Verificação e Validação

- Verificação ≈ correto do ponto de vista de matemático
  - Verificação do código:
    - verificar se o código responde corretamente a ordem de precisão dos modelos implementados
  - Verificação dos cálculos:
    - Estudo sistemático de convergência de malha

- Validação ≈ correto do ponto de vista de ciência/engenharia

- Referência:
  - Verification and Validation in Computational Science and Engineering, Patrick J. Roache, Hermosa Publishers, 1998

Erros

- Erros de ordem de discretização:
  - estes erros podem ser avaliados com estudos de convergência de malha (tamanho da malha espacial, passo de tempo, modos de Fourier, etc)

- Erros de ordem de algum parâmetro numérico
  - Por exemplo: localização da fronteira “infinita”do domínio.

- Erros de ordem de algum parâmetro físico
  - São erros provenientes da modelagem física, e podem ser determinados com método de perturbação. Por exemplo: verificar solução no limite Mach $\rightarrow 0$ (incompressibilidade)

Erros

- Erros de modelagem, não possuem ordem
  - Por exemplo: (i) $\partial\rho/\partial n=0$ ou $\partial P/\partial n=0$ nas fronteiras; (ii) número de vórtices no método de vórtices discretos
- Erros de programação – são enganos
  - podem ser detectados com estudos de convergência de malha para problemas com solução exata (soluções manufaturadas)
- Erros de arredondamento do computador

Erro de truncamento x Erro de discretização

- Erros de truncamento:
  - indica a ordem de aproximação do método (diferenças finitas, elementos finitos, volumes finitos, etc)

- Erro de discretização
  - Erro devido a impossibilidade de utilizar número infinito de pontos

Convergência de Malha x Convergência do processo iterativo

- Convergência de malha:
  - Precisão de discretização

- Convergência do processo iterativo:
  - Precisão residual
  - Convergência iterativa incompleta corrompe a etapa de verificação do código
    - Utilizando precisão simples, utilizar de 7- 8 casas decimais

Ordem de convergência:

- Para um método de ordem *p*, o erro *E* assintótico da solução deve ser proporcional a Δ^p, onde Δ é o espaçamento da malha, ou outra medida de discretização
- Erro: $E = f(\Delta) - f_{exata} = C\,\Delta^p$ + H.O.T
  - H.O.T. = higher order terms
  - $C = erro/\Delta^p \rightarrow constante$ a medida que a malha é refinada para um método de ordem *p* (todos os pontos e derivadas)
- Definição:
  - Espaçamento de malha: $\Delta = \xi_{max}/N$
    - N = número de pontos; ξ_{max} = tamanho do domínio
  - Índice da ordem prevista do erro de discretização:
    - $I = E / \Delta^p + $ + H.O.T $\rightarrow$ *constante*

Metodologia para Verificação de Códigos: Método de Soluções Manufaturadas

- Selecionar uma solução contínua analítica
  - Deve permitir avaliar todas as ordens de diferenciação, termos cruzados
- A solução deve ser inserida na equação diferencial parcial governante (PDE) para fornecer o termo de produção $Q\ (x, y, z, t)$ que produz a solução
- Monitorar o erro numérico em função do refinamento sistemático da malha

Método de Soluções Manufaturadas

- Equação de teste: $L(F)=Q$
- Solução manufaturada: $$F_m = \frac{x_1^{m+1} x_2^{m+2} x_3^{m+3}}{F_{mn}}$$
  - $m = nl + na - 1$; F_{mn} = normalização de F_m
  - nl = ordem de L (*nl=2, para Laplaciano*) ;
  - na = ordem de precisão da discretização, (na=2 para diferenças centrais)
- Problema modificado: $L(F)=Qs$; $Qs = Q + L(F_m)$
- Condição de contorno $F = F_m$ nas fronteiras

Método de Soluções Manufaturadas

- Obter solução utilizando sistema de coordenadas transformado $\xi=(\xi_1,\xi_2,\xi_3)$, onde $0\leq\xi_1\leq 1$; $\xi_1=h_1(i\text{-}1)$

$$x_i = \xi_s + \xi_i + \mathbf{tanh(}d_i\ \xi_1\ \xi_2\ \xi_3\mathbf{)}$$

  - Se $d_i = 0$ não há esticamento da malha, $d_i \neq 0$, todas as derivadas, inclusive cruzadas são testadas.
  - $\xi_s \neq 0$ é necessário, para evitar singularidades na origem

- F_d : solução discreta
- Erro: $E = F_m - F_d = C_1\, h_1^{na} + C_2\, h_2^{na} + C_3\, h_3^{na} + H.O.T$
- Refinar a malha e verificar índice de convergência em pontos específicos (I_{cr} = centro do domínio), e máximo ($I_{max}=max_{i,j,k}\ I$)
- Se todos $I\rightarrow$constante quando N cresce, significa que houve verificação de: (i) equação transformada, (2) ordem da diferenças finitas (iii) procedimento de solução

Exemplo 1

$$L(F) = \nabla^2 (F) = 0$$

Solução manufaturada $$F_m = \frac{x_1^{m+1} x_2^{m+2} x_3^{m+3}}{F_{mn}}$$

Termo de forçamento $$Qs = F_m \left[\frac{m\,(m+1)}{x_1^2} + \frac{(m+1)\,(m+2)}{x_2^2} + \frac{(m+2)\,(m+3)}{x_3^2} \right]$$

malha	E_{max}	ponto E_{max}	E_{centro}	$I_{mx}=E_{max}/h^2$	$I_{centro}=E_{centro}/h^2$
5^3	$4{,}02 \times 10^{-4}$	4,4,4	$8{,}32 \times 10^{-6}$	$6{,}46 \times 10^{-3}$	$1{,}33 \times 10^{-4}$
9^3	$1{,}72 \times 10^{-4}$	8,8,8,	$6{,}50 \times 10^{-7}$	$1{,}11 \times 10^{-2}$	$4{,}16 \times 10^{-5}$
17^3	$4{,}92 \times 10^{-4}$	15,15,15	$3{,}40 \times 10^{-8}$	$1{,}26 \times 10^{-2}$	$8{,}70 \times 10^{-6}$
33^3	$1{,}34 \times 10^{-4}$	29,29,29	$-1{,}69 \times 10^{-6}$	$1{,}37 \times 10^{-2}$	$-1{,}73 \times 10^{-4}$

- O valor aproximadamente constante de I_{max} indica que toda a solução, incluindo a transformação de coordenadas e expressões de diferenças finitas, possui 2ª. ordem de precisão.
- O comportamento errático de I_{centro} para a malha mais fina indica problemas de arredondamento.

Exemplo 2

$$L(F) = \nabla \bullet \left(\Gamma \, \nabla F \right) = 0 \qquad \Gamma = \Gamma_o + \Gamma_m \sin(b)$$

$$b = x_1^n \; x_2^n \; x_3^n$$

Solução manufaturada

$$F_m = \frac{x_1^{m+1} x_2^{m+2} x_3^{m+3}}{F_{mn}}$$

$$x_{1n} = \frac{x_1 - x_{1\mathbf{min}}}{x_{1\mathbf{max}} - x_{1\mathbf{min}}} \; ; \quad x_{2n} = \frac{x_2 - x_{2\mathbf{min}}}{x_{2\mathbf{max}} - x_{2\mathbf{min}}} \; ; \quad x_{3n} = \frac{x_3 - x_{3\mathbf{min}}}{x_{3\mathbf{max}} - x_{3\mathbf{min}}}$$

$$bd = (x_{1\mathbf{max}} - x_{1\mathbf{min}})(x_{2\mathbf{max}} - x_{2\mathbf{min}})(x_{3\mathbf{max}} - x_{3\mathbf{min}})$$

Termo de forçamento

$$Qs = \frac{1}{F_{mn}} F_m \Big[\Gamma \, m \, (m+1) \, x_1^{m-1} x_2^{m+2} x_3^{m+3} + \Gamma \, (m+1)\,(m+2) \, x_1^{m+1} x_2^{m} x_3^{m+3} +$$
$$+ \Gamma \, (m+2)\,(m+3) \, x_1^{m+1} x_2^{m+2} x_3^{m+1} + \Gamma_x \, (m+1) \; x_1^{m} x_2^{m+2} x_3^{m+3} +$$
$$+ \Gamma_y \, (m+2) \; x_1^{m+1} x_2^{m+1} x_3^{m+3} + \Gamma_z \, (m+3) \; x_1^{m+1} x_2^{m+2} x_3^{m+2} \Big]$$

$$\Gamma_x = \frac{\Gamma_m \cos(b) \; x_2^n \; x_3^n}{bd} \qquad \Gamma_y = \frac{\Gamma_m \cos(b) \; x_1^n \; x_3^n}{bd} \qquad \Gamma_z = \frac{\Gamma_m \cos(b) \; x_1^n \; x_2^n}{bd}$$

Exemplo 2

$$L(F) = \nabla \bullet \left(\Gamma \, \nabla F \right) = 0 \qquad \Gamma = \Gamma_o + \Gamma_m \, \mathbf{sin}(b)$$

Γ_m/Γ_o=0,1	malha	5^3	9^3	17^3	33^3
d_i=0,1	$I_{mx}=E_{max}/h^2$	$3{,}90 \times 10^{-3}$	$8{,}77 \times 10^{-3}$	$1{,}00 \times 10^{-2}$	–
d_i=10	$I_{mx}=E_{max}/h^2$	0,433	0,691	1,21	1,53

- *Imx* indica que para esticamento moderado (*di*=0,1) houve verificação do código até 17^3
- Para o esticamento acentuado (*di*=10) observa-se variação de Imx mesmo para a malha 33^3. No entanto, observa-se convergência

Método de Soluções Manufaturadas

- A verificação do código através do teste sistemático de convergência de malha, fornece a verificação de
  - Qualquer transformação utilizada (e.g. coordenadas não ortogonais)
  - Ordem de discretização
  - Programação da discretização
  - Procedimento de solução da matriz de solução

Debugging

- Um resultado negativo da verificação utilizando solução manufaturada indica que há um erro
- Balanço global não satisfeito também indica a existência de erro
- Escolhas adequadas da solução manufaturada, ligando e desligando derivadas cruzadas, auxilia a identificar a fonte do problema.
- Pode-se ainda, comparar resultados numéricos de termos específicos com a solução analítica dos mesmos
- Independência de parâmetros na solução adimensional é mais uma ferramenta para auxiliar a identificar a existência de erros

Grid Convergence Index - GCI

- CGI serve para avaliar teste de convergência de malha.
- Fornece um método assintótico para quantificar incertezas de convergência de malha
- A ideia é relacionar os resultados do teste de convergência de malha aos resultados esperados ao dobrar a malha usando um método de 2a. Ordem.
- O GCI é baseado na estimativa do erro de convergência derivado na teoria generalizada da Extrapolação de Richardson

Extrapolação de Richardson

- A extrapolação de Richardson (1910) também é chamada de “extrapolação h^2” e “metodologia de obtenção de limite”
- Considera-se que a solução discreta *f* possui uma representação em série com espaçamento *h* igual a

$$f = f_{exata} + g_1\, h + g_2\, h^2 + g_3\, h^3 + \cdots$$

- onde g_1 e g_2, etc são funções contínuas e não dependem de discretização.
- Para um método de 2ª. ordem, g_1 =0.

Extrapolação de Richardson

- A ideia é combinar duas soluções discretas separadas f_1 e f_2, obtidas em duas malhas diferentes com espaçamento uniforme h_1 (malha fina) e h_2 (malha grossa), de forma a eliminar os termos de principal ordem, na expansão suposta do erro. Isto é, resolver para g_2 nos pontos nodais, substituir na equação de Richardson para obter uma melhor estimativa para f_{exata}.
- O resultado da declaração original de Richardson para extrapolação de h_2 é

$$f_{exata} = \frac{h_2^2 \; f_1 - h_1^2 \; f_2}{h_2^2 - h_1^2} + H.O.T$$

ou $$f_{exata} \cong f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^2 - 1}$$ onde $$r = \frac{h_2}{h_1}$$

Extrapolação de Richardson

- Frequentemente é afirmado que se r=2, $f_{exata} \cong 4/3\, f_1 - 1/3\, f_2$ é de 4ª ordem de precisão, se f_1 e f_2 forem de 2ª ordem
- Porém, isto só é verdade se não existirem potências impares na expansão. Por exemplo, para diferenças não centradas de 2ª ordem, a extrapolação h^2 é de 3ª ordem e não 4ª.

Generalização da Extrapolação de Richardson

$$f_{exata} \cong f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1}$$

- Não é necessário considerar ausência de potências ímpares. Para diferenças centradas a extrapolação é de ordem p+2. Para esquemas ponderados a montante, a extrapolação é de ordem p+1

Generalização da Extrapolação de Richardson

$$f_{exata} \cong f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1}$$

$$f_{exata} \cong f_1 \left[1 + \frac{(f_1 - f_2)/f_1}{r^p - 1} \right]$$

$$\varepsilon = \frac{(f_1 - f_2)}{f_1}$$

- Definindo: Erro estimado fracional E_1 e real A_1

$$E_1[malha \;\; fina] = \frac{\varepsilon}{r^p - 1}$$

$$A_1[malha \;\; fina] = \frac{(f_1 - f_{exata})}{f_{exata}}$$

- Combinando as expressões acima e usando uma expansão bimodal tem-se

$$A_1[malha \;\; fina] = E_1 + \vartheta(h^{p+m}, E_1^2)$$

Generalização da Extrapolação de Richardson

- E_1 é um estimador de erro ordenado, i.e., é uma aproximação ordenada do erro real fracional da solução na malha fina.
- E_1 é uma boa aproximação quando a solução é de precisão razoável, isto é, quando $E_1 << 1$.
- Pode-se utilizar ou não a extrapolação de Richardson, devido a preocupações com a ordem real do método, ou acúmulo de erros de arredondamento, ou convergência iterativa incompleta, ou incerteza do comportamento assintótico, ou falha na conservação de alguma propriedade com a extrapolação, etc.
- Porém, a extrapolação pode ser utilizada para reportar de forma consistente estudos de convergência de malha

Grid Convergence Index - GCI

➢ CGI relaciona ε obtido em um estudo de convergência de malha com o ε que seria esperado se um estudo de convergência de malha fosse realizado para o mesmo problema, com a mesma malha fina, utilizando um método de 2ª ordem (p=2) e dobrando a malha (r=2)

$$GCI[malha\ \ fina] = F_s \frac{|\varepsilon|}{r^p - 1} \quad ; \quad F_s = 3 \qquad \varepsilon = \frac{(f_1 - f_2)}{f_1}$$

- Note que se r=2 e p=2, CGI=$|\varepsilon|$
- F_s : fator de segurança, pois se F_s = 1 então GCI=E_1

➢O objetivo da GCI é reduzir ao mínimo de 2 exercícios de convergência de malha, numa base de relatórios uniformes.

Grid Convergence Index - GCI

➢ Existem situações onde realiza-se o teste de convergência para apenas algumas situações, sendo a malha grossa usada na maioria dos cálculos. Neste caso, deseja-se definir CGI (erro relativo) como uma correção da malha grossa e não da malha fina. Neste caso

$$f_{exata} \cong f_2 + (f_1 - f_2)\frac{r^p}{r^p - 1}$$

$$GCI[malha\ grossa] = F_s\ |\varepsilon| \frac{r^p}{r^p - 1} \quad ; \quad F_s = 3$$

$$GCI[malha\ grossa] = r^p\ GCI[malha\ fina] + F_s\ |\varepsilon|$$

Grid Convergence Index - GCI

- Exemplo (Equaçao de Burgers): $- U U_x + U_{xx}/Re = 0$, $U(0)=1$, $U(1)=0$
- Re = 1000
- Avaliar erro de atrito: dU/dx em x=1

	exata	f1 malha fina (2000 ptos)	f2 malha grossa (1600 ptos) R=1,25
dU/dx	-500	-529,41	-544,48

erro malha fina (f1-fex)/fex	erro malha grossa (f2-fex)/fex	(f2-f1)/f1	CGI malha fina (F_s=3)	CGI malha fina (F_s=1,25)	CGI grossa (F_s=3)	Richardson malha fina $E1=\|\varepsilon\|/(r^p-1)$	Richardson malha grossa $E1+\|\varepsilon\|$
5,88%	8,90%	2,85%	15,20%	6,34%	23,75%	5,07%	7,92%

- Extrapolação de Richardson é não conservativa