1) IDENTIFICAÇÃO DA PROPOSTA

Multiextrapolação de Richardson para reduzir e estimar o erro de discretização em CFD

***CFD*-17**

Palavras-chave: erro numérico, diferenças finitas, volumes finitos, erro de truncamento, verificação, validação.

Projeto de pesquisa submetido ao
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)
para concorrer ao **Edital PQ 10/2010**
visando renovar uma bolsa de produtividade em pesquisa (PQ)

Proponente: Carlos Henrique Marchi
Doutor em engenharia mecânica pela Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) em 2001
Professor associado da Universidade Federal do Paraná (UFPR)
Caixa postal 19040, CEP 81531-980, Curitiba, PR
Telefone: (41) 3361-3126; Fax: (41) 3361-3701; marchi@ufpr.br

Curitiba, 11 de agosto de 2010.

SITUAÇÃO DO PROJETO ANTERIOR

O proponente do presente projeto tem outro atualmente em curso, intitulado "Verificação e estimação do erro de discretização em CFD", relativo a uma bolsa PQ/CNPq, vigente no período Mar/2008 a Fev/2011, dividido em oito etapas. Em todas as oito etapas foram obtidos resultados. Em resumo, os produtos já obtidos são: onze artigos publicados em eventos (CILAMCE de 2008 e 2009); três artigos publicados em periódicos (Numerical Heat Transfer, JBSMSE e JAESA); defendidos e aprovados dois trabalhos de graduação, quatro dissertações de mestrado e quatro teses de doutorado. Além disso: foram aceitos três artigos para publicação no CONEM/2010; e foram submetidos dois artigos ao ENCIT/2010 e quatro artigos a periódicos (Int. J. for Numerical Methods in Fluids e JBSMSE). Até a conclusão do projeto, em Fev/2011, deve ser concluído um trabalho de graduação e submetidos a periódicos nove artigos, que estão em fase de redação.

RESUMO

O objetivo geral deste projeto de pesquisa básica é reduzir e estimar o erro de discretização em CFD (*Computational Fluid Dynamics*) através de múltiplas extrapolações de Richardson (MER). Pretende-se melhorar, generalizar e testar o uso de MER visando diminuir a memória computacional e o tempo de CPU necessários para se resolver problemas de CFD, bem como obter soluções numéricas de grande acurácia. Serão considerados: problemas governados pelas equações de Poisson, advecção-difusão, Laplace, Burgers e Navier-Stokes; uma, duas e três dimensões espaciais e o tempo; soluções numéricas obtidas com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos; diversos tipos de variáveis de interesse e de aproximações numéricas; precisões simples, dupla e quádrupla nos cálculos; e malhas uniformes, não-uniformes, triangulares, não-ortogonais e não-estruturadas. O projeto está dividido em doze etapas que deverão ser executadas em três anos pelo proponente e 18 colaboradores (7 professores-doutores, 9 doutorandos, 1 mestrando e 1 graduanda) de sete instituições.

2) QUALIFICAÇÃO DO PRINCIPAL PROBLEMA A SER ABORDADO

Definição do problema

A extrapolação de Richardson (ER) pode ser usada em problemas práticos de CFD para reduzir tão significativamente o erro numérico quanto em problemas simples?

O erro numérico (E) pode ser definido (Knupp e Salari, 2003) pela diferença entre a solução analítica exata (Φ) e a solução numérica (ϕ) de uma determinada variável de interesse, isto é,

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

Exemplos de variáveis de interesse em dinâmica dos fluidos são: velocidade, temperatura, pressão, massa específica, fluxo de massa, fluxo de calor e força. As fontes do erro numérico (Roache, 1998) são os erros de discretização, de iteração, de arredondamento e outros, sendo o primeiro geralmente o de maior magnitude.

A extrapolação de Richardson (Burden e Faires, 2003; Roache, 1994, 1998; Richardson, 1910; Richardson e Gaunt, 1927) é dada por

$$\phi_\infty = \phi_1 + \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(r^p - 1)} \tag{2}$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 = soluções numéricas obtidas em duas malhas (h_2=grossa e h_1=fina) com número diferente de nós, sendo cada uma destas malhas representada pelo tamanho dos seus volumes de controle (h), no caso do método de volumes finitos; $r = h_2/h_1$ é a razão de refino entre as duas malhas; p = ordem assintótica (p_L) do erro de discretização; e ϕ_∞ = valor extrapolado da variável de interesse, que geralmente é uma aproximação de Φ melhor do que ϕ_1 e ϕ_2, isto é, $|E(\phi_\infty)| < |E(\phi_1,\phi_2)|$. A Eq. (2) é adequada para reduzir a magnitude do erro de discretização.

MER significa aplicar a Eq. (2) de forma recursiva. Cada aplicação da Eq. (2) representa um nível de extrapolação. No livro de Burden e Faires (2003) é apresentado um exemplo de cálculo da derivada de primeira ordem de uma função através de diferença central; com base em três aplicações desta aproximação numérica para três valores de h, onde a melhor aproximação das três tem $E > 1{,}5\text{x}10^{-2}$, usando-se apenas dois níveis de ER obtém-se $E < 1{,}0\text{x}10^{-6}$, ou seja, o erro é reduzido em mais de 15 mil vezes.

Com base na Eq. (2), pode-se obter (Roache, 1998)

$$U(\phi_1) \quad = \quad \frac{(\phi_1 - \phi_2)}{(r^p - 1)} \tag{3}$$

onde U é uma estimativa do erro numérico, causado por erros de discretização, para a solução numérica ϕ_1 na malha fina (h_1). A Eq. (3) é o estimador de Richardson, que é a base para outros estimadores de erro, como o GCI (*Grid Convergence Index*) de Roache (1994).

Revisão bibliográfica

O próprio criador de ER (Richardson e Gaunt, 1927) aplicou MER com dois níveis de extrapolação em problemas bidimensionais (2D) de condução de calor, antes da era do computador. Joyce (1971) apresenta um extenso estudo sobre processos de extrapolação em análise numérica; quase todos são baseados em ER ou variantes dele.

Alguns trabalhos (Benjamin e Denny, 1979; Schreiber e Keller, 1983; Erturk et al., 2005) obtiveram ótimos resultados ao empregar MER para diminuir o erro de discretização do valor mínimo da função de corrente no problema da cavidade quadrada com tampa móvel, clássico em CFD. Porém, estes autores utilizaram este procedimento com no máximo quatro malhas, resultando em até três níveis de extrapolação para a malha mais fina usada; e só abordaram problemas 2D. Nestes trabalhos, MER foi usado como ferramenta; não foram realizados estudos para seu aperfeiçoamento. Além disso, em nenhum destes trabalhos foi proposto um estimador de erro associado ao uso de MER.

O habitual é aplicar ER de forma simples, isto é, com apenas um nível de extrapolação; por exemplo, De Vahl Davis (1983) em convecção natural; Wang e Zhang (2009) na equação de Poisson 2D; e Ma e Ge (2010) na equação de advecção-difusão 3D.

Originalidade

Até hoje, MER foi muito pouco empregado em CFD. Talvez isso tenha ocorrido por dificuldades pouco compreendidas, exploradas e relatadas na literatura (Burg e Erwin, 2009). Estudos (Marchi et al., 2008) preliminares deste projeto já encontraram algumas destas dificuldades, que são: (1) a redução do erro com MER é bem mais modesta no caso dos valores de variáveis com extremos (máximo/mínimo); (2) para as coordenadas de variáveis com extremos, MER parece não se aplicar, às vezes, até há um aumento do erro ao se usar MER; (3) com alguns níveis de extrapolação o erro de arredondamento pode se tornar maior que o erro de discretização, com isso MER perde sua eficiência; e (4) o uso incorreto das ordens do erro pode prejudicar muito a efetividade de MER.

Com a execução deste projeto, além de eliminar ou minimizar as dificuldades acima, pretende-se formalizar matematicamente a técnica de MER, aplicá-la a problemas bi e tridimensionais de CFD, aplicá-la a diversos tipos de variáveis de interesse, estudar o efeito de diversos parâmetros que afetam o uso de MER, desenvolver um estimador de erro para soluções obtidas com MER (inexistente na literatura), realizar dois processos de validação (Roache, 1998), gerar dois *benchmarks* para exemplificar o uso prático de MER em CFD, e implementar e disponibilizar um *software* para interessados em usar MER.

Algumas contribuições iniciais da equipe deste projeto foram feitas em três trabalhos já publicados em eventos (Marchi et al., 2008; Marchi e Germer, 2009) e periódico (Marchi et al., 2009) e uma tese (Alves, 2010); outros quatro trabalhos estão em preparação para serem submetidos a eventos e periódicos. Nestes trabalhos foram usados mais de 10 níveis de extrapolação, reduzindo de forma surpreendente o erro de discretização, conforme alguns resultados apresentados abaixo. Com base nestes trabalhos, tudo indica que a extrapolação de Richardson (ER) pode ser usada em problemas práticos de CFD para reduzir tão significativamente o erro numérico quanto em problemas simples.

Importância do projeto

A execução deste projeto provocará uma revolução tão grande, ou maior, nos métodos numéricos quanto o método *multigrid*.

Do ponto de vista matemático, idealmente uma solução numérica deve ter erro numérico nulo, ou seja, ela deve resultar na solução analítica. Portanto, estudar técnicas que sejam eficientes na redução do erro numérico ou de suas fontes é importante para que seja possível medir adequadamente o erro de modelagem, isto é, o erro de um modelo matemático usado para representar um fenômeno físico real.

Algumas formas para reduzir o erro numérico causado por erros de discretização são: (1) refinar a malha, cuja desvantagem é aumentar as necessidades de memória e tempo computacionais; (2) aumentar a ordem de acurácia das aproximações numéricas, cuja desvantagem é aumentar a complexidade do modelo numérico; e (3) usar técnicas de extrapolação cuja principal delas é a de Richardson, para a qual algumas de suas dificuldades já foram apontadas na seção anterior.

As principais vantagens do uso da extrapolação de Richardson são:

1) É um pós-processamento simples, ou seja, não interfere diretamente na obtenção da solução numérica em uma dada malha *h*.
2) Seu custo computacional é muito baixo em termos de memória e tempo de CPU.
3) Pode ser aplicada a códigos computacionais já existentes ou a resultados já obtidos.
4) Aplica-se a diversos métodos numéricos, aproximações numéricas e variáveis de interesse.
5) Independe de análises a priori e do conhecimento da solução analítica do problema.

Sabendo-se que as soluções numéricas contêm erros, é importante estimá-los pelos seguintes motivos: (1) na prática não se conhece a solução analítica do problema bem como o erro verdadeiro; (2) quando o erro é maior do que o aceitável compromete-se a confiabilidade do uso da solução numérica; (3) 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 pois ambos são inversamente proporcionais ao nível de erro; (4) para validar e melhorar modelos matemáticos já existentes, e desenvolver novos, 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 (5) para otimizar o uso da malha, isto é, adaptá-la visando homogeneizar o nível de erro no domínio de cálculo.

A técnica de MER é extremamente efetiva na redução do erro de discretização, conforme resultados preliminares obtidos pela equipe deste projeto e apresentados abaixo. O exemplo refere-se à solução numérica da equação de Laplace 2D, obtida por diferenças finitas para uma determinada variável de interesse. Em princípio, pode-se dividir em duas formas o uso de MER:

1. **Obter o mesmo erro de discretização com uma malha que tem muito menos nós, resultando na redução do esforço computacional (memória e tempo de CPU). Esta forma é indicada especialmente para aplicações práticas (validações).** Isso é exemplificado na Tabela 1 para três níveis específicos de erro. Por exemplo, para o nível de erro $-9\text{x}10^{-7}$, sem MER é necessário usar a malha 513x513 para atingir este nível de erro, e a malha 17x17 com MER. Portanto, com MER a malha necessária é 911 vezes menor. Esta razão entre o número de nós das malhas sem e com MER indica o nível de redução do esforço computacional (memória e

tempo de CPU) ao se usar MER em relação a não o usar. A Tabela 1 mostra que quanto menor é o nível de erro desejado, melhor é o desempenho de MER.

Tabela 1. Desempenho de MER para erros específicos.

Nível do erro	**$-2x10^{-4}$**	**$-9x10^{-7}$**	**$-3x10^{-9}$**
Malha necessária sem MER	33x33	513x513	8.193x8.193
Malha necessária com MER	9x9	17x17	33x33
Número de níveis de extrapolação	1	2	3
Razão entre o número de nós das malhas sem e com MER	13,4	911	61.639

2. **Reduzir o erro de discretização em uma malha com o mesmo número de nós, resultando em erros muito menores e maior confiabilidade da solução. Esta forma é indicada especialmente para se gerar *benchmarks* (resultados de referência).** Isso é exemplificado na Tabela 2 para três malhas específicas. Por exemplo, na malha 33x33, mesmo com apenas três níveis de extrapolação, o erro já é reduzido em 143 mil vezes. A Tabela 2 mostra que quanto maior é o número de nós da malha, melhor é o desempenho de MER.

Tabela 2. Desempenho de MER para malhas específicas.

Malha	**33x33**	**129x129**	**1.025x1.025**
Erro sem MER	$-2{,}30x10^{-4}$	$-1{,}44x10^{-5}$	$-2{,}25x10^{-7}$
Erro com MER	$-1{,}61x10^{-9}$	$-1{,}21x10^{-16}$	$-9{,}83\ x10^{-32}$
Número de níveis de extrapolação	3	5	8
Razão entre o erro sem e com MER	$1{,}43x10^{5}$	$1{,}19x10^{11}$	$2{,}29x10^{24}$

3) OBJETIVOS E METAS A SEREM ALCANÇADOS

O objetivo geral deste projeto é reduzir e estimar o erro de discretização em CFD através da técnica denominada de múltiplas extrapolações de Richardson (MER). Para tanto, pretende-se melhorar, generalizar e testar o uso de MER. Com isso, visa-se diminuir a memória computacional e o tempo de CPU necessários para se resolver problemas de CFD, bem como obter soluções numéricas de grande acurácia.

As metas e objetivos específicos deste projeto são:

Meta 1: melhorar e testar o desempenho de MER

1) Melhorar o desempenho de MER em variáveis de campo que têm valores extremos locais ou globais (mínimos e máximos de funções), não-linearidades e descontinuidades.
2) Testar o efeito dos seguintes parâmetros que afetam o desempenho de MER: razão de refino de malha; número de dimensões das equações; número de dimensões de refino de malha; ordens do erro; perfis e campos; precisão dos cálculos; número de extrapolações; malha base.
3) Testar o efeito dos seguintes tipos de malha sobre o desempenho de MER: uniforme, não-uniforme, triangular, não-ortogonal e não-estruturada.
4) Minimizar o efeito dos erros de iteração e de arredondamento sobre o erro numérico.
5) Desenvolver um estimador de erro para soluções obtidas com MER.
6) Aplicar MER a problemas transientes.
7) Aplicar MER a problemas envolvendo fluidos compressíveis.
8) Implementar programas computacionais para analisar o desempenho de MER e para usuários de MER.

Meta 2: validar resultados numéricos com e sem MER

9) Resolver problemas de aerodinâmica de projéteis e foguetes.
10) Resolver problemas de propulsão de foguetes.

Meta 3: gerar *benchmarks* com MER

11) Obter os resultados mais acurados da literatura, com suas estimativas de erro, para o problema clássico do escoamento 2D dentro de uma cavidade quadrada causado pela sua tampa móvel.
12) Idem ao objetivo 11 para o escoamento 3D dentro de uma cavidade cúbica.

4) METODOLOGIA A SER EMPREGADA

Para atingir os objetivos propostos, o projeto está estruturado em doze etapas, uma para cada objetivo específico. Do ponto de vista prático, o interesse é aplicar múltiplas extrapolações de Richardson (MER) para reduzir e estimar o erro de discretização em problemas bi (2D) e tridimensionais (3D) de CFD, representados pelas etapas 9 a 12. As demais etapas são dedicadas a melhorar e testar o desempenho de MER.

As principais características da metodologia a ser usada no projeto são:

a) Todos os programas computacionais serão implementados pela equipe do projeto. Estes programas empregarão a linguagem de programação Fortran 2003.
b) Serão usados os métodos numéricos de diferenças finitas (Tannehill et al., 1997) e volumes finitos (Maliska, 2004; Versteeg e Malalasekera, 2007) com diversos tipos de aproximações numéricas.
c) Serão considerados problemas governados pelas equações de Poisson, Fourier, da onda, advecção-difusão, Laplace, Burgers, Navier-Stokes e Reynolds em uma (1D), duas (2D) e três (3D) dimensões espaciais, e transientes.
d) Para discretizar os domínios de cálculo, serão usadas malhas desde as mais grossas até as mais finas possíveis para os microcomputadores disponíveis no laboratório do proponente deste projeto. Em problemas 1D, devem ser usadas malhas com até a ordem de 10^8 nós; em 2D, até 10^4 nós em cada direção; e em 3D, até 400 nós em cada direção. Essas malhas permitirão realizar, respectivamente, cerca de 25, 15 e 7 níveis de extrapolação.
e) Condições de contorno do tipo Dirichlet, Neumann e Robin.
f) Será usado o método *multigrid* (Wesseling, 1992) para reduzir o tempo computacional necessário para obter a solução numérica dos problemas 2D e 3D em cada malha.
g) Com base em experimentos numéricos e em função da métrica (h) de cada 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 (Marchi et al., 2008).
h) As análises deverão ser feitas para os seguintes tipos de variáveis de interesse: as variáveis dependentes nos modelos matemáticos (velocidade, temperatura) e variáveis secundárias obtidas por diferenciação ou integração das variáveis dependentes (fluxos de massa e calor, média da variável dependente, forças etc).
i) Verificar a eficiência de MER na redução do erro de discretização ao se comparar a memória computacional e o tempo de CPU necessários para resolver cada problema com e sem MER.
j) A solução analítica é conhecida para as equações e variáveis de interesse a serem consideradas nas etapas 1 a 7. Assim, será possível verificar a acurácia e confiabilidade do estimador de erro a ser proposto e a eficiência de MER na redução do erro de discretização.

A seguir são descritas as doze etapas do trabalho, incluindo o número dos objetivos do projeto e membros da equipe envolvidos. O proponente deste projeto é citado só nas etapas cinco e oito porque atuará diretamente nelas; nas demais etapas, ele atuará no planejamento e orientação da execução e análise dos resultados.

Etapa 1: extremos, não-linearidades e descontinuidades

Objetivo 1: melhorar o desempenho de MER em variáveis de campo que têm valores extremos locais ou globais (mínimos e máximos de funções), não-linearidades e descontinuidades.

Responsáveis pela execução: Novak, Gomes, Santiago e Araki.

Em relação a extremos, pretende-se testar o uso de diversos tipos de função de interpolação para tornar contínuas localmente as soluções numéricas em regiões com extremos locais. Desta forma, as soluções não variarão apenas discretamente, com os nós da malha e suas coordenadas; acredita-se que esse seja o problema ao se usar MER em variáveis com extremos; resultados preliminares confirmam essa suspeita.

Em relação a não-linearidades, pretende-se investigar o desempenho de MER na condução de calor com condutividade térmica variável e na equação de Burgers; e no caso de descontinuidades, na condução de calor com condutividade térmica variável e meios compostos bem como em problemas com ondas de choque.

Etapa 2: parâmetros de MER

Objetivo 2: testar o efeito dos seguintes parâmetros que afetam o desempenho de MER: razão de refino de malha; número de dimensões das equações; número de dimensões de refino de malha; ordens do erro; perfis e campos; precisão dos cálculos; número de extrapolações; malha base.

Responsáveis pela execução: Giacomini, Vargas, Joeckel, Oliveira e Pinto.

Pretende-se testar diversos valores de razão de refino. Acredita-se que quanto menor é a razão de refino, maior é a redução do erro com o refino da malha. Contudo, o erro de arredondamento poderá ser um fator limitante.

Número de dimensões das equações: comparar o desempenho de MER ao se resolver um mesmo problema em 1, 2 e 3 dimensões espaciais.

Número de dimensões de refino de malha: pretende-se verificar se MER funciona adequadamente em problemas com mais de uma dimensão, ao se fazer o refino de malha separadamente em cada dimensão.

Ordens do erro: pretende-se investigar o impacto sobre o desempenho de MER ao se usar ordens do erro incorretas, comparando-as às corretas. Isso é importante nos casos em que não se consegue estimar a priori ou a posteriori as ordens do erro.

Perfis e campos: este objetivo se refere a investigar como aplicar MER em perfis e campos inteiros de temperatura, velocidades, pressão etc. em vez de apenas pontos específicos ou variáveis globais.

Precisão dos cálculos: pretende-se verificar o desempenho de MER ao se usar precisão simples, dupla e quádrupla nos cálculos.

Número de extrapolações: neste objetivo deseja-se ver o impacto do número de níveis de extrapolação sobre o desempenho de MER, comparando-se estimativas a priori e a posteriori das ordens do erro.

Malha base: pretende-se verificar se o desempenho de MER é muito sensível à malha mais grossa, do conjunto de malhas usadas, para se fazer as diversas extrapolações. Isso é importante em problemas nos quais as características físicas são captadas apenas com malhas suficientemente finas.

Etapa 3: tipo de malha

Objetivo 3: testar o efeito dos seguintes tipos de malha sobre o desempenho de MER: uniforme, não-uniforme, triangular, não-ortogonal e não-estruturada.

Responsáveis pela execução: Radtke, Alves e Araki.

Pretende-se verificar se o desempenho de MER é sensível ao tipo de malha empregado. Resultados preliminares indicam que MER tem o mesmo desempenho em malhas uniformes e triangulares.

Etapa 4: redução dos erros de iteração e arredondamento

Objetivo 4: minimizar o efeito dos erros de iteração e de arredondamento sobre o erro numérico.

Responsáveis pela execução: Vargas, Martins, Pinto e Araki.

Pretende-se testar algumas técnicas para reduzir os erros de iteração (Ferziger e Peric, 2001) e arredondamento (Dorn e McCracken, 1981) pois ambos afetam o erro numérico e o desempenho de MER. Também faz parte desta etapa testar técnicas de aceleração de convergência, como *multigrid* e uma variação de MER para erros de iteração, visando reduzir o tempo computacional necessário para obter as soluções numéricas, principalmente em malhas muito finas.

Etapa 5: estimador de erro

Objetivo 5: desenvolver um estimador de erro para soluções obtidas com MER.

Responsáveis pela execução: Novak, Giacomini e Marchi.

Pretende-se testar e/ou propor e avaliar o desempenho de um estimador de erro, que seja confiável e acurado, para ser utilizado com soluções numéricas obtidas através de MER. Além disso, este estimador deverá prever o seu limite de uso devido aos erros de arredondamento, que podem ser significativos em soluções obtidas com MER.

Etapa 6: problemas transientes

Objetivo 6: aplicar MER a problemas transientes.

Responsável pela execução: Germer.

Esta etapa será dedicada a estender o uso de MER a problemas transientes. Pretende-se investigar a aplicação de MER de duas formas: primeiro, aplicando MER como pós-processador, isto é, considerando o tempo como uma coordenada espacial; e segundo, aplicando MER durante o processamento da simulação transiente.

Etapa 7: fluidos compressíveis

Objetivo 7: aplicar MER a problemas envolvendo fluidos compressíveis.

Responsáveis pela execução: Bertoldo, Gomes, Nagornni e Araki.

Esta etapa será dedicada a estender o uso de MER a problemas que envolvem fluidos compressíveis. Pretende-se investigar a aplicação de MER em escoamentos através de bocais do tipo convergente-divergente (tubeira), usados em motores-foguete, e sobre projéteis e foguetes. Os testes deverão envolver escoamentos subsônicos e supersônicos, bem como ondas de choque.

Etapa 8: programas para aplicar MER

Objetivo 8: implementar programas computacionais para analisar o desempenho de MER e para usuários de MER.

Responsável pela execução: Marchi.

Desde 2007 existe um programa computacional que vem sendo usado em pesquisas envolvendo MER. Nesta etapa, pretende-se melhorar este programa principalmente para atender à etapa 2. Além disso, pretende-se implementar uma versão deste programa para ser empregada por usuários de MER, juntamente com um manual que deverá incluir teoria e tutoriais; este programa conterá os principais resultados obtidos nas etapas 1 a 7.

Etapa 9: aerodinâmica de projéteis e foguetes

Objetivo 9: resolver problemas de aerodinâmica de projéteis e foguetes.

Responsáveis pela execução: Bertoldo e Araki.

Nesta etapa pretende-se aplicar o processo de validação a soluções numéricas de problemas de aerodinâmica de projéteis e foguetes. Para isso deverão ser usados resultados experimentais da literatura para os quais seja conhecida a incerteza experimental. A validação deverá ser feita com e sem o uso de MER para mostrar em casos práticos a importância de se aplicar MER.

Etapa 10: propulsão de foguetes

Objetivo 10: resolver problemas de propulsão de foguetes.

Responsáveis pela execução: Gomes, Nagornni e Araki.

Nesta etapa pretende-se aplicar o processo de validação a soluções numéricas de problemas envolvendo o escoamento em tubeiras de foguetes. Para isso deverão ser usados resultados experimentais da literatura para os quais seja conhecida a incerteza experimental. A validação deverá ser feita com e sem o uso de MER para mostrar em casos práticos a importância de se aplicar MER.

Etapa 11: *benchmark* 2D

Objetivo 11: obter os resultados mais acurados da literatura, com suas estimativas de erro, para o problema clássico do escoamento 2D dentro de uma cavidade quadrada causado pela sua tampa móvel (Bruneau e Saad, 2006; Marchi et al., 2009).

Responsáveis pela execução: Novak, Santiago, Almeida, Gonçalves, Suero, Pinto, Araki e Joeckel.

Este problema, que não tem solução analítica conhecida, é muito usado como referência para teste de novas funções de interpolação, novas formulações matemáticas, novos modelos numéricos e códigos computacionais.

Nesta etapa será usado MER com malhas de até 8.192x8.192 volumes, diversos tipos de variáveis e número de Reynolds de 0 a 10.000. Serão feitas comparações dos resultados com os disponíveis em farta literatura sobre este problema cuja malha mais fina é 2.024x2.024 e sem MER.

Etapa 12: *benchmark* 3D

Objetivo 12: obter os resultados mais acurados da literatura, com suas estimativas de erro, para o problema do escoamento 3D dentro de uma cavidade cúbica causado pela sua tampa móvel (Freitas et al., 1985; Wu e Shu, 2010).

Responsáveis pela execução: Giacomini, Oliveira, Santiago, Almeida, Suero, Araki e Pinto.

Nesta etapa será usado MER com malhas de até 400x400x400 volumes, diversos tipos de variáveis e número de Reynolds de 0 a 3.200. Serão feitas comparações dos resultados com os disponíveis na literatura sobre este problema cuja malha mais fina é 121x121x121 e sem MER. Atualmente não existe *benchmark* deste problema, que não tem solução analítica conhecida, e tem importância equivalente ao problema 2D em aplicações 3D.

Cronograma físico

Na tabela abaixo, é apresentado o cronograma de execução física das atividades previstas nas etapas 1 a 12, organizado em períodos quadrimestrais.

Início: março/2011. Término: fevereiro/2014. Duração: 3 anos

Meta	Etapa	Título	2011			2012			2013			2014
			1º	2º	3º	1º	2º	3º	1º	2º	3º	1º
1	**Melhorar e testar o desempenho de MER**											
	1	Extremos, não-linearidades e descontinuidades	x	x	x	x	x					
	2	Parâmetros de MER	x	x	x	x	x					
	3	Tipo de malha	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
	4	Redução dos erros de iteração e arredondamento	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
	5	Estimador de erro	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
	6	Problemas transientes	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
	7	Fluidos compressíveis	x	x	x	x						
	8	Programas para aplicar MER	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
2	**Validar resultados numéricos com e sem MER**											
	9	Aerodinâmica de projéteis e foguetes					x	x	x	x	x	x
	10	Propulsão de foguetes					x	x	x	x	x	x
3	**Gerar *benchmarks* com MER**											
	11	*Benchmark* 2D	x	x	x	x	x					
	12	*Benchmark* 3D					x	x	x	x	x	x

Viabilidade

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 verificação de soluções numéricas em problemas resolvidos com o método de diferenças finitas (Marchi, 2001; Marchi e Silva, 2002). Além disso, o proponente deste projeto continua trabalhando desde 2001 com o tema de sua tese, o que pode ser visto através do seu currículo Lattes, nos artigos publicados, projetos em andamento e executados, e orientações concluídas e em andamento. De março/2005 a

fevereiro/2008, o proponente executou o projeto "Estimativa de erros de discretização em dinâmica dos fluidos computacional", relativo a uma bolsa PQ/CNPq (processo CNPq 302916/2004-0). E o projeto "Verificação e estimação do erro de discretização em CFD", também relativo a uma bolsa PQ/CNPq (processo CNPq 306871/2007-6), está atualmente sendo executado, devendo ser encerrado em fevereiro/2011.

2) Seis pesquisadores da equipe (Araki, Pinto, Oliveira, Suero, Alves e Santiago) realizaram seus doutorados sobre verificação de soluções numéricas e métodos *multigrid* (Araki, 2007; Pinto, 2006; Oliveira, 2010; Suero, 2010; Alves, 2010; e Santiago, 2010), ambos temas importantes para o presente projeto. Almeida e Bertoldo têm experiência em computação paralela.
3) O projeto será executado por uma equipe de 19 pessoas, sendo 8 professores-doutores, 9 doutorandos, 1 mestrando e 1 graduanda. Todos os membros da equipe integram o grupo de pesquisa em "Dinâmica dos Fluidos Computacional", da UFPR, que está registrado no CNPq e é liderado pelo proponente deste projeto.
4) As pesquisas sobre MER da equipe deste projeto vem sendo realizadas desde 2007. Alguns resultados já foram publicados (Marchi et. al., 2008; Marchi et al., 2009; Marchi e Germer, 2009; Alves, 2010). Três outros trabalhos estão em fase final de preparação para serem submetidos ainda em 2010.
5) Já estão em execução as etapas 1 a 8 e 11.

5) PRINCIPAIS CONTRIBUIÇÕES CIENTÍFICAS OU TECNOLÓGICAS DA PROPOSTA

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

1) Mostrar a importância prática do uso de MER em CFD para reduzir o erro de discretização, suas limitações e os procedimentos que devem ser seguidos para se obter melhores resultados.
2) Um estimador de erro acurado e confiável para soluções numéricas obtidas com MER.
3) Um programa computacional para usuários de MER. Este programa será disponibilizado gratuitamente na internet aos interessados, juntamente com seu manual.
4) Validações de soluções numéricas em aerodinâmica e propulsão de foguetes para exemplificar na prática o uso de MER.
5) Dois *benchmarks* para exemplificar na prática o uso de MER, de dois problemas clássicos de CFD: escoamentos dentro de cavidades quadrada e cúbica causados pela tampa móvel. Pretende-se que as soluções numéricas obtidas nestes dois problemas sejam as mais acuradas da literatura, que incluirão suas estimativas de erro.
6) Publicar ou submeter para publicação doze trabalhos em eventos e periódicos internacionais para divulgar os resultados deste projeto.
7) Divulgar a técnica de MER no Brasil e no exterior através dos artigos a serem publicados e apresentados, *site* do projeto na internet, palestras, reuniões com os demais membros do grupo de pesquisa do proponente, e das disciplinas sobre CFD que o proponente leciona na graduação e na pós-graduação na UFPR.
8) Concluir a orientação de um trabalho de graduação (Joeckel), um mestrado (Nagornni) e dois doutorados (Novak e Gonçalves). Além disso, este projeto servirá de tema para sete doutorandos (Giacomini, Vargas, Martins, Gomes, Radtke, Bertoldo e Germer), que deverão concluir suas teses entre dezembro de 2012 e setembro de 2014. Este projeto também servirá para manter a integração entre os pesquisadores do grupo de pesquisa em CFD da UFPR que atuam em outras instituições (Santiago, Oliveira, Suero, Alves).

Os resultados dos itens 1, 2, 4, 5 e 8 acima serão materializados através dos artigos que deverão ser publicados em eventos e periódicos da área. Todos os programas computacionais implementados serão disponibilizados no *site* do projeto na internet, bem como os resultados obtidos.

6) IDENTIFICAÇÃO DOS DEMAIS PARTICIPANTES DO PROJETO

Luciano Kiyoshi Araki

- Título: doutor em métodos numéricos em engenharia, UFPR, 2007
- Professor adjunto da Universidade Federal do Paraná (UFPR)

Márcio Augusto Villela Pinto

- Título: doutor em métodos numéricos em engenharia, UFPR, 2006
- Professor adjunto da Universidade Federal do Paraná (UFPR)

Ricardo Carvalho de Almeida

- Título: doutor em ciências atmosféricas em engenharia, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), 2005
- Professor adjunto da Universidade Federal do Paraná (UFPR)

Fabiane de Oliveira

- Título: doutor em engenharia mecânica, UFPR, 2010
- Professora adjunta da Universidade Estadual de Ponta Grossa (UEPG)

Roberta Suero

- Título: doutor em métodos numéricos em engenharia, UFPR, 2010
- Professora do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Paraná (IFPR)

Arileide Cristina Alves

- Título: doutor em engenharia mecânica, UFPR, 2010
- Professora da Universidade Positivo (UP)

Cosmo Damião Santiago

- Título: doutor em engenharia mecânica, UFPR, 2010
- Professor da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR)

Leandro Alberto Novak

- Título: mestre em engenharia mecânica e de materiais, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), 2006
- Professor assistente da Universidade Federal do Paraná (UFPR)
- Doutorando no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR

Simone de Fátima Tomazzoni Gonçalves

- Título: mestre em matemática aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2002
- Doutoranda no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR
- Bolsista da CAPES

Ana Paula da Silveira Vargas

- Título: mestre em métodos numéricos em engenharia, UFPR, 2002
- Professora do Complexo de Ensino Superior do Brasil (UNIBRASIL)
- Doutoranda no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR

Fabiana de Fátima Giacomini

- Título: mestre em engenharia mecânica, Universidade Federal do Paraná (UFPR), 2009
- Doutoranda no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR
- Bolsista da CAPES

Márcio André Martins

- Título: mestre em métodos numéricos em engenharia, UFPR, 2002
- Professor assistente da Universidade Estadual do Centro-Oeste (UNICENTRO)
- Doutorando no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR
- Afastado integralmente da UNICENTRO para cursar o doutorado na UFPR

Mateus das Neves Gomes

- Título: mestre em modelagem computacional, Universidade Federal do Rio Grande (FURG), 2010
- Doutorando no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da UFPR
- Bolsista da CAPES

Jonas Joacir Radtke
- Título: mestre em modelagem matemática, Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul (UNIJUI), 2007
- Professor da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR)
- Doutorando no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da UFPR

Guilherme Bertoldo
- Título: mestre em física, Universidade Federal do Paraná (UFPR), 2009
- Professor da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR)
- Iniciará o doutorado no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR a partir de setembro de 2010

Eduardo Matos Germer
- Título: mestre em engenharia mecânica, UFPR, 2009
- Professor assistente da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR)
- Iniciará o doutorado no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR a partir de setembro de 2010

Reedlei Nagornni Júnior
- Título: bacharel em engenharia de computação, Pontifícia Universidade Católica do Paraná (PUC-PR), 2006
- Mestrando no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia da UFPR
- Bolsista da CAPES

Rayana Dal'Negro Joeckel
- Graduanda em engenharia mecânica, UFPR

7) DISPONIBILIDADE EFETIVA DE INFRA-ESTRUTURA E DE APOIO TÉCNICO PARA O DESENVOLVIMENTO DO PROJETO

O projeto será desenvolvido no Laboratório de Experimentação Numérica (LENA), do Departamento de Engenharia Mecânica (DEMEC), da Universidade Federal do Paraná (UFPR), que é coordenado pelo proponente deste projeto. A infra-estrutura atual disponível no LENA é suficiente para desenvolver as etapas 1 a 8 do presente projeto de pesquisa, e é a seguinte a ser usada:

- Microcomputadores com processadores Intel do tipo Xeon, Core 2 Quad e Core 2 Duo, com memória RAM de 4 a 32 GB.
- Impressoras do tipo laser.
- *Softwares* Linux, Windows, Word, Wgnuplot, Notepad, Origin, Fortran 11.1 da Intel, Maple e Matlab.
- Material de expediente: luz, telefone etc.

Além disso, já contamos com recursos financeiros da Agência Espacial Brasileira (AEB) para adquirir uma estação de trabalho, que será usada para obter as soluções numéricas das etapas 9 a 12 do projeto, nas malhas mais finas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALVES, A. C. **Verificação de soluções numéricas da equação de Laplace 2D com malhas triangulares e múltiplas extrapolações de Richardson**. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2010. Tese de doutorado em Engenharia Mecânica.
- ARAKI, L. K. **Verificação de soluções numéricas de escoamentos reativos em motores-foguete**. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2007. Tese de doutorado em Métodos Numéricos em Engenharia.
- BENJAMIN, A. S.; DENNY, V. E. On the convergence of numerical solutions for 2-D flows in a cavity at large Re. **Journal of Computational Physics**, v. 33, p. 340-358, 1979.
- BRUNEAU, C. H.; SAAD, M. The 2D lid-driven cavity problem revisited. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 326-348, 2006.

- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Análise numérica**. São Paulo: Thomson, 2003.
- BURG, C.; ERWIN, T. Application of Richardson extrapolation to the numerical solution of partial differencial equaions. **Numer. Methods Partial Differencial Eq.**, v. 25, p. 810-832, 2009.
- 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.
- DORN, W. S.; MCCRACKEN, D. D. **Cálculo numérico com estudos de casos em Fortran IV**. Rio de Janeiro: Campus, 1981.
- ERTURK, E.; CORKE, T. C.; GÖKÇÖL, C. Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers. **Int. J. Numer. Meth. Fluids**, v. 48, p. 747-774, 2005.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3. ed. Berlin: Springer, 2001.
- FREITAS, C. J.; STREET, R. L.; FINDIKAKIS, A. N.; KOSEFF, J. R. Numerical simulation of three-dimensional flow in a cavity. **Int. J. Numer. Meth. Fluids**, v. 5, p. 561-575, 1985.
- JOYCE, D. C. Survey of extrapolation processes in numerical analysis. **SIAM Review**, v. 13, p. 435-490, 1971.
- KNUPP, P.; SALARI, K. **Verification of computer codes in computational science and engineering**. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2003.
- MA, Y.; GE, Y. A high order finite difference method with Richardson extrapolation for 3D convection diffusion equation. **Applied Mathematics and Computation**, v. 215, p. 3408-3417, 2010.
- 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.; GERMER, E. M. Verificação de esquemas advectivo-difusivos 1D com e sem múltiplas extrapolações de Richardson. In: Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering. **Anais**… Armação de Búzios, 2009. 20 p. XXX CILAMCE.
- MARCHI, C. H.; NOVAK, L. A.; SANTIAGO, C. D. Múltiplas extrapolações de Richardson para reduzir e estimar o erro de discretização da equação de Laplace 2D. In: Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering. **Anais**… Maceió, 2008. 14 p. XXIX CILAMCE.
- 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.
- MARCHI, C. H.; SUERO, R.; ARAKI, L. K. The lid-driven square cavity flow: numerical solution with a 1024x1024 grid. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. XXXI, p. 186-198, 2009.
- OLIVEIRA, F. **Efeito de malhas anisotrópicas bidimensionais sobre o desempenho do método multigrid geométrico**. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2010. Tese de doutorado em Engenharia Mecânica.
- PINTO, M. A. V. **Comportamento do *multigrid* geométrico em problemas de transferência de calor**. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2006. Tese de doutorado em Métodos Numéricos em Engenharia.
- 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. **Verification and validation in computational science and engineering**, Albuquerque: Hermosa, 1998.
- SCHREIBER, R.; KELLER, H. B. Driven cavity flows by efficient numerical techniques. **Journal of Computational Physics**, v. 49, p. 310-333, 1983.
- SUERO, R. **Otimização de parâmetros do método *multigrid* algébrico para problemas difusivos bidimensionais**. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2010. Tese de doutorado em Métodos Numéricos em Engenharia.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. 2. ed. Washington: Taylor & Francis, 1997.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics; the finite volume method**. 2. ed. Harlow, England: Pearson/Prentice Hall, 2007.
- WANG, Y.; ZHANG, J. Sixth order compact scheme combined with multigrid method and extrapolation technique for 2D poisson equation. **Journal of Computational Physics**, v. 228, p. 137-146, 2009.
- WESSELING, P. **An introduction to multgrid methods**. New York: Wiley, 1992.
- WU, J.; SHU, C. An improved immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating three-dimensional incompressible flows. **Journal of Computational Physics**, v. 229, p. 5022-5042, 2010.