



# *Estimativa de Erros de Discretização em Dinâmica dos Fluidos Computacional*

*CFD-4*

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

Projeto de pesquisa submetido ao  
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)  
para concorrer a 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) 361-3126

Fax: (41) 361-3129

e-mail: [marchi@demec.ufpr.br](mailto:marchi@demec.ufpr.br)

Curitiba, 26 de junho de 2004.

## 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 transiente, 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.

## 1. INTRODUÇÃO

Pode-se dividir em três os tipos de métodos empregados na solução de um problema de engenharia: experimentais, analíticos e numéricos. Discussões sobre as características, vantagens e desvantagens de cada um destes métodos podem ser vistas nos textos de Maliska (2004), Fortuna (2000) e Tannehill *et al.* (1997).

Na área do conhecimento denominada *CFD* (*Computational Fluid Dynamics*), trata-se da solução de problemas de dinâmica dos fluidos através de métodos numéricos. A dinâmica dos fluidos envolve a modelagem de fenômenos físico-químicos nas áreas de mecânica dos fluidos, transferência de calor e massa e combustão, entre outras, que são representados por modelos matemáticos (Oberkampf e Blottner, 1998). Estes modelos são resolvidos através de métodos numéricos que incluem, por exemplo, os métodos de diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos (Minkowycz *et al.*, 1988).

Na Fig. 1 são apresentados os tipos de erros envolvidos nos métodos de solução de problemas e que são os erros experimental, de modelagem e numérico. Erro experimental é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e o seu resultado experimental (ISO, 1993; ABNT, 1997). Em geral, o valor verdadeiro é desconhecido e, portanto, consegue-se apenas estimar o valor do erro experimental. Este valor estimado é denominado de incerteza, e o processo que o quantifica, análise de incerteza. Formas de quantificar a incerteza de resultados experimentais podem ser vistas nas normas ISO (1993), ABNT (1997) e AIAA (1995), assim como nos textos de Coleman e Steele (1999) e Holman (1994).

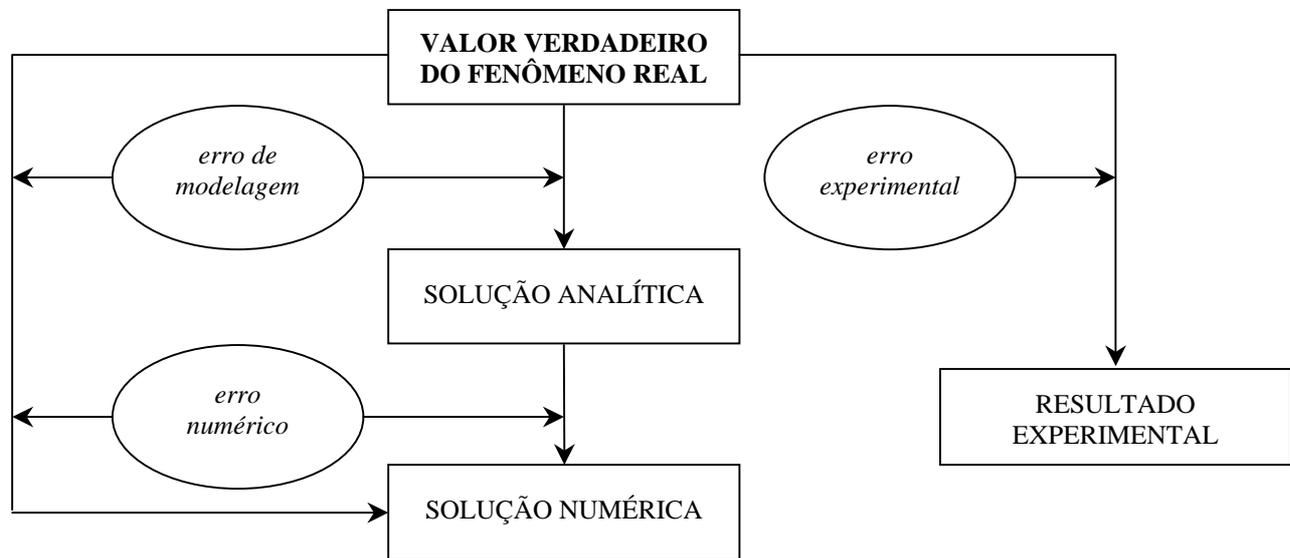


Figura 1. Erros envolvidos nos métodos de solução de problemas de engenharia.

Erro de modelagem é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e a sua solução analítica (Ferziger e Peric, 2001). Novamente, em geral, o valor verdadeiro é desconhecido e, portanto, consegue-se apenas estimar o valor do erro de modelagem. Isso é feito através da comparação das soluções analíticas e numéricas com resultados experimentais. O erro de modelagem é causado pelas simplificações feitas sobre o fenômeno real na concepção dos modelos matemáticos. O processo que quantifica este tipo de erro tem sido denominado recentemente de validação (Blottner, 1990; Mehta, 1996; Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998; AIAA, 1998; Jameson e Martinelli, 1998; Rizzi e Voss, 1998; Fortuna, 2000) ou validação física (Maliska, 2004). O objetivo da validação é determinar em que medida um modelo matemático representa um determinado fenômeno real. O processo de validação é tratado, por exemplo, por Stern *et al.* (2001) e Aeschliman e Oberkampf (1998).

Erro numérico ( $E$ ) de uma variável de interesse é a diferença entre a sua solução analítica exata ( $\Phi$ ) e a sua solução numérica ( $\phi$ ) (Ferziger e Peric, 2001), isto é,

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (1)$$

Portanto, a solução numérica ideal é igual à solução analítica exata do problema, ou seja, é aquela em que o erro numérico é nulo. Exemplos de variáveis de interesse em dinâmica dos fluidos são: velocidade, temperatura, pressão, massa específica, vazão, fluxo de massa, fluxo de calor e força. O processo que quantifica o erro numérico tem sido denominado recentemente de verificação (Blottner, 1990; Mehta, 1996; Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998; AIAA, 1998; Jameson e Martinelli, 1998; Rizzi e Voss, 1998; Fortuna, 2000) ou validação numérica (Maliska, 2004). O objetivo da verificação é determinar em que medida um modelo matemático é resolvido adequadamente através de um método numérico.

O valor do erro numérico verdadeiro independe de resultados experimentais mas só pode ser obtido quando a solução analítica do modelo matemático é conhecida. Porém, em termos práticos, isto é, para soluções numéricas de modelos matemáticos cuja solução analítica é desconhecida, não é possível obter o erro numérico. Nestes casos é necessário estimar o valor da solução analítica. Assim, em vez do erro numérico verdadeiro calcula-se o erro numérico estimado, que é avaliado pela diferença entre a sua solução analítica estimada ( $\phi_\infty$ ) e a sua solução numérica ( $\phi$ ), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (2)$$

Pode-se considerar que o erro numérico é causado pelas seguintes fontes (Ferziger e Peric, 2001; Oberkampf e Blottner, 1998; Roache, 1998, 1994; AIAA, 1998; Jameson e Martinelli, 1998; Rizzi e Voss, 1998; Tannehill *et al.*, 1997; Mehta, 1996; e Blottner, 1990):

- 1) Erro de truncamento: origina-se das aproximações numéricas empregadas na discretização de um modelo matemático (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998). Em geral, este erro se reduz com a diminuição do tamanho dos elementos da malha, isto é, com a diminuição da distância entre dois nós consecutivos da malha.
- 2) Erro de iteração: é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração (Ferziger e Peric, 2001). As equações discretizadas resultam das aproximações numéricas feitas sobre um modelo matemático. De forma geral, o erro de iteração se reduz com o aumento do número de iterações.
- 3) Erro de arredondamento: ocorre principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações. Ele aumenta com a redução do tamanho dos elementos da malha, isto é, com o aumento do número de nós, elementos ou volumes da malha.
- 4) Erro de programação: inclui os erros causados por pessoas na implementação e no uso de um programa computacional.

## **2. DEFINIÇÃO DO PROBLEMA**

O presente projeto de pesquisa se concentra apenas nos efeitos do erro de truncamento sobre as soluções numéricas. Nesse caso, o erro numérico calculado através da Eq. (1) passa a ser denominado de erro de discretização (Ferziger e Peric, 2001). O problema abordado neste projeto é: obtida a solução numérica de uma variável de interesse ( $\phi$ ), estimar qual é o valor do seu erro numérico  $E(\phi)$ . Portanto, a partir daqui, erro numérico é equivalente a erro de discretização ou, simplesmente, erro.

A qualidade de uma estimativa de erro pode ser avaliada através da razão entre o erro estimado ( $U$ ) e o erro verdadeiro ( $E$ ) (Marchi, 2001). 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 ( $U$ ) é igual ao erro verdadeiro ( $E$ ).

Quando o erro numérico é causado apenas por erros de truncamento, admite-se que o erro de discretização  $E(\phi)$  é dado por (Ferziger e Peric, 2001; Roache, 1998)

$$E(\phi) = C_1 h^{p_1} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots \quad (3)$$

onde

$\phi$  = variável de interesse

$h$  = tamanho dos elementos da malha

$C_1, C_2, C_3, \dots$  = coeficientes que independem de  $h$

$p_1, p_2, p_3, \dots$  = ordens verdadeiras do erro de discretização; números inteiros e positivos

$p_L$  = ordem assintótica do erro de discretização;  $p_L \geq 1$ ; é a inclinação da curva do erro num gráfico  $\log(|E|)$  versus  $\log(h)$  para  $h \rightarrow 0$

As estimativas do erro de discretização, gerado por erros de truncamento, podem ser divididas em dois tipos básicos (Szabó e Babuska, 1991): estimativas *a priori* ou *a posteriori* da obtenção da solução numérica.

### 2.1 Estimativas *a Priori*

As estimativas de erro *a priori* são usadas para estimar a ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização. Isso é feito estimando-se o erro de truncamento ( $\varepsilon_T$ ) do modelo matemático do problema através da série de Taylor (Tannehill *et al.*, 1997), e admitindo-se que o erro de discretização ( $E$ ) tenha a mesma forma funcional quando o tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha tende a zero. Portanto, a partir da Eq. (3), tem-se

$$E(\phi) = Ch^{p_L} \quad (\text{para } h \rightarrow 0) \quad (4)$$

onde  $C$  é um coeficiente cujo valor é admitido ser constante. Tanto  $C$  quanto  $p_L$  dependem das aproximações numéricas empregadas na discretização de um modelo matemático.

Com uma estimativa de erro *a priori* não é possível obter o valor de  $E(\phi)$  a partir da Eq. (4) porque  $C$  é desconhecido. Mas é possível avaliar, antes da obtenção de qualquer solução numérica, qual é o efeito do tipo de aproximação numérica usada, ou seja, do valor de  $p_L$ . Também é possível avaliar qual é o efeito da redução do tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha sobre o erro de discretização ( $E$ ) da solução numérica. Por exemplo, para  $p_L = 2$ , a redução de  $h$  à metade reduz o erro a  $\frac{1}{4}$  do valor anterior. Portanto, as estimativas de erro *a priori* proporcionam uma análise qualitativa do erro de discretização.

### 2.2 Estimativas *a Posteriori*

As estimativas de erro *a posteriori* são usadas para estimar efetivamente a magnitude do erro de discretização. Existem vários métodos que podem ser empregados. Eles podem ser divididos em dois grandes conjuntos:

- 1) A estimativa do erro é baseado na solução numérica obtida numa única malha. Em geral o método de elementos finitos (Zhu & Zienkiewicz, 1990; Ainsworth e Oden, 1997; Babuska *et al.*, 1997) se enquadra neste conjunto. E o objetivo, comumente, é adaptar a malha empregada.
- 2) A estimativa do erro é baseado nas soluções numéricas obtidas em múltiplas malhas. Em geral os métodos de diferenças finitas (Blottner, 1990) e de volumes finitos (Hortmann *et al.*, 1990) se enquadram neste conjunto. O objetivo é estimar o erro numérico, de forma análoga à análise de incerteza de resultados experimentais. Alguns estimadores deste tipo são (Marchi, 2001): delta, de Richardson, *GCI*, multicoeficientes e convergente. Todos eles são alguma espécie de variante do estimador de Richardson, que é o método recomendado por Celik (2004) e adotado neste projeto de pesquisa.

### 2.3 Estimador de Richardson

Uma forma de obter a solução analítica estimada ( $\phi_\infty$ ) da variável de interesse é através da extrapolação de Richardson (Roache, 1994; Richardson, 1910; Richardson e Gaunt, 1927), dada por

$$\phi_\infty = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(r^p - 1)} \quad (5)$$

onde

$\phi_1$  e  $\phi_2$  = soluções numéricas obtidas em duas malhas com número diferente de volumes de controle, elementos ou nós. Cada uma destas malhas é representada pelo tamanho dos seus elementos ( $h$ )

$r$  = razão de refino entre as duas malhas ( $h_1$  = fina e  $h_2$  = grossa), definida por

$$r = \frac{h_2}{h_1} \quad (6)$$

$p$  = ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização ou a ordem aparente ( $p_U$ ), que para  $r$  constante é definida por (De Vahl Davis, 1983)

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2}\right)}{\log(r)} \quad (7)$$

onde  $\phi_3$  é a solução numérica obtida na malha supergrossa ( $h_3$ ).

Conforme a Eq. (7), a ordem aparente ( $p_U$ ) é função apenas dos resultados numéricos. Ela independe do erro verdadeiro ou da solução analítica da variável de interesse. Assim, qualquer que seja o problema, ela pode ser usada para verificar *a posteriori* se, à medida que  $h \rightarrow 0$ , obtém-se a ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização, que é um resultado teórico obtido *a priori*.

Com a substituição da Eq. (5) na Eq. (2), a estimativa do erro de discretização para a solução numérica  $\phi_1$  na malha fina ( $h_1$ ) é

$$U(\phi_1) = \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(r^p - 1)} \quad (8)$$

O estimador de Richardson, assim como outros existentes na literatura, são acurados apenas para o caso limite de  $h \rightarrow 0$ . Em geral as estimativas de erro não tem confiabilidade e são inacuradas. Diversos fatores contribuem para isso, principalmente: a complexidade do modelo matemático do problema; o uso de aproximações numéricas diferentes para discretizar um modelo matemático; o uso de malhas muito grossas, isto é, malhas nas quais se está muito distante do caso limite de  $h \rightarrow 0$ ; o uso de malhas irregulares para discretizar o domínio de cálculo. Apesar disso, estimadores de erro de discretização baseados na extrapolação de Richardson ainda são considerados (Roy, 2001) os mais confiáveis para problemas complexos.

### 3. RELEVÂNCIA DO PROBLEMA

Os dois principais objetivos em dinâmica dos fluidos computacional são obter soluções numéricas acuradas e confiáveis (Shyy *et al.*, 2002). Ambos dependem da estimativa do erro numérico. A magnitude aceitável para o erro numérico é função, entre outros fatores, da finalidade

da solução numérica, dos recursos financeiros envolvidos, do tempo permitido ou disponível para realizar as simulações e dos recursos computacionais existentes.

Sabendo-se que as soluções numéricas contêm erros, é importante estimá-los pelos seguintes motivos:

- 1) Quando o erro é maior do que o aceitável, compromete-se a confiabilidade do uso da solução numérica.
- 2) Quando o erro é menor do que o necessário, há desperdício de recursos computacionais, isto é, de tempo de processamento e de quantidade de memória.
- 3) Para validar e desenvolver novos modelos matemáticos que visem explicar fenômenos físico-químicos ainda não modelados adequadamente e cujas soluções analíticas são desconhecidas. Um exemplo típico é a modelagem de escoamentos turbulentos.
- 4) Para otimizar o uso da malha, isto é, adaptá-la visando homogeneizar o nível de erro no domínio de cálculo.

Em geral, o erro de discretização é o componente de maior magnitude do erro numérico quando:

- A solução numérica é iterada suficientemente, reduzindo drasticamente ou zerando o erro de iteração.
- Emprega-se precisão dupla no código computacional, minimizando o erro de arredondamento. Desde que a quantidade de elementos em cada direção coordenada não seja da ordem de centenas de milhares.
- O erro de programação foi eliminado ou minimizado significativamente ao se verificar o código computacional através do método das soluções fabricadas (Shih, 1985; Roache, 1998).

Os processos de análise de incerteza de resultados experimentais e de estimativa de erros numéricos são feitos de formas distintas e encontram-se em níveis diferentes de desenvolvimento. De um lado, para os métodos experimentais existem padrões disponíveis, largamente aceitos e aplicados (ISO, 1993; Holman, 1994; AIAA, 1995; Coleman e Steele, 1999), seja em dinâmica dos fluidos ou em outras áreas do conhecimento. De outro lado, na área de dinâmica dos fluidos computacional (*CFD*), a situação atual pode ser assim resumida:

- 1) Geralmente não se relatam as estimativas do erro das soluções numéricas (Freitas, 2002; Celik *et al.*, 1993). Recentemente, observa-se que alguns pesquisadores apresentam duas ou três soluções numéricas em malhas diferentes, mostrando graficamente o efeito do refino de malha sobre os resultados (Roy e Edwards, 2000). Mas isso não pode ser considerado suficiente pois não é uma estimativa de erro.
- 2) Não existem padrões aceitos para efetuar o processo de verificação em *CFD* (Freitas, 2002, 1993; Celik, 1993; Mehta, 1996; Rizzi e Vos, 1998; e ASME/FED, 2004). Existem apenas propostas iniciais pouco testadas (Oberkampf e Blottner, 1998; e AIAA, 1998). Ainda se está no estágio inicial do desenvolvimento de procedimentos rigorosos e gerais para os processos de Verificação e Validação em *CFD* (Oberkampf e Trucano, 2002).
- 3) Há discordâncias na nomenclatura (Celik e Zhang, 1995), como se observa pelos termos diferentes que são usados (Blottner, 1990; Rudy *et al.*, 1991; Oreskes *et al.*, 1994; Maliska, 2004; Mehta, 1996; Rizzi e Vos, 1998; Roache, 1998; e AIAA, 1998).
- 4) É comum concluir a respeito do desempenho de modelos numéricos e modelos matemáticos com base em soluções numéricas obtidas com uma única malha. Isto foi feito, por exemplo, por Amaladas e Kamath (1998) na avaliação de seis modelos numéricos diferentes, ao resolverem o escoamento sobre um aerofólio com uma malha de 128x32 pontos. Outros exemplos são relatados por Celik *et al.* (1993) e Freitas (1995).
- 5) Rizzi e Vos (1998) afirmam que exceto em trabalhos de referência (*benchmarks*), praticamente todas as soluções numéricas são apresentadas e comparadas apenas através de gráficos, sem tabelas, aumentando e propagando seus níveis de erro.
- 6) Muitos dos trabalhos numéricos de referência (*benchmarks*) (De Vahl Davis, 1983; Hortmann *et al.*, 1990; Demirdzic *et al.*, 1992; e Wakashima e Saitoh, 2004) apresentam estimativas do erro numérico obtidas com procedimentos inadequados ou sem estimativas (Ghia *et al.*, 1982).

- 7) Há pouco entendimento dos efeitos multidimensionais e do uso de malhas irregulares (malhas não-uniformes, não-ortogonais e não-estruturadas) sobre os erros numéricos e o desempenho dos estimadores de erro para estes casos. Para malhas não-uniformes e não-estruturadas, por exemplo, são relatadas diferenças entre previsões teóricas e resultados práticos para os erros numéricos (Ferziger e Peric, 2001; Santos *et al.*, 1996; e Strauss *et al.*, 1999).
- 8) É necessário desenvolver novas metodologias para estimar, limitar e minimizar os erros de discretização em aplicações práticas da engenharia (Douglass e Ramshaw, 1994). Isto é, quando se é forçado a usar malhas muito grossas, por exemplo, em problemas tridimensionais.

As atividades de pesquisa em *CFD* encontram-se no meio de um processo que busca estabelecer padrões para estimar o erro de soluções numéricas (Roache, 1994; Celik e Zhang, 1995; Marvin, 1995; Oberkampf e Blottner, 1998). Este processo tem sido fomentado por simpósios: *Stanford Conference on Complex Turbulent Flows* (Kline *et al.*, 1981) e *Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics* (Celik *et al.*, 1993); e políticas editoriais de diversas revistas, incluindo o *Journal of Fluids Engineering* (Roache *et al.*, 1986; Freitas, 1993), *Journal of Heat Transfer* (ASME, 1994), *International Journal for Numerical Methods in Fluids* (Gresho e Taylor, 1994) e *AIAA Journal* (AIAA, 1994). Nesta última revista publicou-se em sua edição de maio de 1998 uma seção especial (*Credible Computational Fluid Dynamics Simulations*) com 12 artigos dedicados à verificação e validação de soluções numéricas em *CFD*. Este mesmo assunto foi tema de uma seção especial da revista *Journal of Fluids Engineering* (JFE, 2002) em sua edição de março de 2002 (*Quantifying Uncertainty in CFD*) com 8 artigos.

#### **4. 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.

#### **5. METODOLOGIA**

O projeto está estruturado em 8 etapas descritas nesta seção. Do ponto de vista prático, o interesse é realizar estimativas de erro de problemas multidimensionais, que são abordados nas etapas 5.5 a 5.8. As etapas 5.1 a 5.4, dedicadas a problemas unidimensionais, são consideradas importantes para fundamentar adequadamente as etapas 5.5 a 5.8, e para evitar equívocos cometidos por outros autores, conforme os exemplos que seguem. Para avaliar alguma teoria ou estimador de erro, utilizar: poucas malhas e muito grossas (Matos *et al.*, 2001); soluções numéricas de problemas

complicados (turbulentos) junto com malhas irregulares (Roy e Blottner, 2001; Celik e Karatekin, 1997) e em problemas tridimensionais (Simonsen e Stern, 2003).

Algumas características gerais do projeto são: (i) todos os programas computacionais que serão utilizados para realizar as simulações necessárias serão implementados pelo autor deste projeto; (ii) eles empregarão a linguagem de programação Fortran-95, com precisão dupla; (iii) a equação do erro, Eq. (3), será constituída por 1, 2, 3 ou infinitos termos; (iv) 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; e (v) as análises deverão ser feitas para os seguintes tipos de variáveis de interesse: as 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).

### 5.1 Valores do erro e de suas ordens

O objetivo principal desta etapa é demonstrar os valores que podem ser esperados para os erros verdadeiro e estimado e suas ordens. Através de deduções matemáticas realizadas a partir da equação do erro de discretização, Eq. (3), pretende-se demonstrar algumas constatações que são feitas com base em experimentos numéricos: (i) o erro pode ser nulo em  $h \neq 0$ ; (ii) a curva do erro *versus*  $h$  pode apresentar um máximo num  $h$  menor do que o  $h$  máximo; (iii) as ordens efetiva e aparente podem resultar em valores maiores ou menores do que a ordem assintótica, valores negativos ou serem indefinidas; (iv) em malhas grossas, isto é, em  $h$  grande, as ordens efetiva e aparente podem resultar em valores iguais ou muito próximos à ordem assintótica; e (v) mostrar o efeito da razão de refino de malha sobre os valores das ordens aparente e efetiva.

A ordem efetiva do erro verdadeiro é definida por (Marchi, 2001)

$$p_E = \frac{\log\left[\frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)}\right]}{\log(r)} \quad (9)$$

Conforme a Eq. (9), a ordem efetiva ( $p_E$ ) é função do erro verdadeiro da variável de interesse. Assim, para os problema cuja solução analítica é conhecida, ela pode ser usada para verificar *a posteriori* se, à medida que  $h \rightarrow 0$ , obtém-se a ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização, que é um resultado teórico obtido *a priori*.

Encontra-se na literatura (Roy, 2001; Cadafalch *et al.*, 2002; Celik e Zhang, 1995) declarações afirmando que foram obtidos valores de ordem aparente negativos ou muito diferentes da ordem assintótica, e que esses valores se devem a algum tipo de erro do programa, que não o erro de truncamento, ou a irregularidades geométricas (Mishev, 1998). Celik e Karatekin (1997) recomendam limitar o valor da ordem aparente quando são obtidos valores muito “irreais”. Para Cadafalch *et al.* (2002) e Roy (2001), se os esquemas usados na discretização de um modelo matemático são UDS no termo advectivo ( $p_L = 1$ ) e CDS no termo difusivo ( $p_L = 2$ ), então o valor da ordem aparente só pode estar entre 1 e 2.

A importância e contribuição desta etapa se concentra em três pontos. Primeiro, permitir que sejam interpretados corretamente os valores das ordens efetiva e aparente que podem ser obtidos em experimentos numéricos. Segundo, aumentar a confiabilidade e indicar o uso correto de estimadores de erro de discretização baseados na extrapolação de Richardson. Terceiro, esclarecer as questões da literatura, apontadas acima. Não se conhece qualquer trabalho da literatura cujo objetivo tenha sido o apresentado nesta etapa do projeto.

## 5.2 Razão de refino para malhas irregulares

O objetivo principal desta etapa é mostrar que a definição usual da razão de refino empregada em malhas irregulares (não-uniformes, não-ortogonais e não-estruturadas) é incorreta quando aplicada na estimativa do erro de discretização. A definição usual da razão de refino empregada em malhas irregulares é uma extrapolação direta de malhas uniformes e definida por (Roache, 1994; Celik, 2004)

$$r = \left( \frac{N_1}{N_2} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (10)$$

onde  $N_1$  e  $N_2$  representam, respectivamente, o número de elementos das malhas fina e grossa, e  $D$  é a dimensão espacial do problema, sendo igual a 1, 2 ou 3, respectivamente, para os casos uni, bi e tridimensional.

Através de deduções matemáticas, pretende-se demonstrar: (i) que a definição usual da razão de refino empregada em malhas irregulares, Eq. (10), só funciona no caso limite de malhas uniformes; (ii) que ela não funciona nem mesmo para a malha irregular mais simples, que é a unidimensional não-uniforme; (iii) se existe algum tipo misto de malha entre uniforme e irregular na qual a Eq. (10) é válida; e (iv) se existe e qual é a métrica adequada a se usar em gráficos de erro *versus h* para variáveis locais e globais. Com relação ao item (iv), resultados preliminares do autor deste projeto indicam que é incorreta a proposta de Celik (2004) para o cálculo de  $h$ .

A importância e contribuição desta etapa reside no fato de que o uso correto e confiável de estimadores do erro de discretização, baseados na extrapolação de Richardson, depende diretamente do valor da razão de refino e, portanto, de sua definição, conforme pode-se ver na Eq. (8). Não se conhece qualquer trabalho da literatura cujo objetivo tenha sido o apresentado nesta etapa do projeto.

## 5.3 Malhas 1D uniformes

Para o caso de malhas unidimensionais uniformes, pretende-se realizar as seguintes atividades:

- 1) Fazer estimativas *a priori* do erro de discretização, isto é, deduzir os valores das ordens verdadeiras e assintótica ( $p_L, p_2, p_3, \dots$ ) da equação do erro de discretização, Eq. (3).
- 2) Com base em experimentos numéricos, verificar o valor verdadeiro e estimado do erro de discretização em função do tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha, para  $h$  variando entre as ordens de grandeza 1 e  $10^{-6}$ .
- 3) Com base em experimentos numéricos, verificar o valor da ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro de discretização verdadeiro em função do tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha e o valor assintótico para o qual ela tende quando  $h \rightarrow 0$ .
- 4) Com base em experimentos numéricos e num procedimento a ser apresentado neste trabalho, verificar o valor da ordem aparente ( $p_U$ ) do erro de discretização estimado, em função do tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha, e os valores das ordens verdadeiras ( $p_L, p_2, p_3, \dots$ ) da equação do erro de discretização, Eq. (3).
- 5) Verificar se as ordens verdadeiras e assintótica ( $p_L, p_2, p_3, \dots$ ) da equação do erro de discretização, Eq. (3), deduzidas *a priori*, coincidem com aquelas verificadas *a posteriori*.

Para realizar as atividades acima, serão implementados programas computacionais para resolver modelos matemáticos dos seguintes tipos (Tannehill *et al.*, 1997):

$$\frac{d^2T}{dx^2} = S(x) \quad (\text{equação de Poisson 1D}) \quad (11)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = Fo \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + S(x,t) \quad (\text{equação de Fourier 1D}) \quad (12)$$

$$Pe \frac{dT}{dx} = \frac{d^2 T}{dx^2} + S(x) \quad (\text{equação de advecção-difusão linear 1D}) \quad (13)$$

$$Re \frac{d(u^2)}{dx} = \frac{d^2 u}{dx^2} + S(x) \quad (\text{equação de Burgers 1D}) \quad (14)$$

onde  $x$  = coordenada espacial,  $t$  = tempo,  $T$  = temperatura,  $u$  = componente do vetor velocidade na direção  $x$ ,  $S$  = termo fonte,  $Fo$  = número de Fourier,  $Pe$  = número de Peclet,  $Re$  = número de Reynolds.

As Eqs. (11) a (14) serão resolvidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos empregando as aproximações numéricas mais comuns (Ferziger e Peric, 2001; Minkowycz *et al.*, 1988; Hirsch, 1988; Tannehill *et al.*, 1997): UDS, CDS, WUDS, PLDS, híbrido, UDS-2, TVD *superbee* e QUICK. Também será usado o esquema de correção adiada (Ferziger e Peric, 2001) entre UDS e CDS, com diversos valores para o fator  $\beta$ . Para o problema transiente, serão testados diversos valores do parâmetro  $\theta$  (Maliska, 2004), que corresponde à aproximação da derivada temporal, incluindo  $\theta = 0$  (formulação explícita),  $\theta = 1/2$  (formulação Crank-Nicolson) e  $\theta = 1$  (formulação totalmente implícita).

Na literatura (Tannehill *et al.*, 1997; Ferziger e Peric, 2001) existem trabalhos que abordam o objetivo 1 desta etapa, mas não de forma tão ampla, para tantas aproximações numéricas, como neste projeto, e muito pouco para o método de volumes finitos. Na literatura (Ferziger e Peric, 2001) existem trabalhos que abordam os objetivos 2 e 3 desta etapa, mas não para um intervalo tão amplo do tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha quanto será usado neste projeto. Não se conhece qualquer trabalho da literatura cujos objetivos 4 e 5 tenham sido considerados.

Com esta etapa também pretende-se esclarecer afirmações aparentemente inconsistentes existentes na literatura. Por exemplo, Celik e Zhang (1995) afirmam que a ordem assintótica de um esquema híbrido é variável. Já Roache (1994) sugere usar a menor ordem entre os dois esquemas puros. Zhang *et al.* (2001) propõem o cálculo das ordens efetiva e aparente através de alguma norma. Mesmo em problemas unidimensionais, para Roy (2001), o erro se reduz de forma não-monotônica quando se usa pelo menos dois esquemas com ordens assintóticas diferentes.

A importância e contribuição desta etapa é comprovar o valor correto da ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização, para as aproximações numéricas mais comuns usadas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos. E, assim, permitir que o estimador de Richardson seja usado corretamente, já que ele depende diretamente do valor da ordem assintótica ( $p_L$ ), como se pode ver na Eq. (8). Além disso, pretende-se esclarecer as questões da literatura apontadas acima.

#### 5.4 Malhas 1D não-uniformes

Para o caso de malhas unidimensionais não-uniformes, pretende-se realizar as mesmas cinco atividades da etapa 5.3, acrescidas de:

- 6) Mostrar a forma correta de se usar o método que emprega a série de Taylor para realizar estimativas do erro *a priori* em malhas não-uniformes.
- 7) Mostrar que, em termos de análise de erro, o método de diferenças finitas é um subcaso do método de volumes finitos.

Para realizar as atividades acima, serão implementados programas computacionais para resolver os mesmos modelos matemáticos, Eqs. (11) a (14), e usando as mesmas aproximações numéricas da etapa 5.3.

Existe discordância entre as estimativas *a priori* e *a posteriori* para a ordem do erro de discretização do esquema CDS usado com malhas não-uniformes. Segundo as estimativas de erro *a*

*priori* de diversos autores (Pepper e Baker, 1988; Ferziger e Peric, 2001; Hoffmann, 1982; Fletcher, 1997; Turkel, 1985), quando se usa o esquema CDS para aproximar a derivada de 1ª ordem em malhas não-uniformes sua ordem assintótica é  $p_L = 1$ . Isso também ocorre quando se usa o esquema CDS para aproximar a derivada de 2ª ordem em malhas não-uniformes (Pepper e Baker, 1988; Ferziger e Peric, 2001; Hirsch, 1988; Fletcher, 1997; Tannehill *et al.*, 1997). Mas as verificações *a posteriori*, isto é, as curvas de ordem efetiva e ordem aparente, mostram (Ferziger e Peric, 2001; Hortmann *et al.*, 1990; Jones e Menzies, 2000) que a ordem assintótica é  $p_L = 2$ , tanto para malhas uniformes quanto não-uniformes.

Além do mencionado na etapa 5.3, a importância e contribuição desta etapa consiste em dois pontos principais: mostrar que o método que emprega a série de Taylor para realizar estimativas *a priori* também funciona com malhas não-uniformes; e esclarecer a controvérsia que existe sobre o valor da ordem assintótica do esquema CDS em malhas não-uniformes, citada acima.

### 5.5 Malhas 2D uniformes

Esta etapa consiste na extensão da etapa 5.3 ao caso de malhas bidimensionais uniformes, com as mesmas cinco atividades já mencionadas, para  $h$  variando entre as ordens de grandeza 1 e  $10^{-3}$ , acrescidas de:

- 6) Verificar o efeito da bidimensionalidade sobre os resultados unidimensionais.
- 7) Generalizar os resultados para três dimensões espaciais e uma temporal.
- 8) Mostrar a existência do comportamento assintótico do erro de discretização em problemas de CFD bidimensionais.

Para realizar estas atividades, serão implementados programas computacionais para resolver os seguintes modelos matemáticos (Tannehill *et al.*, 1997):

Equação de Poisson 2D:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = S(x, y) \quad (15)$$

Equação de advecção-difusão linear 2D:

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + S(x, y) \quad (16)$$

Equações de conservação da massa e de Navier-Stokes 2D para fluido incompressível:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (18)$$

$$\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(v^2)}{\partial y} = \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} + S(x, y, Re) \quad (19)$$

onde  $y$  = coordenada espacial,  $p$  = pressão,  $v$  = componente do vetor velocidade na direção  $y$ . As Eqs. (15) a (19) serão resolvidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos empregando pelo menos as aproximações numéricas UDS e CDS.

Conforme Marchi e Silva (2002), é recomendável usar o estimador de Richardson com base nas ordens assintótica e aparente. Infelizmente, essa recomendação não é seguida por outros autores, o que resulta em estimativas de erro sem confiabilidade. Exemplos são os trabalhos de Wakashima e Saitoh (2004), Shyy *et al.* (2002), Hayase (1999), De Vahl Davis (1983) e Demuren e Wilson (1994). Eles aplicaram o estimador de Richardson usando apenas a ordem assintótica. Há casos em que nem isso foi feito, como no trabalho de Ghia *et al.* (1982).

Há trabalhos (Matos *et al.*, 2001; Armaly *et al.*, 2002) nos quais usa-se a seguinte estratégia para estimar o erro de discretização: para a variável de interesse, compara-se a diferença relativa entre duas soluções numéricas obtidas em duas malhas diferentes. Isso se constitui no chamado estimador delta (Demirdzic *et al.*, 1992). Quando está diferença é menor do que 1%, normalmente, considera-se que a solução numérica é aceitável. O problema desse estimador é que ele não considera a razão de refino entre as malhas. Assim, é possível tornar a estimativa do erro tão pequena quanto se queira apenas aproximando-se o número de elementos das duas malhas, mas com o erro verdadeiro podendo ser muito grande.

Em problemas unidimensionais, é fácil mostrar a existência do comportamento assintótico do erro em problemas de CFD (Marchi e Silva, 2002). Mas em problemas multidimensionais isso ainda é um desafio (Wilson *et al.*, 2001); e se constitui no objetivo 8 desta etapa.

## 5.6 Malhas 2D não-uniformes

Esta etapa consiste na extensão da etapa 5.4 ao caso de malhas bidimensionais não-uniformes, com as mesmas oito atividades da seção 5.5, para  $h$  variando entre as ordens de grandeza 1 e  $10^{-3}$ . Para realizar estas atividades, serão implementados programas computacionais para resolver os três modelos matemáticos definidos nas Eqs. (15) a (19). Estas equações serão resolvidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos empregando pelo menos as aproximações numéricas UDS e CDS.

A discordância entre as estimativas *a priori* e *a posteriori* para a ordem do erro de discretização do esquema CDS, apontada na seção 5.4, também existe no caso de malhas bidimensionais não-uniformes. Segundo as estimativas de erro *a priori* de Jones e Menzies (2000), quando se usa o esquema CDS, para aproximar a derivada de 2ª ordem em malhas não-uniformes, no método de volumes finitos com nós centrados, sua ordem assintótica é  $p_L = 0$ . Se fosse assim, o erro não se reduziria com a redução de  $h$ , conforme a Eq. (4), e seria constante. Ainda segundo as estimativas de erro *a priori* de Jones e Menzies (2000), quando se usa o esquema CDS, para aproximar a derivada de 2ª ordem em malhas não-uniformes, também no método de volumes finitos mas com faces centradas, sua ordem assintótica é  $p_L = 1$ . Porém as verificações *a posteriori*, isto é, as curvas de ordem efetiva dos próprios autores (Jones e Menzies, 2000) mostram que a ordem assintótica é  $p_L = 2$ , tanto para faces quanto nós centrados. Segundo as estimativas de erro *a priori* de Turkel (1985), quando se usa o esquema CDS, para aproximar a derivada de 1ª ordem em malhas não-uniformes, no método de volumes finitos com nós centrados, sua ordem assintótica também é  $p_L = 0$ .

No caso de problemas multidimensionais com malhas não-uniformes também é comum a apresentação de estimativas de erro sem confiabilidade, isto é, com o estimador de Richardson usando apenas a ordem assintótica (Hortmann *et al.*, 1990). Celik e Karatekin (1997) manipulam arbitrariamente valores de ordem aparente.

## 5.7 Malhas 2D não-ortogonais

Esta etapa consiste na extensão da etapa 5.6 ao caso de malhas bidimensionais não-ortogonais.

No caso de problemas multidimensionais com malhas não-ortogonais também é comum a apresentação de estimativas de erro sem confiabilidade, isto é, com o estimador de Richardson usando apenas a ordem assintótica. Exemplos são os trabalhos de Roy e Blottner (2001) e Blottner (1990).

Há trabalhos nos quais nenhuma espécie de verificação do erro de discretização é realizada. Smith *et al.* (1993), por exemplo, apresentam um modelo numérico para resolver escoamentos tridimensionais, com malhas não-ortogonais; eles apenas mencionam a ordem assintótica do esquema usado para o caso de malhas uniformes. Huang e Prosperetti (1994) analisam *a priori* o erro de discretização em malhas não-ortogonais, mas não realizam uma análise *a posteriori*. Demirdzic *et al.* (1992) usam o estimador delta para avaliar o erro de discretização em malhas não-ortogonais; este estimador não considera a razão de refino entre as malhas nem a ordem do esquema utilizado.

### 5.8 Malhas 2D não-estruturadas

Esta etapa consiste na extensão da etapa 5.6 ao caso de malhas bidimensionais não-estruturadas.

A discordância entre as estimativas *a priori* e *a posteriori* para a ordem do erro de discretização do esquema CDS, apontada na seção 5.4, também existe no caso de malhas bidimensionais não-estruturadas. Segundo as estimativas de erro *a priori* de Santos *et al.* (1996), quando se usa o esquema CDS para aproximar a derivada de 2ª ordem em malhas não-estruturadas, no método de diferenças finitas, sua ordem assintótica é  $p_L = 0$ . Se fosse assim, o erro não se reduziria com a redução de  $h$ , conforme a Eq. (4), e seria constante. Mas as verificações *a posteriori*, isto é, as curvas de ordem efetiva dos próprios autores (Santos *et al.*, 1996) mostram que a ordem assintótica é  $p_L = 2$  ou 1. Segundo as estimativas de erro *a priori* de Roe (1987), quando se usa o esquema CDS para aproximar a derivada de 1ª ordem em malhas não-estruturadas, no método de diferenças finitas, sua ordem assintótica também é  $p_L = 0$ .

Strauss *et al.* (1999) afirmam que não se aplica a malhas não-estruturadas o método de análise *a priori* baseado na série de Taylor. E que aparentemente somente análises *a posteriori* podem ser empregadas para determinar ou verificar a ordem assintótica do esquema numérico.

A importância e contribuição das etapas 5.5 a 5.8 é generalizar os resultados de malhas unidimensionais uniformes e não-uniformes para três dimensões espaciais e uma temporal, em malhas uniformes e irregulares. Desta forma, poderão ser feitas estimativas de erro em aplicações mais práticas, isto é, em problemas tridimensionais transientes. Além disso, pretende-se esclarecer as questões da literatura apontadas nas etapas 5.5 a 5.8.

### 5.9 Cronograma

Na tabela abaixo, é apresentado o cronograma de execução física das atividades previstas nas etapas 5.1 a 5.8, organizado em períodos quadrimestrais. O indicador físico do cumprimento de cada etapa será representado por um artigo submetido para publicação.

Início: março/2005.		Término: fevereiro/2008.									
Etapa	Atividade	2005			2006			2007			1º
		1º	2º	3º	1º	2º	3º	1º	2º	3º	
5.1	Valores do erro e de suas ordens	X	X								
5.2	Razão de refino para malhas irregulares	X	X								
5.3	Malhas 1D uniformes	X	X	X							
5.4	Malhas 1D não-uniformes	X	X	X	X	X					
5.5	Malhas 2D uniformes				X	X	X	X			
5.6	Malhas 2D não-uniformes					X	X	X	X		
5.7	Malhas 2D não-ortogonais						X	X	X	X	
5.8	Malhas 2D não-estruturadas							X	X	X	X

## **6. VIABILIDADE DO PROJETO**

O projeto será desenvolvido no Laboratório de Experimentação Numérica (LENA), do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná. A infra-estrutura disponível no LENA é suficiente para desenvolver o presente projeto de pesquisa, e é a seguinte:

- Microcomputadores Pentium III e IV
- Impressora laser
- *Softwares* Windows, Word, Wgnuplot, Notepad e Fortran
- Material de expediente: papel, disquete, CD, toner, luz, telefone etc

Acredita-se que são boas as possibilidades de se atingir os objetivos deste projeto. Isso ocorre porque este projeto é uma extensão ou seqüência natural da tese de doutorado do autor deste projeto, que tratou sobre a estimativa de erros de discretização em problemas unidimensionais resolvidos com o método de diferenças finitas (Marchi, 2001; Marchi e Silva, 2002). Além disso, o autor deste projeto já publicou diversos trabalhos relacionados ao tema do projeto (Marchi e Silva, 1999a; Marchi e Silva, 1999b; Marchi e Silva, 2000; Silva e Marchi, 2000). Outros três estão em fase de análise para publicação, divulgando os primeiros estudos do presente projeto. O autor deste projeto também vem orientando diversos alunos em dissertações de mestrado e teses de doutorado onde estão sendo aplicadas técnicas para estimar erros numéricos em diversas áreas de CFD (ver currículo Lattes do autor deste projeto), por exemplo em propulsão (Marchi *et al.*, 2004). Atualmente, as etapas 5.1 a 5.4 estão em andamento.

## **7. RESULTADOS ESPERADOS**

Os resultados que se pretende alcançar ao final da execução do presente projeto são:

- 1) Ter publicado ou submetido para publicação 5 artigos em congressos e 3 em revistas científicas internacionais para divulgar a pesquisa realizada.
- 2) Disponibilizar através da internet, gratuitamente a qualquer interessado, os programas-fonte e o programa-executável de um aplicativo que permitirá aos usuários de métodos numéricos estimar os erros de discretização envolvidos em suas soluções numéricas.
- 3) Disponibilizar através da internet, gratuitamente a qualquer interessado, os programas-fonte e os programas-executáveis de todos os aplicativos implementados e usados pelo coordenador durante a execução deste projeto. Deverão ser cerca de 10 aplicativos.
- 4) Disponibilizar através da internet, gratuitamente a qualquer interessado, um manual descrevendo a teoria e procedimentos práticos para estimar erros de discretização em CFD. Este manual será usado nas disciplinas de pós-graduação que o autor deste projeto leciona no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE) e no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PG-Mec), ambos da UFPR: Verificação em Mecânica Computacional, Introdução à Mecânica Computacional, e Dinâmica dos Fluidos Computacional I e II.
- 5) Formar 3 mestres e 5 doutores.

## **8. CONTRIBUIÇÕES**

Para cada etapa deste projeto de pesquisa, as contribuições que se pretende fazer são as seguintes:

Etapa 5.1 Valores do erro e de suas ordens. Permitir que sejam interpretados corretamente os valores das ordens efetiva e aparente que podem ser obtidos em experimentos numéricos. E, aumentar a confiabilidade e indicar o uso correto de estimadores de erro de discretização baseados na extrapolação de Richardson.

Etapa 5.2 Razão de refino para malhas irregulares. Mostrar se é correto aplicar o estimador de Richardson em malhas irregulares, e, se for, em que condições.

Etapa 5.3 Malhas 1D uniformes. Comprovar o valor correto da ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização, para as aproximações numéricas mais comuns usadas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos. E, assim, permitir que o estimador de Richardson seja usado corretamente, já que ele depende diretamente do valor da ordem assintótica ( $p_L$ ).

Etapa 5.4 Malhas 1D não-uniformes. Além do mencionado acima para a etapa 5.3, mas aplicado ao caso de malhas não-uniformes, mostrar que o método que emprega a série de Taylor para realizar estimativas *a priori* também funciona com malhas não-uniformes. E esclarecer a controvérsia que existe sobre o valor da ordem assintótica do esquema CDS em malhas não-uniformes.

Etapas 5.5 a 5.8. Generalizar os resultados de malhas unidimensionais uniformes e não-uniformes para três dimensões espaciais e uma temporal, em malhas uniformes e irregulares. Desta forma, poderão ser feitas estimativas de erro em aplicações mais práticas, isto é, em problemas tridimensionais transientes.

Numa busca realizada em maio/2004 no Diretório dos Grupos de Pesquisa do CNPq, na base de 2002, desconsiderando o grupo do autor deste projeto, foram encontrados apenas cinco grupos que trabalham com estimativas de erro de soluções numéricas no Brasil. Alguns atuam na área de estruturas e outros em CFD. Mas, aparentemente, todos eles utilizam estimadores baseados no método de elementos finitos, que emprega uma única malha. Portanto, o presente projeto de pesquisa tem um caráter de ineditismo dentro do Brasil, uma vez que a estimativa do erro é baseada em soluções numéricas obtidas em múltiplas malhas.

## 9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABNT. **Guia para expressão da incerteza de medição.** Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Normas Técnicas, 1997.

AESCHLIMAN, D. P.; OBERKAMPF, W. L. Experimental methodology for computational fluid dynamics code validation. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, p. 733-741, 1998.

AIAA. Editorial policy statement on numerical accuracy and experimental uncertainty. **AIAA Journal**, v. 32, n. 1, p. 3, 1994.

AIAA. **Assessment of wind tunnel data uncertainty, standard, AIAA S-071-1995.** Washington, 1995.

AIAA. **Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations, AIAA G-077-1998.** Reston, 1998.

AINSWORTH, M.; ODEN, J. T. A posteriori error estimation in finite element analysis. **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.**, v. 142, p. 1-88, 1997.

AMALADAS, J. R.; KAMATH, H. Accuracy assessment of upwind algorithms for steady-state computations. **Computers and Fluids**, v. 27, n. 8, p. 941-962, 1998.

ARMALY, B.F.; LI, A.; NIE, J.H. Three-dimensional forced convection flow adjacent to backward-facing step. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 16, p. 222-227, 2002.

ASME. Journal of heat transfer editorial policy statement on numerical accuracy. **ASME Journal of Heat Transfer**, v. 116, p. 797-798, 1994.

ASME/FED. Journal of fluids engineering editorial policy statement on the control of numerical accuracy. **ASME Journal of Fluids Engineering.** Disponível em:

<[www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumAccuracy.pdf](http://www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumAccuracy.pdf)>. Acesso em 1 June 2004.

BABUSKA, L.; IHLENBURG, F.; STROUBOULIS, T.; GANGARAJ, S. K. A posteriori error estimation for finite element solutions of Helmholtz' equation. Part I: the quality of local indicators and estimators. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 40, p. 3443-3462, 1997.

BLOTTNER, F. G. Accurate Navier-Stokes results for the hypersonic flow over a spherical nosetip. **Journal of Spacecraft and Rockets**, v. 27, n. 2, p. 113-122, 1990.

CADAFALCH, J.; PEREZ-SEGARRA, C.D.; CONSUL, R.; OLIVA, A. Verification of finite volume computations on steady-state fluid flow and heat transfer. **Journal of Fluids Engineering**, v. 124, p. 11-21, 2002.

CELIK, I. Numerical uncertainty in fluid flow calculations: needs for future research. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 115, p. 194-195, 1993.

CELIK, I.B. Procedure for estimation and reporting of discretization error in CFD applications. **ASME Journal of Fluids Engineering**. Disponível em:  
<[www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumAccuracy.pdf](http://www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumAccuracy.pdf)>. Acesso em 1 June 2004.

CELIK, I.; CHEN, C. J.; ROACHE, P. J.; SCHEUERER, G. **Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics**. ASME, FED, v. 158, 1993.

CELIK, I.; KARATEKIN, O. Numerical experiments on application of Richardson extrapolation with nonuniform grids. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 119, p. 584-590, 1997.

CELIK, I.; ZHANG, W. M. Calculation of numerical uncertainty using Richardson extrapolation: application to some simple turbulent flow calculations. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 117, p. 439-445, 1995.

COLEMAN, H. W.; STEELE, W. G. **Experimentation and uncertainty analysis for engineers**. 2. ed. New York: Wiley, 1999.

De VAHL DAVIS, G. Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 3, p. 249-264, 1983.

DEMIRDZIC, I.; LILEK, Z.; PERIC, M. Fluid flow and heat transfer test problems for non-orthogonal grids: bench-mark solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 15, p. 329-354, 1992.

DEMUREN, A. O.; WILSON, R. V. Estimating uncertainty in computations of two-dimensional separated flows. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 116, p. 216-220, 1994.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3. ed. Berlin: Springer, 2001.

FLETCHER, C. A. J. **Computational techniques for fluid dynamics**. 2. ed. Berlin: Springer, 1997.

FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**. São Paulo: Edusp, 2000.

- FREITAS, C. J. Journal of fluids engineering editorial policy statement on the control of numerical accuracy. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 115, p. 339-340, 1993.
- FREITAS, C. J. Perspective: selected benchmarks from commercial CFD codes. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 117, p. 208-218, 1995.
- FREITAS, C.J. The issue of numerical uncertainty. **Applied Mathematical Modelling**, v. 26, p. 237-248, 2002.
- GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. T. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. **Journal of Computational Physics**, v. 48, p. 387-411, 1982.
- GRESHO, P. M.; TAYLOR, C. Editorial. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 19, n. 12, 1994.
- HAYASE, T. Monotonic convergence property of turbulent flow solution with central difference and Quick schemes. **Journal of Fluids Engineering**, v. 121, p. 351-358, 1999.
- HIRSCH, C. **Numerical computation of internal and external flows**. Chichester: Wiley, 1988.
- HOFFMAN, J. D. Relationship between the truncation errors of centered finite-difference approximations on uniform and nonuniform meshes. **Journal of Computational Physics**, v. 46, p. 469-474, 1982.
- HOLMAN, J. P. **Experimental methods for engineers**. New York: McGraw-Hill, 1994.
- HORTMANN, M.; PERIC, M.; SCHEUERER, G. Finite volume multigrid prediction of laminar natural convection: bench-mark solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 11, p. 189-207, 1990.
- HUANG, H.; PROSPERETTI, A. Effect of grid orthogonality on the solution accuracy of the two-dimensional convection-diffusion equation. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 26, p. 1-20, 1994.
- ISO. **Guide to the expression of uncertainty in measurement**. International Organization for Standardization, 1993.
- JAMESON, A.; MARTINELLI, L. Mesh refinement and modeling errors in flow simulation. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, p. 676-686, 1998.
- JFE. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 124, p. 2-80, 2002.
- KLINE, S. J.; CANTWELL, B. J.; LILLEY, G. M. **1980-81 AFOSR-HTTM-Stanford conference on complex turbulent flows**. Stanford: Mechanical Engineering Dept., Stanford University, 1981.
- MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.
- MARCHI, C. H. **Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos**. Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, 2001. Tese de doutorado em Engenharia Mecânica.

- MARCHI, C. H.; LAROCA, F.; SILVA, A. F. C.; HINCKEL, J. N. Numerical solutions of flows in rocket engines with regenerative cooling. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications**, v. 45, p. 699-717, 2004.
- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Condições suficientes para estimar com acurácia e confiabilidade erros de discretização em CFD. In: CONGRESSO IBERO LATINO-AMERICANO DE MÉTODOS COMPUTACIONAIS EM ENGENHARIA. **Anais...** São Paulo, 1999a, p. 16.1-16.20.
- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Procedimento para diminuir e estimar erros de discretização baseado em soluções numéricas coerentes In: XV CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA MECÂNICA. **Anais...** Águas de Lindóia, 1999b.
- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Previsão de erros de truncamento de modelos numéricos em malhas não-uniformes. In: IV SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL. **Anais...** Uberlândia, v. 1, 2000, p. 481-488.
- MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 42, p. 167-188, 2002.
- MARVIN, J. G. Perspective on computational fluid dynamics validation. **AIAA Journal**, v. 33, n. 10, p. 1778-1787, 1995.
- MATOS, R.S.; VARGAS, J.V.C.; LAURSEN, T.A.; SABOYA, F.E.M. Optimization study and heat transfer comparison of staggered circular and elliptic tubes in forced convection. **Int. Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 44, p. 3953-3961, 2001.
- MEHTA, U. B. Guide to credible computer simulations of fluid flows. **Journal of Propulsion and Power**, v. 12, n. 5, p. 940-948, 1996.
- MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.; PLETCHER, R.H. **Handbook of numerical heat transfer**. New York: Wiley, 1988.
- MISHEV, I.D. Finite volume methods on Voronoi meshes. **Numer. Methods Partial Differential Eq.**, v. 14, p. 193-212, 1998.
- OBERKAMPF, W. L.; BLOTTNER, F. G. Issues in computational fluid dynamics code verification and validation. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, p. 687-695, 1998.
- OBERKAMPF, W.L.; TRUCANO, T.G. Verification and validation in computational fluid dynamics. **Progress in Aerospace Sciences**, v. 38, p. 209-272, 2002.
- ORESQUES, N.; FRECHETTE, K. S.; BELITZ, K. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the Earth sciences. **Science**, v. 263, p. 641-646, 1994.
- PEPPER, D. W.; BAKER, A. J. Finite differences versus finite elements. In: **Handbook of numerical heat transfer**. Eds. MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.; PLETCHER, R.H. New York: Wiley, 1988.

RICHARDSON, L. F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A**, v. 210, p. 307-357, 1910.

RICHARDSON, L. F.; GAUNT, J. A. The deferred approach to the limit. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A**, v. 226, p. 299-361, 1927.

RIZZI, A.; VOS, J. Toward establishing credibility in computational fluid dynamics simulations. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, p. 668-675, 1998.

ROACHE, P. J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 116, p. 405-413, 1994.

ROACHE, P. J. **Verification and validation in computational science and engineering**, Albuquerque: Hermosa, 1998.

ROACHE, P. J.; GHIA, K. N.; WHITE, F. M. Editorial policy statement on the control of numerical accuracy. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 108, p. 2, 1986.

ROE, P.L. **Error estimates for cell-vertex solutions of the compressible Euler equations; ICASE Report 87-6**. Hampton: ICASE, 1987.

ROY, C.J. **Grid convergence error analysis for mixed-order numerical schemes**. AIAA paper 2001-2606, 2001.

ROY, C. J.; BLOTTNER, F. G. Assessment of one- and two-equation turbulence models for hypersonic transitional flows. **Journal of Spacecraft and Rockets**, v. 38, p. 699-710, 2001.

ROY, C. J.; EDWARDS, J. R. Numerical simulation of a three-dimensional flame/shock wave interaction. **AIAA Journal**, v. 38, n. 5, p. 745-754, 2000.

RUDY, D. H.; THOMAS, J. L.; KUMAR, A.; GNOFFO, P. A.; CHAKRAVARTHY, S. R. Computation of laminar hypersonic compression-corner flows. **AIAA Journal**, v. 29, p. 1108-1113, 1991.

SANTOS, L. A.; VASCONCELLOS, J. F. V.; MALISKA, C. R. Análise da acurácia de aproximações do laplaciano em volumes finites usando diagramas de Voronoi. In: VI ENCONTRO NACIONAL DE CIÊNCIAS TÉRMICAS. **Anais...** Rio de Janeiro: ABCM, 1996, p. 565-570.

SHIH, T. M. A procedure to debug computer programs. **Int. J. for Numerical Methods in Engineering**, v. 21, p. 1027-1037, 1985.

SHYY, W.; GARBEY, M.; APPUKUTTAN, A.; WU, J. Evaluation of Richardson extrapolation in computational fluid dynamics. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 41, p. 139-164, 2002.

SILVA, A. F. C.; MARCHI, C. H. Estimativa de erros de discretização multidimensional em dinâmica dos fluidos. In: IV SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL. **Anais...** Uberlândia, v. 1, 2000, p. 497-504.

SIMONSEN, C.D.; STERN, F. Verification and validation of RANS maneuvering simulation of Esso Osaka: effects of drift and rudder angle on forces and moments. **Computers & Fluids**, v. 32, p. 1325-1356, 2003.

SMITH, K.M.; COPE, W.K.; VANKA, S.P. A multigrid procedure for three-dimensional flows on non-orthogonal collocated grids. **Int. Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 17, p. 887-904, 1993.

STERN, F.; WILSON, R.V.; COLEMAN, H.W.; PATERSON, E.G. Comprehensive approach to verification and validation of CFD simulations – Part 1: methodology and procedures. **Journal of Fluids Engineering**, v. 123, p. 793-802, 2001.

STRAUSS, D.; AZEVEDO, J. L. F.; SILVA, L. F. F. On the application of higher order schemes for compressible flows. In: XX IBERIAN LATIN-AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING. **Proceedings...** São Paulo, 1999. CD-ROM, paper 49.

SZABÓ, B.; BABUSKA, I. **Finite element analysis**. New York: Wiley, 1991.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. 2. ed. Washington: Taylor & Francis, 1997.

TURKEL, E. **Accuracy of schemes with nonuniform meshes for compressible fluid flows, ICASE Report 85-43**. Hampton: ICASE, 1985.

WAKASHIMA, S.; SAITOH, T. S. Benchmark solutions for natural convection in a cubic cavity using the high-order time-space method. **Int. Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 47, p. 853-864, 2004.

WILSON, R.V.; STERN, F.; COLEMAN, H.W.; PATERSON, E.G. Comprehensive approach to verification and validation of CFD simulations – Part 2: application for Rans simulation of a cargo/container ship. **Journal of Fluids Engineering**, v. 123, p. 803-810, 2001.

ZHANG, X.D.; PELLETIER, D.; TRÉPANIÉ, J.Y.; CAMARERO, R. Numerical assessment of error estimators for Euler equations. **AIAA Journal**, v. 39, p. 1706-1715, 2001.

ZHU, J. Z.; ZIENKIEWICZ, O. C. Superconvergence recovery technique and a posteriori error estimates. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 30, p. 1321-1339, 1990.