

SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS CONVECTIVOS-DIFUSIVOS BIDIMENSIONAIS PELO MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS USANDO MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS

Fábio A. Schneider

SINMEC - Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
Departamento de Engenharia Mecânica – UFSC – Caixa Postal 476 – CEP 88040-970 – Florianópolis – SC, Brasil
schneider@sinmec.ufsc.br

Clovis R. Maliska

SINMEC - Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
Departamento de Engenharia Mecânica – UFSC – Caixa Postal 476 – CEP 88040-970 – Florianópolis – SC, Brasil
maliska@sinmec.ufsc.br

***Resumo.** Este trabalho apresenta um modelo numérico para a solução da equação de conservação de uma variável escalar, utilizando o método dos Volumes Finitos aplicado para malhas não-estruturadas. A principal motivação para o emprego deste esquema numérico é a facilidade de adaptação das malhas tanto em geometrias complexas e irregulares, como em geometrias regulares, permitindo que refinamentos locais sejam feitos em regiões específicas. A malha empregada e a forma de obtenção dos volumes de controle é baseada na discretização por elementos o que facilita a implementação computacional. São discutidas também, aproximações numéricas para algumas funções de interpolação básicas encontradas na literatura. O esquema apresentado é comparado com outros esquemas numéricos que utilizam malhas não-estruturadas.*

***Palavras chave:** métodos numéricos, malhas não-estruturadas, escoamento de fluidos.*

1. Introdução

A discretização de domínios arbitrários em uma malha única e de qualidade sempre representou uma dificuldade no uso dos métodos numéricos. Esta dificuldade torna-se ainda maior caso um refinamento local se faça necessário. A alternativa mais difundida é subdividir o domínio e resolver o problema em blocos acoplados, usando a técnica de multiblocos. Esta técnica requer uma eficiente iteração entre as interfaces comuns aos blocos durante a solução do problema, o que pode representar uma dificuldade a mais para a convergência numérica. Como alternativa existe a possibilidade de mapear a geometria em uma malha única e não-estruturada. Muitos desenvolvimentos têm sido feitos neste sentido e várias formulações surgiram para abordar este problema (Baliga e Patankar, 1980; Schneider e Raw, 1987; Taniguchi e Kobayashi, 1991; Maliska, 1995; Mathur e Murthy, 1997).

A disponibilidade de técnicas híbridas, que reúnem as qualidades de praticidade e generalidade ao mesmo tempo é seguramente, uma tendência dos métodos numéricos atuais. A grande capacidade computacional disponível hoje em pequenas unidades de processamento, propicia o emprego dos métodos numéricos em um grande número de problemas de engenharia (Heinemann e Brand, 1989; Quandalle, 1993; Maliska e Vasconcellos, 2000, Sammon, 2000). Portanto, é fundamental nos desenvolvimentos numéricos que se tenha maior versatilidade na discretização de domínios, na medida em que cresce a complexibilidade dos problemas abordados.

A obtenção dos volumes de controle em uma malha não-estruturada pode ser realizada de várias formas. Uma delas é considerar como volumes os próprios elementos que compõe a malha. O outro é obter os volumes a partir do centro geométrico dos elementos poligonais que compõe a discretização.

No presente trabalho é apresentada a discretização por elementos unidirecionais, que consiste em obter o volume de controle a partir de um conjunto de elementos losangulares, delimitados por dois centros de volumes e uma área, em que se integram as equações. Cada elemento contribui individualmente com um conjunto de coeficientes para a equação discretizada do volume de controle. O posicionamento dos pontos de integração em cada elemento também é fundamental para minimizar o erro numérico introduzido pela aproximação.

A discretização por elementos, longamente empregada no Método dos Elementos Finitos, facilita a obtenção das equações aproximadas e normaliza a implementação computacional. O resultado é uma maior qualidade do processo computacional, pois, os algoritmos são naturalmente desenvolvidos em etapas, diminuindo a ocorrência de erros de programação. O presente trabalho propõe a solução numérica da equação de conservação de uma variável escalar através de uma metodologia que emprega uma malha não-estruturada. Metodologias que usam malhas não-estruturadas (Schneider e Raw, 1987; Maliska e Vasconcellos, 2000), servem como referência para a avaliação do desempenho da formulação proposta.

Para validar os esquemas numéricos apresentados e realizar as comparações de desempenho, o problema teste escolhido foi o transporte, com convecção dominante, de um salto em uma variável escalar, com solução analítica aproximada dada por Raithby (1976).

1.1. Revisão Bibliográfica

As primeiras formulações usando malhas triangulares para geração de volumes de controle surgiram no final da década de 70 e início da década de 80, propostas por Baliga e Patankar (1980). Nesta metodologia, o principal atrativo é a versatilidade oferecida pela malha, formada basicamente por elementos triangulares.

Na Figura (1.a) temos um volume de controle obtido segundo esta metodologia. Partindo da triangulação de Delaunay, comum no método dos elementos finitos, os volumes de controle são gerados a partir do método das medianas, onde une-se o centro geométrico do triângulo $P12$ da Fig. (1.a) ao ponto médio das faces. Vários elementos triangulares similares ao elemento $P12$ formam o volume de controle centrado em P . Cada elemento triangular contribui com dois pontos de integração ip_1 e ip_2 no balanço de conservação do volume P .

O emprego desta metodologia progrediu modestamente dentro do Método dos Volumes Finitos pela preferência no uso de coordenadas generalizadas para a discretização do domínio (Maliska, 1995). A rápida difusão no uso de coordenadas generalizadas em Volumes Finitos se deu devido a fácil geração das malhas utilizadas, que neste caso são estruturadas e obtidas através de algoritmos simples.

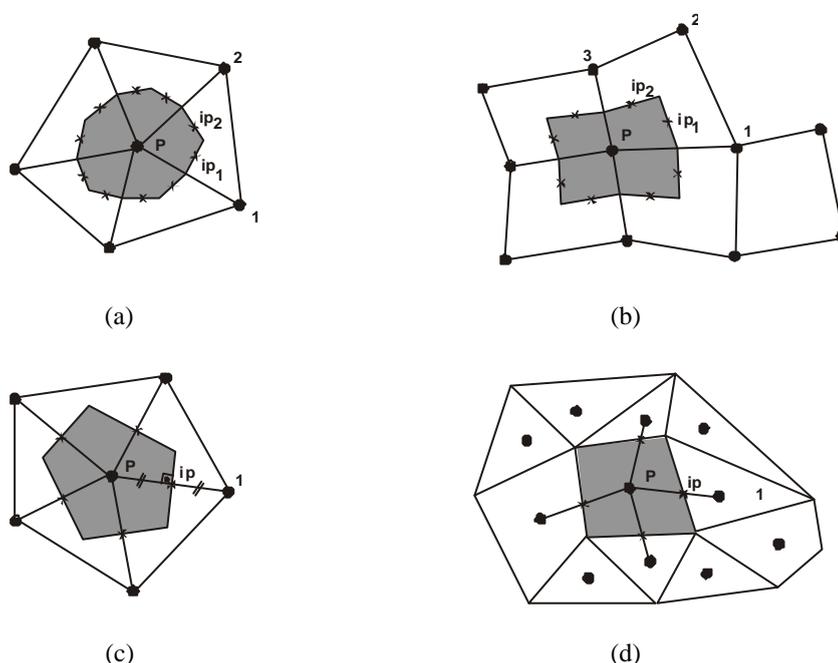


Figura 1. Diferentes construções de volumes de controle em malhas não-estruturadas.

Procurando manter a praticidade na geração da malha, Schneider e Raw (1987) propuseram a obtenção de um volume de controle semelhante ao proposto por Baliga e Patankar (1980), baseado em uma malha formada por quadriláteros, muito semelhante a discretização em coordenadas generalizadas. O grande destaque nesta metodologia é o acoplamento introduzido nas equações de modo a melhorar o processo de convergência.

A Figura (1.b) ilustra a obtenção de um volume elementar segundo esta metodologia. Os volumes de controle também são obtidos unindo o centro geométrico do quadrilátero $P123$ da Fig. (1.b) ao ponto médio das faces. Novamente, elementos quadriláteros similares ao elemento $P123$ formam o volume de controle centrado em P . Neste caso, um sistema coordenado local se faz necessário para implementação das aproximações, o que flexibiliza a malha e elimina a obrigatoriedade de se ter um número fixo de pontos nas direções coordenadas, o que difere dos esquemas em coordenadas generalizadas. Cada elemento quadrilátero também contribui com dois pontos de integração ip_1 e ip_2 no balanço de conservação do volume centrado em P .

As metodologias que empregam malhas não-estruturadas continuaram a se desenvolver na última década motivadas pela necessidade crescente de discretização de domínios cada vez mais irregulares e arbitrários, dificilmente abordado com eficiência no emprego de coordenadas generalizadas. O uso de formulações baseadas em malhas triangulares, como os Diagramas de Voronoi (Taniguchi e Kobayashi, 1991; Maliska e Vasconcellos, 2000) se destacam por apresentarem versatilidade de discretização e baixa complexibilidade computacional, quando comparados a outros métodos que utilizam malhas não-estruturadas.

A Figura (1.c) representa um volume de Voronoi. Neste método os volumes são obtidos através da mediatriz dos segmentos que determinam a malha. O volume de controle é obtido traçando-se a mediatriz do segmento $P1$ da Fig (1.c) e a mediatriz de todos os outros segmentos ligados ao ponto P . Cada segmento contribui com um ponto de integração ip

no balanço de conservação. Os volumes de Voronoi possuem a particularidade de sempre possuírem faces perpendiculares aos centros dos volumes e localizadas sempre no ponto médio destas faces.

A generalização da discretização de domínios através de polígonos convexos arbitrários pode ser encontrada em Mathur e Murthy (1997). Esta metodologia emprega uma malha bastante versátil e muitos desenvolvimentos em malhas não-estruturadas são baseados nesta formulação.

A Figura (1.d) ilustra uma discretização usando polígonos arbitrários. Neste caso o volume de controle é o próprio polígono que compõe a malha. A aproximação é realizada em cada face do polígono P . O ponto de integração ip da Fig. (1.d) não necessariamente é o ponto médio entre o centro dos volumes P e I .

Atualmente, é crescente o interesse pelo desenvolvimento e aprimoramento dos métodos em malhas não-estruturadas, pois é grande o número de problemas de engenharia em que se aplicam as discretizações arbitrárias (Hegre et al. 1996; Heinemann e Brand, 1989; Quandalle, 1993; Maliska e Vasconcellos, 2000). O destaque nas metodologias (Taniguchi e Kobayashi, 1991; Maliska e Vasconcellos, 2000; Mathur e Murthy, 1997) está na facilidade de geração das malhas e o baixo custo computacional, quando comparado a formulações mais complexas (Baliga e Patankar, 1980; Schneider e Raw, 1987). Isso motivou o desenvolvimento da presente proposta, que é uma formulação em malhas não-estruturadas, baseada na construção dos volumes de controle por elementos unidirecionais, conforme detalhado a seguir.

2. Formulação Básica

A formulação porposta neste trabalho é baseada nos desenvolvimentos das metodologias apresentadas anteriormente e tem sua fundamentação descrita em Schneider e Maliska (2001). A principal motivação aqui é pelo desenvolvimento de uma metodologia em malhas não-estruturadas que seja menos dispendiosa computacionalmente, facilitando a implementação dos algoritmos, similar as metodologias discutidas em (Mathur e Murthy, 1997; Maliska e Vasconcellos, 2000). A característica fundamental é a flexibilidade na geração da malha e a discretização das equações por elementos unidirecionais, que além de facilitar o desenvolvimento do código, diminui a incidência de erros de programação, pois, é desenvolvida naturalmente em etapas. Os desenvolvimentos seguem os princípios de conservação do Método dos Volumes Finitos aplicado a malhas não-estruturadas. São também discutidas as aproximações para algumas funções de interpolação básicas na literatura.

2.1. Construção do Volume de Controle e Elementos Unidirecionais

A idéia básica é obter os volumes de controle a partir de uma discretização arbitrária qualquer conforme ilustra a Fig. (2.a). A primeira alternativa é aplicar o método das medianas, ou seja, unir o centro geométrico de cada polígono ao ponto médio das faces obtendo os volumes de controle conforme ilustra a Fig. (2.b). É importante destacar que este procedimento não é inflexível. Os pontos que delimitam os volumes não precisam ser necessariamente o centro geométrico dos polígonos, o que permite a correção de possíveis discrepâncias geométricas da malha. A segunda alternativa, ilustrada na Fig. (2.c), é considerar como volumes os próprios polígonos decorrentes da discretização. Esta alternativa é menos atraente do que a primeira, pois apresenta uma distribuição menos homogênea do tamanho das faces e do tamanho dos próprios volumes, mas pode também ser aplicada (Mathur e Murthy, 1997). Note ainda que o número de informações armazenados computacionalmente é o mesmo para ambas as construções, pois, além de armazenar os valores dos nós da malha, os centros dos polígonos também precisam ser conhecidos de alguma forma.

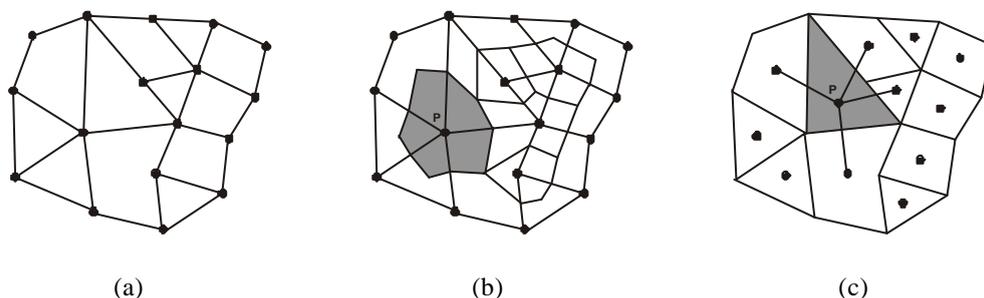


Figura 2. Discretização arbitrária e construção dos volumes de controle.

Observe que após construído, o volume de controle é formado por elementos de formato losangular, do tipo $PaIb$ mostrados nas Fig. (3.a) e (3.b). Estes elementos são delimitados por dois centros de volume e um vetor área. O elemento $PaIb$, através do segmento PI , promove a ligação entre os volumes de controle centrado em P e em I , por isso estes elementos são aqui denominados unidirecionais. Cada elemento unidirecional $PaIb$ possui um único ponto de integração. A posição do ponto de integração deve ser observada por delimitar as distâncias envolvidas nas aproximações e, principalmente o tamanho do volume de controle, importante em problemas com termos fonte.

As Figuras (3.c) e (3.d) ilustram dois elementos que foram extraídos dos volumes de controle representados na Fig. (3.a) e (3.b), respectivamente.

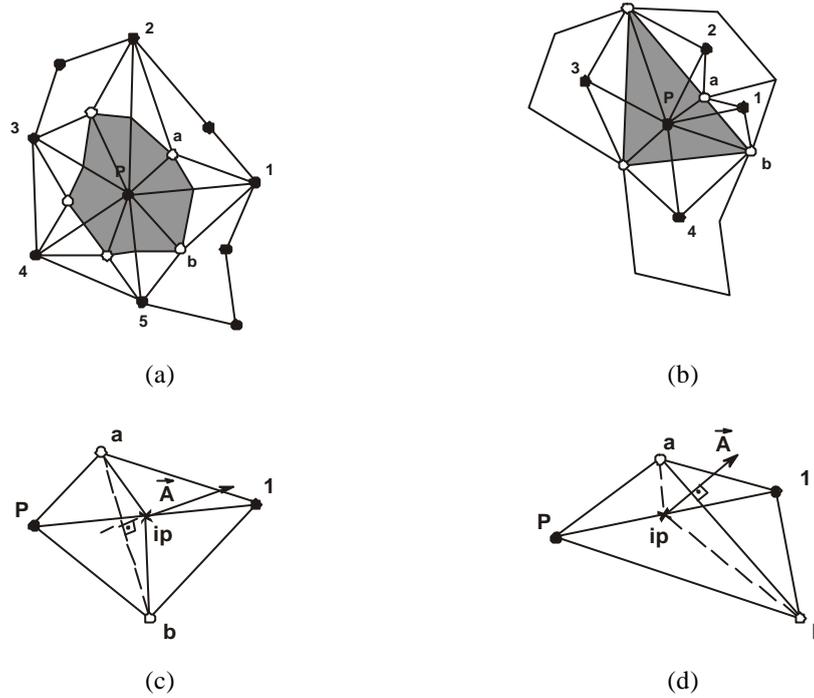


Figura 3. Volumes de controle e elementos unidirecionais.

É importante aqui destacar algumas particularidades. Os pontos a e b da Fig. (3.c) e (3.d) determinam a área efetiva de troca de fluxo referente ao elemento PI , que é também a soma dos vetores área dos segmentos \overline{aip} e \overline{ipb} , representada pelo vetor área \vec{A} sobre o ponto de integração ip e não necessariamente paralelo a PI .

Note que esta área pode ser aplicada sobre um ponto de integração ip , fora da intersecção dos segmentos \overline{ab} e \overline{PI} , sem prejuízo de magnitude. E ainda, qualquer posição em que o ponto de integração estiver localizado, ou qualquer que seja o formato da curva que define os segmentos \overline{aip} e \overline{ipb} , não se altera a área efetiva de troca de fluxo, representada pelo vetor \vec{A} . Conseqüentemente, no uso de termos fonte envolvendo uma quantidade do sub-volume, esse valor pode ser $\frac{1}{2}$ de $Palb$, não sendo necessário o cálculo parcial dos sub-volumes.

Portanto, conforme ilustra as Fig. (3.c) e (3.d), será adotado aqui que o ponto de integração onde são aproximados os fluxos está localizado no ponto médio do segmento \overline{PI} e que as parcelas referentes as quantidades em massa de cada sub-volume é $\frac{1}{2}$ de $Palb$.

A princípio pode-se não perceber a vantagem em se definir o losango $Palb$ da Fig. (3.a) e (3.b) como um elemento. Porém, todo o processo de discretização ficará concentrado nesta única célula, que, uma vez implementada, será aplicada a todo o domínio, normalizando o processo computacional.

2.2. Equação governante

Admitindo conhecido o campo de velocidades e adotando um sistema de coordenadas cartesianas (x,y) , temos, para o problema convectivo-difusivo bidimensional transiente, a seguinte equação de conservação para uma variável genérica ϕ

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + S^\phi \quad (1)$$

onde Γ^ϕ é o coeficiente difusivo, S representa o termo fonte, ρ é a massa específica do fluido e t o tempo. Condensando os fluxos advectivo e difusivo em um único termo, a Eq. (1) pode ser reescrita na forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\vec{J}) = S^\phi \quad (2)$$

$$\vec{J} = \rho \vec{V}\phi - \Gamma^\phi \nabla\phi \quad (3)$$

onde \vec{J} representa o fluxo total (advectivo e difusivo) e \vec{V} é o vetor velocidade.

2.3. Discretização das equações para f

A integração da equação de conservação, Eq. (2), segue a formulação básica das metodologias em Volumes Finitos para malhas não-estruturadas. Esta integração é realizada sobre o volume de controle P , representado na Fig. (3.a). Note que este volume é formado por vários elementos do tipo PI , que contribuirão individualmente para obtenção das equações aproximadas de cada volume. O sub-volume de controle $Paipb$, representado na Fig. (3.c), é parte do volume de controle no qual é realizada a integração. O elemento PI contribui no balanço total da propriedade ϕ do volume com o fluxo \vec{J} , calculado no ponto de integração ip da Fig. (3.c). Portanto, integrando a Eq. (2) no volume de controle P , temos

$$\frac{M_P \phi_P - M_P^o \phi_P^o}{\Delta t} + \int_a^b \vec{J} \cdot d\vec{A} - \int_{Patpb} S^\phi dV + \left[\begin{array}{l} \text{contribuição de outros} \\ \text{elementos associados ao nó } P \end{array} \right] = 0 \quad (4)$$

onde M representa a massa do volume de controle. Detalhes desta integração podem ser vistos em Schneider e Raw (1987). Introduzindo a Eq. (3) na Eq. (4) e admitindo constantes os valores de ρ e Γ^ϕ , temos

$$\frac{M_P \phi_P - M_P^o \phi_P^o}{\Delta t} + \rho (\vec{V} \cdot \vec{A})_{ip} \phi_{ip} - \Gamma^\phi (\vec{\nabla} \phi \cdot \vec{A})_{ip} - (S_p \phi_{ip} + S_c) \frac{\Delta V_{Paib}}{2} + \left[\begin{array}{l} \text{contribuição de outros} \\ \text{elementos associados ao nó } P \end{array} \right] = 0 \quad (5)$$

Quando as parcelas correspondentes a todos os elementos forem adicionadas e aplicadas as condições de contorno, teremos uma equação algébrica de conservação do volume de controle centrado em P , conectado a todos os seus vizinhos, na forma

$$A_i \phi_i = \sum_n A_{nb} \phi_{NB} + B_i \quad (6)$$

onde i indica o número do volume de controle e nb os volumes vizinhos. Resolvendo o sistema linear obtido através de um algoritmo adequado, teremos os valores de ϕ determinados em todos os vértices dos polígonos que compõe a discretização da Fig. (2.b), ou no centro dos polígonos que compõe a discretização da Fig. (2.c), ou seja, no centro de todos os volumes.

O tratamento dado às condições de contorno dependerá do tipo da discretização escolhida, conforme ilustrado na Fig. (2), e será apresentado adiante. Na solução dos sistema linear vale ressaltar que a matriz de coeficientes em uma malha não-estruturada apresenta banda variável, e portanto, a escolha do tipo de algoritmo de solução deve ser criteriosa. O uso de esquemas de solução mais simples como os iterativos pode ser uma alternativa interessante quando a solução do problema é não-linear, ou está se aplicado algum tipo de esquema multigrid. Nestes casos, a solução final depende de um processo iterativo e a matriz de coeficientes é corrigida a cada iteração, não sendo necessária portanto, a solução exata desta matriz nas iterações intermediárias.

2.4. Função de interpolação

A função de interpolação tem o objetivo de avaliar o valor de uma propriedade genérica ϕ na interface do volume de controle bem como suas derivadas. Tradicionalmente o Método dos Volumes Finitos utiliza duas funções de interpolação para esta tarefa: uma para determinação dos valores das derivadas de ϕ e outra para a determinação dos valores de ϕ nas interfaces de integração. Normalmente, na avaliação das derivadas é suficiente o uso de um esquema de diferenças centrais, e na avaliação de ϕ , emprega-se algum mecanismo que considere os efeitos convectivos do problema, na maioria das vezes em função do número de Peclet da malha.

Para esta proposta, a discretização da equação de conservação resultou na Eq. (5), onde precisam ser determinadas as expressões aproximadas para ϕ na interface de integração (ϕ_p), e para o vetor gradiente formado pelas derivadas de ϕ ($\vec{\nabla} \phi$). Portanto apresentaremos a função de interpolação em duas etapas: avaliação das derivadas de ϕ e avaliação de ϕ nos pontos de integração.

A idéia básica é aplicar a função de interpolação para o elemento unidirecional representado na Fig. (3.c), dentro do mesmo enfoque usado nas metodologias (Baliga e Patankar, 1980) e (Schneider e Raw, 1987), que fazem uso de elementos triangulares e quadriláteros para discretização, através de funções peso.

2.4.1. Avaliação das derivadas de f

Considere inicialmente a Fig. (4.a) que ilustra o elemento $I2$ que compõe o volume de controle da Fig. (3.a). O objetivo aqui é determinar uma expressão para o gradiente de ϕ , escrito no sistema de coordenadas cartesianas (x,y) e posteriormente aplicá-lo na equação de conservação discretizada, dada pela Eq.(5). Para isso escrevemos uma função de interpolação da seguinte forma

$$\phi(x, y) = N_1 \Phi_1 + N_2 \Phi_2 \quad (7)$$

onde Φ_1 e Φ_2 são os valores de ϕ armazenados nos nós do elemento, e N_1 e N_2 são as funções peso, semelhante as funções apresentadas em Schneider e Raw, (1987), lá denominadas *shape functions*, decorrentes de uma transformação de coordenadas. Note que a Eq.(7) é escrita em duas coordenadas para facilitar a obtenção das expressões das derivadas de ϕ em x e y , e posteriormente comporem o vetor gradiente. Portanto, a Eq.(7) é uma função de interpolação bidimensional, onde dispõem-se somente de dois nós para sua construção.

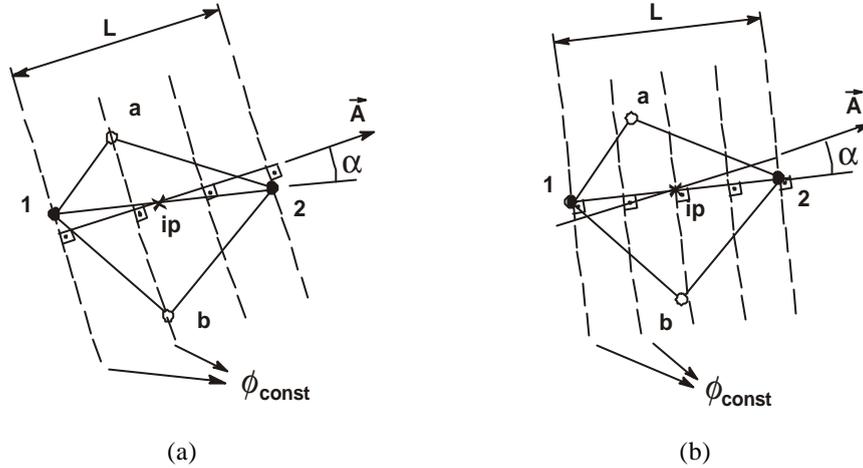


Figura 4. Elementos unidirecionais e os parâmetros difusivos.

A idéia então é construir uma função plano, na forma de uma rampa bidimensional entre os valores de Φ_1 e Φ_2 , que apresente gradiente máximo na direção do vetor área do elemento $I2$ ilustrado na Fig. (4.a), e gradiente nulo na direção perpendicular. Daí a razão em denominar os elementos como unidirecionais. Portanto, esta função fornece

$$N_1 = [(x_a - x_b)x + (y_a - y_b)y + (x_b - x_a)x_2 + (y_b - y_a)y_2] / \text{DET} \quad (8)$$

$$N_2 = [(x_b - x_a)x + (y_b - y_a)y + (x_a - x_b)x_1 + (y_a - y_b)y_1] / \text{DET} \quad (9)$$

$$\text{DET} = (x_2 - x_1)(x_b - x_a) + (y_2 - y_1)(y_b - y_a) = LA \cos \alpha \quad (10)$$

Note que existe também a opção de se escrever esta função rampa em outras direções, por exemplo, alinhada com a direção do segmento $I2$, representada na Fig. (4.b), que fornece valores diferentes para os coeficientes N_1 e N_2 . Isso decorre de estarmos assumindo uma variação unidirecional da propriedade ϕ , da mesma forma empregada na formulação tradicional do Método dos Volumes Finitos (Maliska, 1995) e na metodologia dos diagramas de Voronoi (Maliska e Vasconcellos, 2000). Nas metodologias (Baliga e Patankar, 1980), (Schneider e Raw, 1987) e (Mathur e Murthy, 1997) este fato não ocorre devido a utilização de mais de dois pontos nodais para esta aproximação, definindo melhor a função bidimensional.

A escolha de qual direção utilizar na construção da função rampa depende da direção real do fluxo, que é desconhecida a priori (Heinemann e Brand, 1989). Para o esquema numérico aqui desenvolvido, admite-se que a função rampa terá a forma da Fig. (4.a) e os coeficientes N_1 e N_2 dados pelas Eqs.(8) e (9), o gradiente máximo fica portanto estabelecido na direção do vetor área. Assim, a componente do gradiente perpendicular ao vetor área é sempre multiplicada por uma área nula, permitindo o uso da função rampa na interpolação sem prejuízo da formulação, como na metodologia dos diagramas de Voronoi (Maliska e Vasconcellos, 2000).

Esquemas numéricos semelhantes ao adotado, que empregam malhas não ortogonais e usam apenas dois pontos para a avaliação dos fluxos são utilizados na simulação de reservatórios e baseiam-se no conceito de transmissibilidade (Abdou et al., 1991; Peaceman, 1996; Sammon, 2000). Segundo Heinemann e Brand (1989) o fluxo calculado fica sujeito a dois erros: um erro de ordem (L^2) decorrente da aproximação linear da derivada, e outro erro envolvendo os cossenos dos ângulos que o fluxo real e o vetor área fazem com o segmento $I2$. O próximo passo é a obtenção da expressão que fornece o vetor gradiente de ϕ . Para tal, derivamos a Eq.(7) em relação a (x,y) obtendo

$$\frac{\partial \phi}{\partial(x,y)} = \frac{\partial N_1}{\partial(x,y)} \Phi_1 + \frac{\partial N_2}{\partial(x,y)} \Phi_2 \quad (11)$$

Considerando as Eqs.(8) à (11), o vetor gradiente é escrito como

$$\vec{\nabla}\phi = \frac{(x_b - x_a)\hat{i} + (y_b - y_a)\hat{j}}{LA \cos\alpha}(\Phi_2 - \Phi_1) \quad (12)$$

O produto escalar do vetor gradiente pelo vetor área, apresenta na Eq.(5), é (Peaceman, 1996)

$$\vec{\nabla}\phi \cdot \vec{A} = \frac{A}{\cos\alpha} \frac{(\Phi_2 - \Phi_1)}{L} \quad (13)$$

onde α é o ângulo entre o vetor área e o segmento $I2$, representado na Fig. (4.a). A parcela da Eq.(13) correspondente ao inverso do coseno de α varia conforme a escolha da direção da função rampa. No caso de se optar pela função representada na Fig. (4.b) que admite gradiente máximo na direção do segmento $I2$, esta parcela é dada por $\cos \alpha$ (Heinemann e Brand, 1989; Peaceman, 1996).

2.4.2. Avaliação de f nos pontos de integração

Para a determinação dos valores de ϕ no ponto de integração, vários métodos podem ser aplicados. Os dois primeiros esquemas aqui apresentados, *UDS* e *CDS*, seguem os desenvolvimentos da literatura e servem como base para a análise dos outros que serão propostos. Considere inicialmente a Fig. (5) que representa o elemento $I2$ e seu ponto de integração ip .

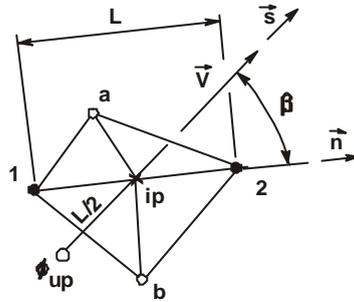


Figura 5. Elemento unidirecional e os parâmetros convectivos.

Usando séries de Taylor em torno do ponto de integração ip , o valores de Φ_1 e Φ_2 podem ser calculados por

$$\Phi_1 = \phi_{ip} - \frac{\partial\phi}{\partial n}\bigg|_{ip} (L/2) + \frac{\partial^2\phi}{\partial n^2}\bigg|_{ip} \frac{(L/2)^2}{2} - \dots + \dots \quad (14)$$

$$\Phi_2 = \phi_{ip} + \frac{\partial\phi}{\partial n}\bigg|_{ip} (L/2) + \frac{\partial^2\phi}{\partial n^2}\bigg|_{ip} \frac{(L/2)^2}{2} + \dots + \dots \quad (15)$$

A partir destas expressões temos os seguintes esquemas

· **Esquema UDS.** Neste esquema, bastante difundido na literatura, o valor de ϕ no ponto de integração é dado pelas Eqs. (14) e (15), assumindo um erro de primeira ordem. Portanto temos

$$\phi_{ip} = \Phi_1 \quad , \quad p/\cos\beta > 0 \quad (16)$$

$$\phi_{ip} = \Phi_2 \quad , \quad p/\cos\beta < 0 \quad (17)$$

· **Esquema CDS.** Neste outro esquema, também muito usado na literatura, o valor de ϕ no ponto de integração é dado pela soma das equações Eq. (14) e (15), assumindo um erro de segunda ordem. Então temos

$$\phi_{ip} = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{2} \quad (18)$$

· **Opção 1.** Considerando um valor a montante de ϕ_p , representado por ϕ_{up} na Fig. (5) e alinhado com a orientação s do vetor velocidade, temos, usando a série de Taylor em torno do ponto de integração ip , a seguinte expressão

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \frac{\partial \phi}{\partial s} \Big|_{ip} (L/2) - \frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} \Big|_{ip} \frac{(L/2)^2}{2} - \dots + \dots \quad (19)$$

Assumindo um erro de primeira ordem na equação acima e aproximando o valor de ϕ_{ip} como uma média ponderada dos valores de Φ_1 e Φ_2 , baseadas no ângulo β da Fig. (5) (Schneider e Maliska, 2001), temos

$$\phi_{ip} = \phi_{up} \quad , \quad \phi_{up} = a\Phi_1 + (1-a)\Phi_2 \quad , \quad a = \frac{(1 + \cos\beta)}{2} \quad (20)$$

Portanto, a Eq. (20) fornece o valor de ϕ_p como sendo uma média entre os valores de Φ_1 e Φ_2 , baseada no ângulo que o vetor velocidade faz com o segmento $I2$. Como o afastamento do ponto up em relação a ip é exatamente $L/2$, esta média angular fornece exatamente o mesmo valor de ϕ_{ip} dado pela Eq. (7). Este esquema pode ser entendido como um Skew de dois pontos (*Skew2-UDS*).

· **Opção 2.** Uma segunda opção é assumir na Eq.(19) um erro de segunda ordem. Para isso é necessário determinar o valor da derivada de ϕ na direção s , representada na Fig. (5). Esta derivada pode ser tratada explicitamente e dada pelo produto escalar do vetor gradiente, calculado na Eq. (12), pelo vetor unitário s . Assim, substituindo as expressões na Eq. (19), temos

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \cos\beta \frac{\Phi_2^0 - \Phi_1^0}{2} \quad (21)$$

onde o valor de ϕ_{up} é dado pela Eq. (20). Note que, caso o termo tratado explicitamente seja incluído implicitamente, a Eq. (21) simplifica-se e torna-se a Eq. (18), representando o esquema *CDS*. E não poderia ser diferente, assumindo que a interpolação de ϕ_{up} é linear e representada pela Eq. (7), e que o vetor gradiente também o é, ao somarmos a variação de ϕ do ponto up ao ponto ip , estamos deslocando o valor de ϕ sobre a função dada pela Eq. (7), o que fornece ao final do deslocamento, a média dos valores de ϕ nodais. A correção explícita em um esquema de interpolação de primeira ordem, que origina, na convergência do processo numérico, um esquema de segunda ordem. Este mecanismo é conhecido na literatura como correção adiada.

· **Opção 3.** A proposta agora é determinar o valor da derivada de ϕ na direção s , através da própria equação de conservação dada pela Eq. (2), e substituí-la na Eq. (19), obtendo uma aproximação de segunda ordem. Este esquema é conhecido também como a função completa. A Equação (2) pode ser reescrita na forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial s} = \frac{1}{\rho V} \left[\Gamma^\phi \nabla^2 \phi + S^\phi - \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] \quad (22)$$

Substituindo a equação acima na Eq. (19) e assumindo um erro de segunda ordem, temos

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \frac{(L/2)}{\rho V} \left[\Gamma^\phi \nabla^2 \phi + S^\phi - \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] \quad (23)$$

Assumindo a solução em regime permanente para a Eq. (23) e considerando nulo o termo fonte, pode-se aproximar o termo difusivo restante por diferenças centrais da seguinte forma

$$\Gamma^\phi \nabla^2 \phi = \Gamma^\phi \frac{\Phi_1 - 2\phi_{ip} + \Phi_2}{(L/2)^2} \quad (24)$$

Substituindo esta expressão na Eq. (23) e reagrupando, temos a expressão que fornece o valor de ϕ no ponto de integração ip , como

$$\phi_{ip} = \frac{Pe\phi_{up} + \Phi_1 + \Phi_2}{(Pe + 2)} \quad (25)$$

onde o valor de ϕ_{up} é dado pela Eq. (20) e o número de Peclet baseado na malha é dado por

$$Pe = \frac{\rho V(L/2)}{\Gamma^\phi} \tag{26}$$

Note que, na Eq. (25) a variação do número de Peclet fornece

$$\phi_{ip} = \frac{\Phi_1 + \Phi_2}{2} \quad p/(Pe \rightarrow 0) = (CDS) \tag{27}$$

$$\phi_{ip} = \phi_{up} \quad p/(Pe \rightarrow \infty) = (Skew2-UDS) \tag{28}$$

2.5. Condições de Contorno

A aplicação das condições de contorno dependerá do tipo da discretização escolhida, conforme ilustrado na Fig. (2.b) e (2.c). Considere primeiramente o caso em que a opção de discretização é a configuração dada pela Fig. (2.b). Os volumes que se encontram na fronteira do domínio tem seus centros localizados sobre essa fronteira. Portanto, para ϕ prescrito a equação do volume de fronteira passa assumir a forma $\phi = \phi_{prescrito}$. Em caso de fluxo prescrito, a equação do volume de fronteira é empregada e o fluxo conhecido acrescido ao termo fonte.

No segundo caso, onde a discretização adotada é dada pela configuração da Fig. (6), os volumes que se encontram na fronteira do domínio não terão seus centros localizados sobre a fronteira.

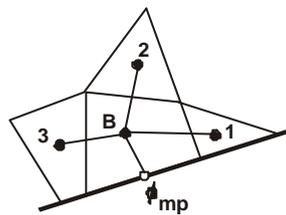


Figura 6. Volume de controle de fronteira com centro interno ao domínio.

Neste caso, se o valor no contorno é $\phi_{prescrito}$, a equação de conservação do volume de fronteira B , representado na Fig. (6), terá as contribuições referentes aos nós $1, 2, 3$ e mp , realizadas de acordo com a Eq. (5), observando que o ponto mp é o ponto médio da face pertencente à fronteira. O valor de ϕ_{mp} é tratado explicitamente, onde $\phi_{mp} = \phi_{prescrito}$, e uma parcela será adicionada ao termo fonte. Em caso de fluxo prescrito procede-se da mesma forma como no caso anterior, na equação do volume de fronteira é acrescido ao termo fonte o fluxo conhecido.

3. Resultados

Para avaliar o desempenho da formulação proposta o problema teste escolhido foi o transporte, com velocidade uniforme, de um salto na variável escalar ϕ . A equação governante deste problema é a Eq. (1), excluído o termo temporal e o termo fonte. A Figura (7) ilustra o problema.

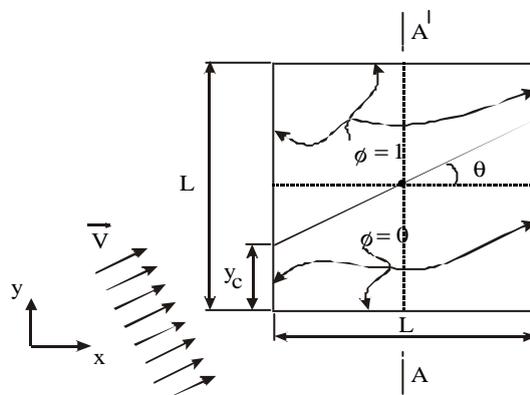


Figura 7. Transporte da variável ϕ , com velocidade uniforme.

A Figura (8.b) ilustra o formato da malha usada na obtenção da solução, onde variou-se o número de volumes em cada uma delas. A solução do problema foi obtida para $\theta = 0^\circ$, $\theta = 26,57^\circ$ e $\theta = 45^\circ$, e tamanhos da malhas aleatórias

iguais a 213, 437 e 833 volumes internos. Para a obtenção dos volumes de controle da discretização representada na Fig. (8.b), optou-se pelo método das medianas descrito anteriormente.

Os resultados obtidos nesta formulação também foram comparados com os resultados de outras metodologias (Maliska e Vasconcellos, 2000; Schneider e Raw, 1987), utilizando a discretização na forma dada pela Fig. (8.a). Como referência, é adotada a solução analítica aproximada apresentada por Raithby (1976).

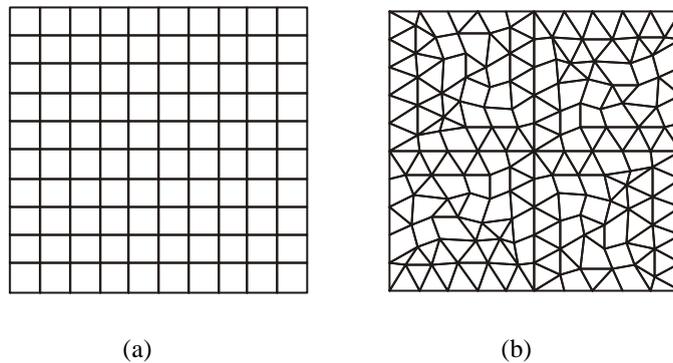


Figura 8. Formato de malhas utilizados na solução do problema proposto.

O problema teste foi resolvido para o número de Reynolds $Re=250$. As condições de contorno do problema ilustrado na Fig. (7) são $\phi=1$, acima da linha paralela ao escoamento e que passa através do centro do domínio e $\phi = 0$, abaixo dessa linha. A solução obtida é apresentada ao longo da seção AA' , onde $x = 0,25$. As Figuras (9) à (11) apresentam os resultados obtidos.

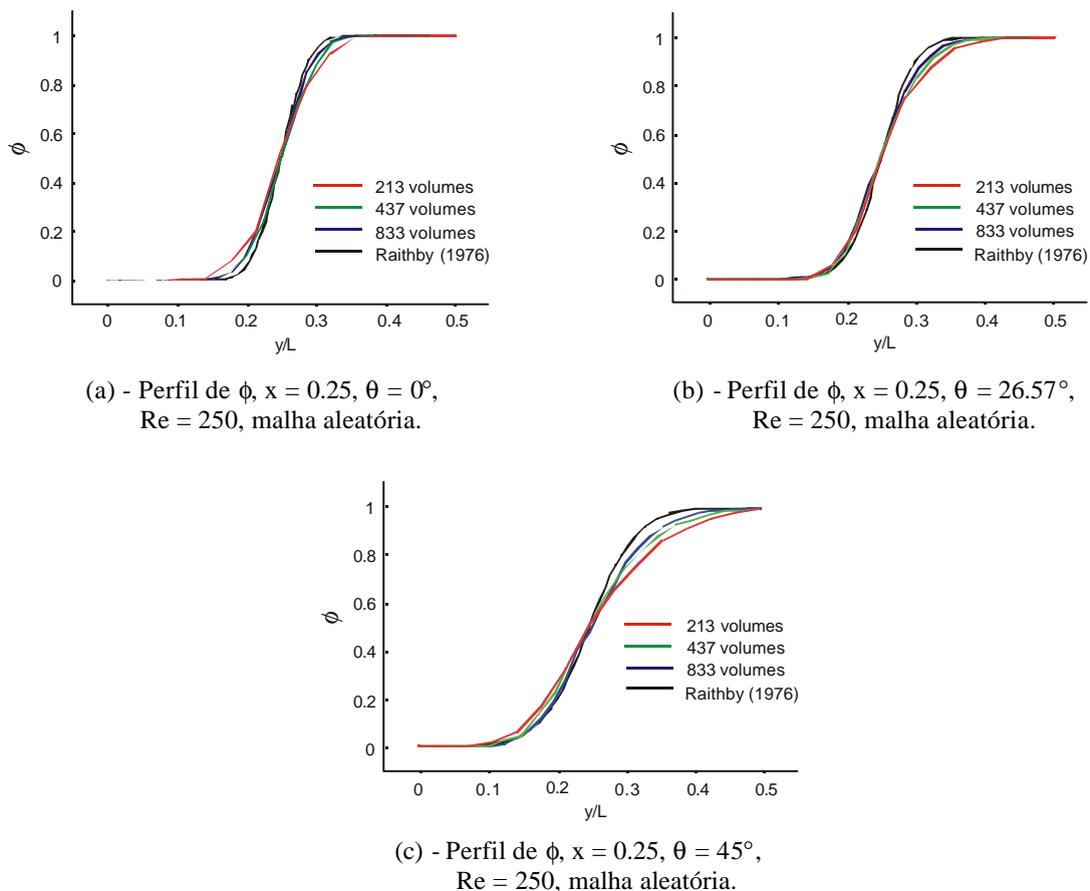


Figura 9. Resultados obtidos para o problema teste em malhas aleatórias, com esquema de interpolação convectivo dado pela Opção 3.

A Figura (9) apresenta os resultados obtidos na solução do problema teste para três ângulos e três tamanhos de malha, usando o esquema de interpolação convectivo dado pela Opção 3. Os resultados obtidos mostram que o refino da malha aproxima a solução numérica da solução de referência, validando o esquema numérico proposto.

Na Figura (10) temos a solução numérica obtida para as diferentes propostas de avaliação dos valores de ϕ nas interfaces dos volumes, com malha aleatória, no ângulo $\theta = 26.57^\circ$, que é o mais crítico. O esquema que possibilita correção adiada, Opção 2, mostrou-se bastante eficiente para este problema específico, reduzindo a difusão numérica e aproximando mais a solução numérica da solução de referência em relação as outras soluções. O esquema de interpolação da Opção 1, entendido aqui como um skew de dois pontos, mostrou-se bastante promissor, e aparentemente, melhora a ordem de interpolação do esquema, uma vez que a solução aproximou-se bastante do esquema dado pela Opção 3, que como visto é de segunda ordem.

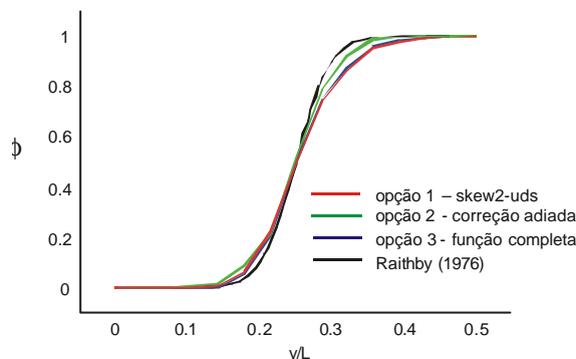


Figura 10. Perfil de ϕ e esquemas de interpolação ($x = 0.25$, $\theta = 26.57^\circ$, $Re = 250$, malha aleatória de 213 volumes).

Uma comparação geral entre as metodologias é apresentada na Fig. (11), onde uma malha retangular foi empregada para a solução do problema teste. As funções de interpolação utilizadas são as baseadas no número de Peclet da malha. Como se pode notar, a metodologia proposta apresenta desempenho intermediário entre a metodologia que utiliza um esquema de interpolação unidirecional, tanto nos termos convectivos como difusivos, e a metodologia que utiliza interpolações bidimensionais para estes termos.

Note que, a única perceptível diferença entre as metodologias usadas para a obtenção dos resultados da Fig. (11), para esta malha e este problema em particular, está no emprego das funções de interpolação. E, no caso das metodologias que usam esquemas de interpolação unidirecional, no esquema usado na avaliação dos termos convectivos. Isto reforça a idéia de que avaliação dos termos convectivos apresentada nesta proposta pela Eq.(20) melhora o desempenho do método.

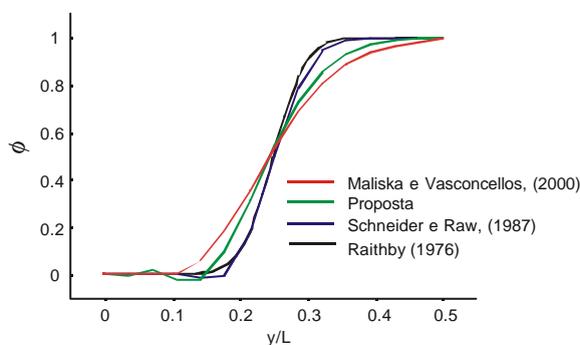


Figura 11. Perfil de ϕ para diferentes formulações ($x = 0.25$, $\theta = 26.57^\circ$, $Re = 250$, malha retangular 15 x 15).

4. Conclusões

O objetivo deste trabalho foi a implementação de uma metodologia, usando malhas não-estruturadas e formada por elementos unidirecionais, para a solução numérica da equação de conservação de uma variável escalar, com avaliação dos fluxos difusivos usando dois pontos, como nos esquemas numéricos vistos em (Heinemann e Brand, 1989; Quandalle, 1993; Sammon, 2000). A metodologia dos Diagramas de Voronoi (Maliska e Vasconcellos, 2000) e a metodologia (Schneider e Raw, 1987) serviram como referência para a comparação do desempenho da formulação aqui proposta.

Para validação dos esquemas numéricos apresentados, o problema teste escolhido foi o transporte, com convecção dominante, de um salto em uma variável escalar, que possui solução analítica aproximada dada por (Raithby, 1976).

A metodologia apresentada possui versatilidade na geração das malhas, admitindo o emprego de malhas não-estruturadas e estruturadas, priorizando a simplicidade na implementação dos algoritmos.

O emprego do esquema proposto de interpolação que segue a direção média do escoamento calculado entre dois pontos proporciona bons resultados para problemas de convecção dominante, e mostra-se promissor nas metodologias que utilizam esquemas de interpolação unidirecionais.

5. Referências

- Abdou, M.K., Pham, H.D., and Al-Aqueeli, A.S., 1991, , “Use of Orthogonal and Nonorthogonal Grids for the Simulation of Faulted Reservoir”, Paper SPE 21391 in SPE Middle East Oil Show held in Bahrain, pp. 443-456.
- Baliga, B.R. and Patankar, S.V., 1980, “A New Finite Element Formulation for Convection Diffusion Problems”, Numerical Heat Transfer, Vol.3, pp. 393-409.
- Hegre, T.M., Dalen, V., Henriquez, A., 1986, “Generalized Transmissibilities for Distorted Grids in Reservoir Simulation”, Paper SPE 15622, 61st Annual Techn. Conference and Exhibition of SPE, New Orleans, LA., pp. 15.
- Heinemann, Z.E. and Brand, C.W., 1989, “Gridding Techniques in Reservoir Simulation”, 1st/2nd Stanford Univ. and Leoben Mining Univ. Reservoir Simulation Inf. Forum, Alpbach, Austria, pp. 339-425.
- Maliska, C.R., 1995 “Transferência de Calor e Mecânica do Fluidos Computacional”, Ed. LTC, Rio de Janeiro, Brasil, 424 p.
- Maliska, C.R. and Vasconcellos, J.F.V, 2000, “An Unstructured Finite Volume Procedure for Simulating Flows with Moving Fronts”, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier Science S.A., Vol.182, pp. 401-420.
- Mathur, S.R, and Murthy, J.Y., 1997, “A Pressure Based Method for Unstructured Meshes”, Numerical Heat Transfer, part B, Vol.31, pp. 195-215.
- Peaceman, D.W., 1996, “Calculation of Transmissibilities of Gridblocks defined by arbitrary corner point geometry”, Paper SPE 37306, Unsolicited, pp. 28.
- Quandalle, P., 1993, “Eighth SPE Comparative Solution Project: Gridding Techniques in Reservoir Simulation”, Paper SPE 25263 presented at the 12st Symposium on Reservoir Simulation, New Orleans, LA, pp. 343-357.
- Raithby, G.D., 1976, “Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow”, Computational Method Applied Mechanical Engineering, Vol.9, pp. 153-164.
- Sammon, P.H., 2000, “Calculation of Convective and Dispersive Flows for Complex Corner Point Grids”, Paper SPE 62929 presented at the 2000 SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Dallas, Texas, pp. 11.
- Schneider, F.A. e Maliska, C.R., 2001, “Discretização de Equações para Problemas Convectivos-Difusivos Usando Elementos Unidirecionais”, Relatório Interno, SINMEC/EMC/UFSC, RT-2001-12, Florianópolis, SC, Brasil, pp.35.
- Schneider, G.E. and Raw, M.J., 1987, ”Control Volume Finite Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Co-located Variables – 2: Application and Validation”, Numerical Heat Transfer, Vol.11, pp. 391-400.
- Taniguchi, N. and Kobayashi, T., 1991, “Finite Volume Method on the Unstructured Grid System”, Computer & Fluids, Vol.9, n°.34, pp. 287-295.

NUMERICAL SOLUTIONS FOR CONVECTIVE-DIFFUSIVE PROBLEMS USING THE FINITE VOLUME METHOD FOR UNSTRUCTURED GRIDS

Fábio A. Schneider

SINMEC – Computational Fluid Dynamics Laboratory
 Mechanical Engineering Department – UFSC – P.O. Box 476 – 88040-970 – Florianópolis – SC, Brazil
schneider@sinmec.ufsc.br

Clovis R. Maliska

SINMEC – Computational Fluid Dynamics Laboratory
 Mechanical Engineering Department – UFSC – P.O. Box 476 – 88040-970 – Florianópolis – SC, Brazil
maliska@sinmec.ufsc.br

Abstract. *This work presents a numerical method for the solution of the convection/diffusion equation for a scalar variable, using the Finite Volume Method in unstructured grids. These grids have better adaptive ness for simple and complex domains, allowing that local refinement in specific regions. The employed mesh and the construction of the control volumes are based on the element discretization, what it facilitates the computational implementation. The formulation is presented in the basic form. The presented method is compared with other numerical methods that use unstructured grids.*

Keywords. *numerical method, unstructured grids, fluid flow.*