Solução da equação de convecção-difusão: uma aplicação do método de volumes finitos.

Santos, Alana[1]

Resumo: *Esta pesquisa foi desenvolvida com base em referências bibliográficas. Baseado nos estudos desenvolvidos, constatou-se que, para a Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC), o método de discretização de Volumes Finitos se destaca para a resolução de Equações Diferenciais Parciais (EDP's), pois tem a vantagem da conservação dos fluxos nas grandezas trabalhadas, em sua formulação. A equação de convecção-difusão é a EDP com a qual escolhemos fazer os primeiros estudos dessa teoria.*

Palavras-chave: *Equações Diferenciais Parciais. Convecção. Difusão. Método de Volumes Finitos.*

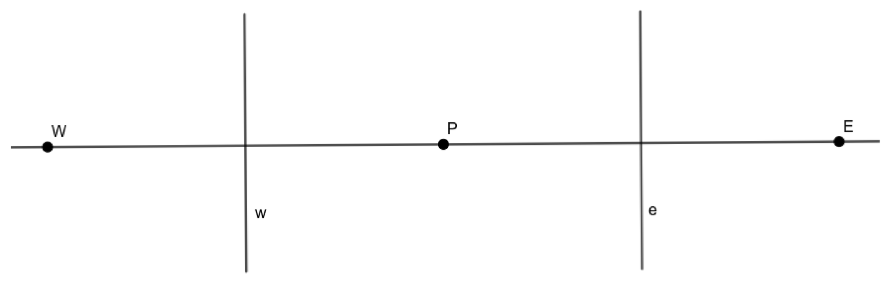
1. Introdução

Neste trabalho, será apresentado a solução da equação de convecção e difusão utilizando Métodos de Volumes Finitos (MVF), mais especificamente, discorre-se sobre três MVF que são utilizados para resolver esta equação, sendo eles o método de Diferenças Centrais, o Upwind e o QUICK.

2. Equação de Convecção e Difusão Unidimensional no estado Estacionário

Trabalhamos com o método de volumes finitos, onde o domínio é dividido em partes menores, chamadas de volumes de controle (V.C.):

Ampliando uma parte da reta, que representa o domínio de um problema unidimensional, podemos verificar os Volumes de Controle e os nós. Assim, temos um V.C., onde w e e são as faces e P é o nó central, com W e E sendo os nós adjacentes, ou vizinhos, a ele:



Podemos dizer que a equação que representa a convecção e difusão estacionária da propriedade ϕ em um campo de fluxo unidimensional, onde u é a velocidade, é:

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx}\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx}\right) \tag{1}$$

A integração da equação (1) sobre o volume de controle, onde as faces w e e são os limites de integração inferior e superior respectivamente, resulta em:

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx}\right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx}\right)_w \tag{2}$$

Para obter o resultado desejado, que são as equações discretizadas para o problema de convecção e difusão, deve-se aproximar os termos da equação (2). Para isso, por conveniência, definimos duas variáveis F e D, onde:

$$F = \rho u \quad \text{e} \quad D = \frac{\Gamma}{\Delta x} \tag{3}$$

Os valores de F e D nas faces das células podem ser expressos como:

$$F_w = (\rho u)_w \quad \text{e} \quad F_e = (\rho u)_e \tag{4}$$

$$D_w = \frac{\Gamma_w}{\Delta x_{WP}} \Rightarrow D_w = \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \quad \text{e} \quad D_e = \frac{\Gamma_e}{\Delta x_{PE}} \Rightarrow D_e = \frac{\Gamma_e}{\Delta x} \tag{5}$$

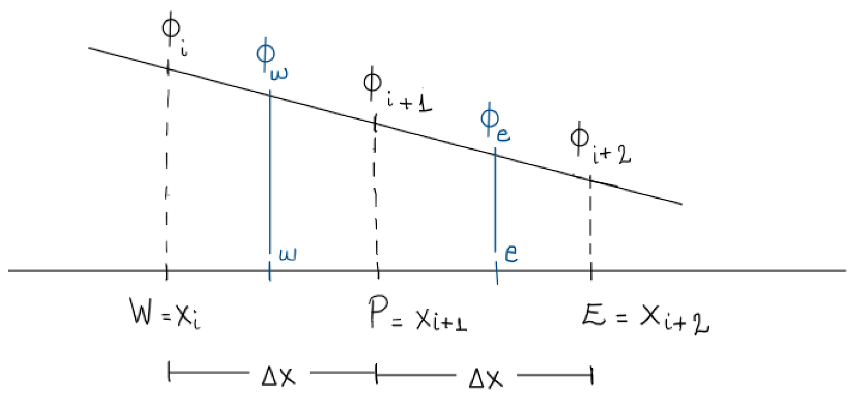
Prosseguindo, assumimos que $A_w = A_e = A$, para que aconteça a divisão de ambos os lados da equação (2) pela área A. Assim, no lado direito da equação, onde temos os termos de difusão, podemos utilizar as diferenças centrais para escrever a equação como:

$$F_e\phi_e - F_w\phi_w = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \tag{6}$$

Assumimos também que o campo de velocidade é de alguma forma conhecido. Por isso, os valores de F_e e F_w são igualmente conhecidos. Dessa forma, para resolver a equação (6), só precisamos calcular a propriedade transportada, ϕ, nas faces e e w, que são os valores que ainda não temos definidos em (6).

3. Método de Diferenças Centrais

A aproximação por diferenças centrais é usada para representar os termos de difusão que aparecem no lado direito da equação (6) em problemas de convecção e difusão em uma dimensão. Porém, os termos convectivos ainda ficam em função de ϕ_e e ϕ_w, os quais pretendemos calcular. Para isso, utilizando a interpolação polinomial, por diferenças divididas, podemos calcular os valores nas faces das células para os termos convectivos. Neste trabalho, utilizaremos o polinômio interpolador de Newton:



Obtemos:

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad \text{e} \quad \phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \tag{7}$$

Substituindo os termos na equação (6) podemos calcular da seguinte forma:

$$\frac{F_e}{2}(\phi_P + \phi_E) - \frac{F_w}{2}(\phi_W + \phi_P) = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \tag{8}$$

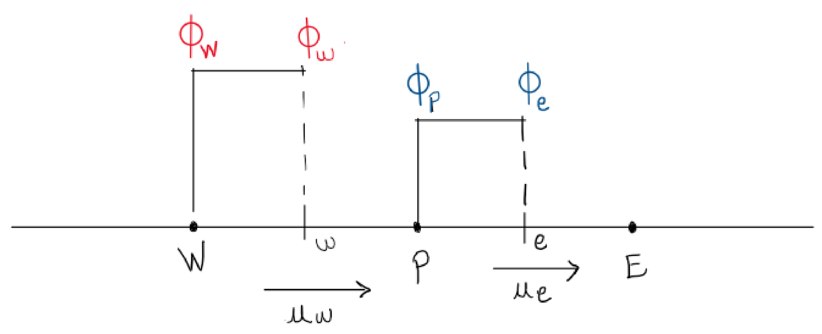
Identificando os coeficientes de ϕ_W e ϕ_E como a_W e a_E respectivamente, a expressão da equação de convecção-difusão discretizada, pelo método de diferenças centrais é:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E \tag{9}$$

4. O Método Upwind

O esquema Upwind leva em consideração a direção do fluxo para calcular o valor da propriedade na face da célula. Nesse sentido, temos que o valor da propriedade ϕ na face da célula é considerado igual ao valor de ϕ no nó atrás desta face (à montante). Para melhor compreensão, serão apresentados exemplos a seguir.

Na figura abaixo os valores da propriedade nos nós estão sendo usados para calcular o valor da propriedade nas faces do volume de controle, estando o fluxo na direção positiva, ou seja da esquerda para a direita.



- Para o fluxo positivo, $(F_w > 0, F_e > 0)$:

$$a_W = D_w + F_w \quad \text{e} \quad a_E = D_e$$

- Para o fluxo negativo, $(F_w < 0, F_e < 0)$:

$$a_W = D_w \quad \text{e} \quad a_E = D_e - F_e$$

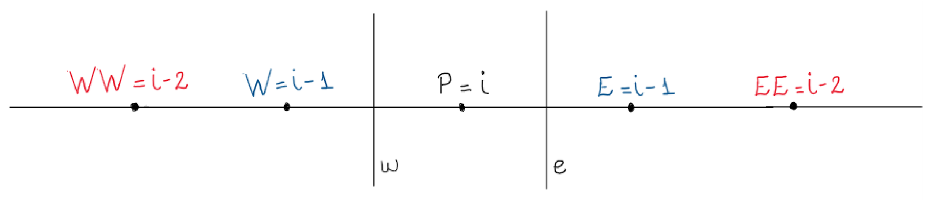
Uma forma de notação para os coeficientes vizinhos no método de diferenciação Upwind que cobre as duas direções do fluxo pode ser:

$$a_W = D_w + max(F_w, 0) \quad \text{e} \quad a_E = D_e + max(0, -F_e)$$

5. O Método QUICK

Podemos dizer que para calcular o valor de ϕ na face leva-se em consideração dois nós à montante, antes da face e um depois dela, sempre levando em conta a direção do fluxo para entender onde é a montante e onde é a jusante.

Na interpolação polinomial, considerando os nós de índices i, $i-1$ e $i-2$, com i sendo o índice no ponto P, $i-1$ o índice no ponto adjacente W ou E e $i-2$ o índice no ponto à montante, que pode ser WW ou EE, depende da direção do fluxo e em qual face se deseja calcular o valor da propriedade. Podemos calcular, pelo método de diferenças divididas, o valor de ϕ na face.



Assim, aplicamos novamente o método de diferenças divididas de Newton, mas dessa vez, considerando mais um ponto, ou seja, procuramos um polinômio interpolador de segunda ordem. Dessa forma, o valor de ϕ na face da célula é dado pela seguinte fórmula:

$$\phi_{face} = \frac{6}{8}\phi_{i-1} + \frac{3}{8}\phi_i - \frac{1}{8}\phi_{i-2} \tag{10}$$

O esquema QUICK para problemas de convecção-difusão unidimensional pode ser resumido da seguinte forma:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_{WW}\phi_{WW} + a_{EE}\phi_{EE} \tag{11}$$

com coeficientes:

$$\begin{aligned}
a_P &= a_W + a_E + a_{WW} + a_{EE}(F_e - F_w) \\
a_W &= D_w + \frac{6}{8}\alpha_w F_w + \frac{1}{8}\alpha_e F_e + \frac{3}{8}(1-\alpha_w)F_w \quad ; \\
a_{WW} &= -\frac{1}{8}\alpha_w F_w \quad ; \\
a_E &= D_e + \frac{3}{8}\alpha_e F_e - \frac{6}{8}(1-\alpha_e)F_e - \frac{1}{8}(1-\alpha_w)F_w \quad ; \\
a_{EE} &= \frac{1}{8}(1-\alpha_e)F_e
\end{aligned}$$

Onde

$$\alpha_w = \begin{cases} 1, & \text{se } F_w > 0 \\ 0, & \text{se } F_w < 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad \alpha_e = \begin{cases} 1, & \text{se } F_e > 0 \\ 0, & \text{se } F_e < 0 \end{cases}$$

6. Conclusão

Neste trabalho, buscou-se entender e comparar as vantagens e desvantagens na utilização de três métodos de Volumes Finitos diferentes. Cada um desses métodos pode ser empregado dependendo do problema e do grau de precisão desejada, como foi visto o QUICK é o mais apropriado, entre os três, para problemas mais complexos. Por outro lado, para problemas mais simples, mas em que a direção do fluxo faz-se importante, a utilização do Upwind seria adequada. Já em problemas onde a direção do fluxo não é relevante, o método de Diferenças Centrais pode ser aplicado.

Referências

[1] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: THE FINITE VOLUME METHOD**. 2 ed. Inglaterra: Pearson Education Limited, 2007.

Apoios:

[1] Universidade Federal do Pará (UFPA). Esta autora foi apoiada pelo PPGME