figura; na legenda ou no texto sobre esta figura, deve-se informar esta convenção. No título desta figura, devem ser informados os nomes do caso do problema e da variável de interesse.

7. ESTIMATIVA DO ERRO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

Objetivos: (a) estimar o erro da solução numérica; e, no caso da solução analítica ser conhecida, (b) avaliar a acurácia e a confiabilidade do erro estimado.

Se a solução analítica for conhecida, para cada caso e variável de interesse, apresentar numa única tabela as seguintes informações mínimas:

1) Nome da simulação
2) Valor da métrica (h) que representa cada malha
3) Erro verdadeiro (E) da solução numérica
4) Razão entre $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)$ e E
5) Razão entre $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_U)$ e E
6) Razão entre $U_{GCI}(\phi_1,p)$ e E

No título desta tabela, devem ser informados os nomes do caso do problema e da variável de interesse. Quando a ordem aparente (p_U) é indefinida ou negativa, deve-se indicar nesta tabela que o erro estimado (U) pertinente não se aplica.

$U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)$ representa o erro estimado da solução numérica (ϕ_1) na malha fina (h_1) com base no estimador de Richardson e na ordem assintótica (p_L), dado por

$$U_{Ri}(\phi_1,p_L) = \frac{(\phi_1-\phi_2)}{(r_{21}^{p_L}-1)} \tag{9}$$

$U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_U)$ representa o erro estimado da solução numérica (ϕ_1) na malha fina (h_1) com base no estimador de Richardson e na ordem aparente (p_U), dado por

$$U_{Ri}(\phi_1,p_U) = \frac{(\phi_1-\phi_2)}{(r_{21}^{p_U}-1)} \tag{10}$$

Esta Eq. (10) só se aplica quando $p_U > 0$.

$U_{GCI}(\phi_1,p)$ representa o erro estimado da solução numérica (ϕ_1) na malha fina (h_1) com base no estimador *GCI* e na ordem p, dado por

$$U_{GCI}(\phi_1,p) = 3\frac{|\phi_1-\phi_2|}{(r_{21}^{p}-1)} \tag{11}$$

onde p é o menor valor entre p_U e p_L, desde que $p_U > 0$. Se $p_U < 0$, a Eq. (11) não se aplica.

Se a solução analítica for conhecida, para cada caso e variável de interesse, apresentar numa única figura as razões $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)/E$, $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_U)/E$ e $U_{GCI}(\phi_1,p)/E$ em função do logaritmo decimal da métrica (h) que representa cada malha. Quando a ordem aparente (p_U) é indefinida ou negativa, deve-se usar por convenção o valor zero para representar nesta figura a razão U/E pertinente; na legenda ou no texto sobre esta figura, deve-se informar esta convenção. No título desta figura, devem ser informados os nomes do caso do problema e da variável de interesse.

Se a solução analítica for conhecida, o desempenho da estimativa do erro pode ser avaliado através da sua acurácia e da sua confiabilidade, definidas por

$$\frac{U}{E} \approx 1 \qquad \text{(Acurácia)} \tag{12}$$

$$\frac{U}{E} \geq 1 \qquad \text{(Confiabilidade)} \tag{13}$$

onde quanto mais próximo da unidade estiver a razão U/E, mais acurada é a estimativa do erro; e se a razão $U/E \geq 1$, a estimativa do erro é confiável.

Se a solução analítica não for conhecida, para cada caso e variável de interesse, apresentar numa única tabela as seguintes informações mínimas:

1) Nome da simulação
2) Valor da métrica (h) que representa cada malha
3) Valor de $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)$
4) Razão entre $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_U)$ e $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)$
5) Razão entre $U_{GCI}(\phi_1,p)$ e $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)$

No título desta tabela, devem ser informados os nomes do caso do problema e da variável de interesse. Quando a ordem aparente (p_U) é indefinida ou negativa, deve-se indicar nesta tabela que o erro estimado (U) pertinente não se aplica.

Se a solução analítica não for conhecida, para cada caso e variável de interesse, apresentar numa única figura as razões $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_U)/U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)$ e $U_{GCI}(\phi_1,p)/U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)$ em função do logaritmo decimal da métrica (h) que representa cada malha. Quando a ordem aparente (p_U) é indefinida ou negativa, deve-se usar por convenção o valor zero para representar nesta figura a razão U/U pertinente; na legenda ou no texto sobre esta figura, deve-se informar esta convenção. No título desta figura, devem ser informados os nomes do caso do problema e da variável de interesse.

Com a solução analítica conhecida ou não, para cada caso e variável de interesse, apresentar numa única figura o logaritmo decimal do módulo de E, $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_L)$, $U_{\mathrm{Ri}}(\phi_1,p_U)$ e $U_{GCI}(\phi_1,p)$ em função do logaritmo decimal da métrica (h) que representa cada malha. Quando a ordem aparente (p_U) é indefinida ou negativa, deve-se usar por convenção o valor unitário para representar nesta figura o erro estimado (U) pertinente; na legenda ou no texto sobre esta figura, deve-se informar esta convenção. No título desta figura, devem ser informados os nomes do caso do problema e da variável de interesse.

8. APRESENTAÇÃO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA COM O SEU ERRO ESTIMADO

O resultado final da solução numérica de cada variável de interesse (ϕ) e do seu erro estimado, $U_{GCI}(\phi_1,p)$, deve ser apresentado através de

$$\phi \quad = \quad \phi_1 \quad \pm \quad U_{GCI}(\phi_1, p) \tag{14}$$

onde ϕ_1 representa a solução numérica obtida com a malha mais fina.