

CONDIÇÕES SUFICIENTES PARA ESTIMAR COM ACURÁCIA E CONFIABILIDADE ERROS DE DISCRETIZAÇÃO EM CFD

Carlos Henrique Marchi* e Antônio Fábio Carvalho da Silva†

* Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal do Paraná
Caixa postal 19040 – CEP 81531-990 – Curitiba, PR, Brasil
e-mail: marchi@cce.ufpr.br,
web page: <http://www.demec.ufpr.br/departamento/professores/marchi.htm>

† Departamento de Engenharia Mecânica
Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor - SINMEC
Universidade Federal de Santa Catarina
Caixa postal 476 – CEP 88040-970 – Florianópolis, SC, Brasil
e-mail: fabio@sinmec.ufsc.br

Palavras-chave: Erros numéricos, incerteza numérica, extrapolação de Richardson, simulação numérica, escoamentos de fluidos.

Resumo. *Os erros de discretização espacial são investigados neste trabalho baseando-se em mais de 300 experimentos numéricos efetuados com dois problemas unidimensionais: equação de advecção-difusão e escoamento de fluidos compressíveis. Estes experimentos envolveram razões de refino de malha constantes (2, 3 e 4) e variável (1.06 a 10), quatro funções de interpolação, e tamanho dos volumes de controle (h) entre 1.0×10^{-6} e 5.0×10^{-1} . As soluções numéricas são obtidas usando-se o método dos volumes finitos. Para o estimador de Richardson, avaliam-se a confiabilidade, a acurácia, a forma adequada de usá-lo e as suas limitações na obtenção de estimativas do erro de discretização de soluções numéricas. As análises realizadas são aplicáveis a soluções numéricas extrapoladas ou não, de variáveis de campo e secundárias (locais e globais). As principais conclusões do trabalho são: estimativas confiáveis do erro de discretização das soluções numéricas dependem do comportamento da ordem de convergência espacial aparente (p_a) em função do tamanho característico de malha (h) e do valor de p_a quando h tende a zero (p_∞); a acurácia da estimativa do erro de discretização depende da diferença entre os valores de p_a e p_∞ ; e, a extrapolação de Richardson só é aplicável, coerentemente, para valores positivos da ordem de convergência espacial.*

1 INTRODUÇÃO

As soluções numéricas de qualquer variável de interesse (Φ_h), obtidas em malhas com dois ou três tamanhos de volumes de controle (h) diferentes, não permitem realizar estimativas confiáveis do erro de discretização, mesmo que os valores de Φ_h , aparentemente, apresentem tendência de convergência, conforme será mostrado neste trabalho.

Por exemplo, os resultados numéricos Φ_h da equação de advecção-difusão unidimensional, para um valor específico da variável independente, são 26.00, 15.65 e 14.92, obtidos, respectivamente, em malhas com dimensão característica h igual a 0.5, 0.25 e 0.125. Para as malhas com os dois h maiores, calculando-se a incerteza da solução numérica através do estimador GCI^1 , obtém-se $GCI/erro = 0.37$, ou seja, o valor do erro exato é cerca de 3 vezes o valor da incerteza. Portanto, a incerteza da solução numérica dada pelo GCI subestima o valor do erro exato. Já as soluções obtidas com os dois h menores parecem indicar que há convergência na solução, no entanto, obtém-se $GCI/erro = 0.026$, isto é, o erro exato é aproximadamente 38 vezes o valor da incerteza. Neste caso, o GCI subestima, relativamente, ainda mais o erro exato. Portanto, ao refinar a malha, aparentemente há convergência se considerados os valores de Φ_h mas a incerteza piora, e muito. Além disso, a própria tendência aparente de convergência pode ser errônea, conforme o exemplo acima: os valores de Φ_h diminuem com o refinamento da malha mas deveriam aumentar (isto de fato ocorre para $h < 0.1$), já que o valor da solução analítica é 100.

Como o exemplo acima mostra, há necessidade de maior entendimento dos erros de discretização mesmo em problemas unidimensionais e, conseqüentemente, dos estimadores de erro empregados atualmente. Sendo assim, optou-se neste trabalho em usar modelos matemáticos unidimensionais, evitando, com isso, diversas dificuldades enfrentadas por outros pesquisadores pois, em geral, seus estudos para desenvolver ou avaliar estimadores de erro são realizados com problemas muito complexos² que apresentam vários tipos de erros simultaneamente. Isso dificulta as análises pois os erros podem ter sinais diferentes. Além disso, comumente, estes problemas bi ou tridimensionais não permitem efetuar refinamentos de malha muito grandes devido às restrições de memória e tempo de computação. Nestes problemas, os erros iterativos colaboram ainda mais para dificultar as análises.

O presente trabalho envolve o processo de Verificação³, isto é, a análise da qualidade da solução numérica de um modelo matemático. Os tipos de erros que podem existir numa solução numérica podem ser classificados em⁴: erros de discretização, erros de iteração, erros de arredondamento e enganos. Os erros de discretização (E_h) representam a diferença entre a solução analítica exata do modelo matemático e a solução numérica exata das equações discretizadas, sem qualquer outro tipo de erro nestas soluções. Os erros de iteração (E_n) representam a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração, numa mesma malha, sem erros de arredondamento e enganos nestas soluções. Os erros de arredondamento (E_π) são os erros que ocorrem em virtude da representação finita dos números reais nas computações. E os enganos são erros cometidos

por negligência e ignorância, por exemplo, na discretização do modelo matemático, e na implementação e uso do código computacional.

Obtido o resultado numérico de uma variável de interesse sobre uma malha específica, a idéia básica dos estimadores de erro é calcular um valor estimado para a solução exata do problema, isto é, sem erro de discretização; a diferença entre o valor estimado para a solução exata e o resultado numérico obtido representa a incerteza deste. No presente trabalho, considera-se incerteza sinônimo de erro estimado. As expressões erro e erro exato, representadas por E , são usadas apenas quando se conhece a solução analítica exata da variável de interesse; já as expressões incerteza e erro estimado, representadas por U , são usadas em associação a uma estimativa da solução analítica exata. Existem diversos estimadores de erro disponíveis na literatura. Neste trabalho, optou-se pela utilização do estimador de Richardson^{5,6,1,7}, representado aqui por U_{Ri} , e que se baseia na diferença entre as soluções numéricas obtidas em malhas diferentes, na razão de refino entre estas malhas e na ordem de convergência espacial (p). Esta ordem pode ser⁸ teórica (p_t), cujo valor depende da função de interpolação adotada na discretização do modelo matemático, ou pode ser a ordem aparente (p_a), que é função dos valores das próprias soluções numéricas obtidas em pelo menos três malhas diferentes⁹.

Recomenda-se¹⁰ usar o estimador de Richardson somente quando $p_a \approx p_t$. No entanto, o que se observa em geral é a obtenção de valores de p_a diferentes, e muito, dos valores de p_t . Por exemplo²: p_a entre 0.012 e 8.8, além de valores negativos e indefinidos, para p_t entre 1 e 2. Não se tem dado muita atenção sobre as implicações destas diferenças entre os valores de p_a e p_t . Neste trabalho é mostrado que o valor de p_a e seu comportamento em função de h são essenciais para estimar com acurácia e confiabilidade os erros de discretização. Também é mostrado que obter valor de ordem aparente aproximadamente ou mesmo igual à ordem teórica nem sempre significa que estimativas de erro baseadas na extrapolação de Richardson são confiáveis ou acuradas.

O **objetivo** do presente trabalho é definir as condições suficientes para estimar erros de discretização com acurácia e confiabilidade. Estes dois termos são assim definidos: uma **estimativa de erro é acurada** quando a razão entre incerteza (U) e erro exato (E) é aproximadamente igual à unidade; enquanto que, uma **estimativa de erro é confiável** quando a razão entre incerteza (U) e erro exato (E) é maior ou igual à unidade. Portanto, o estimador de erro ideal é aquele cujo valor do erro estimado (U) é igual ao erro exato (E), quaisquer que sejam as condições. Evidentemente, estas duas definições só podem ser empregadas se for conhecida a solução analítica exata da variável de interesse.

O presente trabalho é desenvolvido considerando: (1) método dos volumes finitos¹¹; (2) problemas unidimensionais em regime permanente com uma e quatro variáveis dependentes; (3) os níveis dos erros de arredondamento e de iteração são muito pequenos em relação aos erros de discretização; (4) malhas uniformes, isto é, o tamanho dos volumes de controle (h) é constante numa mesma malha; (5) estimativas de erro *a posteriori* da obtenção das soluções numéricas, e que podem ser aplicadas a variáveis dependentes ou a quaisquer variáveis secundárias obtidas por diferenciação ou integração das variáveis dependentes; estas variáveis

secundárias podem ser do tipo local, para valor específico da variável independente, ou do tipo global, sobre parte ou todo o domínio de cálculo; e (6) o uso da extrapolação de Richardson¹ para diminuir e estimar os erros de discretização.

A seguir são apresentados: nas seções 2 e 3, os modelos de simulação¹² de uma e quatro variáveis dependentes; e na seção 4, as definições matemáticas usadas neste trabalho para erro de discretização, estimador de Richardson, e ordens de convergência espacial; ainda na seção 4, são introduzidos os conceitos de série de Richardson e de faixa de convergência. Na seção 5, são relatados os experimentos numéricos realizados com os modelos de simulação das seções 2 e 3 e os resultados obtidos. Na seção 6, mostra-se quando é válida a extrapolação de Richardson e comentam-se algumas das possibilidades de representar as soluções numéricas junto com suas incertezas associadas; e a conclusão do trabalho é apresentada na seção 7.

2 ADVECCÃO-DIFUSÃO

O modelo matemático de uma variável dependente (T) é formado pela equação de advecção-difusão¹³ unidimensional, em regime permanente:

$$Pe \frac{dT}{dx} = \frac{d^2T}{dx^2} \quad (1)$$

onde T e x são variáveis adimensionais e Pe é o número de Peclet. As condições de contorno são: $T(x=0) = 0$ e $T(x=1) = 1$.

As variáveis de interesse deste modelo de simulação são: a variável dependente do problema (T), na coordenada $x = 0.5$; a inclinação (D) ou derivada de T em $x = 1$; e o comprimento da função (S) ao longo do domínio de cálculo. Estas duas últimas variáveis são definidas por:

$$D = \left(\frac{dT}{dx} \right)_{x=1} \quad (2)$$

$$S = \int_0^1 \sqrt{1 + \left(\frac{dT}{dx} \right)^2} dx \quad (3)$$

A solução analítica exata da Eq. (1) é conhecida¹¹; dela, facilmente obtêm-se as soluções analíticas exatas de D e S.

O modelo numérico empregado para obter a solução numérica das Eqs. (1) a (3) é caracterizado por¹¹:

- método: volumes finitos;
- funções de interpolação: UDS, CDS, PLDS¹⁴ e QUICK;
- solver: TDMA;

- malha uniforme: volumes de controle com comprimento (h) constante, exceto nos contornos onde foram usados dois meio-volumes; e
- precisão dupla nas computações.

A discretização da Eq. (1) com o modelo numérico acima resulta em

$$a_p T_p = a_w T_w + a_e T_e + b_p \quad (4)$$

onde os coeficientes (a) e o termo fonte (b_p) de cada volume de controle dependem da função de interpolação adotada. A solução do sistema linear representado pela Eq. (4) fornece T_p em cada volume de controle. O símbolo T_h será usado para representar a solução numérica T_p obtida em cada malha de dimensão h. Com base em T_h , as soluções numéricas das Eqs. (2) e (3) são obtidas, respectivamente, usando-se diferenças a montante e central. Neste problema, o tamanho dos volumes de controle é dado por $h = 1/(n-1)$, onde n é o número de volumes de controle usado para discretizar o domínio de cálculo de $x=0$ a $x=1$, incluindo os dois meio-volumes dos contornos.

3 ESCOAMENTO DE FLUIDOS COMPRESSÍVEIS

O modelo matemático de quatro variáveis dependentes (ρ, u, p_r, T) representa o escoamento invíscido de um gás perfeito. A geometria empregada é um bocal do tipo convergente-divergente. O escoamento é subsônico na região convergente do bocal e supersônico na região divergente. O modelo matemático é dado por:

$$\frac{d}{dx}(\rho u A) = 0 \quad (5)$$

$$\frac{d}{dx}(\rho u A u) = -A \frac{dp_r}{dx} \quad (6)$$

$$c_p \frac{d}{dx}(\rho u A T) = u A \frac{dp_r}{dx} \quad (7)$$

$$p_r = \rho R T \quad (8)$$

onde ρ = massa específica; u = velocidade; A = área da seção transversal a x ; x = coordenada espacial; p_r = pressão termodinâmica; c_p = calor específico à pressão constante; T = temperatura; e, R = constante do gás.

As Eqs. (5) a (8) representam, respectivamente, as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia, e a equação de estado dos gases perfeitos. Este modelo matemático apresenta solução analítica conhecida¹⁵. As variáveis de interesse são: o

fluxo de massa do escoamento ($F_M = \rho u A$); o empuxo na saída do bocal ($F_E = \rho u^2 A$), em $x = L$; e o número de Mach na garganta (M_g).

O modelo numérico empregado¹⁶ usa arranjo co-localizado de variáveis¹⁷; as funções de interpolação usadas são UDS e CDS com correção adiada¹⁸; o solver utilizado é o TDMA; e o domínio é discretizado com malhas uniformes.

4 FUNDAMENTOS

4.1 Erro de discretização

O erro de discretização da solução numérica em relação à solução analítica exata do modelo matemático é definido por¹¹

$$E_h = \Phi_A - \Phi_h \quad (9)$$

onde E_h = erro de discretização de Φ_h ; Φ_h = solução numérica obtida com malha de dimensão característica h ; e, Φ_A = solução analítica exata. O símbolo Φ representa qualquer variável dependente (de campo), ou variáveis secundárias obtidas das variáveis dependentes, D e S nas Eqs. (2) e (3), por exemplo. Para a Eq. (9) medir de fato o erro de discretização, a solução de Φ_h não deve conter outros tipos de erros (de iteração, de arredondamento ou enganos), ou pelo menos a magnitude deles deve ser muito inferior ao erro de discretização.

4.2 Estimador de Richardson

O estimador de Richardson^{5,6,1,7} (U_{Ri}) estima o erro de discretização, ou avalia a incerteza, da solução numérica Φ_1 através de

$$U_{Ri} = \Phi_\infty - \Phi_1 \quad (10)$$

onde Φ_∞ é obtido da **extrapolação de Richardson**⁵ generalizada¹ e visa estimar o valor da solução numérica sem erro de discretização, isto é, o valor da solução analítica exata; sua expressão é

$$\Phi_\infty = \Phi_1 + \frac{(\Phi_1 - \Phi_2)}{(q^p - 1)} \quad (11)$$

Com a Eq. (11) em (10) obtém-se

$$U_{Ri} = \frac{(\Phi_1 - \Phi_2)}{(q^p - 1)} \quad (12)$$

onde

$$q = \frac{h_2}{h_1} \quad (13)$$

e, U_{Ri} = incerteza de Φ_1 ; Φ_2 = solução numérica da malha grossa (h_2); Φ_1 = solução numérica da malha fina (h_1); Φ_∞ = solução numérica extrapolada; h_2 = comprimento dos volumes de controle da malha grossa; h_1 = comprimento dos volumes de controle da malha fina; q = razão de refino entre as malhas h_2 e h_1 ; p = ordem de convergência espacial teórica (p_t) ou aparente (p_a); não está claro na literatura se deve-se usar p_a ou p_t , e em que condições, no estimador de Richardson.

4.3 Ordens de convergência espacial

Um parâmetro que influencia diretamente o estimador de Richardson, Eq. (12), é a ordem de convergência espacial (p) da solução numérica. Podem ser definidos três tipos de ordem⁸: teórica, aparente e assintótica.

A **ordem teórica** (p_t) é obtida a partir da análise da discretização do modelo matemático empregado, usando, por exemplo, a série de Taylor¹⁹. No caso das variáveis de interesse da seção 2, os valores de p_t são iguais a 2 para T e S com os esquemas CDS, PLDS ($Pe_h < 10$) e QUICK, e iguais a 1 para as mesmas variáveis com o esquema UDS. No caso da variável D, devido à forma como ela é calculada, usando derivada a montante, todos os esquemas resultam em $p_t = 1$.

A **ordem aparente** (p_a) é calculada com base em três soluções numéricas obtidas em três malhas diferentes. Para razões de refino de malha constante⁹ e variável entre as três malhas, respectivamente, tem-se

$$p_a = \frac{\ln\left(\frac{\Phi_2 - \Phi_3}{\Phi_1 - \Phi_2}\right)}{\ln(q)} \quad (\text{para } q = Q) \quad (14)$$

$$p_a = \frac{\ln\left[\psi \frac{(q^{p_a} - 1)}{(Q^{p_a} - 1)}\right]}{\ln q} \quad (\text{para } q \neq Q) \quad (15)$$

onde

$$\psi = \frac{\Phi_2 - \Phi_3}{\Phi_1 - \Phi_2} \quad (16)$$

$$Q = \frac{h_3}{h_2} \quad (17)$$

e, p_a = ordem de convergência espacial aparente; Φ_3 = solução numérica da malha supergrossa (h_3); Φ_2 = solução numérica da malha grossa (h_2); Φ_1 = solução numérica da malha fina (h_1); h_3 = comprimento dos volumes de controle da malha supergrossa; h_2 = comprimento dos volumes de controle da malha grossa; h_1 = comprimento dos volumes de controle da malha fina; q = razão de refino entre as malhas h_2 e h_1 (Eq. 13); Q = razão de refino entre as malhas h_3 e h_2 (Eq. 17); e ψ = razão de convergência espacial. Com a Eq. (16), a Eq. (14) também pode ser representada por

$$p_a = \frac{\ln \psi}{\ln q} \quad (\text{para } q = Q) \quad (18)$$

No caso de razão de refino de malha variável, isto é, $q \neq Q$, o cálculo de p_a com a Eq. (15) se torna iterativo porque esta equação é transcendental. Através das Eqs. (14) a (16), pode-se perceber que soluções numéricas (Φ) diferentes resultam em valores diferentes da ordem aparente (p_a). Antecipa-se, aqui, que tanto a acurácia quanto a confiabilidade da incerteza de uma solução numérica estão intimamente ligadas à função $p_a(h)$, conforme será mostrado e explicado nas seções 5 e 6.

A **ordem assintótica** (p_∞) é o valor para o qual converge a ordem aparente (p_a) quando h tende a zero ($h \rightarrow 0$ é usado neste trabalho para simplificar a notação formal¹³), ou seja,

$$p_\infty = \lim_{h \rightarrow 0} (p_a) \quad (19)$$

4.4 Série de Richardson

Pode-se demonstrar que a extrapolação de Richardson, Eq. (11), é o resultado da soma dos termos de uma série geométrica infinita, denominada aqui de série de Richardson (R_∞), isto é,

$$\Phi_\infty = \Phi_1 + R_\infty(\Phi_1 - \Phi_2) \quad (20)$$

onde

$$R_\infty = \frac{1}{\psi} + \frac{1}{\psi^2} + \frac{1}{\psi^3} + \dots \quad (\text{série de Richardson}) \quad (21)$$

$$\psi = q^p \quad (22)$$

Para $\psi < -1$ e $\psi > 1$, esta série converge para valores finitos dados por

$$R_{\infty} = \frac{1}{(\psi - 1)} \quad (23)$$

Com a substituição da Eq. (22) em (23), e o resultado na Eq. (20), obtém-se a expressão da extrapolação de Richardson mostrada na Eq. (11).

4.5 Faixa convergente

Define-se, a seguir, dois tipos de comportamento da ordem de convergência espacial aparente (p_a) em função do tamanho dos volumes de controle da malha (h): faixas subconvergente e superconvergente.

Faixa subconvergente: à medida que h é reduzido em relação a um valor específico (h_c), todos os valores da ordem aparente, $p_a(h)$, são positivos, crescentes e menores do que a ordem assintótica (p_{∞}), isto é,

$$\left. \begin{aligned} 0 < p_a(h_c) \leq p_a(h) < p_{\infty} \\ \frac{dp_a}{dh} < 0 \end{aligned} \right\} \quad \text{para } h \leq h_c \quad (24)$$

Faixa superconvergente: à medida que h é reduzido em relação a um valor específico (h_c), todos os valores da ordem aparente, $p_a(h)$, são positivos, decrescentes e maiores do que a ordem assintótica (p_{∞}), ou seja,

$$\left. \begin{aligned} 0 < p_{\infty} < p_a(h) \leq p_a(h_c) \\ \frac{dp_a}{dh} > 0 \end{aligned} \right\} \quad \text{para } h \leq h_c \quad (25)$$

5 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Esta seção relata os experimentos numéricos realizados com os modelos matemáticos das seções 2 e 3, e as observações e verificações feitas com base nos resultados obtidos destes experimentos.

5.1 Advecção-difusão

Foram realizados 282 experimentos numéricos com o modelo matemático da Eq. (1) para as variáveis $T(x=0.5)$, $D(x=1)$ e S . Cada experimento numérico se constitui num conjunto específico dos seguintes dados: Pe , n ou h e função de interpolação.

Os experimentos foram realizados para:

- número de Peclet: $Pe = 0.1, 1, 10$ e 100 ;
- funções de interpolação: UDS, CDS, PLDS e QUICK;
- razões de refino de malha constantes ($q = 2, 3$ e 4) e variável ($q = 1.06$ a 10); e
- número de volumes de controle: $n = 3$ a 1062883 ; estes valores de n equivalem a $h = 0.5$ a 9.4×10^{-7} ; deve-se mencionar que atualmente o número de volumes de controle usado em cada direção coordenada é da ordem de centenas, por exemplo: 640×640^{20} e $240 \times 240 \times 240^{21}$.

5.2 Escoamento de fluidos compressíveis

Ao todo foram realizados 38 experimentos numéricos com o modelo matemático dado pelas Eqs. (5) a (8) para as três variáveis de interesse: F_M , F_E e M_g . Cada experimento numérico é caracterizado por um conjunto específico de n ou h e função de interpolação, mantidos constantes os demais dados e a geometria do bocal.

Os experimentos foram realizados para:

- funções de interpolação: UDS e CDS;
- razões de refino de malha constante ($q = 2$) e variável ($q = 1.25$ a 2.0); e
- número de volumes de controle: $n = 10$ a 81920 ou $h = 0.1$ a 1.22×10^{-5} .

5.3 Resultados

Em todos os experimentos realizados, conforme já mencionado na literatura¹⁰, constatou-se que o estimador de Richardson (U_{Ri}) é uma medida acurada do erro de discretização quando h tende a zero, ou seja,

$$\frac{U_{Ri}(p_a)}{E_h} \rightarrow 1 \quad \text{para } h \rightarrow 0 \quad (26)$$

onde E_h é calculado através da Eq. (9), e o valor de $U_{Ri}(p_a)$ com a Eq. (12) usando-se $p = p_a$. Deve-se notar que $U_{Ri}(p_a)$ é função de h pois p_a , Φ_1 e Φ_2 dependem de h . Além de h , no caso específico do modelo matemático dado pela Eq. (1), o valor da ordem aparente (p_a) depende: da variável de interesse (T , D ou S), de todos os parâmetros que podem alterá-la (Pe , função de interpolação), e das razões de refino de malha (q e Q) usadas no cálculo de p_a , Eq. (14) ou (15), ou seja,

$$p_a = p_a(\Phi, Pe, h, \text{função de interpolação}, q, Q) \quad (27)$$

Todos os valores de p_∞ obtidos coincidiram com aqueles previstos teoricamente (p_t) e mencionados no item 4.3. A dependência constatada da ordem assintótica (p_∞) é

$$p_\infty = p_\infty(\Phi, \text{função de interpolação}) \quad (28)$$

Aparentemente, a função $p_a(h)$ é imprevisível *a priori* de sua obtenção e pode assumir diversos tipos de comportamento: dois exemplos são apresentados nas Figs. 1 e 2 (todas as figuras mostradas se baseiam nos experimentos numéricos realizados, e cada símbolo nestas figuras representa um experimento específico). Apesar disso, em todos os experimentos realizados, verificou-se que abaixo de um valor específico de h , denominado aqui de h_c , o valor de p_a tende monotonicamente para a ordem assintótica quando $h \rightarrow 0$, isto é, entra-se na faixa convergente de p_a , conforme definido na seção 4.5; no caso das Figs. 1 e 2, os valores correspondentes de h_c são 5.6×10^{-2} e 2.0×10^{-3} . Também verificou-se que as seguintes relações são sempre satisfeitas quando $h \leq h_c$, ou seja, quando se está dentro da faixa convergente:

$$\frac{U_{Ri}(p_\infty)}{E_h} < 1 < \frac{U_{Ri}(p_a)}{E_h} \quad (p_a \text{ subconvergente}) \quad (29)$$

$$\frac{U_{Ri}(p_a)}{E_h} < 1 < \frac{U_{Ri}(p_\infty)}{E_h} \quad (p_a \text{ superconvergente}) \quad (30)$$

As Eqs. (29) e (30) representam importantes constatações:

- 1) o erro exato (E_h) fica limitado entre os valores de $U_{Ri}(p_\infty)$ e $U_{Ri}(p_a)$; à medida que h é reduzido, este intervalo de $U_{Ri}(p_\infty)$ a $U_{Ri}(p_a)$, que limita E_h , vai sendo estreitado;
- 2) uma estimativa de erro confiável é obtida com o uso do menor valor entre p_a e p_∞ no estimador de Richardson (U_{Ri}); por maior que seja a diferença entre p_a e p_∞ , as Eqs. (29) e (30) estimam confiavelmente o erro de discretização; e
- 3) a acurácia da estimativa do erro de discretização depende da diferença entre os valores das ordens aparente e assintótica; quanto mais próximo estiver p_a de p_∞ , mais acurada é a estimativa do erro de discretização.

Na Fig. 1, a Eq. (24) é satisfeita em todo h . Esta figura caracteriza um exemplo de curva de ordem aparente subconvergente desde o maior h (5.6×10^{-2}) onde $p_a = 9.6 \times 10^{-3}$. A Fig. 3 (nesta figura e na seguinte, p_i representa p_∞) mostra a validade da Eq. (29), onde os valores de p_a usados no cálculo de $U_{Ri}(p_a)$ são aqueles da Fig. 1. Pode-se notar na Fig. 3 que: $U_{Ri}(p_\infty)/E_h < 1$ em qualquer h (para valores muito pequenos de h fica difícil ver isto na figura, mas numericamente é o que ocorre), ou seja, $U_{Ri}(p_\infty)$ subestima o erro exato; e $U_{Ri}(p_a)/E_h > 1$ em qualquer h , isto é, $U_{Ri}(p_a)$ superestima o erro exato, portanto, sua estimativa do erro é confiável. Em h (5.6×10^{-2}), $U_{Ri}(p_a)$ é confiável mas não é tão acurado devido ao valor de p_a (9.6×10^{-3}) neste h , praticamente zero se comparado ao valor da ordem assintótica (1).

A Fig. 4 apresenta as razões $U_{Ri}(p_a)/E_h$ e $U_{Ri}(p_\infty)/E_h$ para um caso em que o comportamento da curva $p_a(h)$, mostrado na Fig. 2, é mais complexo do que aquele da Fig. 1. Na Fig. 2, a curva de ordem aparente é subconvergente para $h \leq 2.0 \times 10^{-3}$, assim, a Eq. (29) passa a ser válida, ou seja, existem limites inferior e superior para o erro de discretização, o que pode ser observado na Fig. 4. Para $h > 2.0 \times 10^{-3}$, existem pontos de h em que $U_{Ri}/E_h > 1$. No entanto, não é possível garantir que eles ocorram apenas com base em sua curva de ordem aparente mostrada na Fig. 2, que apresenta um valor negativo (-0.71) em $h = 3.1 \times 10^{-2}$ e valor indefinido (não mostrado na figura, evidentemente) em $h = 3.9 \times 10^{-3}$; o valor indefinido deve-se a $\psi = -7.0$ neste h . O valor de $U_{Ri}(p_a)/E_h = 10^3$, em $h = 3.1 \times 10^{-2}$, mostrado na Fig. 4, é só para ressaltar que este valor é na verdade infinito, e isso ocorre porque $p_a < 0$ no h mencionado. Em $h = 7.8 \times 10^{-3}$, onde $p_a \approx 6.4$ (Fig. 2), as razões $U_{Ri}(p_\infty)/E_h$ e $U_{Ri}(p_a)/E_h$ resultam, respectivamente, em -1.11 e -0.04 (não mostradas na Fig. 4 por serem negativas). Já em $h = 3.9 \times 10^{-3}$, onde p_a é indefinido, a razão $U_{Ri}(p_\infty)/E_h$ é 0.30 e $U_{Ri}(p_a)/E_h$ é -0.12 (não mostrada na Fig. 4 por ser negativa).

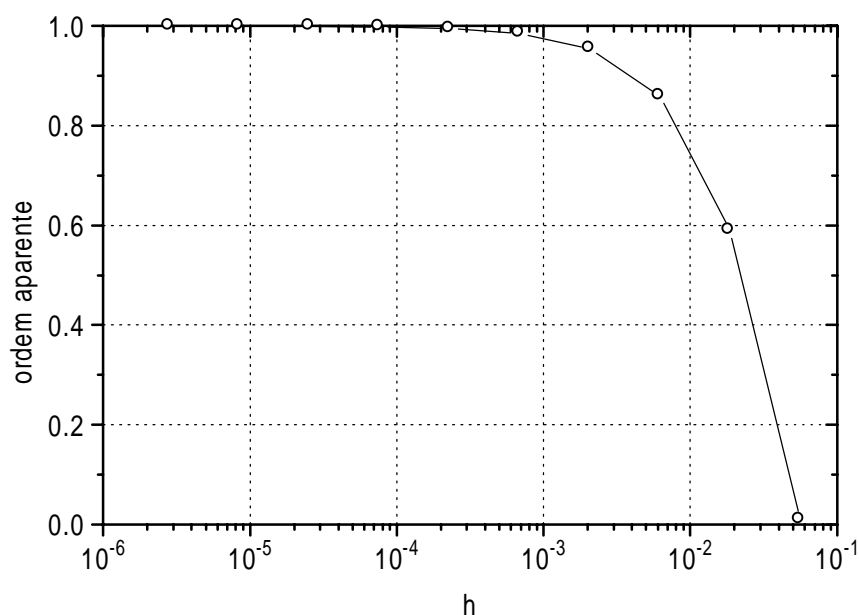


Figura 1. Ordem aparente de $D(x=1)$ para $Pe=10$, PLDS e $q=3$.

Conforme mencionado na introdução deste trabalho, obter valor de ordem aparente aproximadamente ou mesmo igual à ordem teórica (ou assintótica) nem sempre significa que estimativas de erro baseadas na extrapolação de Richardson são confiáveis ou acuradas. Por exemplo, o valor da ordem aparente em $h = 2.44 \times 10^{-4}$ e 1.56×10^{-2} é aproximadamente o

mesmo, 1.90 (Fig. 2). No entanto, as razões entre incerteza e erro nestes dois pontos de h são muito diferentes: em $h = 2.44 \times 10^{-4}$, $U_{Ri}(p_\infty)/E_h = 0.96$ e $U_{Ri}(p_a)/E_h = 1.059$; em $h = 1.56 \times 10^{-2}$, $U_{Ri}(p_\infty)/E_h = 40.4$ e $U_{Ri}(p_a)/E_h = 44.4$.

Para problemas não-triviais, na prática, p_a nunca atinge exatamente o valor de p_∞ pois pela própria definição de p_∞ , Eq. (19), é necessário uma malha com infinitos volumes para ter h nulo, o que é certamente impossível, eliminando, assim, a obtenção de soluções independentes da malha; além disso, existem os erros de arredondamento que ocorrem nas soluções numéricas e que se propagam para o cálculo de p_a através das Eqs. (14) ou (15).

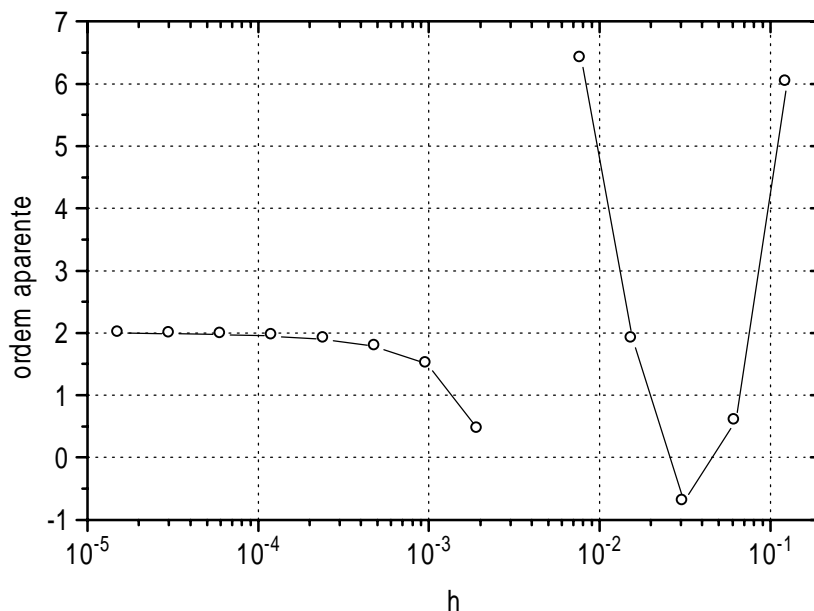


Figura 2. Ordem aparente de S para $Pe=100$, QUICK e $q=2$.

6 ANÁLISE DOS RESULTADOS

Nesta seção, mostra-se quando se pode aplicar a extrapolação de Richardson, que é a base do estimador de Richardson, e discutem-se algumas das possibilidades de representação das soluções numéricas e de suas incertezas associadas.

6.1 Validade da extrapolação de Richardson

Considerando-se razão de refino de malha constante, a extrapolação de Richardson (Eq. 11) e o estimador de Richardson (Eq. 12) são válidos apenas para razão de convergência maior do que um ($\psi > 1$), o que equivale a $p > 0$, conforme explica-se abaixo. Esta condição é automaticamente satisfeita para as ordens teóricas e assintóticas das funções de interpolação normalmente empregadas (por exemplo: UDS, $p=1$; CDS, $p=2$); mas isso não procede no caso da ordem aparente, que pode assumir valores positivos ou negativos ou, ainda, ser indefinida.

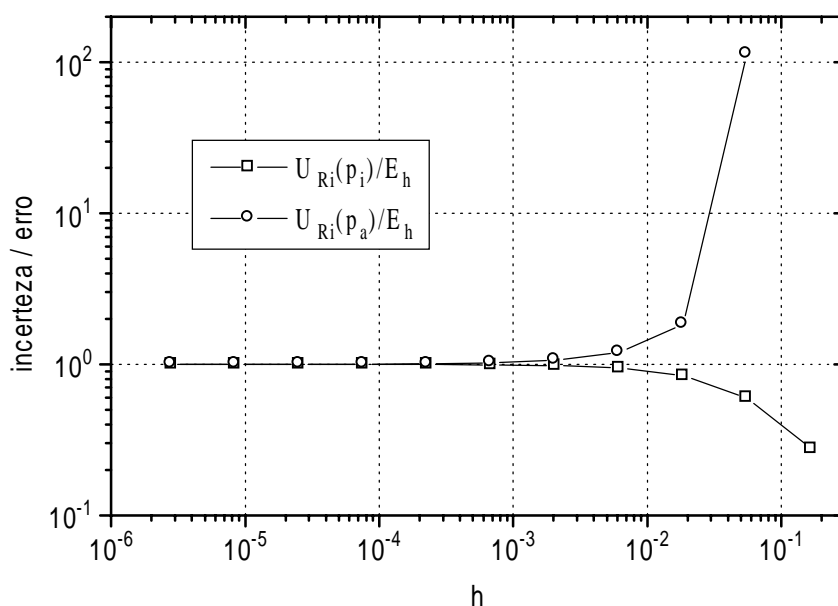


Figura 3. Razão entre incerteza e erro de $D(x=1)$ para $Pe=10$, PLDS e $q=3$.

Diversos significados estão implícitos na extrapolação de Richardson, Eq. (11): (1) o erro de discretização é dado por $E_h=Ch^p$, onde C é uma constante; (2) a razão de redução de E_h entre malhas consecutivas é $1/\psi$; (3) a diferença entre o valor extrapolado (Φ_∞) e a solução numérica da malha fina (h_1), Φ_1 , é o erro de discretização desta solução numérica e é igual à soma dos erros de discretização entre estas duas malhas que, por sua vez, é igual a uma série geométrica infinita, a série de Richardson, dada pela Eq. (21); (4) a razão de refino de malha (q) e a ordem de convergência espacial (p) são constantes nesta série e, portanto, ψ ; (5) a série de Richardson só converge para valores finitos nos intervalos $\psi(-\infty,-1)$ ou $\psi(1,\infty)$ e, portanto, a extrapolação de Richardson só tem significado nestes dois intervalos; e, (6) Φ_∞ representa o valor estimado da solução analítica exata, isto é, sem erros de discretização.

A validade da extrapolação de Richardson pode ser analisada em função dos valores da razão de convergência (ψ), que são divididos em quatro intervalos: $(1, \infty)$, $(0, 1]$, $[-1, 0]$ e ainda $(-\infty, -1)$. Exemplos da série de Richardson, Eq. (21), para cada um destes quatro intervalos são, respectivamente:

$$R_\infty = \frac{1}{4} + \frac{1}{16} + \frac{1}{64} + \dots = \frac{1}{3} \quad (\text{para } q = 2 \text{ e } \psi = 4 \rightarrow p = 2) \quad (31)$$

$$R_\infty = 2 + 4 + 8 + 16 + \dots = \infty \quad (\text{para } q = 2 \text{ e } \psi = 1/2 \rightarrow p = -1) \quad (32)$$

$$R_\infty = -2 + 4 - 8 + 16 + \dots = \infty \quad (\text{para } \psi = -1/2) \quad (33)$$

$$R_\infty = -\frac{1}{2} + \frac{1}{4} - \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \dots = -\frac{1}{3} \quad (\text{para } \psi = -2) \quad (34)$$

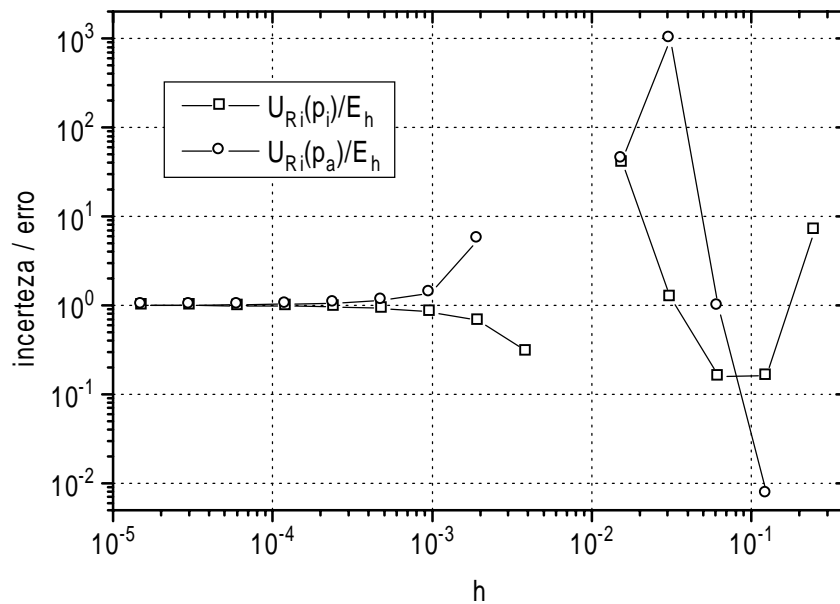


Figura 4. Razão entre incerteza e erro de S para $Pe=100$, QUICK e $q=2$.

Claramente, não faz sentido aplicar a extrapolação de Richardson e, portanto, o estimador de Richardson, nos intervalos $\psi(0, 1]$ e $\psi[-1, 0]$, como pode-se observar pelos exemplos das

Eqs. (32) e (33). No intervalo $\psi(0,1]$, exemplificado na Eq. (32), a ordem de convergência espacial é negativa ou nula, isto é, $p \leq 0$; e indefinida no intervalo $\psi(-\infty,0]$.

Para o intervalo de $\psi(-\infty,-1)$, embora não se tenha uma prova definitiva, ainda que R_∞ convirja para valores finitos, recomenda-se não usar os valores resultantes de Φ_∞ e U_{Ri} devido às seguintes observações:

- $R_\infty < 1/\psi$, como pode ser visto no exemplo da Eq. (34) ou extraído da Eq. (23); ou seja, a soma dos infinitos termos de variação do erro de discretização entre malhas consecutivas é menor do que a variação entre as malhas h_1 e h_2 , as mais grossas; e,
- nos experimentos numéricos realizados com o modelo matemático da Eq. (1), em quatro casos obteve-se ψ neste intervalo e verificou-se que $U_{Ri}(\psi)$ e $U_{Ri}(p_\infty)$ não limitam E_h .

6.2 Representações da solução numérica e da incerteza associada

Após obter as soluções numéricas de uma variável de interesse sobre três malhas diferentes, em termos práticos, um usuário gostaria de saber qual o valor que deve apresentar como solução do problema e qual a sua incerteza associada. Nesta seção, são examinadas duas possibilidades com este fim.

Para soluções numéricas com ordem aparente de comportamento convergente, isto é, para $h \leq h_c$, obtêm-se das Eqs. (29) e (30) as seguintes expressões genéricas para os limites inferior (U^-) e superior (U^+) do erro de discretização (E_h):

$$U^- = sg(\Phi_1 - \Phi_2) \text{MIN}\{|U_{Ri}(p_\infty)|; |U_{Ri}(p_a)|\} \quad (35)$$

$$U^+ = sg(\Phi_1 - \Phi_2) \text{MAX}\{|U_{Ri}(p_\infty)|; |U_{Ri}(p_a)|\} \quad (36)$$

onde U^- = estimativa do erro mínimo de Φ_1 ; U^+ = estimativa do erro máximo de Φ_1 ; $sg(\Phi_1 - \Phi_2)$ = sinal da diferença entre Φ_1 e Φ_2 ; $\text{MIN}\{ \}$ = valor mínimo entre os módulos de $U_{Ri}(p_\infty)$ e $U_{Ri}(p_a)$; $\text{MAX}\{ \}$ = valor máximo entre os módulos de $U_{Ri}(p_\infty)$ e $U_{Ri}(p_a)$; Φ_2 = solução numérica da malha grossa (h_2); Φ_1 = solução numérica da malha fina (h_1).

A forma mais simples de representar a solução numérica (Φ_N) é considerá-la igual à solução da malha mais fina (Φ_1), e sua incerteza associada (U_N) igual à incerteza máxima esperada (U^+), ou seja,

$$\Phi_N = \Phi_1 \quad (37)$$

$$U_N = U^+ \quad (38)$$

Entretanto, sabe-se que a solução analítica Φ_A encontra-se entre (Φ_1+U^-) e (Φ_1+U^+) ou, equivalentemente, entre $\Phi_\infty(p_\infty)$ e $\Phi_\infty(p_a)$ quando a ordem aparente já é convergente. Sendo

assim, pode-se eliminar o erro sistemático (U) da solução numérica (Φ_1) e manter-se apenas a incerteza U^- a U^+ ; isso resulta na **representação recomendada**:

$$\Phi_N = \Phi_m \pm U_m \quad (39)$$

onde

$$\Phi_m = \frac{\Phi_\infty(p_\infty) + \Phi_\infty(p_a)}{2} \quad (40)$$

$$U_m = \frac{|\Phi_\infty(p_\infty) - \Phi_\infty(p_a)|}{2} \quad (41)$$

onde $\Phi_\infty(p_\infty)$ e $\Phi_\infty(p_a)$ são obtidos da Eq. (11) com p igual, respectivamente, a p_∞ e p_a . A incerteza calculada através da Eq. (41) não é no sentido de aleatoriedade, já que a repetição da simulação fornecerá o mesmo resultado; ela é devido à falta de conhecimento⁴ da função exata de $p_a(h)$. A Eq. (40) se baseia no cálculo do valor médio (Φ_m) da faixa que envolve a solução analítica: $\Phi_\infty(p_\infty)$ a $\Phi_\infty(p_a)$. E a Eq. (41) corresponde a uma incerteza de mesma magnitude, para mais e para menos, de Φ_m .

Exemplificando: com $q=2$, $\Phi_3=150$, $\Phi_2=95$ e $\Phi_1=80$, da Eq. (14) obtém-se $p_a(h_1)=1.87$; e com a Eq. (12), $U_{Ri}(p_a) = -5.65$. Da Eq. (12), com $p_\infty=2$, tem-se $U_{Ri}(p_\infty) = -5$. Para estes valores, as Eqs. (35) e (36) resultam em $U^- = -5$ e $U^+ = -5.65$, e as duas representações comentadas acima fornecem:

- com as Eqs. (37) e (38), $\Phi_N = 80$ e $U_N = -5.65$; e
- $\Phi_m = 74.675$ e $U_m = 0.325$, ou $\Phi_N = 74.675 \pm 0.325$ para as Eqs. (39) a (41) na representação recomendada.

Na Fig. 5 são mostrados os erros exatos da solução numérica calculada (Φ_h), representados por E_h , e de Φ_m (Eq. 40), representados por E_m . Juntamente, são exibidos os erros estimados de Φ_m e representados por U_m . No exemplo desta figura, $p_a(h)$ é superconvergente para $h \leq 6.25 \times 10^{-2}$. Também mostra-se a incerteza máxima (U^+) de Φ_1 , obtida da Eq. (36), e representada por U_h . O aumento dos valores dos erros e incertezas que ocorre na Fig. 5, ao se reduzir h , deve-se ao fato dos erros de arredondamento já prevalecerem sobre os erros de discretização e, então, o estimador de Richardson deixa de ser válido.

Conforme mostrado na Fig. 5, a partir dos mesmos dados (Φ_1 , U^- e U^+), consegue-se aumentar a ordem de convergência espacial ao se usar a representação dada pelas Eqs. (39) a (41), e reduzir o erro de discretização. Este aumento de ordem deve-se ao fato de Φ_m , na Eq. (40), se basear nas soluções extrapoladas $\Phi_\infty(p_\infty)$ e $\Phi_\infty(p_a)$. Para este exemplo específico, em que se usou a função de interpolação CDS, $p_\infty(\Phi_h)=2$ e $p_\infty(\Phi_m)=4$, conforme esperado da análise do erro de truncamento da Eq. (1) usando-se a série de Taylor. Ainda na Fig. 5, as relações U_h/E_h são maiores do que a unidade (visualmente é difícil perceber mas

numericamente é o que ocorre) e $U_m/E_m > 1$, conforme esperado quando a incerteza é confiável. Nesta figura, U_h , E_m e U_m são mostrados apenas para p_a na faixa convergente.

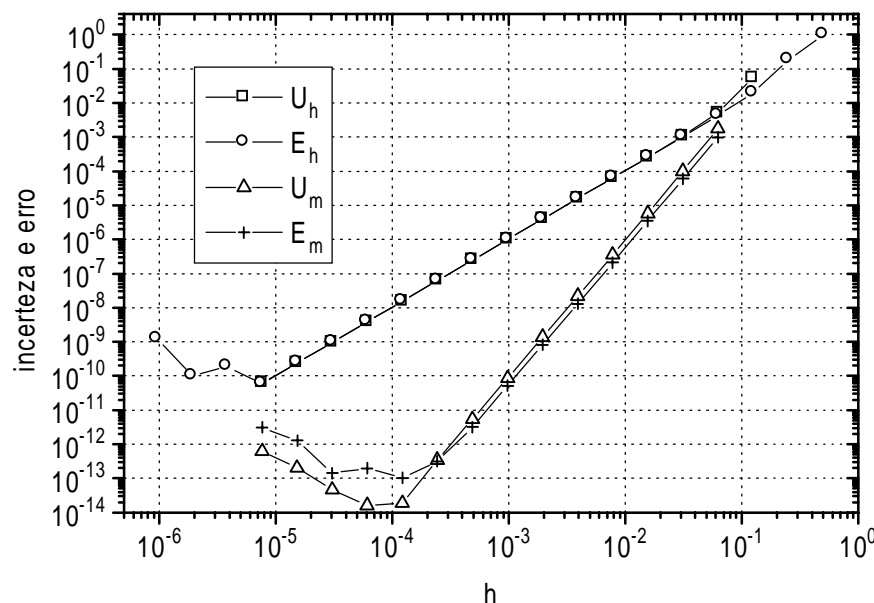


Figura 5. Incerteza e erro de S para $Pe=10$, CDS e $q=2$.

7 CONCLUSÃO

Foram realizados mais de 300 experimentos numéricos com dois modelos matemáticos: equação de advecção-difusão (uma variável dependente) e escoamento de fluidos compressíveis (quatro variáveis dependentes). Estes experimentos envolveram seis tipos de variáveis de interesse, quatro funções de interpolação, razões de refino de malha constantes ($q = 2, 3$ e 4) e variável ($q = 1.06$ a 10), e número de volumes de controle de 3 a 1062883 ou, equivalentemente, comprimento dos volumes de controle (h) de 0.5 a 9.4×10^{-7} .

Em todos os experimentos realizados, constatou-se que o estimador de Richardson (U_{Ri}) é uma medida acurada do erro de discretização quando $h \rightarrow 0$, conforme já mencionado na literatura.

A extrapolação de Richardson é o resultado da soma dos termos de uma série geométrica infinita e, portanto, tanto ela quanto o estimador de Richardson são válidos somente para valores de ordem de convergência espacial (p) positivos.

Introduziu-se o conceito de faixa convergente. Dentro desta faixa, verificou-se em todos os experimentos numéricos realizados que:

- o valor da ordem aparente (p_a) tende monotonicamente para a ordem assintótica (p_∞) quando $h \rightarrow 0$;
- o erro exato (E_h) fica limitado entre os valores de $U_{Ri}(p_\infty)$ e $U_{Ri}(p_a)$; à medida que h é reduzido, este intervalo de $U_{Ri}(p_\infty)$ a $U_{Ri}(p_a)$, que limita E_h , vai sendo estreitado;
- $U_{Ri}(p_\infty)$ e $U_{Ri}(p_a)$ podem ser usados para diminuir o erro de discretização; isso resulta no aumento do valor da ordem de convergência da solução numérica;
- uma estimativa de erro confiável é obtida com o uso do menor valor entre p_a e p_∞ no estimador de Richardson (U_{Ri}), por maior que seja a diferença entre p_a e p_∞ ; e
- a acurácia da estimativa do erro de discretização depende da diferença entre os valores das ordens aparente e assintótica; quanto mais próximo estiver p_a de p_∞ , mais acurada é a estimativa do erro de discretização.

Fora da faixa convergente não existe garantia da validade de nenhuma das cinco afirmações acima.

Além de h , o valor da ordem aparente (p_a) é sensível à variável de interesse e a todos os parâmetros que podem alterá-la. Não se conhece nenhum procedimento para se afirmar quando a ordem aparente já está na faixa convergente, exceto obtendo-se soluções numéricas Φ_h em malhas (h) cada vez mais refinadas e calculando-se p_a em função de h . Portanto, não é possível afirmar sobre a confiabilidade de estimativas de erro baseadas apenas em um valor de p_a , ou baseadas em soluções numéricas obtidas somente com duas malhas diferentes.

Agradecimentos

O primeiro autor agradece à Universidade Federal do Paraná (UFPR), à Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), e ao Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC)/UFSC pelo apoio financeiro e de infra-estrutura; e aos colegas Luciano Amaury dos Santos e Fernando Laroca pelas discussões realizadas.

REFERÊNCIAS

- [1] P. J. Roache, "Perspective: a Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies", *Journal of Fluids Engineering*, **116**, 405-413 (1994).
- [2] Celik, I. and O. Karatekin, "Numerical Experiments on Application of Richardson Extrapolation with Nonuniform Grids", *Journal of Fluids Engineering*, **119**, 584-590 (1997).
- [3] P. J. Roache, *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*, Hermosa, (1998).
- [4] AIAA, *Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations*, AIAA G-077-1998, (1998).

- [5] L. F. Richardson and J. A. Gaunt, "The Deferred Approach to the Limit", *Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A*, **226**, 299-361 (1927).
- [6] F. G. Blottner, "Accurate Navier-Stokes Results for the Hypersonic Flow Over a Spherical Nosedip", *Journal of Spacecraft and Rockets*, **27**, 113-122 (1990).
- [7] J. H. Ferziger and M. Peric, "Further Discussion of Numerical Errors in CFD", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **23**, 1263-1274 (1996).
- [8] P. J. Roache, "Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics", *Annual Reviews in Fluid Mechanics*, **29**, 123-160 (1997).
- [9] G. de Vahl Davis, "Natural Convection of Air in a Square Cavity: a Bench Mark Numerical Solution", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **3**, 249-264 (1983).
- [10] W. L. Oberkampf and F. G. Blottner, "Issues in Computational Fluid Dynamics Code Verification and Validation", *AIAA Journal*, **36**, 687-695 (1998).
- [11] J. H. Ferziger and M. Peric, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer, (1996).
- [12] U. B. Mehta, "Guide to Credible Computer Simulations of Fluid Flows", *Journal of Propulsion and Power*, **12**, 940-948 (1996).
- [13] J. C. Tannehill, D. A. Anderson, and R. H. Pletcher, *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, 2nd. ed., Taylor & Francis, (1997).
- [14] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere, (1980).
- [15] J. E. A. John, *Gas Dynamics*, 2nd. ed., Allyn & Bacon, (1984).
- [16] J. P. van Doormaal, G. D. Raithby, and B. H. McDonald, "The Segregated Approach to Predicting Viscous Compressible Fluid-Flows", *Journal of Turbomachinery*, **109**, 268-277 (1987).
- [17] C. H. Marchi and C. R. Maliska, "A Nonorthogonal Finite-Volume Method for the Solution of All Speed Flows Using Co-Located Variables", *Numerical Heat Transfer, Part B*, **26**, 293-311 (1994).
- [18] Z. Lilek, S. Muzaferija, and M. Peric, "Efficiency and Accuracy Aspects of a Full-Multigrid Simple Algorithm for Three-Dimensional Flows", *Numerical Heat Transfer, Part B*, **31**, 23-42 (1997).
- [19] C. A. J. Fletcher, *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, 2nd. ed., Springer, (1997).
- [20] M. Hortmann, M. Peric, and G. Scheuerer, "Finite Volume Multigrid Prediction of Laminar Natural Convection: Bench-Mark Solutions", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **11**, 189-207 (1990).
- [21] D. Bogucki, J. Andrzej Domaradzki and P. K. Yeung, "Direct Numerical Simulation of Passive Scalars with $Pr > 1$ Advected by Turbulent Flow", *Journal of Fluid Mechanics*, **343**, 111-130 (1997).