

Relatório técnico final do projeto

Estimativa de Erros de Discretização em

Dinâmica dos Fluidos Computacional

CFD-4

Processo CNPq 302916/2004-0

Período: 1 Mar 2005 a 29 Fev 2008

Palavras-chave: erro numérico, CFD, volumes finitos, diferenças finitas, malhas irregulares, extração de Richardson

Projeto de pesquisa financiado pelo
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)
através de uma bolsa de produtividade em pesquisa (PQ)

Carlos Henrique Marchi

Professor adjunto da
Universidade Federal do Paraná (UFPR)
Departamento de Engenharia Mecânica (DEMEC)
Endereço: Caixa postal 19040
81531-980, Curitiba, PR
Telefone: (41) 3361-3126
Fax: (41) 3361-3701
e-mail: marchi@ufpr.br

Curitiba, 18 de abril de 2008.

RESUMO

O erro numérico é definido pela diferença entre as soluções analítica e numérica de um modelo matemático, para cada variável de interesse. Ele é causado por erros de discretização, de iteração, de arredondamento e de programação. O problema abordado neste projeto é: obtida a solução numérica de uma variável de interesse, estimar qual é o valor do seu erro numérico. O objetivo principal deste projeto é contribuir para melhorar a qualidade das estimativas do erro de discretização de soluções numéricas obtidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos, para problemas de dinâmica dos fluidos, em malhas uniformes e irregulares (não-uniformes, não-ortogonais e não-estruturadas). A qualidade de uma estimativa de erro pode ser avaliada através da razão entre o erro estimado e o erro verdadeiro. Quanto mais próximo da unidade estiver esta razão, mais acurada é a estimativa do erro. Quando esta razão é maior ou igual à unidade, a estimativa de erro é considerada confiável. O que se busca é uma estimativa de erro ideal, isto é, quando o erro estimado é igual ao erro verdadeiro. Os dois principais objetivos em dinâmica dos fluidos computacional são obter soluções numéricas acuradas e confiáveis. Ambos dependem da estimativa do erro numérico. Entre outros motivos, é importante estimar o erro numérico para: ter confiabilidade na aplicação de soluções numéricas; e validar modelos matemáticos de fenômenos físico-químicos ainda não modelados adequadamente, como os escoamentos turbulentos. Na área de dinâmica dos fluidos computacional, a situação atual sobre a estimativa de erros numéricos pode ser assim resumida: geralmente não se relatam as estimativas do erro das soluções numéricas; não existem padrões aceitos; ainda se está no estágio inicial do desenvolvimento de procedimentos rigorosos e gerais; há discordâncias na nomenclatura; há pouco entendimento dos efeitos multidimensionais e do uso de malhas irregulares; são relatadas diferenças entre previsões teóricas e resultados práticos para os erros numéricos; é necessário desenvolver novas metodologias para estimar, limitar e minimizar os erros de discretização em aplicações práticas da engenharia. Este projeto de pesquisa considera: modelos matemáticos com equações diferenciais lineares e não-lineares, uni e bidimensionais, em regime permanente e transitório, representando problemas básicos de transferência de calor e mecânica dos fluidos; para poder avaliar a qualidade das estimativas de erro, a solução analítica exata é conhecida para todos os modelos matemáticos e variáveis de interesse considerados (variáveis dependentes nos modelos matemáticos: velocidade, pressão, temperatura; e variáveis secundárias obtidas por diferenciação ou integração das variáveis dependentes: vazões, fluxos de massa e calor, média da variável dependente, forças); diversos tipos de aproximações ou esquemas numéricos; estimativas de erro *a priori* baseadas na série de Taylor; estimativas de erro *a posteriori* baseadas na extrapolação de Richardson, com grande variação do número de nós das malhas. Com a execução deste projeto de pesquisa, as principais contribuições que se pretende fazer são: aumentar a confiabilidade e indicar o uso correto de estimadores de erro de discretização baseados na extrapolação de Richardson; mostrar se é correto aplicar o estimador de Richardson em malhas irregulares, e, se for, em que condições; comprovar o valor correto da ordem assintótica do erro de discretização para as aproximações numéricas mais comuns; mostrar que o método que emprega a série de Taylor para realizar estimativas *a priori* também funciona com malhas não-uniformes; esclarecer a controvérsia que existe sobre o valor da ordem assintótica do esquema de diferença central em malhas não-uniformes; e, generalizar os resultados de malhas unidimensionais uniformes e não-

uniformes para três dimensões espaciais e uma temporal, em malhas uniformes e irregulares.

OBJETIVOS DO PROJETO

O objetivo geral deste projeto é contribuir para melhorar a qualidade das estimativas do erro de discretização. São consideradas soluções numéricas obtidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos, para problemas de dinâmica dos fluidos, em malhas uniformes e irregulares (não-uniformes, não-ortogonais e não-estruturadas).

Os objetivos específicos deste projeto são:

- 1) Demonstrar os valores do erro verdadeiro e estimado, e de suas ordens, que podem ser obtidos de experimentos numéricos. E o efeito sobre eles da razão de refino de malha.
- 2) Mostrar que a definição usual da razão de refino empregada em malhas irregulares é incorreta quando aplicada na estimativa do erro de discretização. E indicar alternativas para contornar este problema.
- 3) Fazer estimativas *a priori* do erro de discretização, em malhas uniformes e irregulares, para várias aproximações numéricas usadas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos. E mostrar a forma correta de se usar o método que emprega a série de Taylor para fazer estas estimativas *a priori*.
- 4) Para o erro de discretização, verificar seu valor verdadeiro e suas estimativas *a posteriori*, e de suas ordens, em malhas uniformes e irregulares, para várias aproximações numéricas usadas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos. E mostrar a existência do comportamento assintótico do erro em problemas multidimensionais.
- 5) Formar mestres e doutores no tema do projeto, habilitados para realizar os processos de verificação e validação de soluções numéricas.

RESULTADOS OBTIDOS

Os resultados obtidos com a execução deste projeto foram:

Teses de doutorado concluídas:

- SCHNEIDER, F. A. **Verificação de soluções numéricas em problemas difusivos e advectivos com malhas não-uniformes.** Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2007. Tese de doutorado em Métodos Numéricos em Engenharia.
- ARAKI, L. K. **Verificação de soluções numéricas de escoamentos reativos em motores-foguete.** Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2007. Tese de doutorado em Métodos Numéricos em Engenharia.

Dissertações de mestrado concluídas:

- SUERO, R. **Verificação de soluções numéricas de escoamentos bidimensionais laminares em malhas uniformes.** Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2006. Dissertação de mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia.
- HACKE, O. **Verificação de soluções numéricas de problemas termoelásticos em malhas uniformes.** Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2006. Dissertação de mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia.

Trabalho de graduação concluído:

- TAILLANDIER, J. Efeito do modelo matemático sobre a solução numérica do escoamento em tubeira de motor-foguete. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2006. Trabalho de graduação em engenharia mecânica.

Artigos publicados em periódicos:

- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Multi-dimensional discretization error estimation for convergent apparent order. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. XXVII, p. 432-439, 2005.
- MARCHI, C. H.; HOBMEIR, M. A. Numerical solution of staggered circular tubes in two-dimensional laminar forced convection. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. XXIX, p. 42-48, 2007.

Artigos publicados em congressos:

- MORAIS, E. L.; SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. Verification of the discretization error of numerical solutions of flows using unstructured meshes. In: XVIII CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA MECÂNICA (COBEM). **Anais...** Ouro Preto, 2005.
- SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. On the grid refinement ratio for one-dimensional advective problems with nonuniform grids. In: XVIII CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA MECÂNICA (COBEM). **Anais...** Ouro Preto, 2005.
- ARAKI, L. K.; MARCHI, C. H. Numerical solution of one-dimensional reactive flows in rocket engines with regenerative cooling. In: XI CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS (ENCIT). **Anais...** Curitiba, 2006.
- HACKE, O.; MARCHI, C. H. Solução numérica de problema termoelástico com estimativa do erro de discretização. In: XI CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS (ENCIT). **Anais...** Curitiba, 2006.
- MARCHI, C. H.; SUERO, R.; SCHNEIDER, F. A. Escoamento na cavidade com tampa móvel: soluções numéricas com malha 1024x1024 e estimativa do erro de discretização. In: XXVII CONGRESSO IBERO LATINO-AMERICANO DE MÉTODOS COMPUTACIONAIS EM ENGENHARIA (CILAMCE). **Anais...** Belém, 2006.
- SCHNEIDER, F. A.; MARCHI, C. H. Efeito do tipo de refino de malhas não-uniformes de volumes finitos sobre a ordem efetiva do erro de discretização. In: XXVII CONGRESSO IBERO LATINO-AMERICANO DE MÉTODOS COMPUTACIONAIS EM ENGENHARIA (CILAMCE). **Anais...** Belém, 2006.
- ARAKI, L. K.; MARCHI, C. H. Verification of numerical solution of two-dimensional reactive flow in rocket engine nozzles. In: XIX CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA MECÂNICA (COBEM). **Anais...** Brasília, 2007.

Trabalho de iniciação científica concluído e publicado:

- KONOPKA, T. F.; MARCHI, C. H.; ARAKI, L. K. Simulação numérica de escoamento reativo bidimensional em tubeira. In: 15º EVENTO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFPR (EVINCI). **Anais...** Curitiba, 2007.

Aplicativo computacional implementado:

- MARCHI, C. H. RICHARDSON 3.1 (1998-2007): **Analizador e estimador de erros de discretização com base na extrapolação de Richardson.** Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2007.

CONCLUSÃO

Em resumo, os resultados obtidos com a execução deste projeto foram: publicados dois artigos em periódicos e sete em congressos; formados dois doutores e dois mestres; concluída uma orientação de trabalho de graduação e uma de trabalho de iniciação científica; e implementado um aplicativo para estudo e aplicação de estimadores de erro de discretização.

Além disso, foram submetidos três artigos para publicação em periódicos. E estão andamento a orientação de três dissertações de mestrado e duas teses de doutorado sobre o tema deste projeto.

Todas as dissertações, teses, artigos e aplicativo estão disponíveis na internet em <ftp://ftp.demec.ufpr.br/CFD/>