

VERIFIKACIJA KAO PREDUSLOV USPJEŠNE VALIDACIJE NUMERIČKIH SIMULACIJA

VERIFICATION AS A PRECONDITION FOR SUCCESSFUL VALIDATION OF THE RESULTS OF NUMERICAL SIMULATIONS

**Senad Balić, dipl.inž.maš.
Mašinski fakultet Univerziteta u Zenici
Zenica**

**Ernad Bešlagić, dipl.inž.maš.
Mašinski fakultet Univerziteta u Zenici
Zenica**

**Elma Smriko
Mašinski fakultet Univerziteta u Zenici
Zenica**

REZIME

Iako je validacija osnovni cilj zajedničkog procesa verifikacije i validacije rezultata numeričkih simulacija, njoj mora prethoditi verifikacija. Verifikacija daje odgovor na pitanje da li su postavljene jednačine koje opisuju neki proces korektno i tačno riješene.

Dokumentacija koja dolazi uz mnoge komercijalne solvere često nije dovoljna da bi se na osnovu nje moglo zaključiti da li se taj alat može koristiti za specifični problem koji proizvodni inženjer pokušava riješiti. U takvim slučajevima se preporučuje da inženjer samostalno provede postupak verifikacije. U radu je, na primjeru određivanja hidrauličkih gubitaka prilikom strujanja fluida kroz cijev, opisan proces verifikacije definisan standardom ASME V&V20-2009.

Ključne riječi: numeričke simulacije, kvalitet rezultata, verifikacija, validacija

ABSTRACT

Although the validation is a basic objective of the joined process of verification and validation of the numerical simulation results, it must be preceded with verification. Verification answers the question whether the given equations that describe the certain process are precisely or correctly solved.

Documentation that comes with many solvers is not sufficient for us to conclude whether we can use it for a specific problem that we want to deal with. In such cases it is recommended that the engineer goes through the verification procedure individually.

In this paper, we described the process of verification on the basis of ASME V&V20-2009 standard, using the example of determining the hydraulic losses of a fluid that flows through a pipe.

Keywords: numerical simulation, quality of results, verification, validation

1. UVOD U VERIFIKACIJU I VALIDACIJU NUMERIČKIH SIMULACIJA

U cilju daljeg usavršavanja procesa razvoja novih ili poboljšanja postojećih proizvoda, proizvodni inženjeri se sve više oslanjaju na numeričke simulacije, što dovodi do toga da se broj provedenih eksperimenata i izrađenih prototipova smanjuje. Eksperimentalno dobiveni rezultati se sve više nadomješćuju rezultatima dobivenim simulacijama. Zbog toga se kao logično nameće pitanje koliko su ti rezultati pouzdani. Kao odgovor na to pitanje razvijena je posebna oblast koja se naziva verifikacija i validacija numeričkih simulacija.

Metodologija verifikacije i validacije (V&V) je definisana standardom ASME V&V20-2009 - Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer [1]. Iako je kod V&V krajnji cilj validacija, njoj mora prethoditi verifikacija koja daje odgovor na pitanje da li primjenjeni algoritmi rješavaju postavljane jednačine korektno i tačno, ne obazirući se na to koliko te jednačine zapravo predstavljaju stvarni svijet. To je zadatak validacije tokom koje se tačnost i pouzdanost rezultata simulacija određuje direktnim poređenjem sa eksperimentalnim rezultatima u izabranim kontrolnim tačkama.

Postupak verifikacije koja se može podijeliti na verifikaciju koda i verifikaciju rješenja. To su matematičke aktivnosti koje ne uzimaju u obzir podudaranje rezultata simulacije sa stvarnim rezultatima. Verifikacija koda provjerava da li kod tačno rješava matematički model ugrađen u kod, dok verifikacija rješenja vrši procjenu numeričke tačnosti određene kalkulacije. I pored toga što su komercijalni alati u sve široj upotrebi, i što su verificirani za rješavanje široke lepeze različitih problema, može se desiti da nisu verificirani za konkretnе probleme koje inženjeri žele da riješe. U tom slučaju se preporučuje nezavisna provedba postupka verifikacije od strane samih korisnika komercijalnih alata. U ovom radu postupak verifikacije je objašnjen na primjeru određivanja linijskih gubitaka mehaničke energije pri strujanju fluida kroz glatke cijevi pomoću softverskog paketa SolidWorks, konkretno modula Flow Simulation (u daljem tekstu SWFS).

2. MODELIRANJE LINIJSKIH GUBITAKA

Linijski gubici h_f se određuju pomoću izraza Darcy-Weissbacha [3]:

$$h_f = \frac{\Delta p_f}{\rho g} = \lambda \frac{L}{D} \frac{v^2}{2g} = \lambda \frac{8LQ^2}{\pi^2 D^5 p}, \quad \dots (1)$$

gdje je: λ faktor trenja, L dužina cjevovoda, D prečnik cjevovoda, v srednja brzina strujanja fluida i Q protok.

Faktor trenja se obično određuje eksperimentalno, ali su vremenom razvijeni i obrasci za analitičko određivanje faktora trenja. Prema njima, faktor trenja je funkcija samo Reynoldsovog broja kod laminarnog strujanja ($Re < 2300$), dok kod turbulentnog strujanja ($Re > 4000$) faktor trenja zavisi i od relativne visine hrapavosti stijenke zida (δ/D). U prelaznoj oblasti faktor trenja je veoma nepredvidiv, te je pouzdanost proračuna slaba.

U području turbulentnog strujanja najtačnijom se smatra formula Colebrooka koja glasi [3]:

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = -0,86859 \cdot \ln \left(0,2698 \frac{k}{D} + \frac{2,5119}{Re \sqrt{\lambda}} \right), \quad \dots (2)$$

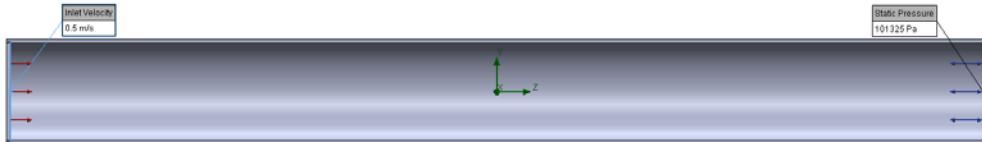
i iz koje se faktor trenja određuje iterativnim postupkom.

U radu je analizirano strujanje vode brzinom od 0,5 m/s, kroz glatku bakarnu cijev unutrašnjeg promjera 0,05 m i dužine 0,5 m. Strujanje je turbulentno jer Rejndoldsov broj iznosi približno 25000. Hrapavost bakarnih cijevi iznosi 1,5 μm te se ovdje radi o strujanju kroz hidraulički glatku cijev. Upotrebom navedenih izraza određena je veličina linijskih gubitaka i ona iznosi:

$$h_f = \lambda \frac{L}{D} \frac{v^2}{2g} = 0,00313636 \text{ m}, \quad \dots (3)$$

3. VERIFIKACIJA KODA

U sklopu verifikacije koda se vrši provjera da li sistemsku konvergenciju mreže prati konvergencija rezultata prema poznatom referentnom rješenju, odnosno egzaktnom analitičkom rješenju. Za složenije probleme za koje ne postoje egzaktna analitička rješenja u spomenutom standardu je predstavljena metoda proizvedenih rješenja (engl. *Method of manufactured solution - MMS*), koja nije predmet ovog rada.



Slika 1. Granični uslovi definisani u SWFS

Dobivena vrijednost linijskih gubitaka se prilikom verifikacije koda poredi sa rezultatima provedenih numeričkih simulacija u SWFS sa različitim kvalitetom mreže. Drugim riječima, prati se da li rješenja numeričkih simulacija konvergiraju dobivenom analitičkom rješenju pri konvergenciji mreže, odnosno kada $h \rightarrow 0$ (h je parametar veličine mreže). To se postiže određivanjem tzv. greške diskretizacije, E_h , koja predstavlja razliku između rezultata dobivenog numeričkom simulacijom $f(h)$ i egzaktog, analitičkog rezultata f^{exact} :

$$E_h = f(h) - f^{exact} \quad \dots (4)$$

SWFS se bazira na metodi konačnih volumena za koju se očekuje, ako je zadani problem dobro riješen, da je greška simulacije asimptotski proporcionalna h^p , gdje se p može smatrati redom konvergencije.

$$E_h = Ch^p + H.O.T. \quad \dots (5)$$

Zanemarivanjem izraza višeg reda (H.O.T.) moguće je odrediti koeficijent C za usvojeni, očekivani red konvergencije p . Mi smo usvojili $p=2$.

Provredene su simulacije za tri različita kvaliteta mreže. Numeričkim simulacijama se ne mogu direktno odrediti linijski gubici, nego se, u skladu sa izrazom (1), predstavljaju i određuju kao funkcija pada pritiska. Karakteristična veličina svake mreže je određena u skladu sa izrazom (7). U tabeli 1. su prikazani dobiveni rezultati numeričkih simulacija te ostale izračunate vrijednosti.

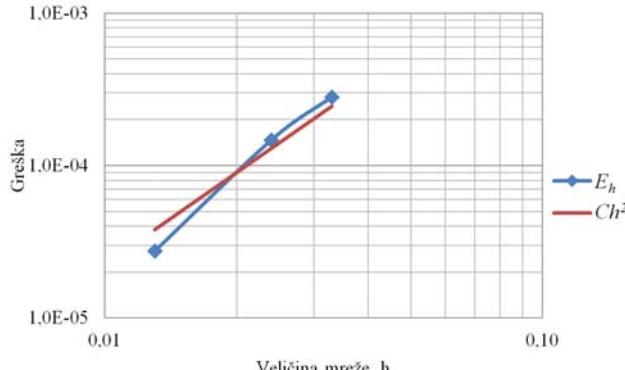
Tabela 1. Pregled dobivenih rezultata

	Ukupan broj ćelija	Karakter. vel. mreže	Faktor usavršavanja	Linijski gubici	Greška diskretizacije
	N_i	h_i, m	$r = h_{i+1}/h_i$	$h_f \cdot f(h)_i, m$	E_{hi}
Mreža 3	34224	0,033	...	0,002854374	$-2,81989 \cdot 10^{-4}$
Mreža 2	95952	0,024	1,410	0,002989422	$-1,46941 \cdot 10^{-4}$
Mreža 1	524440	0,013	1,761	0,003108839	$-0,27524 \cdot 10^{-4}$
Analitika	0,003136363	...

Na osnovu dobivenih vrijednosti moguće je odrediti stvarni red konvergencije, p^{obs} . Za bilo koje dvije mreže vrijedi da je:

$$p^{obs} = \frac{\ln\left(\frac{E_{h_{i+1}}}{E_{h_i}}\right)}{\ln\left(\frac{h_{i+1}}{h_i}\right)}. \quad \dots (6)$$

U našem slučaju, srednji stvarni red konvergencije rezultata iznosi $p^{obs}=2,428$ te se može izvući zaključak da analizirani kompjuterski kod obezbeđuje tačnost najmanje drugog reda. I analizom vrijednosti greške se može zaključiti da verificirani kod obezbeđuje zadovoljavajuću tačnost rezultata. Uočljivo je smanjivanje greške sa povećavanjem kvaliteta mreže. Na slici 2 je prikazana greška simulacije kao funkcija karakteristične veličine mreže (u logaritamskoj skali).



Slika 2. Greška kao funkcija kvaliteta mreže

4. VERIFIKACIJA RJEŠENJA

Kao i verifikacija koda tako i verifikacija rješenja se bazira na sistematskom poboljšanju mreže. I dok se verifikacijom koda može odrediti (engl. *evaluate*) greška, verifikacija rješenja omogućava samo procjenu (engl. *estimate*) greške, što za sobom odmah povlači i procjenu mjerne nesigurnosti. Nakon procijene proširene mjerne nesigurnosti $U_x\%$ (što nam omogućava verifikacija rezultata) može se sa vjerovatnoćom od $x\%$ tvrditi da se u intervalu $f \pm U_x\%$ nalazi stvarna vrijednost analizirane veličine f . Najčešće se kao cilj (i za eksperimente i za izračune) uzima vjerovatnoća od približno 95%.

Procedura od pet koraka definisana standardom [1] omogućava procjenu proširene mjerne nesigurnosti ($U_{95\%}$) preko Roacheovog indeksa konvergencije mreže (engl. *Grid Convergence Index* – u daljem tekstu GCI). GCI je procijenjena 95%-tina mjerena nesigurnost dobivena množenjem apsolutne vrijednosti procijenjene greške sa empirijski određenim faktorom sigurnosti, F_s . Najčešće korištена metoda za procjenu greške jeste klasična Richardsonova ekstrapolacija (engl. *Richardson Extrapolation* – u daljem tekstu RE). RE je bazirana na pretpostavci da se diskretna rješenja, f , mogu predstaviti kao stepeni red veličine mreže, h , te zahtjeva tri numerička rješenja zasnovana na različitim mrežama da bi se odredio taj red konvergencije (engl. *order of convergence*) i procijenila greška.

4.1. Procedura procjene numeričke nesigurnosti

Korak 1:

Prvi korak predstavlja određivanje karakteristične veličine mreže. U našem slučaju to urađeno pomoću slijedećeg izraza:

$$h = \left[\frac{\sum_{i=1}^N \Delta V_i}{N} \right]^{1/3}, \quad \dots (7)$$

gdje je: N ukupan broj celija a ΔV_i – zapremina i-te celije. U tabeli 1 su prikazane karakteristične vrijednosti za tri korištene mreže.

Korak 2:

U okviru drugog koraka provedene su tri numeričke simulacije i dobivene tri vrijednosti linijskih gubitaka (tabela 1). Faktor usavršavanja mreže, r , ne mora da bude cijelobrojan, iako to ima određene prednosti. Jedino je poželjno da njegova vrijednost bude veća od 1,3. Naše mreže ispunjavaju ovaj uslov koji je zasnovan na iskustvu a ne na nekom konkretnom izvodu.

Korak 3:

Na osnovu dobivenih vrijednosti linijskih gubitaka i izračunatih faktora usavršavanja mreže, red konvergencije se određuje na osnovu slijedećih izraza:

$$p = \left[\frac{1}{\ln(r_{21})} \right] \left[\ln \left| \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right| + q(p) \right], \quad \dots (8)$$

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right), \quad \dots (9)$$

$$s = 1 \cdot \text{sign} \left(\frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right), \quad \dots (10)$$

gdje je: $\varepsilon_{32} = h_{f_3} - h_{f_2}$, $\varepsilon_{21} = h_{f_2} - h_{f_1}$.

Uz pomoć softvera Mathcad određena je vrijednost reda $p=1,404$

Korak 4:

Ekstrapolirana vrijednost linijskih gubitaka se izračunava u četvrtom koraku na osnovu izraza:

$$h_{f_{ext}}^{21} = \frac{(r_{21}^p h_{f_1} - h_{f_2})}{(r_{21}^p - 1)} = 3,207 \cdot 10^{-3}. \quad \dots (11)$$

Korak 5:

U zadnjem koraku izračunava se približna relativna greška (12), procjenjuje se relativna ekstrapolirana greška (13) i određuje indeks konvergencije mreže GCI (14).

$$e_a^{21} = |h_{f_1} - h_{f_2}| = 1,194 \cdot 10^{-4}. \quad \dots (12)$$

$$e_{ext}^{21} = \left| \frac{h_{f_{ext}}^{21} - h_{f_1}}{h_{f_{ext}}^{21}} \right| = 0,031. \quad \dots (13)$$

$$GCI_{fine}^{21} = \frac{F_s \cdot e_a^{21}}{r_{21}^p - 1} = 1,229 \cdot 10^{-4}. \quad \dots (14)$$

Faktoru sigurnosti F_s se najprije dodjeljivala vrijednost 3, ali Roache, za studije kod kojih se koriste vrijednosti dobivene upotrebom najmanje tri različite mreže i kod kojih se određuje red p , preporučuje manje konzervativnu vrijednost za faktor sigurnosti od 1,25 [2]. Do ove vrijednosti je došao empirijskim istraživanjima, što je potvrđeno kroz brojne CFD primjere.

Empirijski testovi su doveli i do zaključka da se sa 95%-tom sigurnošću može tvrditi da je indeks konvergencije mreže GCI jednak proširenoj numeričkoj nesigurnosti U_{num} , pri čemu nije urađena nikakva pretpostavka o tipu raspodjele. Ipak, pošto je za potrebe validacije potrebno pretvoriti proširenu nesigurnost u oblik u_{num} neophodno je pretpostaviti tip raspodjele.

Raspodjela greške oko rješenja dobivenog uz upotrebu najkvalitetnije mreže h_{f1} je približno Gaussianova (faktor prekrivanja $k=2$) samo za slabo razvijene (engl. *poorly behaved*) probleme kod kojih je prisutna oscilirajuća konvergencija. Za potpuno razvijene i dobro

riješene probleme (engl. *well behaved and highly resolved problems*), raspodjela greške je približno Gaussianova, ali ne oko rješenja dobivenog uz upotrebu najkvalitetnije mreže, nego oko ekstrapolirane vrijednosti određene izrazom (11). Prema tome, raspodjela greške oko rješenja dobivenog uz upotrebu najkvalitetnije mreže je približno pomjerena Gaussianova raspodjela. Analizama se došlo do vrijednosti za faktor pokrivanja i on u ovom slučaju iznosi $k=1,1 \div 1,15$ [1].

Za naš slučaj, vrijednost numeričke nesigurnosti koja je potrebna za izračunavanje standardne nesigurnosti validacije, iznosi:

$$u_{num} = \frac{U_{num}}{k} = \frac{GCI}{1,15} = 1,069 \cdot 10^{-4}. \quad \dots (15)$$

Nakon provedenih analiza i određivanja proširene numeričke nesigurnosti možemo, sa vjerovatnoćom od 95%, tvrditi da linijski gubitci prilikom proticanja vode srednjom brzinom od 0,5 m/s kroz bakarnu cijev promjera 0,05 m i dužine 0,5 m iznose:

$$h_f = 0,003108839 \pm 0,0001229 \text{ m}. \quad \dots (16)$$

U navedenom intervalu se nalazi i vrijednost dobivena analitičkim proračunom, što je samo još jedna potvrda da se SWFS može koristiti za rješavanje problema ovog tipa.

5. ZAKLJUČAK

Verifikacijom koda se potvrđuje da li se računarski kod može koristiti za rješavanje konkretnih problema. U prvom dijelu rada, na primjeru određivanja linijskih gubitaka, pokazana je procedura verifikacije računarskog koda ugrađenog u SWFS i dobiveni su očekivani rezultati. Da to nije bio slučaj bilo bi potrebno izvršiti poboljšanje i modifikaciju računarskog koda.

Nakon što je upotreba koda za određivanje linijskih gubitaka verificirana, uslijedila je verifikacija rješenja koja je rezultirala procjenom proširene nesigurnosti U_{num} koja se povezuje sa rezultatom simulacije. Na osnovu nje je izračunata numerička nesigurnost u_{num} koja se, zajedno sa mjernom nesigurnošću eksperimentalnih rezultata i mjernom nesigurnošću uzrokovana greškama ulaznih parametara, koristi za određivanje mjerne nesigurnosti validacije, u_{val} .

U mnogim slučajevima, u inženjerskoj i naučnoj praksi, ove dvije procedure mogu biti sve što se zahtjeva. U slučaju nedostatka adekvatnih eksperimentalnih podataka potrebnih za validaciju može se reći da je to sve što je moguće. Tada uspješno završena procedura verifikacije rješenja za korišteni komercijalni softverski paket će doprinijeti boljem razumijevanju tačnosti same simulacije jer se tada može predstaviti da je rješenje simulacije vrijednost X sa numeričkom nesigurnošću Y [1].

6. LITERATURA

- [1] ASME V&V 20-2009, Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer, The American Society of Mechanical Engineers, 2009.
- [2] Roache P.J.: Verification and Validation in Computational Science and Engineering, Hermosa Publishers, Albuquerque, 1998.
- [3] Crowe C.T., Elger D.F., Williams B.C., Roberson J.A.: Engineering Fluid Mechanics – 9th edition, John Wiley&Sons, Inc., 2009.
- [4] Zaimović-Uzunović N., Mjerna tehnika, Mašinski fakultet u Zenici, 2006.
- [5] Flow Simulation 2014, Technical Reference, Dassault Systèmes SolidWorks Corp, Waltham, Massachusetts, USA, 2014.
- [6] Flow Simulation 2014, Solving Engineering Problems, Dassault Systèmes SolidWorks Corp, Waltham, Massachusetts, USA, 2014.