

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

3.1 Erros Verdadeiros (E)

Os erros verdadeiros (E) inerentes aos métodos da engenharia são apresentados na Fig. 3.1.

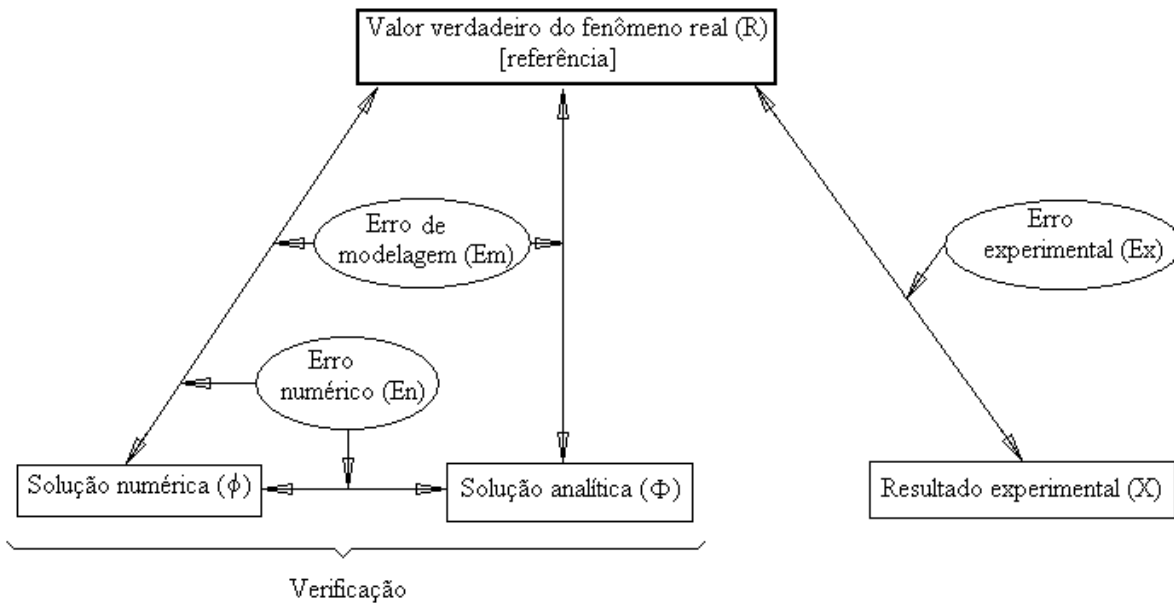


Figura 3.1: Erros verdadeiros (E) inerentes aos métodos da engenharia.

O erro experimental é definido por

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

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

O erro de modelagem de uma solução analítica é definido por

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

Ele 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.); e
- 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.

O erro numérico é definido por

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

Ele é causado por erros de:

- 1) discretização (E_h);
- 2) iteração (E_i);
- 3) arredondamento (E_π); e
- 4) outros (E_o).

Simbolicamente: $E_n = f(E_h, E_i, E_\pi, E_o)$.

O erro numérico existe apenas na solução numérica.

Geralmente o erro de discretização (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). A Fig. 3.2 apresenta os erros estimados e seus processos.

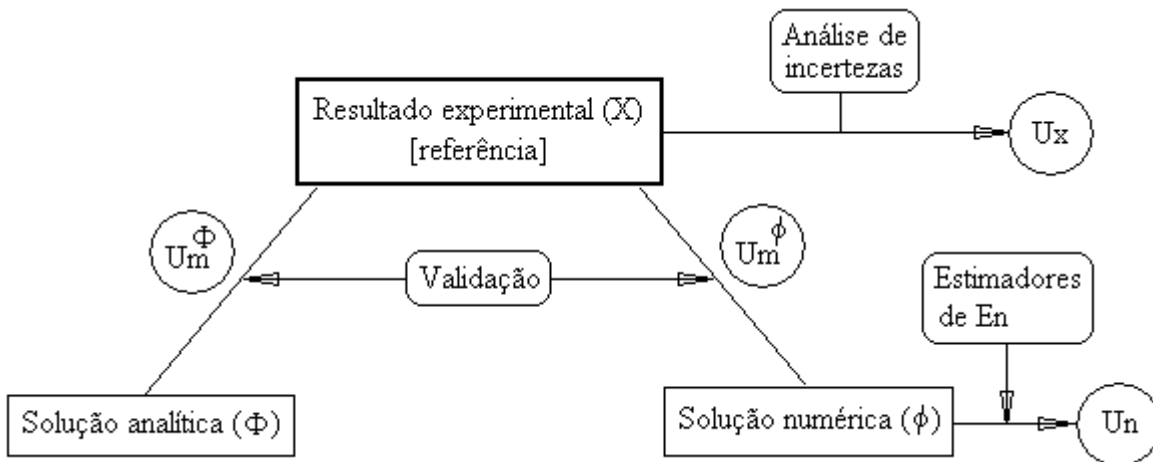


Figura 3.2: Erros estimados (U) e seus processos.

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

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

A estimativa do E_m da solução analítica (se for conhecida) é obtida através de

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

A estimativa do E_m da solução numérica é obtida através de

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

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:

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

Importância de se estimar erros:

- 1) Se $E > \text{aceitável}$ [50% x 1%]: solução numérica sem confiabilidade (por ex., no C_L das asas de um avião, pode levar à queda do avião).
- 2) Se $E < \text{necessário}$ [0,001% x 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:

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

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

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

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 demonstrar 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:

$p_L < p_2 < p_3 \dots$ e $\Delta p = \text{constante} = p_2 - p_L$

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 .

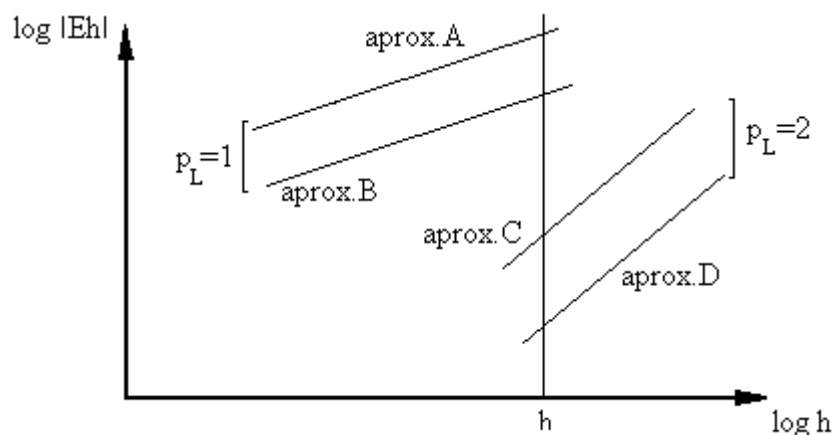


Figura 3.3: Efeito de p_L sobre E_h .

Quanto maior p_L , menor E_h para um mesmo h .

Aproximações diferentes com o mesmo p_L resultam em E_h diferente devido a valores diferentes de c_1 .

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 $r = 2$

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

Exemplo prático com o Prog1_CFD para $p_L = 2$ e $r = 10$:

$$E_h(\phi_1) = \frac{E_h(\phi_2)}{100} \quad (h \rightarrow 0)$$

Variável analisada: média da temperatura (T_m) em 3 malhas: 11, 110 e 1.100. O comportamento do erro está apresentado no gráfico da Fig. 3.4. Conforme h se reduz de aproximadamente 0,1 para 0,01 (ou seja, 10 vezes) o erro se reduz de aproximadamente 1 para 0,01 (ou seja, 100 vezes).

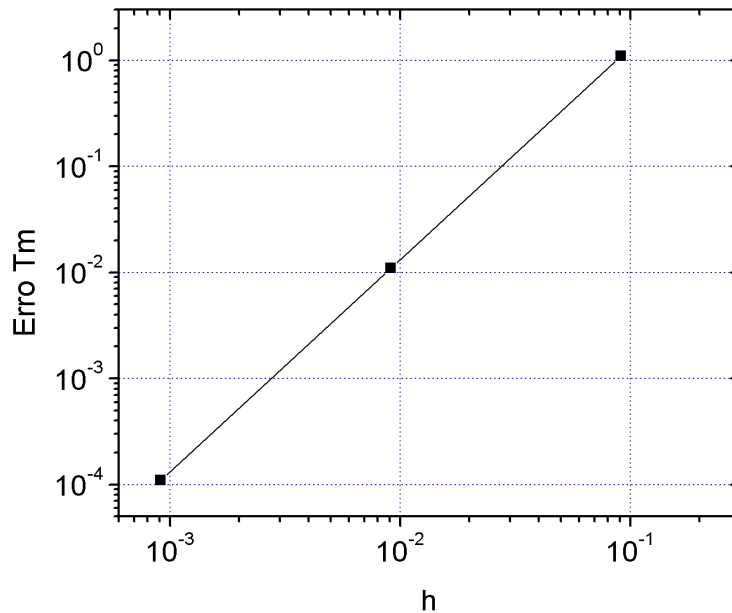


Figura 3.4: Efeito da malha sobre E_h para a variável T_m ao se reduzir h com $r = 10$ e $p_L = 2$

Outra abordagem seria isolar 'r' para um erro desejado na prática, tendo como conhecidos $E_h(\phi_2)$ e p_L do problema. Por exemplo: para o problema citado na Fig. 3.4, o erro conhecido na malha 1 (11 volumes) para a variável T_m é de aproximadamente 1 ($E_h(\phi_2) \approx 1$). Sabendo que para este problema $p_L=2$, qual seria o número de volumes necessário para se obter um erro de 10^{-6} ? Basta isolar r na Eq. 3.11 e posteriormente obter-se N_1 com a Eq. 3.12, resultando em

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

$$10^{-6} = \frac{1}{r^2}, \quad r^2 = 10^6, \quad r = 10^3$$

$$r = \frac{h_2}{h_1} = \frac{L/N_2}{L/N_1} = \frac{N_1}{N_2}, \quad 10^3 = \frac{N_1}{11}$$

$$N_1 = 11 \cdot 10^3 \quad \text{ou} \quad N_1 = 11000$$

3.3.2 Verificação de p_L

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

1) Ordem efetiva equivalente (p_E^*):

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

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

2) Ordem aparente equivalente (p_U^*):

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

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 . Portanto, ele pode ser aplicado na prática.

O valor de p_L teórico é confirmado se p_E^* e/ou $p_U^* \rightarrow p_L$ para $h \rightarrow 0$.

Está mostrado na Fig. 3.5 um exemplo prático do comportamento de p_U^* conforme o número de nós aumenta, ou h diminui.

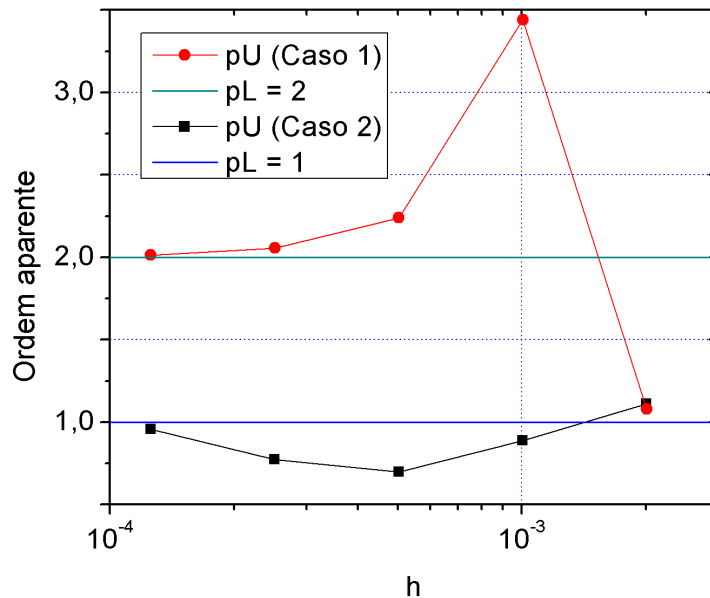


Figura 3.5: Efeito de p_U^* ao se reduzir h para dois casos distintos

O Caso 1 mostrado na Fig. 3.5 é a ordem aparente da primeira derivada numérica da função tangente próximo de um ponto onde a derivada tende ao infinito. Nas malhas iniciais a ordem aparente fica distante da ordem assintótica do método utilizado (ordem 2). No entanto ao aumentar

a malha utilizada, o comportamento da ordem aparente tende à ordem assintótica. Este é um caso onde a função é bem comportada.

O Caso 2 mostrado na Fig. 3.5 é a ordem aparente da solução numérica do coeficiente de descarga de um motor-foguete operando no vácuo. Neste caso apenas nas 3 últimas malhas foi possível identificar um comportamento assintótico da ordem aparente para a ordem assintótica utilizada na aproximação (ordem 1).

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 valores diferentes de h).

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 dado por

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

onde

$$p = \text{valor mínimo entre } p_L \text{ e } p_U^* \text{ para } p_U^* > 0 \quad (3.17)$$

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

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:

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

onde

$U_h^{\text{GCI}}(\phi_1)$ deve ser apresentado com 2 algarismos significativos. A precisão de ϕ_1 deve ser compatível com U , como exemplificado na próxima seção.

3.3.5 Exemplo 1 de cálculo

Dados: $L = 1$ 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 \downarrow
 $r = 2$ $p_U = 2,43$

$p = \text{mínimo entre } 2 \text{ e } 2,43 = 2$

Portanto $U_h^{\text{GCI}}(\phi_1) \cong 3,9$ e

$$\phi = 36,7 \pm 3,9$$

3.3.6 Exemplo 2 de cálculo

Dados: $p_L = 1$, $F_S = 3$, problema 2D (r é dado pelo refino da malha em cada direção, $r = r_x = r_y = 2$), é apresentado o Cd em 9 malhas, onde Cd é o coeficiente de descarga da simulação de um motor-foguete operando no vácuo.

N_x	N_y	Cd	p_U	U^{GCI}
24	10	1,074675		
48	20	1,042141		
96	40	1,014083	0,2135	0,5276
192	80	0,999171	0,9119	0,0507
384	160	0,990503	0,7827	0,0361
768	320	0,986015	0,9496	0,0145
1536	640	0,983686	0,9464	0,0075
3072	1280	0,982519	0,9969	0,0035
6144	2560	0,981935	0,9988	0,0018

Para a última malha ($N_x = 6144$ e $N_y = 2560$), tem-se

$$U_h^{\text{GCI}}(Cd) \cong 0,0018$$

então

$$Cd = 0,9819 \pm 0,0018$$

3.4 Erro de Iteração (E_i)

O erro de iteração é definido por

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

onde

ϕ_i : variável de interesse na iteração i

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

As principais causas de E_i são:

- 1) O 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 exemplo com 3 equações para p , u e v).

Características de E_i (Fig. 3.6):

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, tem-se

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

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 $i \rightarrow \infty$

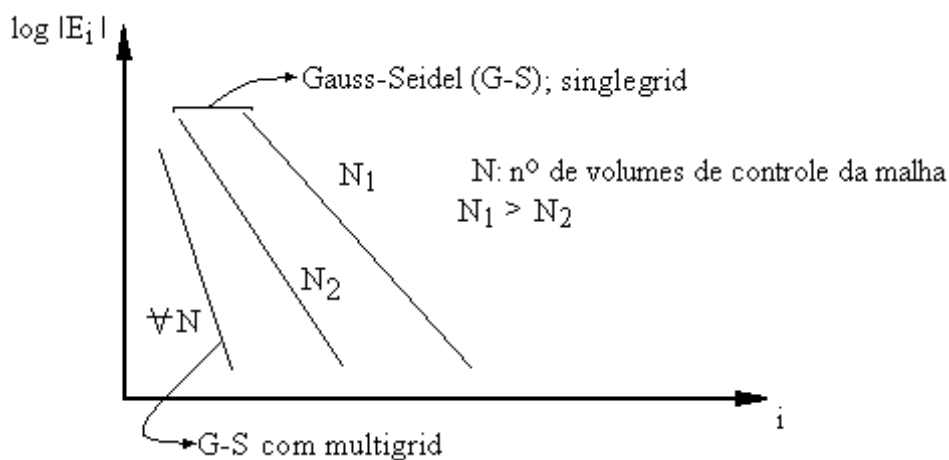


Figura 3.6: Efeito de i sobre E_i para $i \rightarrow \infty$.

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

O procedimento recomendado para a minimização do erro de iteração (E_i) é o seguinte:

- 1) Escolher uma ou mais variáveis de interesse (ϕ).
- 2) Monitorar a variação de $\Delta\phi_i = \phi_i - \phi_{i-1}$ ao longo das iterações até que fique praticamente constante com i , por maior que seja i (note que este valor praticamente constante pode oscilar levemente ao longo das iterações).
- 3) Identificar o início da variação constante denominado por i_π .
- 4) O ponto recomendado para encerrar o processo iterativo é pelo menos o dobro deste valor, ou seja, $2i_\pi$.

O procedimento recomendado é ilustrado na Fig. 3.7.

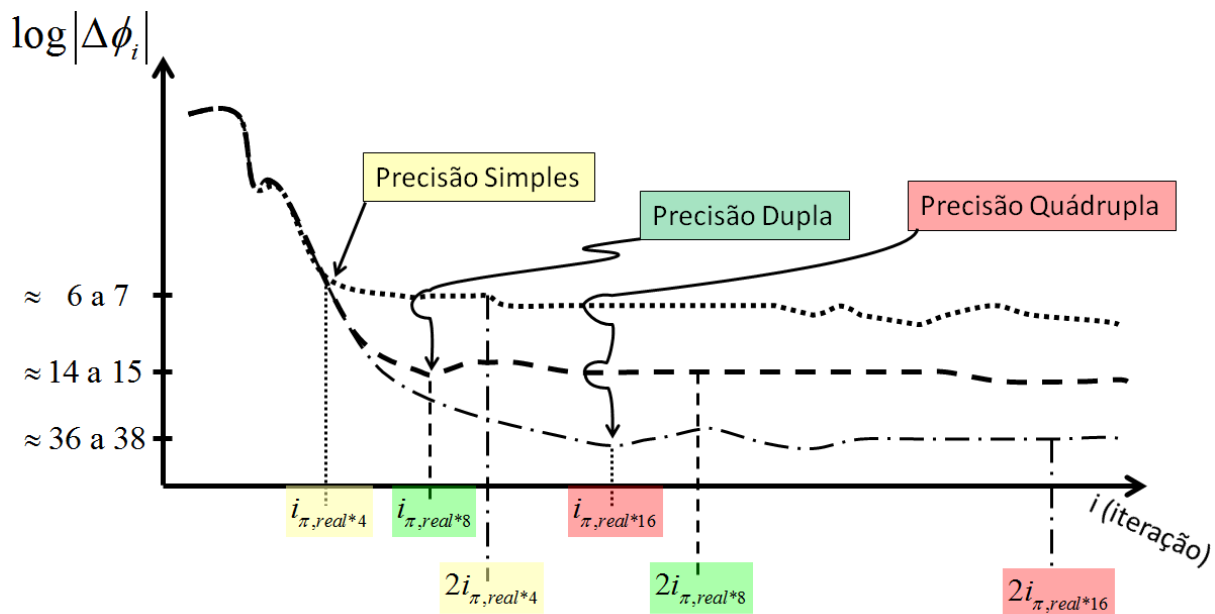


Figura 3.7: Procedimento recomendado para a minimização de E_i .

O erro de iteração (E_i) obtido com este procedimento será menor ou igual ao erro de arredondamento de máquina (E_π), ou seja,

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

Na Fig. 3.7 nota-se que dependendo da precisão adotada nos cálculos (simples, dupla ou quádrupla) é necessário aumentar o número de iterações para se chegar no erro de arredondamento máquina e, como consequência, para parar o processo iterativo no ponto recomendado.

Ainda na Fig. 3.7, o comportamento mostrado ao se reduzir a precisão dos cálculos (de precisão quádrupla para precisão dupla, por exemplo) também ocorre qualitativamente ao se aumentar o número de nós do problema: o patamar de variação, praticamente constante, sofre aumento pelo fato dos resultados estarem parcialmente contaminados com erros de arredondamento.

3.5 Erro de Arredondamento (E_π)

O erro de arredondamento verdadeiro é definido por

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

onde

Φ : solução analítica exata da variável de interesse

ϕ : solução numérica apenas com E_π , sem E_h , E_i , E_o .

A Fig. 3.8 mostra o comportamento do erro de arredondamento conforme o tamanho de malha h diminui, o que pode ser entendido também como o número de nós na malha aumentando.



Figura 3.8: Comportamento de E_π com h e N .

A causa de E_π é a representação finita dos números reais nas computações. Estes números são representados com uma determinada 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 pelos seguintes três fatores:

1) **Número de cálculos:** quanto maior o número de nós N da malha, maior E_π .

Um modelo simples para estimar a perda de precisão máxima (Δp_{\max}) devido ao número de cálculos é dado por

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

onde

N: número de volumes no caso 1D; no caso 2D ou 3D, N é o maior valor do número de volumes em uma única direção (por exemplo, 20 x 50 resulta em $N = 50$).

$\theta(N)$: ordem de grandeza de N em notação científica, ou também, a parte inteira de $\log_{10} N$.

Exemplo de perda de precisão máxima:

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

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

Portanto, se $\phi = 1,234567 \times 10^3$, então de 2 a 4 algarismos do lado direito de ϕ podem ter E_{π} .

2) **Cancelamento subtrativo**: subtração entre dois números com valores próximos

Por exemplo: na Eq.(3.16), as soluções numéricas em 2 malhas e a diferença entre elas resulta em

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

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

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

3) **Ordens de grandeza muito diferentes**: cálculos envolvendo variáveis com valores muito pequenos e grandes.

Exemplo:

$$\phi_1 = 1,234567 \times 10^0$$

$$\phi_2 = 1,234567 \times 10^{-6}$$

$$\phi_1 + \phi_2 = 1,234568 \times 10^0$$

Salvo o valor da mantissa, todos os algarismos significativos de ϕ_2 foram perdidos nessa soma.

3.6 Outros Erros (E_o)

Existem outras fonte do erro numérico que podem ser causadas, por exemplo, por:

- 1) Implementação incorreta do modelo numérico no programa computacional. Exemplo: deveria ser $a = b/2$ e usa-se $a = b/3$.
- 2) 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) Uso incorreto do programa computacional na obtenção da solução numérica. Exemplo: deveria ser o k do cobre e usa-se o da madeira.
- 4) Uso da solução analítica com precisão menor que o da solução numérica. Por exemplo: a solução analítica tem 7 algarismos significativos e a solução numérica está com mais de 10 algarismos sem erro numérico.
- 5) Qualquer outra eventual fonte de erro.

A Fig. 3.9 mostra um indício de outras fontes de erro.

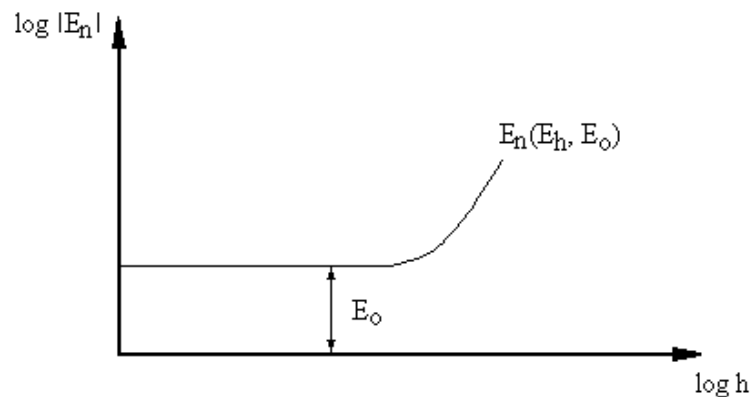


Figura 3.9: Indício de E_0 .

3.7 Método das Soluções Fabricadas

Este método é utilizado geralmente para problemas onde a solução analítica não é conhecida. Neste caso o objetivo é resolver um problema similar ao desejado, mas com uma solução analítica para analisar os eventuais erros que possam surgir na sua implementação.

Exemplo, supondo que não há solução analítica conhecida para a Eq. (3.25):

Equação original:

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

Solução proposta ou fabricada: $T = x^2$ (3.26)

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

Com a Eq. (3.26) e (3.27) na Eq. (3.25), tem-se

$$2 + x2x + (x^2)^2 - x \neq 0$$

ou

$$x^4 + 2x^2 + 2 - x \neq 0$$

Definindo-se

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

A equação original (3.25) pode ser reescrita por

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

A constante C é definida nos dados da seguinte forma:

- Se $C = 1 \rightarrow$ a Eq. (3.29) é resolvida cuja solução analítica é dada pela Eq. (3.26).
- Se $C = 0 \rightarrow$ a Eq. (3.25) é resolvida cuja solução analítica é desconhecida.

3.8 Composição de Erros

A composição dos erros de discretização com erros de arredondamento sobre o erro numérico é mostrada na Fig. 3.10.

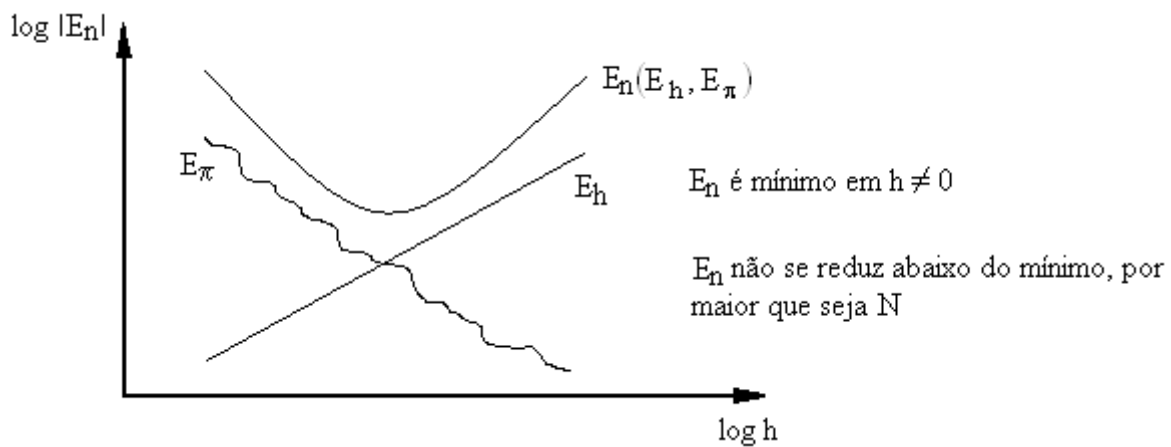


Figura 3.10: E_n causado apenas por E_h e E_π .

A composição dos erros de iteração com erros de arredondamento sobre o erro numérico é mostrada na Fig. 3.11.

Definição de média da norma l_1 do erro numérico:

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

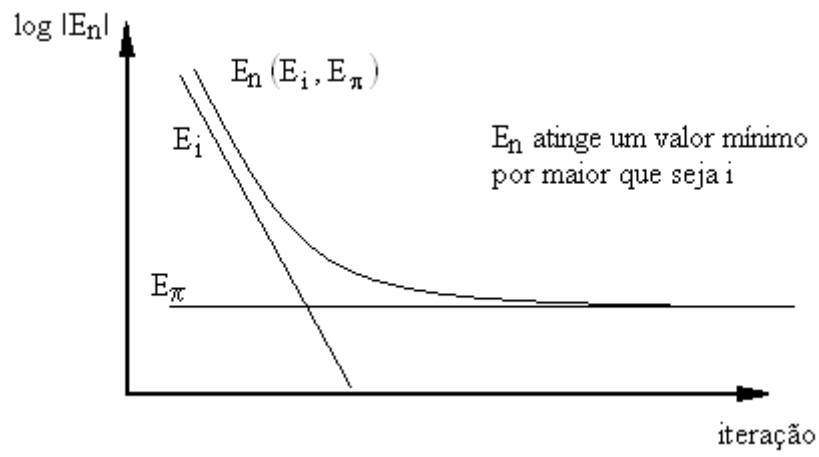


Figura 3.11: E_n causado apenas por E_i e E_π para uma malha com N volumes.