

Fig. 5 - Stream lines, isotherm and isobars curves for prescribed heat fluxes and the mode III ( $Q_1 = 0$ ,  $Q_2 = 1$ ) ( $R_a = 100$ ,  $L = 100$ ,  $Pr = 0.7$  and  $\Gamma = 30^\circ$ ,  $60^\circ$  and  $90^\circ$ ).

SCALES: The n.<sup>o</sup> of the curve indicates 1/10 from the value shown under each graphic.

## UM ESQUEMA NUMÉRICO EM VOLUMES FINITOS PARA A MINIMIZAÇÃO DA DIFUSÃO NUMÉRICA

*Antônio Augusto Ulson de Souza*

Universidade Federal de Santa Catarina

Departamento de Engenharia Química

C.P.476 - Florianópolis - SC - Brasil

*Clóvis Raimundo Maliska*

Universidade Federal de Santa Catarina

Departamento de Engenharia Mecânica

C.P.476 - Florianópolis - SC - Brasil

### RESUMO

Um esquema numérico, dentro do contexto de volumes finitos, utilizando-se a disposição das variáveis desencontradas, é proposto, visando minimizar o problema da difusão numérica. A estratégia empregada baseia-se na proposição de uma função de interpolação, para a aproximação das variáveis nas faces do volume de controle, consistente com as equações de conservação. O objetivo básico do presente trabalho é investigar o comportamento do esquema numérico quando estão presentes as duas componentes do termo convectivo na função de interpolação das propriedades na face do volume de controle. O esquema proposto é empregado na solução de um problema teste e os resultados confrontados com dados obtidos de soluções existentes na literatura.

### NOMENCLATURA

- B - força de campo por unidade de volume,  $[M/(L^2 t^2)]$
- $B^\phi$  - variável definida pela equação (10),  $[M\phi/(L^3 t)]$
- $B^{\phi*}$  - variável definida pela equação (13),  $[\phi]$
- $C_1$  - variável definida pela equação (5),  $[M/(Lt)]$
- $C_2$  - variável definida pela equação (6),  $[M/(Lt)]$
- $C_4$  - variável definida pela equação (7),  $[M/(Lt)]$
- J - jacobiano da transformação

- m – vazão massica do fluido, [M/t]
- P – pressão nas equações de Navier-Stokes, [M/(L<sup>2</sup> t<sup>2</sup>)]
- P<sup>φ</sup> – gradiente de pressão na equação (3), [M/(L<sup>2</sup> t<sup>2</sup>)]
- $\hat{P}^\phi$  – variável definida pela equação (4), [M/(L<sup>2</sup> t<sup>2</sup>)]
- Pe\* – variável adimensional definida pela equação (12)
- S<sup>φ</sup> – termo fonte das equações de conservação, [Mφ/(L<sup>3</sup> t)]
- $\hat{S}^\phi$  – variável definida pela equação (4), [Mφ/(L<sup>3</sup> t)]
- t – tempo, [t]
- u – componente da velocidade na direção x, no sistema cartesiano, [L/t]
- U – componente contravariante da velocidade, sem normalização métrica, [L/t]
- v – componente da velocidade na direção y, no sistema cartesiano, [L/t]
- V – componente contravariante da velocidade, sem normalização métrica, [L/t]
- V – vetor velocidade do fluido, [L/t]
- x – coordenada do sistema cartesiano, [L]
- y – coordenada do sistema cartesiano, [L]
- α – componente do tensor métrico da transformação
- β – componente do tensor métrico da transformação
- γ – componente do tensor métrico da transformação
- Γ<sup>φ</sup> – difusividade relativa à variável φ, multiplicada pela massa específica do fluido, [M/(L t)]
- η – coordenada do sistema generalizado, [L]
- μ – viscosidade dinâmica do fluido, [M/(L t)]
- ξ – coordenada do sistema generalizado, [L]
- ξ\* – variável adimensional definida pela equação (11)
- ρ – massa específica do fluido, [M/L<sup>3</sup>]
- φ – campo escalar geral

## INTRODUÇÃO

Na maioria dos problemas práticos da engenharia, elevados números de Reynolds ou Peclet estão envolvidos e, nestes casos, o esquema de diferença central leva a um comportamento oscilatório não físico com sérios problemas de convergência.

Por outro lado, cálculos utilizando esquemas "upwind", frequentemente, sofrem grandes imprecisões devido à falsa difusão, ou difusão numérica, resultante de erros de truncamento, existência de termos fonte, presença de grandes gradientes da variável dependente normais à linha de corrente, e inclinação do vetor velocidade relativamente à malha.

Embora o refinamento da malha possa aliviar todos estes problemas, o grau de refinamento necessário é totalmente impraticável para os objetivos da engenharia, especialmente para escoamento tridimensional, turbulento, transiente e com altas velocidades, ocasionando, portanto, excessivo custo computacional.

Uma melhoria introduzida nos esquemas numéricos, visando agrupar as vantagens dos esquemas CDS e UDS, é o esquema híbrido (WUDS), proposto por Raithby e Torrance [1], o qual se reduz ao CDS ou UDS dependendo da faixa do número de Reynolds ou Peclet de interesse.

O desenvolvimento de algoritmos para minimizar o problema da difusão numérica recebe, atualmente, bastante atenção dos pesquisadores. Apesar da grande quantidade de trabalhos publicados sobre o problema da difusão numérica, não existe ainda um esquema de discretização eficiente, econômico, preciso e de fácil implementação.

O ponto de vista mais comum, encontrado na literatura, sobre difusão numérica é que esquemas de alta ordem apresentam menos difusão numérica do que esquemas de ordem mais baixa. Como os esquemas "upwind" são de primeira ordem e os esquemas de diferença central são de segunda ordem, então é dito que os últimos apresentam menor falsa difusão, sendo, portanto melhores do que esquemas "upwind". Isto não é verdade, pois o esquema de diferença central é bastante instável, para altos números de Reynolds ou Peclet, resultando em campos de variáveis fisicamente não reais.

Alternativas para minimizar a difusão numérica são o refinamento da malha, permitindo o uso de aproximações por diferenças centrais e o uso de funções de interpolação bidimensionais que permitem a correta avaliação das

propriedades nas faces do volume de controle. O refinamento da malha é, muitas vezes, impraticável devido à excessiva necessidade de memória computacional. O uso de funções de interpolação bidimensionais é uma alternativa que vem sendo muito explorada mas, em geral, apresentam problemas de estabilidade e dificuldade de implementação.

No contexto de volumes finitos, a difusão numérica pode ser substancialmente reduzida através do uso de esquema de diferenciação "skew upwind", como o proposto por Raithby [2]. Entretanto, este procedimento produz oscilações na solução, através da introdução de coeficientes negativos na equação de conservação discretizada.

Mais recentemente, Hassan et al. [3] propuseram um procedimento numérico que evita o problema de coeficientes negativos, pela restrição da faixa do fator peso de modo que sua influência nos coeficientes impossibilita que estes tornem-se negativos. Este procedimento é baseado fundamentalmente em uma restrição matemática sobre o fator peso a montante, não garantindo a conservação das grandezas envolvidas no problema em estudo.

Um novo esquema proposto por Baliga et al. [4], no contexto de elementos finitos, reduz consideravelmente a difusão numérica, apresentando, porém problemas de coeficientes negativos, limitando a sua aplicação a elementos finitos triangulares.

Lillington [5] propõe um esquema em diferenças finitas para o tratamento de problemas envolvendo convecção e difusão, em regime de convecção dominante, incluindo circunstâncias onde estão presentes termos fontes.

Um número muito grande de métodos numéricos é apresentado na literatura para a redução da falsa difusão ou eliminação dos problemas de negatividade dos coeficientes, como os propostos por Raithby [2], Leonard et al. [6], Ghia et al. [7], Patel et al. [8].

Schneider [9] propõe um esquema numérico para avaliação das propriedades nas faces do volume de controle, no contexto de variáveis co-localizadas, levando em conta a influência dos termos convectivo, difusivo e fonte, não considerando porém, uma das componentes do termo convectivo.

Neste trabalho, é proposto um esquema numérico, dentro do contexto de volumes finitos, utilizando-se a disposição das variáveis desencontradas, para a avaliação das propriedades nas faces do volume de controle, visando a análise da influência das duas componentes do termo convectivo.

## FORMULAÇÃO PROPOSTA

### Equações Governantes

O conjunto de equações necessário à solução de um problema hidrodinâmico considerando-se fluido newtoniano, escoamento laminar, bidimensional, é apresentado, em coordenadas cartesianas, pelas equações

$$\partial \rho / \partial t + \partial_i (\rho u_i) = 0 \quad (1)$$

$$\partial (\rho u_i) / \partial t + \partial_j (\rho u_j u_i) = - \partial_i P + \partial_j (\mu \partial_j u_i) + B_i + \mu \partial_i (\partial_j u_j) / 3 \quad (2)$$

As equações (1) e (2) podem ser escritas para um escalar  $\phi$  como

$$\partial (\rho \phi) / \partial t + \partial_j (\rho u_j \phi) + P^\phi = \partial_j (\Gamma^\phi \partial_j \phi) + S^\phi \quad (3)$$

onde  $\Gamma^\phi$ ,  $P^\phi$  e  $S^\phi$  são o coeficiente de difusão, o gradiente de pressão e o termo fonte, respectivamente, assumindo expressões apropriadas para representação da equação de conservação da massa ou de quantidade de movimento.

No presente trabalho é utilizada a disposição de variáveis desencontradas na malha computacional.

### Transformação das Equações

A escolha do sistema de coordenadas é um fator importante para o sucesso do modelo numérico empregado, podendo afetar a precisão dos resultados obtidos, ou ainda tornar o modelo numérico fortemente dependente da geometria do problema físico para o qual o modelo foi inicialmente desenvolvido.

A utilização de sistemas de coordenadas, que se adaptam às linhas de contorno do problema físico, evita a necessidade de interpolações das condições de contorno, e confere mais generalidade ao método.

Utilizando-se a regra da cadeia, com algumas manipulações matemáticas, é possível transformar a equação (3) para o novo sistema de coordenadas  $(\xi, \eta)$ , que se alinham ao contorno do problema físico, resultando

$$\begin{aligned} & (\partial (\rho \phi) / \partial t) / J + \partial (\rho U \phi) / \partial \xi + \partial (\rho V \phi) / \partial \eta + \hat{P}^\phi = \hat{S}^\phi + \\ & + \partial [C_1 \partial \phi / \partial \xi + C_2 \partial \phi / \partial \eta] / \partial \xi + \partial [C_3 \partial \phi / \partial \xi + C_4 \partial \phi / \partial \eta] / \partial \eta \end{aligned} \quad (4)$$

$$C_1 = \alpha J \Gamma^\phi \quad (5)$$

$$C_2 = -\beta J \Gamma^\phi \quad (6)$$

$$C_4 = \gamma J \Gamma^\phi \quad (7)$$

sendo que  $\alpha, \beta, \gamma$  são componentes do tensor métrico,  $J$  é o Jacobiano da transformação,  $\hat{S}^\phi$  e  $\hat{P}^\phi$  são os termos transformados de  $\hat{S}^\phi$  e  $\hat{P}^\phi$ , respectivamente.

### Discretização das Equações Governantes

A equação (4), que representa os balanços diferenciais de conservação de massa e quantidade de movimento nas direções  $x$  e  $y$ , pode ser discretizada considerando-se que:

a) o valor de  $\phi$  ao longo do intervalo de tempo  $\Delta t$  será dado por um valor calculado entre os instantes  $t$  e  $t + \Delta t$ .

b)  $\rho\phi$  e  $S^\phi$  são constantes no volume de controle.

c) os fluxos de massa,  $\phi$  na face do volume de controle, as métricas, pressões e as propriedades físicas do fluido são consideradas uniformes ao longo de cada face do volume de controle.

Com base nas hipóteses acima mencionadas pode escrever-se que

$$\left[ \left( \rho\phi / (J\Delta t) \right)_P - \left( \rho\phi / (J\Delta t) \right)_P^o \right] \Delta\xi \Delta\eta = \dot{m}_v \phi_v - \dot{m}_s \phi_s + \dot{m}_e \phi_e - \dot{m}_n \phi_n +$$

$$+ \left\{ \left[ C_1 \partial\phi / \partial\xi + C_2 \partial\phi / \partial\eta \right]_s - \left[ C_1 \partial\phi / \partial\xi + C_2 \partial\phi / \partial\eta \right]_v \right\} \Delta\eta +$$

$$+ \left\{ \left[ C_2 \partial\phi / \partial\xi + C_4 \partial\phi / \partial\eta \right]_n - \left[ C_2 \partial\phi / \partial\xi + C_4 \partial\phi / \partial\eta \right]_e \right\} \Delta\xi +$$

$$+ \left[ \hat{S}_P^\phi + \hat{P}_P^\phi \right] \Delta\xi \Delta\eta \quad (8)$$

onde  $m_n, m_s, m_e$  e  $m_v$  representam os fluxos de massa através das faces norte, sul, leste e oeste, respectivamente. O superscrito representa valores obtidos da iteração ou instante de tempo anterior.

Devido ao fato dos valores das propriedades estarem armazenados nos pontos centrais dos volumes de controle, é necessário fazer-se uma estimativa dos valores destas propriedades nas faces dos mesmos para avaliação dos termos convectivos das equações de conservação.

### Interpolação das variáveis nas faces do volume de controle

No presente trabalho, é utilizada uma função de interpolação com suporte nas leis de conservação levando-se em conta a influência dos termos convectivo, difusivo e fonte. Esta função é obtida escrevendo-se a equação da conservação da quantidade de movimento para a face do volume de controle.

Considerando-se que  $C_1$  é constante ao longo de  $\xi$ ,  $C_4$  é constante ao longo de  $\eta$ , regime permanente e malhas quasi-ortogonais,  $\beta = 0$ , a equação (4), escrita para a face leste do volume de controle, é dada por

$$\rho U \partial\phi / \partial\xi = C_1 \partial^2\phi / \partial\xi^2 + B^\phi \quad (9)$$

onde  $B^\phi$  é dado pela equação

$$B^\phi = \hat{S}^\phi + C_4 \partial^2\phi / \partial\eta^2 - \rho V \partial\phi / \partial\eta \quad (10)$$

A equação (9) pode ser considerada uma equação diferencial ordinária de segunda ordem, linear, considerando-se o termo  $B^\phi$  constante e o valor de  $U$  tomado da iteração anterior. Esta equação contém as informações dos termos difusivo e convectivo, na direção  $\eta$ , e a influência do termo fonte no coeficiente  $B^\phi$ .

Fazendo-se as seguintes adimensionalizações

$$\xi^* = (\xi - \xi_P) / (\xi_E - \xi_P) \quad (11)$$

$$Pe^* = \rho U \Delta\xi / C_1 \quad (12)$$

$$B^{\phi*} = B^\phi \Delta\xi^2 / C_1 \quad (13)$$

a equação (9) se reduz a

$$-Pe^* \partial\phi / \partial\xi^* + \partial^2\phi / \partial\xi^{*2} + B^{\phi*} = 0 \quad (14)$$

cujas soluções, para a face leste, aplicadas as condições de contorno,  $\phi = \phi_P$  para  $\xi^* = 0$  e  $\phi = \phi_E$  para  $\xi^* = 1$ , é dada por

$$\phi_o = a_p^* \phi_P + a_E^* \phi_E + b^* B_o^{\phi^*} \quad (15)$$

onde,

$$a_p^* = [\exp(Pe^*) - \exp(Pe^*/2)] / [\exp(Pe^*) - 1] \quad (16)$$

$$a_E^* = [\exp(Pe^*/2) - 1] / [\exp(Pe^*) - 1] \quad (17)$$

$$b^* = \{ [1 - \exp(Pe^*/2)] / [\exp(Pe^*) - 1] + 1/2 \} / Pe^* \quad (18)$$

o,

$$B_o^{\phi^*} = \{ C_4 [\phi_N + \phi_{NE} + \phi_{SE} + \phi_S - 2\phi_E - 2\phi_P] / 2 - \rho V [\phi_{NE} + \phi_N - \phi_{SE} - \phi_S] / 4 \} / C_4 \quad (19)$$

As equações acima preservam correta influência das variáveis armazenadas nos centros dos volumes de controle sobre as estimadas nas faces dos mesmos, para os casos limites, como  $Pe \rightarrow 0$  e  $Pe \rightarrow \infty$ .

Na proposta apresentada por Schneider [9], para a função de interpolação das propriedades na face do volume de controle, em coordenadas cartesianas, a componente do termo convectivo na direção y foi suprimida da formulação, devido ao fato de ocasionar problemas de convergência. Expressões análogas às equações (15), (16), (17), (18) e (19) podem ser obtidas para as faces oeste, norte e sul do volume de controle.

Substituindo-se as expressões para avaliação da propriedade  $\phi$  nas faces leste, oeste, norte e sul do volume de controle, expressões análogas à equação (15), na equação (8), obtém-se

$$a_p \phi_P = a_o \phi_E + a_v \phi_W + a_n \phi_N + a_s \phi_S + a_{no} \phi_{NE} + a_{nv} \phi_{NW} + a_{so} \phi_{SE} + a_{sv} \phi_{SW} + b_p \quad (20)$$

O acoplamento pressão - velocidade é resolvido utilizando-se o método PRIME [10].

## RESULTADOS PRELIMINARES

A formulação em estudo foi preliminarmente empregada na solução do problema clássico da cavidade quadrada, isotérmica, de dimensão L, com a parede superior movendo-se com velocidade U constante, para os valores de número de Reynolds de 100, 400 e 1000, ( $Re = \rho U L / \mu$ ).

O problema teste escolhido visa, neste momento, a análise da estabilidade do esquema numérico desenvolvido, uma vez que a presença das duas componentes do termo convectivo, na equação para avaliação da propriedade na face do volume de controle, gera problemas de estabilidade conforme mencionado por Schneider [9]. Para análise futura, pretende-se empregar esta formulação em problemas onde tem-se um salto na função, para verificar os efeitos da difusão numérica.

Os resultados obtidos foram apresentados na forma gráfica u x y, para os diversos valores de Re investigados, conjuntamente com os dados obtidos por Ghia et al. [11], para o mesmo problema em estudo, utilizando uma malha de 129 x 129. Os dados apresentados nas FIGURAS 1 e 2 são referentes ao plano mediano da cavidade e foram obtidos utilizando-se malhas 10 x 10, 20 x 20 e 40 x 40.

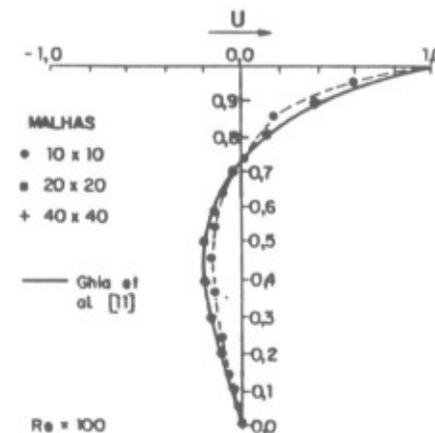


FIGURA 1 - Cavidade quadrada com a parede superior movendo-se com velocidade U constante,  $Re = 100$ .

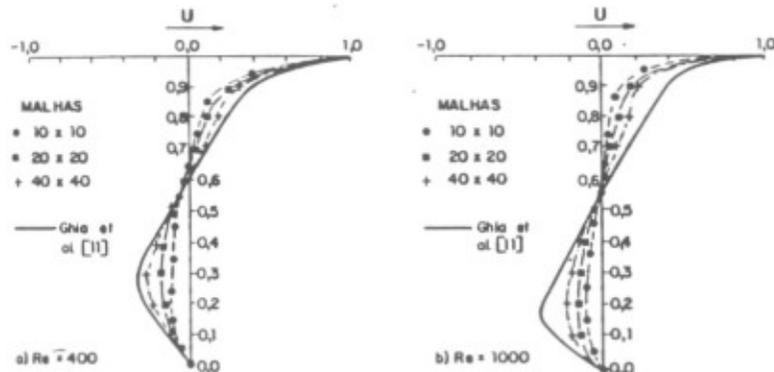


FIGURA 2 - Cavidade quadrada com a parede superior movendo-se com velocidade  $U$  constante a)  $Re = 400$  b)  $Re = 1000$ .

Para  $Re = 100$ , os resultados obtidos para a malha  $10 \times 10$ , apresentaram ligeira discordância com os dados de Ghia et al [11], enquanto que, para malhas  $20 \times 20$  e  $40 \times 40$  os resultados apresentaram excelente concordância.

Os resultados obtidos para  $Re = 400$ , com malha  $10 \times 10$  apresentam-se bastante discordantes com os dados de Ghia et al. [11]. Esta discordância é menor para a malha  $20 \times 20$ , sendo que, para o caso da malha  $40 \times 40$ , pouca discrepância é observada.

A condição mais crítica é encontrada na confrontação entre os dados obtidos pela formulação proposta e os apresentados por Ghia et al. [11], no caso de  $Re = 1000$ . Para este caso, a malha  $10 \times 10$ , apresentou grande discordância, sendo atenuada com o refinamento da malha para  $20 \times 20$  e  $40 \times 40$ .

## CONCLUSÃO

A formulação desenvolvida apresenta pouca concordância com os resultados de Ghia et al. [11], nas situações de convecção dominante, para o grau de refinamento das malhas escolhido para estudo, muito embora, estes resultados sejam consistentes com os obtidos utilizando-se a disposição das variáveis co-localizadas [9] e com o esquema de variáveis desencontradas, utilizando "WUDS", computados por estes autores.

No exemplo estudado, não foi observado nenhum problema de estabilidade numérica, como relatado por Schneider [9], com referência à presença de ambas as componentes do termo convectivo na função de interpolação das propriedades na face do volume de controle.

O principal atrativo da presente formulação é o fato das equações de aproximação garantirem o princípio da conservação, permitindo a correta influência dos efeitos convectivos, difusivos e fonte na avaliação das propriedades nas faces dos volumes de controle.

A continuação do presente trabalho inclui a implementação de um esquema de malha adaptativa, alinhando-se o vetor velocidade às linhas coordenadas, visando a minimização dos efeitos da difusão numérica.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] Raithby, G. D. and Torrance, K. E., Upstream-weighted Differencing Schemes and their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow, Computers and Fluids, 2, pp.191-206 (1974).
- [2] Raithby, D. G., Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow, Comp. Methods in Appl. Mech. Eng., 9, pp.153-164 (1976).
- [3] Hassan, Y. A., Rice, J. G. and Kim, J. H., A Stable Mass-Flow-Weighted Two-Dimensional Skew Upwind Scheme, Numerical Heat Transfer, 6, 4, pp.395-408 (1983).
- [4] Baliga, B. R., Phari, T. T. and Patankar, S. V., Solution of Some Two-Dimensional Incompressible Fluid Flow and Heat Transfer Problems, Using Volume Finite Element Method, Numerical Heat Transfer, 6, 3, pp. 263-282 (1983).
- [5] Ullington, J. N., A Vector Upstream Differencing Scheme for Problems in Fluid Flow Involving Significant Source Terms in Steady-State Linear Systems, Int. J. Numer. Methods in Fluids, 1, pp.3 - 16 (1981). (1981).
- [6] Leonard, B. P., A Survey of Finite Differences of Opinion on Numerical Muddling of the Incomprehensible Defective Confusion Equation, in T. J. R. Hughes (ed.), Proc. Symp. Finite Element Methods for Convection Dominate Flows, ASME Winter Ann., Mtg., New York, pp.1-17 (1979).
- [7] Ghia, K. N., Ghia, U. and Shin, C. T., Adaptive Grid Generation for Flows With Local High Gradient Regions, Advanced in Grid Generation, ASME, FED, 5, pp.35-47 (1986).
- [8] Patel, M. K., Markatos, N. C. and Cross, M., Method of Reducing False-Diffusion Errors in Convection-Diffusion Problems, Technical Note, Appl. Math. Modelling, 9, pp. 302-306 (1985).
- [9] Schneider, G. E., A Novel Co-located Finite Difference Procedure for the Numerical Computation of Fluid Flow, AIAA - 4. Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference, Boston, Massachusetts (1986).
- [10] Maliska, Clóvis R., A Solution Method Three-Dimensional Parabolic Fluid Flow Problems in Nonorthogonal Coordinates, Ph. D. Thesis, University of Waterloo, Ontario, Canada (1981).
- [11] Ghia, U., Ghia, K.N., and Shin, C. T., High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multi-Grid Method, Journal of Computational Physics, 48, pp. 387-411 (1982).