ENGENHARIA QUÍMICA
Universidade Federal de Goiás

Método dos Volumes Finitos (MVF) aplicado a problemas envolvendo Difusão e Advecção

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
Disciplina: Introdução à Fluidodinâmica Computacional
site: www.dyrney.com

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

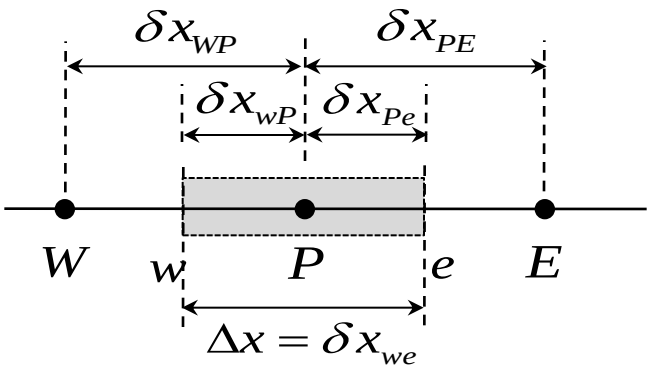
5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

Observação 45: Nesta primeira análise, iremos considerar que o campo de velocidade é, de alguma forma, conhecido, ou seja, as componentes do vetor velocidade nas faces dos volumes já são dadas e não precisam ser calculadas (u_e, u_w, v_n, v_s, w_b e w_t). No próximo capítulo iremos discutir como calcular o campo de velocidade.

Considere a equação de transporte contendo apenas o termo difusivo e o termo advectivo na forma integral:

$$\int_A \vec{n}.\left(\rho\vec{V}\phi\right)dA = \int_A \vec{n}.\left(\Gamma\ \nabla\phi\right)dA$$

Termo Advectivo — Termo Difusivo



Considerando um problema unidimensional e integrando a equação acima sobre o volume centrado em *P*, tem-se:

$$\left(\rho u A\phi\right)_e - \left(\rho u A\phi\right)_w = \left(\Gamma A\frac{d\phi}{dx}\right)_e - \left(\Gamma A\frac{d\phi}{dx}\right)_w \qquad \textit{Eq. 5.1}$$

Por conveniência, iremos definir o fluxo advectivo (*F*) e a condutância difusiva (*D*) nas faces das células como sendo:

$$F = \rho u \quad \text{e} \quad D = \frac{\Gamma}{\delta x}$$

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

Logo, teremos, nas faces dos volumes:

$$\begin{cases} F_w = (\rho u)_w ; \ \mathrm{D}_w = \dfrac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} \\ F_e = (\rho u)_e ; \ \mathrm{D}_e = \dfrac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} \end{cases}$$

Como feito anteriormente, iremos empregar Diferenças Centradas para os termos difusivos (os termos advectivos irão ser tratados posteriormente). Considerando $A_w = A_e = A$, substituindo os termos acima na Eq. 5.1 e dividindo por A, tem-se:

$$F_e\phi_e - F_w\phi_w = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \qquad \textit{Eq. 5.2}$$

Observação 46: **Como assumimos, neste primeiro momento, que as componentes do vetor velocidade nas faces dos volumes já são dadas e não precisam ser calculadas, F_e e F_w são conhecidos, por enquanto.**

Observação 47: **Para resolver a Eq. 5.2, teremos que estimar os valores de ϕ nas faces do volume (ϕ_e e ϕ_w). Como ϕ é analisado somente nos centros dos volumes, uma função de interpolação terá que ser assumida. Lembre-se que, por enquanto, assumimos Diferenças Centradas apenas para avaliar os gradientes de ϕ para os termos difusivos e não o valor de ϕ.**

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

a) Diferenças Centradas

Considerando como primeira aproximação para o termo advectivo Diferenças Centradas e que a malha seja uniforme, tem-se:

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

Substituindo estes termos na Eq. 5.2, teremos:

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

Aplicando a propriedade distributiva e agrupando os termos em comum, a equação padrão do MVF se torna:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E$$

Eq. 5.3

sendo

$$\begin{cases} a_E = D_e - \dfrac{F_e}{2} \\ a_W = D_w + \dfrac{F_w}{2} \\ a_P = a_W + a_E + \left(F_e - F_w\right) \end{cases}$$

Observação 48: Observe que, quando se usou Diferenças Centradas para o termo advectivo, foram obtidos coeficientes que nem sempre serão positivos a depender dos valores de *F* e de *D*, como veremos a seguir. Como discutido anteriormente, coeficientes negativos podem levar a instabilidades numéricas e soluções fisicamente incoerentes.

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

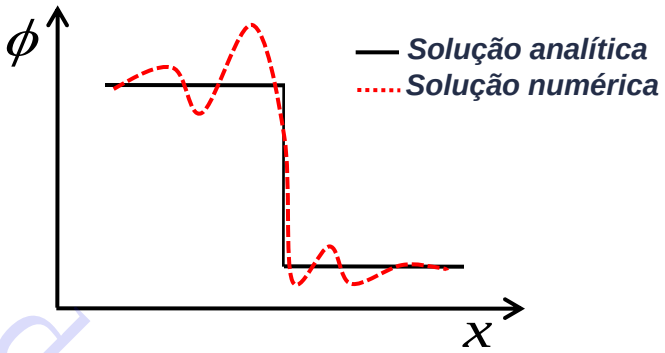
5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

a) Diferenças Centradas

Um aumento na variável ϕ em uma determinada célula computacional, deve resultar em um aumento de ϕ nos seus vizinhos. Isto significa que, para se ter um comportamento fisicamente coerente, todos os coeficientes da equação padrão do MVF devem ser positivos.

O uso de diferenças centrais em problemas de advecção dominante ocasiona, em geral, oscilações numéricas conduzindo a soluções não-realísticas



Pode-se definir um número adimensional que "mede" as "forças relativas" entre a advecção e a difusão em um determinado problema físico, conhecido como número de Peclet (*Pe*)

Jean Claude Eugène Péclet (1793 – 1857) (Físico francês)

$$Pe = \frac{F}{D} = \frac{\rho u}{\Gamma/\delta x}$$

sendo

$$\begin{cases} Pe \to 0 \Rightarrow \text{ difusão pura} \\ Pe \to \infty \Rightarrow \text{ advecção pura} \end{cases}$$

Observação 49: **Quanto maior *Pe*, maior a instabilidade e mais fisicamente incoerente será a solução numérica quando se utiliza Diferenças Centradas para o termo advectivo**

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

a) Diferenças Centradas

Reescrevendo os coeficientes da Eq. 5.3, tem-se:

$$\begin{cases} a_E = D_e - \dfrac{F_e}{2} \\ a_W = D_w + \dfrac{F_w}{2} \\ a_P = a_W + a_E + \left(F_e - F_w\right) \end{cases}$$

Começando pela análise do a_P, a equação da continuidade para um escoamento unidimensional e incompressível é dada por:

$\dfrac{d(\rho u)}{dx} = 0$, **que após discretizada se torna:** $(\rho u A)_e - (\rho u A)_w = 0$, **ou seja:** $\boxed{F_e - F_w = 0}$

Desta forma, o critério para se ter uma solução fisicamente coerente (coeficientes positivos) quando se usa Diferenças Centradas para o termo advectivo recai no coeficiente a_E. Logo, considerando $F_w > 0$ e $F_e > 0$ (escoamento unidirecional), deve-se ter:

$$D_e - \frac{F_e}{2} > 0 \Rightarrow \boxed{Pe < 2}$$ **, ou, de outra forma:** $\boxed{\dfrac{\rho u \delta x}{\Gamma} < 2}$

Observação 50: Observe que, quanto maior o fluxo mássico (ρu) frente ao coeficiente de difusão (Γ), mais refinada deve ser a malha computacional (menor valor de δx) quando se utiliza Diferenças Centradas para o termo advectivo. Isto, de certo modo, inviabiliza o seu uso em casos de problemas com advecção.

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

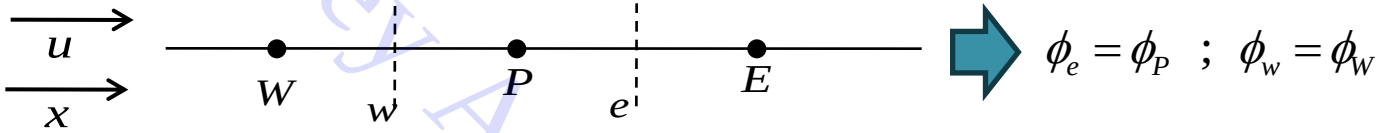
5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

b) Upwind

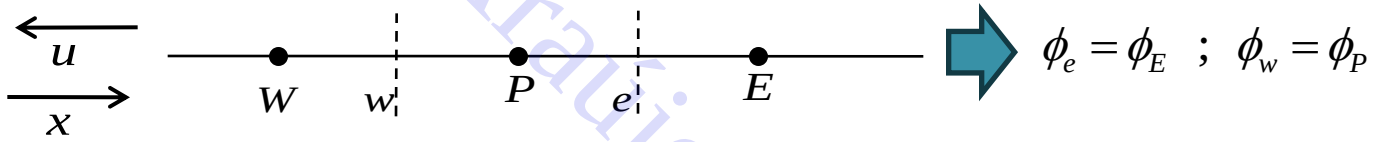
O esquema de interpolação Upwind considera que o valor da variável ϕ, na face do volume, transportada por advecção será igual ao valor no volume a montante da face considerada.

Exemplo:

- **Para *u* positivo:**



- **Para *u* negativo:**



Aplicando Upwind para o termo advectivo e Diferenças Centradas para o termo difusivo, a equação padrão do MVF se torna:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E$$ **sendo** $$\begin{cases} a_E = D_e + máx(0, -F_e) \\ a_W = D_w + máx(F_w, 0) \\ a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \end{cases}$$

Eq. 5.4

Observação 51: **A função "*máx*" utilizada nos coeficientes denota o máximo valor entre parênteses, o que possibilita determinar o sentido do fluxo mássico e, consequentemente, o valor de ϕ correto nas faces.**

Ex: Se o fluxo estiver no sentido positivo, F_e e F_w são positivos, logo:

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

Caso contrário, F_e e F_w são negativos, logo:

$$a_E = D_e + F_e \text{ e } a_w = D_w$$

Nota-se que, independente do sentido do fluxo, todos os coeficientes são sempre positivos!!

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

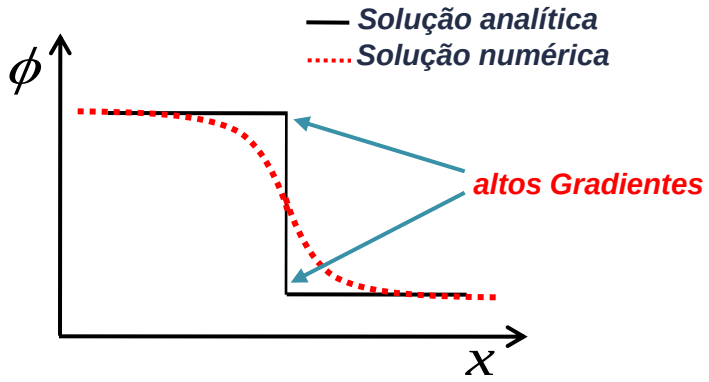
Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

b) Upwind

O uso de Upwind em problemas de advecção dominante gera soluções fisicamente coerentes, porém suaviza os altos gradientes introduzindo a chamada "Difusão Numérica" ou "Falsa Difusão".



Observação 52: A função de interpolação Diferenças Centradas é classificada, em termos de acurácia, como sendo de 2ª ordem, enquanto o Upwind é classificado como sendo de 1ª ordem. As funções de interpolação de 1ª ordem normalmente causam a "Falsa Difusão", ou seja, suaviza altos gradientes, quando o escoamento não está alinhado com as linhas da malha computacional.

Observação 53: O conceito de 1ª, 2ª etc. ordem de acurácia da função de interpolação está relacionado à aproximação por uma série de Taylor truncada até um determinado termo para se tornar igual à própria função de interpolação. O termo de truncamento, ou seja, o termo que será desprezado, pode ser função de Δx, Δx^2, Δx^3 etc. (espaçamento da malha). Por exemplo, se o termo de truncamento depende de Δx, o erro da aproximação diminui com a diminuição proporcionou de Δx, sendo então de 1ª ordem de acurácia (Ex.: Upwind). Por outro lado, se o termo de truncamento depende de Δx^2, o erro da aproximação diminui com o quadrado de Δx, sendo então de 2ª ordem de acurácia (Ex.: Diferença Centrada). Desta forma o erro numérico de uma função de 2ª ordem diminui mais rapidamente com o refino da malha do que o de 1ª ordem. Uma outra forma de verificar esta classificação é perceber que a função Upwind usa apenas um ponto da malha para estimar o valor na face da célula (1ª ordem), enquanto a Diferenças Centradas utiliza dois pontos da malha (2ª ordem). Logo, é de se esperar, o que realmente acontece, que uma função de 3ª ordem irá estimar um valor na face se baseando em três pontos da malha computacional.

Para maiores detalhes ver "Apêndice A" do livro VERSTEEG e MALALASEKERA (2007).

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

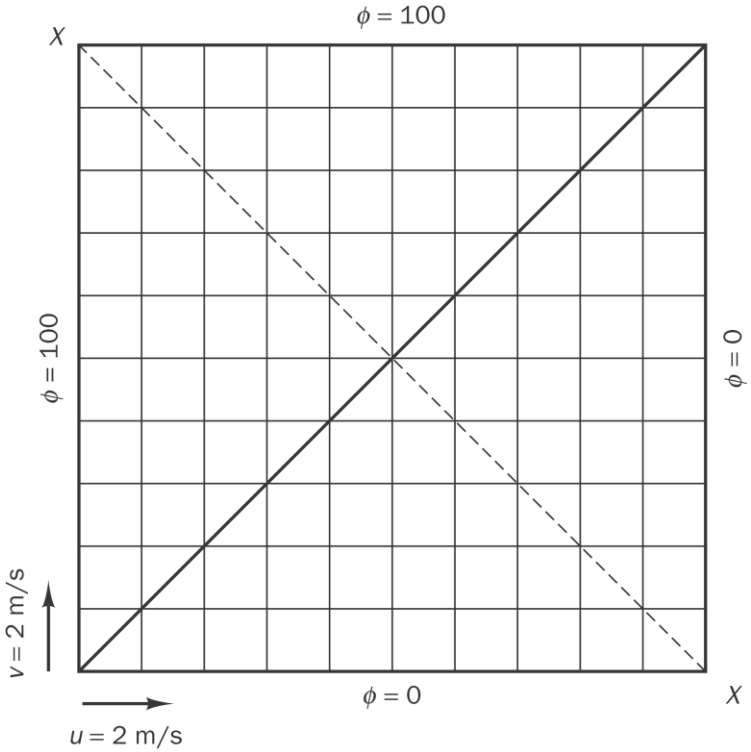
5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

b) Upwind

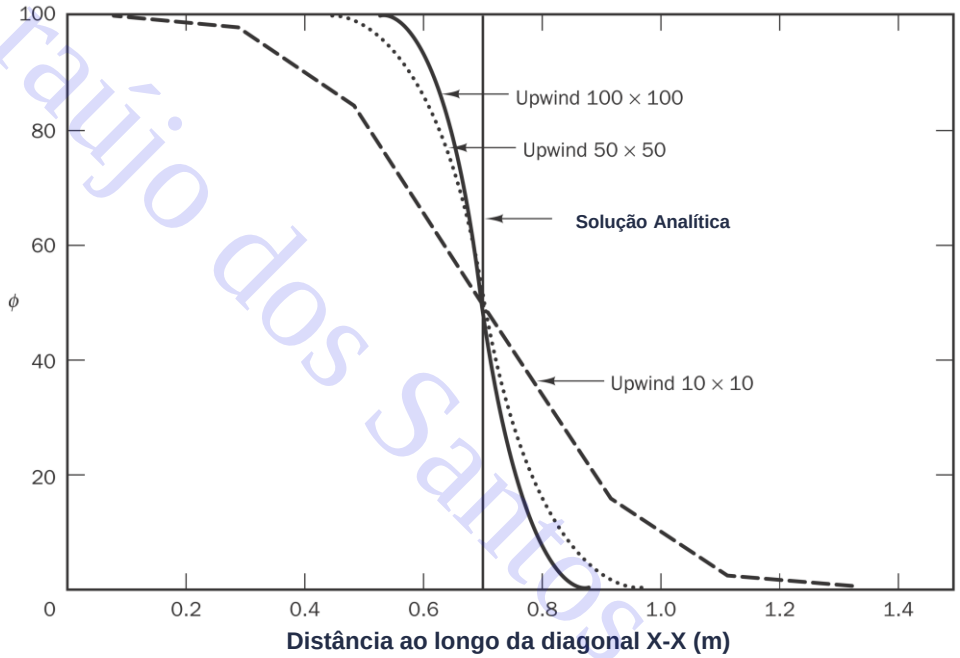
Exemplo de "Falsa Difusão" utilizando o Upwind para um escoamento não alinhado com as linhas da malha computacional:

Considere um problema puramente advectivo com as condições de contorno dadas na malha computacional abaixo e a solução numérica, para diferentes refinos da malha computacional, sendo comparada com a solução analítica.

Malha computacional e condições de contorno



Soluções numéricas para diferentes refinos da malha (10×10, 50×50 e 100×100) comparada com a solução analítica



Fonte: VERSTEEG e MALALASEKERA (2007)

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.1 Problema de Difusão e Advecção Unidimensional, em Estado Estacionário e sem Termo Fonte

c) Esquema Híbrido (Spalding, 1972)

É uma combinação entre o esquema de interpolação de 2ª ordem Diferenças Centradas (para Pe < 2) e o esquema de 1ª ordem Upwind (para Pe ≥ 2).

A equação padrão do MVF para o esquema Híbrido pode ser escrita como:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E \quad \text{sendo} \quad \begin{cases} a_E = máx\left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2}\right), 0\right] \\ a_W = máx\left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2}\right), 0\right] \\ a_P = a_W + a_E + \left(F_e - F_w\right) \end{cases}$$

Observação 54: **É fácil de verificar que se Pe < 2, os coeficientes se tornam iguais aos da utilização da Diferenças Centradas para o termo advectivo (Eq. 5.3), enquanto para Pe > 2, esta equação se torna a equação para Upwind (Eq. 5.4).**

Observação 55: **Como este esquema muda automaticamente a depender de *Pe*, ele sempre garante coeficientes positivos, ou seja, resultados fisicamente coerentes. Porém, ainda causa "Difusão Numérica" pois em altos valores de *Pe* ele representa um esquema de 1ª ordem.**

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.2 Problema de Difusão e Advecção Bidimensional, Transiente e com Termo Fonte

Vimos que a forma geral da equação de transporte (integral) para uma propriedade "ϕ" qualquer é dada por:

$$\underbrace{\int_{\Delta t}\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{VC}\rho\phi d\vartheta\right)dt}_{\text{Termo Transiente}}+\underbrace{\int_{\Delta t}\int_{A}\vec{n}.\left(\rho\vec{V}\phi\right)dAdt}_{\text{Termo Advectivo}}=\underbrace{\int_{\Delta t}\int_{A}\vec{n}.\left(\Gamma\ \nabla\phi\right)dAdt}_{\text{Termo Difusivo}}+\underbrace{\int_{\Delta t}\int_{VC}S_{\phi}d\vartheta dt}_{\text{Termo Fonte}}$$

Considerando um esquema implícito para o termo transiente, Diferenças Centradas para o termo difusivo e o esquema Híbrido para o termo advectivo, a equação discretizada para um problema bidimensional se torna:

$$a_P\phi_P=a_W\phi_W+a_E\phi_E+a_S\phi_S+a_N\phi_N+a_P^0\phi_P^0+S_u$$

sendo:

$$a_P=a_W+a_E+a_S+a_N+a_P^0+\Delta F-S_P$$

$$a_P^0=\rho_P^0\,\Delta x\Delta y/\Delta t$$

$$a_W=máx\left[F_w,\left(D_w+F_w/2\right),0\right]$$

$$a_E=máx\left[-F_e,\left(D_e-F_e/2\right),0\right]$$

$$a_S=máx\left[F_s,\left(D_s+F_s/2\right),0\right]$$

$$a_N=máx\left[-F_n,\left(D_n-F_n/2\right),0\right]$$

$$F_w=\left(\rho u\right)_w\Delta y$$

$$F_e=\left(\rho u\right)_e\Delta y$$

$$F_s=\left(\rho v\right)_s\Delta x$$

$$F_n=\left(\rho v\right)_n\Delta x$$

$$\Delta F=F_e-F_w+F_n-F_s$$

$$D_w=\left(\Gamma_w/\delta x_{WP}\right)\Delta y$$

$$D_e=\left(\Gamma_e/\delta x_{PE}\right)\Delta y$$

$$D_s=\left(\Gamma_s/\delta y_{SP}\right)\Delta x$$

$$D_n=\left(\Gamma_n/\delta y_{PN}\right)\Delta x$$

Observação 56: **Lembrando que estamos considerando, por enquanto, que conhecemos o campo de velocidade.**

Estes coeficientes são facilmente modificados para se obter Diferenças Centradas ou Upwind "puros" para os termos advectivos.

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.3 Problema de Difusão e Advecção Tridimensional, Transiente e com Termo Fonte

Vimos que a forma geral da equação de transporte (integral) para uma propriedade "ϕ" qualquer é dada por:

$$\underbrace{\int_{\Delta t}\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{VC}\rho\phi\, d\vartheta\right)dt}_{\text{Termo Transiente}}+\underbrace{\int_{\Delta t}\int_{A}\vec{n}.\left(\rho\vec{V}\phi\right)dA dt}_{\text{Termo Advectivo}}=\underbrace{\int_{\Delta t}\int_{A}\vec{n}.\left(\Gamma\ \nabla\phi\right)dA dt}_{\text{Termo Difusivo}}+\underbrace{\int_{\Delta t}\int_{VC}S_{\phi}\, d\vartheta dt}_{\text{Termo Fonte}}$$

Considerando um esquema implícito para o termo transiente, Diferenças Centradas para o termo difusivo e o esquema Híbrido para o termo advectivo, a equação discretizada para um problema tridimensional se torna:

$$a_P\phi_P=a_W\phi_W+a_E\phi_E+a_S\phi_S+a_N\phi_N+a_B\phi_B+a_T\phi_T+a_P^0\phi_P^0+S_u$$

sendo:

$$a_P=a_W+a_E+a_S+a_N+a_B+a_T+a_P^0+\Delta F-S_P$$

$$a_P^0=\rho_P^0\,\Delta x\Delta y\Delta z/\Delta t$$

$$a_W=máx\left[F_w,\left(D_w+F_w/2\right),0\right]$$

$$a_E=máx\left[-F_e,\left(D_e-F_e/2\right),0\right]$$

$$a_S=máx\left[F_s,\left(D_s+F_s/2\right),0\right]$$

$$a_N=máx\left[-F_n,\left(D_n-F_n/2\right),0\right]$$

$$a_B=máx\left[F_b,\left(D_b+F_b/2\right),0\right]$$

$$a_T=máx\left[-F_t,\left(D_t-F_t/2\right),0\right]$$

$$F_w=\left(\rho u\right)_w\Delta y\Delta z \qquad D_w=\left(\Gamma_w/\delta x_{WP}\right)\Delta y$$

$$F_e=\left(\rho u\right)_e\Delta y\Delta z \qquad D_e=\left(\Gamma_e/\delta x_{PE}\right)\Delta y$$

$$F_s=\left(\rho v\right)_s\Delta x\Delta z \qquad D_s=\left(\Gamma_s/\delta y_{SP}\right)\Delta x$$

$$F_n=\left(\rho v\right)_n\Delta x\Delta z \qquad D_n=\left(\Gamma_n/\delta y_{PN}\right)\Delta x$$

$$F_b=\left(\rho w\right)_b\Delta x\Delta y \qquad D_b=\left(\Gamma_b/\delta z_{BP}\right)\Delta x\Delta y$$

$$F_t=\left(\rho w\right)_t\Delta x\Delta y \qquad D_t=\left(\Gamma_n/\delta z_{PT}\right)\Delta x\Delta y$$

$$\Delta F=F_e-F_w+F_n-F_s+F_t-F_b$$

Observação 57:
Lembrando que estamos considerando, por enquanto, que conhecemos o campo de velocidade.

Estes coeficientes são facilmente modificados para se obter Diferenças Centradas ou Upwind "puros" para os termos advectivos.

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

5. MVF para Problemas Difusivos e Advectivos

5.4 Esquemas de Interpolação de Ordens Superiores para o Termo Advectivo

Vimos que o esquema Upwind evita a instabilidade numérica e garante que todos os coeficientes serão positivos. Porém, este esquema é de 1ª ordem de acurácia (causa "Difusão Numérica"), logo precisamos buscar esquemas estáveis mas de ordens superiores.

Alguns esquemas de interpolação para o termo advectivo de ordens superiores são:

- **QUICK (Quadratic Upwind);**
- **Upwind de Segunda Ordem;**
- **Esquemas TVD (Total Variation Diminishing)**
  - ✓ **Van Leer (Van Leer, 174);**
  - ✓ **Van Albada (Van Albada et al., 1982);**
  - ✓ **Mid-Mod (Roe, 1985);**
  - ✓ **UMIST (Lien e Leschziner, 1993);**
  - ✓ **etc.**

Para maiores detalhes destes esquemas de ordens superiores, ver, por exemplo, VERSTEEG e MALALASEKERA (2007).

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

Bibliografia

VERSTEEG, H.K.; MALALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, 2nd ed. Pearson Education Ltd.: Harlow, UK, 2007.

MALISKA, C.R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, Livros Técnicos e Científicos Editora S/A, 2ª Edição Revista e Ampliada, 2004.

PATANKAR, S.V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, Taylor & Francis Group. New York, 1980.

Prof. Dyrney Araújo dos Santos