

RELATÓRIO - TESTES COM MODIFICAÇÕES NO TRANSPORTE DE INFORMAÇÕES PARA O MODELO DE EQUILÍBRIO QUÍMICO LOCAL

1. Modificação proposta

Com o intuito de acelerar a convergência das simulações empregando-se o modelo físico de equilíbrio químico local, foi proposta uma modificação com relação ao transporte de informações entre as diversas subrotinas que compõem o código Mach1D, versão 5.0. No código original, a cada iteração são calculadas as frações mássicas das espécies e os graus de reação em cada equação de dissociação envolvidas. Nota-se, no entanto, que tais valores não são transportados de uma iteração para a seguinte. Deste modo, a cada iteração o sistema é solucionado a partir de uma mesma estimativa inicial. Neste caso, propõe-se transportar tais informações entre as subrotinas, durante o ciclo iterativo. Assim, ao invés de se tomar sempre a mesma estimativa inicial, pode-se tomar como dado inicial o resultado da iteração anterior, acelerando a convergência.

O transporte de informações é feito através da utilização de matrizes apropriadas, cuja dimensão varia de acordo com o número de volumes e de reações de dissociação do modelo químico adotado. Desta forma, para cada volume de controle, são armazenados valores referentes ao grau de dissociação, obtidos na iteração anterior, que são empregados como estimativas iniciais para a nova iteração.

2. Resultados obtidos

A Tabela 1, a seguir, mostra o desempenho do mesmo código numérico, obtido no computador CFD-11 (2 processadores Intel Xeon QC, 2,66 GHz, 16 GB RAM) do Laboratório de Experimentação Numérica 2 (LENA-2) do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Paraná.

Tabela 1: Comparação entre os tempos de CPU para malhas de 80 e de 640 volumes de controle, empregando-se os códigos original e modificado.

Modelo químico	80 volumes			640 volumes		
	Original	Modificado	Redução	Original	Modificado	Redução
Modelo 3	1,127 min	38,47 s	43,11%	1,180 h	44,05 min	37,78%
Modelo 4	50,07 s	29,45 s	41,18%	52,96 min	35,00 min	33,91%
Modelo 5	2,974 h	28,33 s	99,74%	---	40,02 min	---
Modelo 7	4,555 h	37,83 s	99,77%	---	49,29 min	---
Modelo 9	1,744 h	40,28 s	99,36%	---	1,080 h	---
Modelo 10	1,474 min	51,80 s	41,43%	1,564 h	59,97 min	36,09%

Pode-se notar a partir da Tabela 1 que o tempo de CPU entre os diversos modelos de seis espécies (modelos 3, 4, 5 e 7) foi reduzido em todos os casos, sendo a diminuição mais significativa observada no caso dos modelos com maior número de reações de dissociação. Isto se deve ao fato de que, nesses casos, ao se transferir as informações quanto aos graus de dissociação de uma iteração à outra, tem-se estimativas iniciais melhoradas, reduzindo-se o número total de iterações necessárias para a convergência, reduzindo-se assim o tempo de

CPU demandado. Nota-se, também, que os tempos de CPU, após a modificação proposta, apresentam uma menor dispersão (de até 35,8% no caso da malha de 80 volumes e de até 40,8% no caso de 640 volumes, para os modelos de seis espécies). Isto também é verificado no caso dos modelos de oito espécies. Deve-se notar que para todos os modelos químicos foram efetuadas 20.000 iterações no caso da malha de 80 volumes e 200.000 iterações no caso de 640 volumes.

As Tabelas 2 e 3 apresentam dados relativos ao número de iterações necessárias à convergência dos diferentes modelos químicos para as malhas de 80 e de 640 volumes de controle, bem como o número de algarismos significativos obtidos em cada simulação. Com relação ao número de iterações necessárias à convergência, observa-se que a variação desse parâmetro é maior quando empregado o código original: no caso dos modelos de seis espécies e 80 volumes de controle, são necessárias desde 14.000 (modelo 7) até 18.000 iterações (modelo 4); no caso do código modificado, o número de iterações necessárias é entre 18.000 e 19.000, para os mesmos modelos químicos. Essa menor variação no número de iterações necessárias à convergência também é observada para a malha de 640 volumes de controle e para os modelos de oito espécies químicas.

Tabela 2: Iterações necessárias para a convergência.

Modelo químico	80 volumes		640 volumes	
	Original	Modificado	Original	Modificado
Modelo 3	17.500	18.000	180.000	180.000
Modelo 4	18.000	18.000	175.000	185.000
Modelo 5	16.000	19.000	---	190.000
Modelo 7	14.000	19.000	---	192.000
Modelo 9	14.000	19.000	---	185.000
Modelo 10	16.500	19.000	192.000	180.000

Tabela 3: Número de algarismos significativos obtidos para cada modelo químico.

Modelo químico	80 volumes		640 volumes	
	Original	Modificado	Original	Modificado
Modelo 3	10	11	10	10
Modelo 4	11	11	10	10
Modelo 5	8	12	---	11
Modelo 7	8	12	---	11
Modelo 9	8	12	---	10
Modelo 10	10	12	11	10

Observando-se os resultados apresentados na Tabela 3, é verificado que o número de algarismos significativos dos modelos químicos 3, 4 e 10, no código modificado, sofre pouca ou nenhuma modificação em relação ao código original. Nota-se, contudo, que o número de algarismos significativos dos modelos químicos 5, 7 e 9 tende a se equiparar aos demais, o que não era observado no código original. Conforme pode ser observado no Relatório Técnico 3 do Projeto CFD-5, o número de algarismos significativos dos modelos 5, 7 e 9 tendia a ser menor que os demais modelos com mesmo número de espécies químicas. Uma possível causa para isso é o fato de que os modelos citados apresentam um maior número de reações de

dissociação, o que ocasiona um maior número de equações não-lineares a ser solucionado, impactando tanto no tempo de CPU demandado quanto no número de algarismos significativos alcançado. O fato de se transferir informações quanto ao grau de dissociação entre iterações subsequentes, entretanto, altera o comportamento da solução do sistema não-linear, fornecendo uma estimativa inicial melhorada, reduzindo o número de iterações necessárias para a convergência do sistema não-linear correspondente à composição química. Como conseqüências têm-se, então, a redução do tempo de CPU demandado e o aumento do número de algarismos significativos da solução numérica.

Observa-se, contudo, que a variação do número de algarismos significativos não influencia a acurácia dos resultados obtidos, como é visto na Tabela 4. Para a confecção de tal tabela, foram estimados os erros numéricos empregando-se o estimador GCI. Nota-se que, em geral, o modelo modificado apresenta valores menores para as estimativas de erro na malha de 80 volumes de controle, para algumas das variáveis de interesse, como o coeficiente de descarga e a pressão na saída da tubeira. Verifica-se, contudo, que para malhas mais refinadas (como a de 640 volumes), os valores dos erros numéricos estimados são praticamente os mesmos para ambos os códigos, à exceção do coeficiente de descarga e do empuxo adimensional, cujos erros estimados ainda apresentam valores inferiores àqueles verificados para o código original. Deste modo, pode-se afirmar os resultados numéricos obtidos após a modificação do código original são equivalentes àqueles obtidos com o código original, com erros numéricos estimados com ao menos a mesma ordem de grandeza.

Tabela 4: Resultados numéricos - modelo 3.

Variável	80 volumes		640 volumes	
	Original	Modificado	Original	Modificado
C_d [adim]	$0,98 \pm 1 \times 10^{-2}$	$0,980 \pm 5 \times 10^{-3}$	$0,9784 \pm 6 \times 10^{-4}$	$0,9784 \pm 5 \times 10^{-4}$
F^* [adim]	$1,01 \pm 1 \times 10^{-2}$	$1,013 \pm 5 \times 10^{-3}$	$1,0116 \pm 1 \times 10^{-4}$	$1,01159 \pm 3 \times 10^{-5}$
P_{ex} [Pa]	$3,63 \times 10^4 \pm 5 \times 10^2$	$3,63 \times 10^4 \pm 2 \times 10^2$	$3,618 \times 10^4 \pm 6 \times 10^1$	$3,618 \times 10^4 \pm 6 \times 10^1$
T_{ex} [K]	$2461,2 \pm 3 \times 10^{-1}$	$2461,2 \pm 1 \times 10^{-1}$	2460 ± 1	2460 ± 1
u_{ex} [m/s]	3427 ± 2	$3426,7 \pm 7 \times 10^{-1}$	3429 ± 2	3429 ± 2
M_{ex} [adim]	$2,911 \pm 2 \times 10^{-3}$	$2,9111 \pm 6 \times 10^{-4}$	$2,914 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2,914 \pm 3 \times 10^{-3}$

3. Conclusões

- Para uma determinada malha, observou-se que a modificação proposta do código original resultou em redução de no mínimo 30% no tempo de CPU demandado para a convergência das simulações. A redução do tempo de CPU foi maior, contudo, para os modelos que levam em consideração um maior número de reações de dissociação, como é o caso dos modelos 5 e 7 (ambos com seis espécies) e 9 (com oito espécies).
- A modificação proposta não alterou significativamente o número de algarismos significativos das soluções numéricas, quando obtida a convergência da simulação, para os modelos com menor número de reações de dissociação (modelos 3, 4 e 10). Para os demais modelos químicos, no entanto, observou-se um aumento da quantidade de algarismos significativos da solução numérica. Isso é atribuído ao fato de que na mudança proposta, os graus de dissociação obtidos em uma iteração são empregados como estimativas iniciais para a iteração seguinte. Deste modo, o número de iterações realizadas para se atingir à convergência é menor, o que acarreta em uma redução

tanto do tempo computacional quanto do erro de iteração, resultando em uma maior quantidade de algarismos significativos.

- As soluções numéricas obtidas com a modificação proposta são praticamente as mesmas que aquelas verificadas com o código original, especialmente para malhas mais refinadas, o que pode ser observado através da análise de erros numéricos apresentada na Tabela 4.