

Multiextrapolação de Richardson e Verificação da Ordem de Acurácia de Esquema Híbrido sobre a Equação 2D de Advecção-Difusão com Termo Fonte

Ana Paula da S. Vargas, Carlos H. Marchi, Marcio A. V. Pinto

Universidade Federal do Paraná - Departamento de Engenharia Mecânica

81531-980, Curitiba, Paraná

E-mails: vargas.apaulas@gmail.com; machi@pq.cnpq.br; marcio_villela@ufpr.br

Resumo: Este trabalho apresenta a solução numérica da equação de advecção-difusão 2D, com termo fonte e erro de truncamento combinando o método das soluções fabricadas (MSF) com a verificação da ordem de acurácia a priori e a posteriori. A estimativa a priori da ordem de acurácia é realizada por meio da dedução da ordem formal baseada na série de Taylor a partir da aplicação do método da correção adiada (MCA). Tal abordagem é utilizada com o objetivo de verificar efetivamente a ordem de acurácia das soluções numéricas calculada a posteriori pela utilização de técnicas híbridas. A estimativa a posteriori é realizada com base na estimativa do erro de discretização obtida por meio de Multiextrapolações de Richardson (MER). As soluções são obtidas com o emprego dos Métodos de Diferenças Finitas e multigrid. Os resultados obtidos indicam que: i) o valor do parâmetro de mistura tem grande influência na ordem do erro de discretização para todas as variáveis de interesse; ii) o parâmetro de mistura não altera a eficácia de MER; iii) comprovou-se que MER é uma ferramenta capaz de potencializar a acurácia das soluções numéricas reduzindo o seu custo computacional; iv) MER provê subsídios para os casos em que não se consegue estimar a priori ou a posteriori as ordens do erro numérico e v) o efeito de Pe sobre o erro de discretização obtido com a utilização de MER apresenta melhor resultado para Pe pequenos.

Palavras-chave: Multiextrapolação de Richardson, método das soluções fabricadas, equação de Advecção-Difusão 2D, método da correção adiada.

1 Introdução

Dentre os principais interesses na área de dinâmica dos fluidos computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) está o de obter soluções numéricas acuradas e confiáveis de modelos que envolvam interação entre os processos advectivo e difusivo. Dificuldades comumente experimentadas na solução desses modelos podem ser reduzidas ou eliminadas pelo conhecimento do comportamento da solução por efeitos causados, por exemplo, pelo número de Péclet (Pe), por ordens de acurácia mistas e presença de termo fonte.

Os modelos matemáticos empregados em CFD representam problemas básicos de transferência de calor e de mecânica dos fluidos. Qualquer equação governante tem suas propriedades vinculadas diretamente às propriedades físicas do escoamento. Em modelos de transporte a descrição do escoamento é o resultado de um balanço entre os efeitos dos fluxos advectivo, difusivos, fontes externas e internas.

A solução numérica de equações de advecção-difusão contribui para a solução numérica das equações de Navier-Stokes onde simplificações são realizadas em função das propriedades do escoamento, permitindo assim, o emprego de métodos numéricos mais simples [3].

Atualmente, não se consideram mais apenas efeitos físicos e de modelagem. A preocupação em obter resultados numéricos cada vez mais acurados, na solução de problemas em Engenharia, têm levado muitos pesquisadores a desenvolverem diversas metodologias de solução. Verifica-se o grande interesse no efeito que técnicas numéricas, computacionais, parâmetros físicos e numéricos, causam na solução de forma que possibilite a previsão e a confiabilidade de seus resultados [1,7,8,10].

Acurácia e previsões confiáveis em mecânica dos fluidos são objetivos fundamentais em CFD [7,9,10]. Devido a isso, aumentar a acurácia do resultado da simulação numérica de

escoamento de fluidos e reduzir os recursos computacionais necessários para estas simulações estão em constante estudo.

Tendo em vista o exposto acima, a importância desse trabalho se concentra em comprovar o valor correto da ordem assintótica do erro de discretização para aproximações numéricas de 1ª e 2ª ordens, muito comuns no Método de Diferenças Finitas (MDF), por meio da aplicação do método de correção adiada [2] e Multiextrapolação de Richardson. Verifica-se também a influência de parâmetros, físico (número de Péclet) e numérico (parâmetro de mistura de métodos mistos), sobre o erro de discretização e sua ordem. Este estudo deve contribuir para os processos de verificação em CFD [7].

O interesse em esquemas híbridos está em determinar um modelo numérico apropriado de forma a atender altos níveis de acurácia. Nesse sentido, a verificação da ordem de acurácia da solução numérica *versus* ordem de acurácia formal da técnica numérica tem como objetivo identificar em que medida um modelo numérico é resolvido adequadamente. Para tanto, dois métodos são abordados: estimativa de erro *a priori* e estimativa de erro *a posteriori* [7].

A estimativa *a priori* da ordem de acurácia é realizada por meio da dedução da ordem formal baseada na série de Taylor a partir da aplicação do método de correção adiada (MCA) (ou *Deferred-Correction Approaches* – DCA) [2]. Tal abordagem é utilizada com o objetivo de verificar efetivamente a ordem de acurácia das soluções numéricas calculada *a posteriori* pela utilização de técnicas híbridas. A ideia do MCA consiste em equilibrar a solução através de técnicas de aproximação de baixa e alta ordem por meio de um parâmetro de mistura (β) na forma:

$$F_e = F_e^L + \beta(F_e^H - F_e^L)^{old} \quad (1)$$

onde F_e^L é uma aproximação de baixa ordem e F_e^H é a aproximação de alta ordem. O termo em parênteses é calculado usando valores da iteração imediatamente anterior e é indicado pelo sobrescrito “old”.

Para estimar, *a posteriori*, a magnitude da ordem do erro de discretização bem como a influência do parâmetro numérico de esquemas híbridos, emprega-se o método de extrapolação de Richardson (ER) [6] de forma recursiva. Esse procedimento é conhecido por Multiextrapolação de Richardson (MER) (ou *Repeated Richardson Extrapolation* - RRE) [6,11]. ER também é bastante utilizada para reduzir o erro de discretização e aumentar a ordem de acurácia, pois cada aplicação representa um nível de extrapolação e a sua eficácia pode ser potencializada.

Com isso, os objetivos deste trabalho são: (1) análise da ordem de acurácia da solução numérica *versus* ordem de acurácia formal da técnica numérica; (2) verificação do efeito do parâmetro físico (Pe) na solução e no erro numérico; (3) verificação do efeito do parâmetro numérico na solução e no erro numérico; (4) verificação da solução com o emprego de MER.

Para tanto, levando-se em conta as condições do erro de truncamento, e conseqüentemente, o erro de discretização inerentes a aproximações numéricas baseadas no MDF, este trabalho apresenta a solução numérica da equação de advecção-difusão 2D, em regime permanente, com termo fonte e solução analítica, obtidos por meio do método das soluções fabricadas (MSF) (ou *Method of Manufactured Solutions* – MMS) [4]. O procedimento para a utilização do MSF baseia-se na seleção *a priori* de uma solução analítica e então obtém-se um termo fonte para equilibrar a equação governante [4]. Através da análise do erro de discretização verifica-se a concordância das ordens de acurácia teórica e da solução, conferindo assim um elevado grau de confiança referente a erros na codificação.

2 Conceitos e métodos

O erro da solução numérica, ou simplesmente erro numérico (E), é a diferença entre a solução analítica exata (Φ) de uma variável de interesse e sua solução numérica (ϕ) [5, 6], ou seja,

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (2)$$

O erro numérico é causado basicamente por quatro fontes, que são: erros de iteração, erros de truncamento, erros de arredondamento e erros de programação [5, 6]. Quando as demais fontes são minimizadas ou inexistentes, o erro de truncamento passa a ser denominado erro de discretização (Eh). Similarmente à forma geral do erro de truncamento, Eh é dado por

$$Eh = c_0 h^{p_0} + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + \dots \quad \text{para } h \rightarrow 0 \quad (3)$$

onde o menor expoente de h na expressão de Eh na Eq. (3), p_0 , chamamos ordem assintótica ou de acurácia de Eh . A ordem assintótica (p_0) e os expoentes dos termos não nulos na equação do erro de truncamento (p_1, p_2, \dots) são denominadas ordens verdadeiras (p_V). O conjunto representado por p_V e seus elementos são números reais e seguem a relação: $1 \leq p_0 < p_1 < p_2 < \dots$. Todas as ordens verdadeiras são valores conhecidos. Os coeficientes reais c_0, c_1, c_2, \dots independem de h e podem ser positivos ou negativos são função da variável dependente e de suas derivadas. Tanto os coeficientes c_i como as ordens verdadeiras dependem das aproximações numéricas aplicadas.

A ideia básica de ER exige a solução numérica da variável de interesse em duas malhas com diferentes números de nós. Por exemplo, com base nas Eqs. (2) e (3), consideram-se as soluções aproximadas $\phi(h)$ e $\phi(rh)$ representadas por

$$\Phi - \phi(h) = c_0 h^{p_0} + \mathcal{O}(h^{p_1}) \quad (4)$$

$$\Phi - \phi(rh) = c_0 (rh)^{p_0} + \mathcal{O}(h^{p_1}) \quad (5)$$

Subtraindo a Eq. (5) da Eq. (4), obtém-se a expressão para o erro de truncamento:

$$c_0 h^{p_0} = \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_0} - 1} + \mathcal{O}(h^{p_1}) \quad (6)$$

Assim, substituindo a Eq. (6) na Eq. (4) chega-se a

$$\Phi = \phi(h) + \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_0} - 1} + \mathcal{O}(h^{p_1}) \quad (7)$$

A aplicação repetida da Eq. (7) é denominada por Multiextrapolação de Richardson (MER) em que a primeira aplicação é considerada o primeiro nível de extrapolação, chegando-se a p_0 . Com a aplicação sucessiva desse processo, definem-se os valores sequenciais das ordens por p_m , cada nível de malha por g , e m o número de aplicações de ER, assim, pode-se reescrever a Eq. (7) como

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1} \quad (8)$$

em que $g = 2, \dots, G$, $r = h_{g-1}/h_g$ e $m = 1, \dots, g - 1$; G é o número total de malhas e $\phi_{g,0}$ representa ϕ sem o emprego de ER. Teoricamente, quanto maior o valor de m , mais próximo $\phi_{g,m}$ estará de Φ . O valor máximo de m permitido é $m = M$ onde $M = G - 1$. Os valores de p_m podem ser verificados com base nos conceitos de ordem efetiva (p_E) e ordem aparente (p_U), dadas pelas Eqs. (8) e (9), isto é,

$$p_{Eg,m} = \frac{\log \left[\frac{\Phi - \phi_{g-1,m-1}}{\Phi - \phi_{g,m}} \right]}{\log(r)} \quad e \quad p_{Ug,m} = \frac{\log \left[\frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}} \right]}{\log(r)} \quad (9)$$

assumindo-se $g = 2, \dots, G$ para $p_{Eg,m}$, $g = 3, \dots, G$ para $p_{Ug,m}$ e $m = 1, \dots, M$.

3 Modelo Matemático

A equação de advecção-difusão [3] utilizada neste trabalho representa o comportamento da temperatura em um domínio bidimensional, com termo fonte, em um sistema de coordenadas cartesianas, para regime permanente e considerando-se propriedades constantes, dada por

$$Pe_x \frac{\partial T}{\partial x} + Pe_y \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + S(x, y) \quad (10)$$

onde T é a temperatura, Pe_i é o número de Péclet (com $i = x$ ou y) e o termo fonte S é dado por

$$S(x, y) = \frac{\pi[(\pi \text{sen}(\pi x) + Pe_x \cos(\pi x))(e^{Pe_x x} - 1) - 2Pe_x \cos(\pi x)e^{Pe_x x}](e^{Pe_y y} - 1)}{(e^{Pe_x} - 1)(e^{Pe_y} - 1)} \quad (11)$$

obtido por meio do MSF.

As condições de contorno são dadas por

$$T(0, y) = T(1, y) = T(x, 0) = 0 \text{ e } T(x, 1) = \text{sen}(\pi x) \frac{(e^{Pe_x x} - 1)}{(e^{Pe_x} - 1)} \quad (12)$$

Como já mencionado anteriormente, o termo fonte e as condições de contorno foram ajustadas por meio do MSF de forma a possibilitar a obtenção da solução analítica dada por

$$T(x, y) = \text{sen}(\pi x) \frac{(e^{Pe_x x} - 1)(e^{Pe_y y} - 1)}{(e^{Pe_x} - 1)(e^{Pe_y} - 1)} \quad (13)$$

Neste trabalho, por conveniência, os resultados são analisados considerando $Pe_x = Pe_y = Pe$.

4 Modelo Numérico

O modelo numérico é caracterizado pelo uso do MDF com malhas uniformes. Com o intuito de verificar as ordens verdadeiras da solução numérica, *a priori* e *a posteriori*, o MCA [2] é aplicado de forma que, nas aproximações para os termos de advecção é utilizada a técnica CDS-2 com correção adiada sobre UDS-1 conforme a Eq. (14).

$$T_P = T_{P,UDS-1} + \beta(T_{P,CDS-2}^* - T_{P,UDS-1}^*) \quad (14)$$

onde $T_{P,CDS-2}^*$ e $T_{P,UDS-1}^*$ são os valores conhecidos da iteração anterior e são aplicados conforme o esquema dado pela Eq. (15).

$$\beta = \begin{cases} 0, & \text{caso UDS - 1} \\ 1, & \text{caso CDS - 2} \\ 0 < \beta < 1, & \text{mistura} \end{cases} \quad (15)$$

A Eq. (15) fornece a possibilidade de uma análise do comportamento da solução e de seu erro por meio da variação do parâmetro de mistura (β).

Substituindo as aproximações definidas anteriormente na Eq. (10), obtém-se

$$\left(\frac{Pe}{h_x} + \frac{Pe}{h_y} + \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2}\right)T_P = \left(\frac{Pe}{h_x} + \frac{1}{h_x^2}\right)T_W + \left(\frac{Pe}{h_y} + \frac{1}{h_y^2}\right)T_S + \frac{1}{h_x^2}T_E - \frac{1}{h_y^2}T_N + S(x, y) + \beta \left[\left(\frac{Pe}{h_x} + \frac{Pe}{h_y}\right)T_P^* - \frac{Pe}{2h_x}(T_W^* + T_E^*) - \frac{Pe}{2h_y}(T_S^* + T_N^*) \right] + \varepsilon_{\tau\beta} \quad (16)$$

onde $\varepsilon_{\tau\beta}$ é o erro de truncamento obtido e apresentado na Eq. (17) considerando $h = h_x = h_y$.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\tau\beta} = & -\frac{(1-\beta)}{2!}(T_{P_x}^{ii} + T_{P_y}^{ii})h + \left[(2T_{P_x}^{iii} - T_{P_x}^{iv}) + (2T_{P_y}^{iii} - T_{P_y}^{iv}) \right] \frac{h^2}{12} \\ & - \frac{(1-\beta)}{4!}(T_{P_x}^{iv} + T_{P_y}^{iv})h^3 + \left[(3T_{P_x}^v - T_{P_x}^{vi}) + (3T_{P_y}^v - T_{P_y}^{vi}) \right] \frac{h^4}{360} \\ & - \frac{(1-\beta)}{6!}(T_{P_x}^{iv} + T_{P_y}^{iv})h^5 + \left[(4T_{P_x}^{vii} - T_{P_x}^{viii}) + (4T_{P_y}^{vi} - T_{P_y}^{viii}) \right] \frac{h^6}{20160} + \dots \end{aligned} \quad (17)$$

Na Eq. (17) os subscritos P_x e P_y são os pontos de expansão considerados, na direção x e na direção y , respectivamente; e o índice sobrescrito indica a ordem da derivada.

Como as derivadas parciais são diferentes de zero, as ordens verdadeiras para o erro no cálculo de T são

$$\begin{aligned} 0 \leq \beta < 1 & \Rightarrow p_V(i) = i \\ \beta = 1 & \Rightarrow p_V(i) = 2i \end{aligned} \quad (18)$$

onde $i = 1, 2, 3, \dots$ confirmando, assim, a ordem assintótica do erro no cálculo de T quando o esquema utilizado é UDS-1, $p_0 = 1$, e CDS-2, $p_0 = 2$.

5 Resultados e Conclusão

A metodologia proposta foi aplicada a diversas variáveis de interesse, a saber, a temperatura no centro do domínio (T_c), a temperatura média (T_m), a taxa de transferência de calor ao leste (q_e), a taxa de transferência de calor ao norte (q_n) e a média da norma l_1 do erro numérico (L). Os resultados obtidos para cada uma destas variáveis podem ser encontrados em [11].

Os resultados obtidos *a posteriori* podem ser verificados nas Figuras 1, 2 e 3 para as variáveis $T_c = T(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, T_m e q_e , respectivamente. Elas apresentam as três primeiras ordens verdadeiras obtidas com o emprego de MER quando $\beta = 0$ e 1.

Estes resultados mostram a tendência das ordens verdadeiras do erro de discretização obtidas *a posteriori*, considerando a variação do parâmetro de mistura (β) dada pela Eq. (15). As ordens obtidas desta forma podem ser corroboradas com aquelas obtidas na estimativa *a priori*, por exemplo, para a variável T_c , tem-se $p_V(i) = i$ para $0 \leq \beta < 1$ e, para $\beta = 1$ tem-se $p_V(i) = 2i$, com $i = 1, 2, 3, \dots$. As ordens obtidas *a priori* para a variável T_m são: $p_V(i) = 2i$, com $i = 1, 2, 3, \dots$; e para q_e são: $p_V(i) = 2 + i$, com $i = 0, 1, 2, 3, \dots$, para qualquer valor de β .

Os resultados apresentados são os obtidos para $Pe = 1$ e as indicações encontradas nas legendas de cada gráfico referem-se ao método de obtenção da respectiva ordem, isto é, para $p_E(Th)$ (ordem efetiva) e $p_U(Th)$ (ordem aparente); Ti_pU é a solução extrapolada uma vez com base em pU e Tbi_pU é a solução extrapolada duas vezes com base em pU .

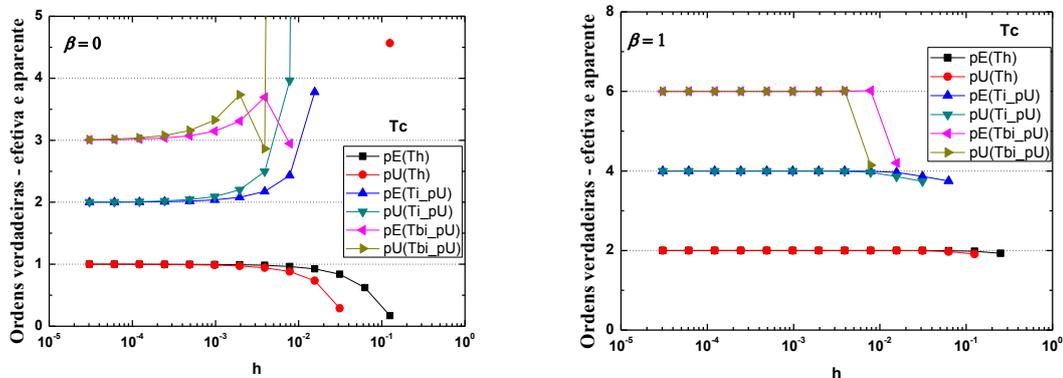


Figura 1: Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_c .

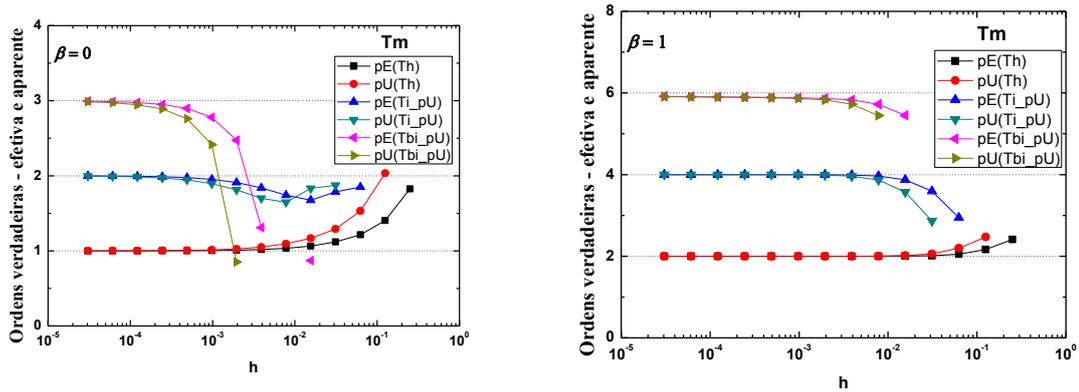


Figura 2: Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável T_m .

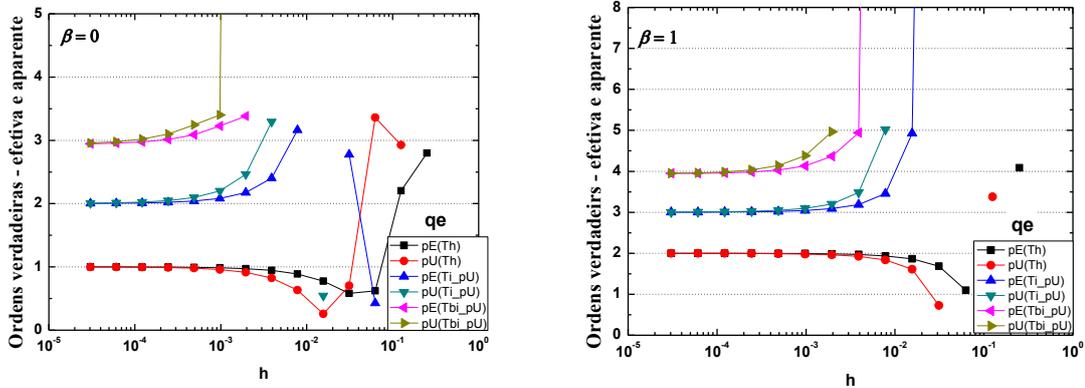


Figura 3: Ordens verdadeiras – efetiva e aparente da variável q_e .

Análises para outros valores de Pe , como $Pe = 0,1$ e 10 , mostram que este não influencia a solução, mas resultados melhores são observados para $Pe = 0,1$.

Os resultados mostram que as ordens efetivas e aparentes são confirmadas para $\beta = 0$ e $\beta = 1$ e, pode-se constatar também, que para qualquer mistura entre essas duas técnicas, ou seja, para $0 < \beta < 1$, as ordens verdadeiras são como as obtidas para $\beta = 0$ [11]. Porém, para os casos das variáveis T_m e q_e , considerando as ordens verdadeiras obtidas *a priori*, verifica-se que a ordem fica degenerada quando $0 \leq \beta < 1$ [11].

Este comportamento pode estar relacionado com alguns fatores, que podem ser devido à condição de contorno (no caso da variável q_e); ou com a ordem da função de interpolação utilizada; ou ainda, estar relacionado ao erro de poluição definido como a diferença dos erros de discretização e truncamento [5]. Pode-se considerar que as ordens obtidas *a posteriori* informam que as ordens obtidas *a priori* são determinadas conforme a função de interpolação utilizada (ou seja, depende do valor de β). No caso em que $0 \leq \beta < 1$, a menor ordem prevalece.

Em uma análise geral das ordens verdadeiras obtidas *a posteriori*, para cada variável de interesse, conforme o parâmetro de mistura $\beta = 0$ ou $\beta = 1$, todas as tendências assintóticas confirmam as análises obtidas *a priori*. Com isso torna-se confiável a análise das mesmas para outros fatores de mistura dos métodos propostos.

Da mesma forma verificou-se que, independente do número de Péclet, todas as tendências corroboram com os resultados obtidos *a priori*, mostrando assim, que análises feitas *a posteriori* trazem vantagens como ferramenta de previsão da magnitude do erro de discretização.

Ainda na análise *a posteriori*, a ordem aparente (pU) mostrou-se uma ferramenta confiável para a verificação numérica da solução no caso em que a solução analítica é desconhecida.

As ordens de acurácia obtidas *a posteriori* com MER trazem grandes vantagens em relação à perspectiva do comportamento da solução numérica de um problema físico em estudo. Estas podem indicar efetivamente as ordens do erro, uma vez que as ordens de erro *a priori* devem ser confirmadas pelas ordens obtidas *a posteriori*. Esta ideia pode ser ampliada para a verificação da solução nos casos em que não há conclusões significativas na estimativa *a priori* ou a solução analítica é desconhecida.

Detalhes deste trabalho podem ser encontrados em [11].

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 segundo autor é bolsista do CNPq.

Referências

- [1] I. Celik, W. M. Zhang, Calculation of numerical uncertainty using Richardson extrapolation: Application to Some Simple Turbulent Flow Calculations, *Journal of Fluids Engineering*, 117, 439-445, (1995).
- [2] J. H. Ferziger, M. Peric. “Computational Methods for Fluid Dynamics”, Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [3] A. O. Fortuna, “Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos”, Edusp, São Paulo, 2000.
- [4] P. M. Knupp, K. Salari, “Verification of computer codes in computational science and engineering”, Chapman & Hall/CRC, New York, 2003.
- [5] C. H. Marchi, “Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos”, Tese de Doutorado, PGMEC-UFSC, Florianópolis, 2001.
- [6] C. H. Marchi, L. A. Novak, C. D. Santiago, A. P. S. Vargas, Highly accurate numerical solutions with repeated Richardson extrapolation for 2D Laplace, *Mathematical Modelling*, 37, 7386–7397 (2013).
- [7] W. L. Oberkampf, T. G. Trucano, Verification and validation in computational fluid dynamics, *Progress in Aerospace Sciences*, 38, 209-272, (2002).
- [8] J. C. Roy, Grid Convergence error analysis for mixed-order numerical schemes, *AIAA Journal*, 41, 595-604, (2003).
- [9] J. C. Roy, Review of code and solution verification procedures for computational simulation. *J. Comp. Phys*, 205, 131 - 156, (2005).
- [10] W. Shyy, M. Garbey, A. Appukuttan, J. Wu, Evaluation of Richardson extrapolation in computational fluid dynamics, *Numerical Heat transfer*, Part B, 41, 139-164, (2002).
- [11] A. P. da S. Vargas, “Multiextrapolação de Richardson e Esquemas de 1ª e 2ª Ordens, Mistos e Crank-Nicolson sobre as Equações 2D de Advecção-Difusão e Fourier”, Tese de Doutorado, PGMEC-UFPR, Curitiba, 2013.