Verificação e estimação do erro de discretização em CFD

***CFD*-11**

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

Projeto de pesquisa submetido ao
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)
para concorrer à renovação 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, 15 de agosto de 2007.

SITUAÇÃO DO PROJETO ANTERIOR

O proponente do presente projeto tem outro atualmente em curso, intitulado “Estimativa de erros de discretização em dinâmica dos fluidos computacional”, relativo a uma bolsa PQ/CNPq, vigente no período Mar/2005 a Fev/2008, dividido em oito etapas. Em sete etapas já foram obtidos resultados. Em resumo, os produtos já obtidos são: oito artigos publicados em congressos (CILAMCE, COBEM, ENCIT); dois artigos publicados em revista internacional (JBSMSE); um trabalho de graduação; um trabalho de iniciação científica; três dissertações de mestrado; e duas teses de doutorado. Além disso, estão em análise para publicação: um artigo em congresso (COBEM) e dois artigos em revistas internacionais (NHT, ASME/JFE). Até a conclusão do projeto, em Fev/2008, outros três artigos devem ser submetidos para publicação em revistas internacionais.

RESUMO

O objetivo geral deste projeto é contribuir para melhorar a qualidade (acurácia e confiabilidade) das estimativas do erro de discretização em CFD (*Computational Fluid Dynamics*). O erro de discretização é definido pela diferença entre as soluções analítica e numérica de um problema. Este projeto envolve: (a) a solução numérica de equações diferenciais lineares e não-lineares, uni (1D) e bidimensionais (2D), em regime permanente, representando problemas básicos de condução e convecção de calor e mecânica dos fluidos; (b) para avaliar a qualidade das estimativas de erro, a solução analítica exata é conhecida para todas as equações e variáveis de interesse consideradas; (c) o uso dos métodos de diferenças finitas e de volumes finitos, com diversos tipos de aproximações numéricas; (d) malhas uniformes e irregulares (não-uniformes e não-estruturadas); (e) os três tipos de condições de contorno e a forma de aplicá-las; (f) estimativas de erro *a priori* baseadas na série de Taylor; e (g) verificação e estimação do erro *a posteriori* com sete estimadores baseados na extrapolação de Richardson, que emprega múltiplas malhas. Com a execução deste projeto de pesquisa, os resultados e contribuições que se espera são: (1) deduzir e comprovar o valor da ordem assintótica do erro de discretização para diversas aproximações numéricas e variáveis; (2) mostrar qual é o melhor esquema para cálculo da condutividade térmica nas faces de volumes de controle em problemas 1D de condução e convecção de calor; (3) mostrar qual é a melhor forma de aplicar condições de contorno em problemas 1D no método de volumes finitos, e o efeito do tipo de condição de contorno; (4) mostrar o efeito do tipo de aproximação numérica; (5) mostrar o efeito de ondas de choque normais e escoamentos supersônicos em problemas quase-unidimensionais; (6) verificar qual o estimador de erro que é mais acurado e confiável; (7) obter soluções numéricas altamente acuradas (malhas com 2048x2048 volumes de controle), do problema da cavidade quadrada com tampa móvel, com suas estimativas de erro; (8) ter publicado ou submetido para publicação oito artigos em congressos ou revistas científicas internacionais para divulgar a pesquisa realizada; e (9) formar três mestres e três doutores no tema do projeto.

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) e Tannehill *et al*. (1997).

CFD envolve fenômenos físicos nas áreas de mecânica dos fluidos, transferência de calor e massa e combustão, entre outras, que são representados por modelos matemáticos. 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*., 2006).

Os tipos de erros associados aos métodos de solução de problemas são o experimental, de modelagem e numérico. Erro experimental é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e o seu resultado experimental (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.

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 físico real na concepção dos modelos matemáticos. O processo que quantifica este tipo de erro é denominado de validação (Oberkampf e Barone, 2006; AIAA, 1998). O objetivo da validação é determinar em que medida um modelo matemático representa um determinado fenômeno físico real.

Erro numérico (E) de uma variável de interesse é a diferença entre a sua solução analítica exata (Φ) e a sua solução numérica (ϕ) (Knupp e Salari, 2003), isto é,

$$E(\phi) = \Phi - \phi \tag{1}$$

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, fluxo de massa, fluxo de calor e força. O processo que quantifica o erro numérico é denominado de verificação (Oberkampf e Barone, 2006; AIAA, 1998). 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 (ϕ_∞) e a sua solução numérica (ϕ), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \tag{2}$$

Pode-se considerar que o erro numérico é causado pelas seguintes fontes (Marchi e Silva, 2002):

1) Erro de truncamento: origina-se das aproximações numéricas empregadas na discretização de um modelo matemático. Em geral, este erro se reduz com a diminuição do tamanho (h) dos volumes de controle da malha.
2) Erro de iteração: é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração. 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 de h.
4) Erro de programação: inclui os erros causados por pessoas na discretização do modelo matemático, e 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 (ϕ), estimar com acurácia e confiabilidade 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)

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \ldots \tag{3}$$

onde ϕ = variável de interesse; h = tamanho dos volumes de controle da malha; C_1, C_2, C_3, ... = coeficientes que independem de h; p_L, p_2, p_3, ... = 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 em um gráfico log(|E|) *versus* log(h) para $h \to 0$).

As estimativas do erro de discretização, gerado por erros de truncamento, podem ser divididas em dois tipos básicos (Oberkampf e Trucano, 2002): 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 (ε_τ) 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 do ε_τ. Portanto, a partir da Eq. (3), tem-se

$$E(\phi) = C h^{p_L} \qquad \text{(para } h \to 0\text{)} \tag{4}$$

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 de h sobre E. Por exemplo, para $p_L = 2$, a redução de h à metade reduz o erro a ¼ 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 baseada na solução numérica obtida numa única malha. Em geral o método de elementos finitos (Ainsworth e Oden, 1997) se enquadra neste conjunto. O objetivo, comumente, é adaptar a malha empregada.
2) A estimativa do erro é baseada 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. Alguns estimadores deste tipo são (Marchi, 2001): delta, de Richardson, GCI (*Grid Convergence Index)*, multicoeficientes, convergente e coerente. Todos eles são alguma espécie de variante do estimador de Richardson.

2.3 Estimador de Richardson

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

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

onde ϕ_1 e ϕ_2 = soluções numéricas obtidas em duas malhas com número diferente de nós, sendo cada uma destas malhas representada pelo tamanho dos seus volumes (h); r = razão de refino entre as duas malhas (h_1 = fina e h_2 = grossa), definida por

$$r = \frac{h_2}{h_1} \tag{6}$$

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

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

onde ϕ_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 $h \to 0$, 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 ϕ_1 na malha fina (h_1) é

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

O estimador de Richardson, assim como outros existentes na literatura, são acurados apenas para o caso limite de $h \to 0$. Em geral as estimativas de erro não têm 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 $h \to 0$; e o uso de malhas irregulares para discretizar o domínio de cálculo.

3 RELEVÂNCIA DO PROBLEMA E JUSTIFICATIVA DO PROJETO

Para Oberkampf e Trucano (2002), a estimativa quantitativa do erro numérico é um dever dos analistas de CFD; para problemas complexos de engenharia, isto requer métodos *a posteriori*. Para os mesmos autores, Verificação e Validação são os meios principais para avaliar a acurácia e a confiabilidade em simulações computacionais. Ambas 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 físicos ainda não modelados adequadamente e cujas soluções analíticas são desconhecidas (um exemplo típico é a modelagem de escoamentos turbulentos; e (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 truncamento é a fonte de maior magnitude do erro numérico quando: (a) a solução numérica é iterada suficientemente, reduzindo drasticamente ou zerando o erro de iteração; (b) emprega-se precisão dupla ou quádrupla no código computacional, minimizando o erro de arredondamento; e (c) o erro de programação foi eliminado ou minimizado significativamente ao se verificar o código computacional através do método das soluções fabricadas (Knupp e Salari, 2003; Roache, 1998).

Uma perspectiva geral sobre a importância e o estado-da-arte em Verificação de soluções numéricas em CFD é a seguinte:

1) Ainda hoje não há um método único de verificação que seja aceito universalmente (Knupp e Salari, 2003).
2) A última década viu um aumento na importância dos processos de Verificação e Validação em CFD. Muitas revistas e sociedades profissionais têm implementado políticas projetadas para forçar padrões. Muita concordância tem sido obtida sobre a terminologia mais importante e métodos básicos (Minkowycz *et al*., 2006).
3) A estimativa de erros é considerada uma área especializada dentro de CFD (Rubin, 2005).
4) As revistas do *American Institute of Aeronautics and Astronautics* (AIAA) não aceitam manuscritos que não avaliem adequadamente a acurácia dos resultados numéricos (AIAA, 2007).
5) Atualmente não há método padrão, aceito pela comunidade de CFD, para avaliar o erro numérico; mas podem ser usados estimadores baseados na extrapolação de Richardson (ASME/JFE, 2007), que ainda são considerados (Roy, 2003) os mais confiáveis.
6) Tem havido recentemente grande interesse em Verificação e Validação; é um campo novo no qual não existe consenso (Karniadakis e Glimm, 2006).
7) Gupta e Kalita (2005) apresentam uma nova formulação para resolver as equações de Navier-Stokes. Não verificam a ordem de acurácia de suas soluções numéricas, nem estimam o erro delas. Apenas fazem comparações gráficas de seus resultados com outros da literatura, também sem estimativa de erro.
8) Um caso inusitado ocorreu num *workshop* dedicado à verificação de soluções de escoamentos turbulentos (Eça *et al*., 2005): seis grupos apresentaram seus resultados, avaliaram o desempenho de estimadores de erro e chegaram a conclusões sem ter a solução analítica do problema.
9) Raramente estudos de convergência de malha são feitos corretamente (Salas, 2006).
10) Não existem padrões aceitos para efetuar o processo de verificação em *CFD* (Freitas, 2002). 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).
11) Há discordâncias na nomenclatura, como se observa pelos termos diferentes que são usados, por exemplo entre Oberkampf e Trucano (2002) e Karniadakis e Glimm (2006).

A execução do presente projeto e a metodologia a ser adotada são justificados com base no seguinte:

- Há interesse em obter estimadores de erro mais rigorosos (Karniadakis e Glimm, 2006).
- Alguns pesquisadores, mesmo em trabalhos do tipo *benchmark*, como o de Bruneau e Saad (2006), apresentam duas, três ou quatro soluções numéricas em malhas diferentes, mostrando graficamente ou em tabela o efeito do refino de malha sobre os resultados; mas isso não pode

ser considerado suficiente pois não é uma estimativa de erro. Além disso, comparam seus resultados a outros da literatura, também sem estimativa de erro.

- O teste mais rigoroso de verificação é o da ordem de acurácia; hoje, a maioria das pesquisas é sobre métodos *a posteriori* para estimar o erro de discretização (Roy, 2005).
- A ordem de acurácia é verificável somente com cálculos em múltiplas malhas (Roache, 2004).
- São necessárias malhas altamente refinadas para obter soluções com nível aceitável de acurácia em problemas de escoamentos complexos (Hosder *et al*., 2006).
- 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).
- Para avaliar alguma teoria ou estimador de erro, exemplos de equívocos cometidos por outros autores: utilizar poucas malhas e muito grossas (Matos *et al*., 2001); usar 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).
- Liu e Ma (2005) mostraram que o cálculo da condutividade térmica (k) com base na temperatura na face é melhor do que o uso de média aritmética ou harmônica dos k nodais. Mas a análise deles foi apenas qualitativa, sem verificar o erro e sua ordem.
- Para Cadafalch *et al*. (2002) e Roy (2001), se os esquemas usados na discretização de um modelo matemático são UDS (*Upwind Differencing Scheme*) no termo advectivo ($p_L = 1$) e CDS (*Central Differencing Scheme*) no termo difusivo ($p_L = 2$), então o valor da ordem aparente só pode estar entre 1 e 2.
- 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.
- 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).
- 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 e faces centradas, sua ordem assintótica é, respectivamente, $p_L = 0$ e 1. Porém as verificações *a posteriori* dos próprios autores mostram que $p_L = 2$, 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 $p_L = 0$.
- 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 $p_L = 0$. Mas as verificações *a posteriori* dos próprios autores mostram que $p_L = 2$ 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.
- Segundo Versteeg e Malalasekera (2007): o esquema HDS (*Hybrid Differencing Scheme*) é de 1ª ordem; o PLDS (*Power-Law Differencing Scheme*) é mais acurado; e para análises *a priori* com a série de Taylor o escoamento deve ser suficientemente suave, sem descontinuidades em qualquer variável de interesse.

- Talvez devido à presença de choque num problema a ordem de acurácia com TVD (*Total Variation Diminishing*) fique entre 1ª e 2ª ordem na região do choque (Knupp e Salari, 2003). Na vizinhança de choque a série de Taylor não é válida (Zhang *et al*., 2001). Métodos para análise de erros, na presença de ondas de choque, podem ser complicados (Roy, 2003).
- Ainda não foi provada a existência da faixa assintótica para problemas práticos (Stern *et al*., 2001).

4 OBJETIVOS DO PROJETO

O objetivo geral deste projeto é contribuir para melhorar a qualidade (acurácia e confiabilidade) das estimativas do erro de discretização em CFD. Serão consideradas soluções numéricas obtidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos, para problemas 1D e 2D de condução e convecção de calor e mecânica dos fluidos, em malhas uniformes e irregulares (não-uniformes e não-estruturadas), com diversos tipos de aproximações numéricas e condições de contorno.

Os objetivos específicos deste projeto são:

1) Deduzir o valor das ordens verdadeiras e assintótica ($p_L, p_2, p_3, ...$) do erro de discretização.
2) Com base em experimentos numéricos, comprovar se os valores das ordens efetiva (p_E) e aparente (p_U) do erro tendem a p_L à medida que o tamanho (h) dos volumes de controle tende a zero. E verificar o valor verdadeiro do erro de discretização em função de h.
3) Mostrar a existência do comportamento assintótico do erro, e de p_E e p_U em problemas bidimensionais.
4) Fazer análises *a priori* e *a posteriori* do desempenho de diversos estimadores do erro de discretização, verificando a acurácia e confiabilidade deles. Se necessário, propor e testar alterações dos estimadores existentes ou novos. Verificar qual o estimador de erro que é mais acurado e confiável.
5) Gerar um *benchmark* do problema da cavidade quadrada com tampa móvel, clássico em CFD, incluindo a aplicação de diversos estimadores de erro e o uso de malhas com 2048x2048 volumes de controle.
6) Formar três mestres e três doutores no tema do projeto, habilitados para aplicar o processo de verificação de soluções numéricas em CFD.

5 METODOLOGIA E PLANO DE TRABALHO

O projeto está estruturado em oito etapas descritas nesta seção. Do ponto de vista prático, o interesse é realizar estimativas do erro de discretização em problemas multidimensionais. Assim, são abordados problemas bidimensionais (2D) nas etapas 5 a 8. As etapas 1 a 4, dedicadas a problemas unidimensionais (1D), são consideradas importantes para fundamentar adequadamente as demais.

As principais características do projeto são: (a) todos os programas computacionais que serão utilizados serão implementados pelo proponente e seus colaboradores; (b) estes programas empregarão a linguagem de programação Fortran 95, com precisão dupla ou quádrupla; (c) para poder avaliar o desempenho dos estimadores de erro, a solução analítica exata é conhecida para todos os modelos matemáticos e variáveis de interesse considerados; (d) as análises deverão ser feitas para os seguintes tipos de variáveis de interesse: as variáveis dependentes nos modelos matemáticos (velocidade, pressão, temperatura, massa específica) e variáveis secundárias obtidas por diferenciação ou integração das variáveis dependentes (fluxos de massa e calor, média da variável dependente, forças); (e) nos problemas 1D, devem ser usados até 10^5 volumes de controle, e nos 2D, até 4×10^4 em cada direção; (f) será usado o método de diferenças finitas na etapa 5, e nas demais, o de volumes finitos; (g) o método *multigrid* (Wesseling, 1992) será empregado nas etapas 5 a 8 associado ao *solver* MSI (*Modified Strongly Implicit procedure*) para resolver os sistemas de equações algébricas, e o Gauss-Seidel na etapa 6; (h) nas etapas 1 a 4 será empregado o método *singlegrid* associado ao *solver* TDMA (*TriDiagonal Matrix Algorithm*); (i) serão feitas estimativas *a priori* do erro de discretização, isto é, deduzidos os valores das ordens verdadeiras e assintótica (p_L, p_2, p_3, ...) da equação do erro de discretização, Eq. (3); (j) com base em experimentos numéricos, em função do tamanho (h) dos volumes de controle da malha, serão verificados o valor verdadeiro e estimado do erro de discretização, o valor da ordem efetiva (p_E) do erro de discretização verdadeiro e o valor da ordem aparente (p_U) do erro de discretização estimado; (k) verificar se a ordem assintótica (p_L), deduzida *a priori*, coincide com aquela verificada *a posteriori*; (l) nas etapas 1 a 7 deve ser avaliado o desempenho dos estimadores de Richardson, GCI e convergente e, na etapa 8, estes três mais multicoeficientes e coerente.

Etapa 1: Cálculo da condutividade nas faces

Objetivo: verificar o desempenho de quatro esquemas para cálculo da condutividade térmica (k) nas faces dos volumes de controle no método de volumes finitos. Pretende-se verificar o desempenho dos três esquemas e de um quarto através da solução de cinco problemas 1D, com refino sistemático de malhas. Assim, será possível verificar o erro de discretização e a ordem assintótica dos quatro esquemas e chegar a conclusões efetivamente fundamentadas. Os problemas a serem resolvidos são: condução de calor em dois materiais, com k constante ou variável; condução de calor em um material com k variável; e advecção-difusão em um fluido com k variável. A aproximação numérica a ser usada é CDS. Em problemas com dois materiais, pretende-se verificar o efeito da interface entre eles se dar num nó ou numa face de volume de controle.

Etapa 2: Efeito das condições de contorno (C.C.)

Objetivo: verificar o efeito do tipo e da forma de aplicar condições de contorno. Tipos de C.C. que serão consideradas: Dirichlet, Neumann e Robin. Formas de aplicar C.C. que serão consideradas: incorporação aos volumes de controle com uma face no contorno; volumes fictícios; meio volume; e volume de tamanho nulo. As equações 1D a serem resolvidas são Poisson, aleta, advecção-difusão e Burgers. Serão considerados três tipos de aproximações numéricas: UDS, CDS e *Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinetics* (QUICK), descritos por Versteeg e Malalasekera (2007).

Etapa 3: Efeito do tipo de aproximação 1D

Objetivo: verificar o efeito do tipo de aproximação numérica. As equações 1D a serem resolvidas são Poisson, advecção-difusão e Burgers. Serão considerados nove tipos de aproximações numéricas: UDS de 1ª e 2ª ordens, CDS de 2ª e 4ª ordens, QUICK, HDS, PLDS, *Weighted Upstream Differencing Scheme* (WUDS) e TVD, descritos por Versteeg e Malalasekera (2007).

Etapa 4: Fluido compressível

Objetivo: verificar o efeito de problemas hiberpólicos. O problema é definido pelas equações de Euler Quase-1D resolvidas em bocais do tipo convergente-divergente. Serão considerados escoamentos com e sem onda de choque, e três tipos de aproximações numéricas: UDS, CDS e QUICK.

Etapa 5: Efeito do tipo de equação 2D

Objetivo: verificar o efeito do tipo de equação bidimensional (2D). As equações a serem resolvidas são Laplace, advecção-difusão, Burgers e Navier-Stokes. A aproximação numérica a ser usada é CDS com aproximações 1D.

<u>Etapa 6: Efeito do tipo de malha 2D</u>

Objetivo: verificar o efeito dos seguintes tipos de malhas bidimensionais (2D): totalmente uniforme, não-uniforme e não-estruturada. A aproximação numérica a ser usada é CDS. As equações a serem resolvidas são Laplace e advecção-difusão.

<u>Etapa 7: Aproximações 1D x 2D</u>

Objetivo: verificar o efeito do uso de aproximações 1D (UDS, CDS e QUICK) contra um tipo de aproximação 2D baseado em CDS. As equações 2D a serem resolvidas são Laplace, advecção-difusão, Burgers e Navier-Stokes.

<u>Etapa 8: Tipo de estimador e *benchmark*</u>

Objetivo: verificar o desempenho de vários estimadores do erro de discretização na solução das equações de Navier-Stokes 2D. Serão considerados três tipos de aproximações numéricas (UDS, CDS e QUICK) e malhas totalmente uniformes e não-uniformes. Outro objetivo é gerar um *benchmark* com a estimativa do erro de discretização associada à solução numérica.

<u>Cronograma</u>

Na tabela abaixo, é apresentado o cronograma de execução física das atividades previstas nas etapas 1 a 8, organizado em períodos quadrimestrais. O indicador físico do cumprimento de cada etapa será representado por um artigo a ser submetido para publicação.

Início: março/2008. Término: fevereiro/2011.

Etapa	Atividade	2008			2009			2010			
		1º	2º	3º	1º	2º	3º	1º	2º	3º	1º
1	Cálculo da condutividade nas faces	X	X								
2	Efeito das condições de contorno (C.C.)	X	X	X							
3	Efeito do tipo de aproximação 1D	X	X	X							
4	Fluido compressível	X	X	X							
5	Efeito do tipo de equação 2D	X	X	X	X	X	X				
6	Efeito do tipo de malha 2D	X	X	X	X	X	X	X	X		
7	Aproximações 1D x 2D	X	X	X	X	X	X	X	X	X	
8	Tipo de estimador e *benchmark*			X	X	X	X	X	X	X	X

<u>6 VIABILIDADE DO PROJETO</u>

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

- Microcomputadores com processadores Intel do tipo Xeon, Core 2 Quad e Core 2 Duo, além de alguns Pentium 4
- Impressoras do tipo laser
- *Softwares* Windows, Word, Wgnuplot, Notepad e Fortran 9.1 da Intel
- Material de expediente: papel, disquete, CD, toner, luz, telefone etc

Acredita-se que são grandes as possibilidades de se atingir os objetivos deste projeto porque: (1) a tese de doutorado do proponente deste projeto tratou sobre a estimativa de erros de discretização em problemas unidimensionais resolvidos com o método de diferenças finitas

(Marchi, 2001; Marchi e Silva, 2002); (2) o proponente deste projeto tem outro (processo CNPq 302916/2004-0) atualmente em curso (Estimativa de erros de discretização em dinâmica dos fluidos computacional), relativo a uma bolsa PQ/CNPq, vigente no período Mar/2005 a Fev/2008; (3) para executar este novo projeto, seu proponente conta com três alunos regulares de mestrado e dois alunos regulares de doutorado, do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da UFPR, além de um pesquisador doutor do seu grupo de pesquisa; (4) atualmente, as etapas 1, 4 e 6 já estão em andamento; e (5) a experiência do proponente no tema do projeto pode ser avaliada através do seu currículo Lattes.

7 RESULTADOS E CONTRIBUIÇÕES ESPERADOS

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

1) Atingir os seis objetivos específicos do projeto.
2) Ter publicado ou submetido para publicação oito artigos em congressos ou revistas científicas internacionais para divulgar a pesquisa realizada.
3) Mostrar qual é o melhor esquema para cálculo da condutividade térmica nas faces de volumes de controle em problemas 1D de condução e convecção de calor.
4) Mostrar qual é a melhor forma de aplicar condições de contorno em problemas 1D no método de volumes finitos, e o efeito do tipo de condição de contorno.
5) Mostrar o efeito do tipo de aproximação numérica em problemas 1D e 2D, em malhas uniformes, não-uniformes e não-estruturadas.
6) Mostrar o efeito de ondas de choque normais e escoamentos supersônicos em problemas quase-unidimensionais.
7) Divulgar soluções numéricas altamente acuradas (malhas com 2048x2048 volumes de controle), do problema da cavidade quadrada com tampa móvel, com suas estimativas de erro.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABNT. **Guia para expressão da incerteza de medição**. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Normas Técnicas, 1997.
- AIAA. **Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations, AIAA G-077-1998**. Reston, 1998.
- AIAA. Editorial policy statement on numerical and experimental accuracy. **American Institute of Aeronautics and Astronautics.** Disponível em: <www.aiaa.org>. Acesso em 18 Julho 2007.
- AINSWORTH, M.; ODEN, J. T. A posteriori error estimation in finite element analysis. **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg**., v. 142, p. 1-88, 1997.
- ASME/JFE. 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>. Acesso em 18 Julho 2007.
- 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.
- BRUNEAU, C. H.; SAAD, M. The 2D lid-driven cavity problem revisited. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 326-348, 2006.
- 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.; 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.
- 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.
- EÇA, L.; HOEKSTRA, M.; ROACHE, P. J. **Verification of calculations: an overview of the Lisbon workshop**. AIAA paper 4728-2005, 2005.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3. ed. Berlin: Springer, 2001.
- FREITAS, C. J. The issue of numerical uncertainty. **Applied Mathematical Modelling**, v. 26, p. 237-248, 2002.
- GUPTA, M. M.; KALITA, J. C. A new paradigm for solving Navier-Stokes equations: streamfunction-velocity formulation. **Journal of Computational Physics**, v. 207, p. 52-68, 2005.
- 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.
- HOSDER, S.; GROSSMAN, B.; HAFTKA, R. T.; MASON, W. H.; WATSON, L. T. Quantitative relative comparison of CFD simulation uncertainties for a transonic diffuser problem. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 1444-1458, 2006.
- JONES, W. P.; MENZIES, K. R. Analysis of the cell-centred finite volume method for the diffusion equation. **Journal of Computational Physics**, v. 165, p. 45-68, 2000.
- KARNIADAKIS, G. E.; GLIMM, J. Uncertainty quantification in simulation science. **Journal of Computational Physics**, v. 217, p. 1-4, 2006.
- KNUPP, P.; SALARI, K. **Verification of computer codes in computational science and engineering**. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2003.
- LIU, Z.; MA, C. A new method for numerical treatment of diffusion coefficients at control-volume surfaces. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 47, p. 491-505, 2005.
- 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.; SILVA, A. F. C. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 42, p. 167-188, 2002.
- 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.
- MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; MURTHY, J. Y. **Handbook of numerical heat transfer**. 2. ed. New Jersey: Wiley, 2006.
- OBERKAMPF, W. L.; BARONE, M. F. Measures of agreement between computation and experiment: validation metrics. **Journal of Computational Physics**, v. 217, p. 5-36, 2006.
- 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.
- 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. **Phylosophical 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. **Phylosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A**, v. 226, p. 299-361, 1927.
- 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. Building PDE codes to be verifiable and validatable. **Computing in Science & Engineering**, v. 6, p. 30-38, 2004.
- ROACHE, P. J. **Verification and validation in computational science and engineering**, Albuquerque: Hermosa, 1998.
- 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. Grid convergence error analysis for mixed-order numerical schemes. **AIAA Journal**, v. 41, p. 595-604, 2003.
- ROY, C. J. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, v. 205, p. 131-156, 2005.
- 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.
- RUBIN, S. G. Editorial: note to readers of C&F; editor for review articles. **Computers & Fluids**, v. 34, p. 641, 2005.
- SALAS, M. D. Some observations on grid convergence. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 688-692, 2006.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics; the finite volume method**. 2. ed. Harlow, England: Pearson/Prentice Hall, 2007.
- WESSELING, P. **An introduction to multgrid methods**. New York: Wiley, 1992.
- 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.; TRÉPANIER, J.Y; CAMARERO, R. Numerical assessment of error estimators for Euler equations. **AIAA Journal**, v. 39, p. 1706-1715, 2001.