ENGENHARIA QUÍMICA
Universidade Federal de Goiás

Método dos Volumes Finitos (MVF) aplicado a problemas de Difusão Pura em Estado Transiente

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

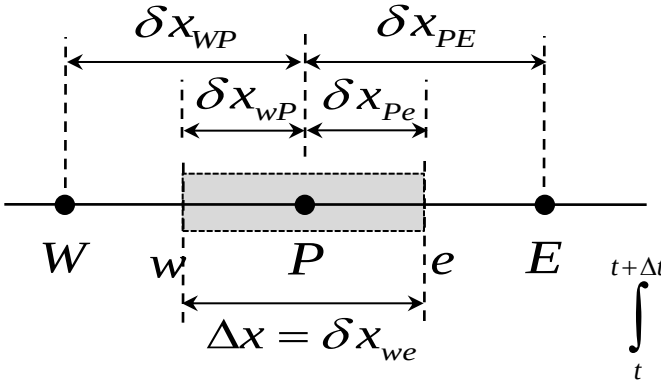
4. MVF para Problemas Difusivos Transientes

4.1 Difusão Unidimensional em Estado Transiente

Considere a equação da condução de calor transiente e com termo fonte na sua forma integral:

$$\int_{\Delta t}\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{VC}\rho c_p T d\vartheta\right)dt=\int_{\Delta t}\int_{A}\vec{n}.\left(k\nabla T\right)dA dt+\int_{\Delta t}\int_{VC}S_\phi d\vartheta dt$$

Termo Transiente | **Termo Difusivo** | **Termo Fonte**



Integrando sobre o volume centrado em *P* e sobre um intervalo de tempo *Δt*, tem-se:

$$\int_{t}^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{VC}\rho c_p T d\vartheta\right)dt=\int_{t}^{t+\Delta t}\left[\left(kA\frac{\partial T}{\partial x}\right)_e-\left(kA\frac{\partial T}{\partial x}\right)_w\right]dt+\int_{t}^{t+\Delta t}\bar{S}\Delta\vartheta dt$$

Considerando que *T* prevalece sobre todo o volume de controle considerado e que ρc_p é constante, o lado esquerdo da equação acima se torna:

$$\int_{t}^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{VC}\rho c_p T d\vartheta\right)dt=\rho c_p\frac{\left(T_P-T_P^o\right)}{\Delta t}\Delta t\Delta\vartheta=\rho c_p\left(T_P-T_P^o\right)\Delta\vartheta$$

Observação 42: **Foi considerado para o termo transiente uma função de interpolação linear de primeira ordem, conhecida como Esquema de Euler (*Backward Euler*). O sobrescrito "o" indica a variável no tempo anterior e sem o sobrescrito, a variável no tempo atual.**

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

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

4. MVF para Problemas Difusivos Transientes

4.1 Difusão Unidimensional em Estado Transiente

Considerando, também, Diferenças Centradas para os fluxos difusivos nas faces, tem-se:

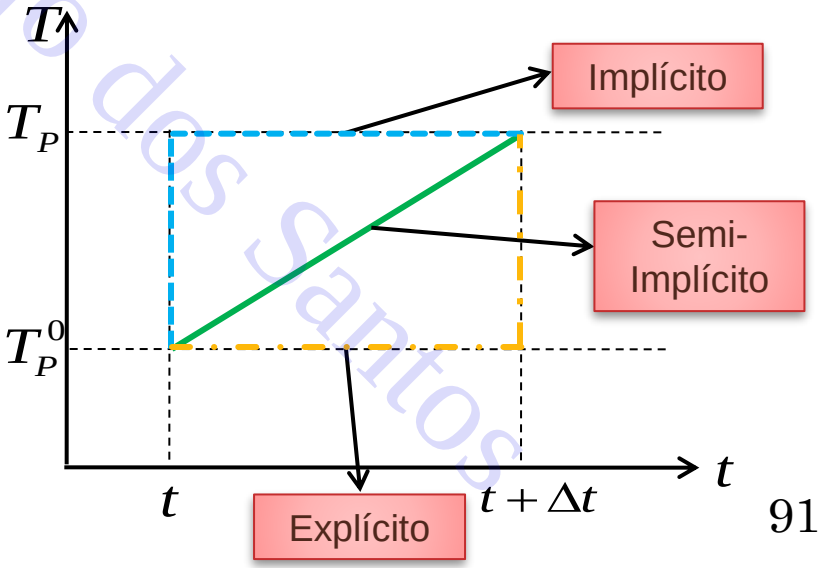
$$\rho c_p \left(T_P - T_P^o\right)\Delta\vartheta = \int_t^{t+\Delta t}\left[\left(k_e A\frac{\left(T_E - T_P\right)}{\delta x_{PE}}\right) - \left(k_w A\frac{\left(T_P - T_W\right)}{\delta x_{WP}}\right)\right]dt + \int_t^{t+\Delta t}\bar{S}\,\Delta\vartheta dt$$

Neste ponto é necessário fazer uma suposição do comportamento de T_P, T_E e T_W com o tempo. Muitas são disponíveis e alguma delas podem ser representadas, de uma forma geral, como abaixo, escrita para T_P:

$$\int_t^{t+\Delta t} T_P dt = \left[\, fT_P + (1-f)T_P^0 \,\right]\Delta t$$

Sendo *f* um fator de ponderação que varia entre 0 e 1

- Se *f* = 0 → Esquema Explícito
- Se *f* = 0,5 → Esquema Semi-Implícito ou Esquema de Crank-Nicolson
- Se *f* = 1 → Esquema Implícito



Prof. Dyrney Araújo dos Santos

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

4. MVF para Problemas Difusivos Transientes

4.1 Difusão Unidimensional em Estado Transiente

Utilizando-se da mesma formulação geral para T_E e T_W, substituindo na equação integral e dividindo tudo por $A \times \Delta t$, teremos (observando que $\Delta V = A \times \Delta x$):

$$\rho c_p \frac{\left(T_P - T_P^o\right)}{\Delta t}\Delta x = f\left[k_e \frac{\left(T_E - T_P\right)}{\delta x_{PE}} - k_w \frac{\left(T_P - T_W\right)}{\delta x_{WP}}\right] + \left(1-f\right)\left[k_e \frac{\left(T_E^0 - T_P^0\right)}{\delta x_{PE}} - k_w \frac{\left(T_P^0 - T_W^0\right)}{\delta x_{WP}}\right] + \bar{S}\Delta x$$

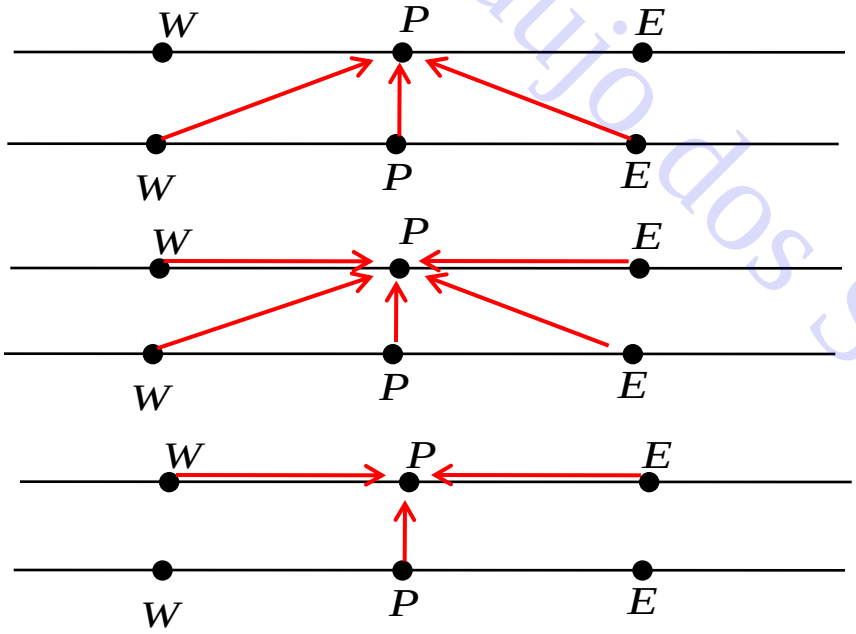
Após um rearranjo, a equação discretizada torna-se:

$$a_P T_P = a_W\left[f T_W + \left(1-f\right)T_W^0\right] + a_E\left[f T_E + \left(1-f\right)T_E^0\right] + \left[a_P^0 - \left(1-f\right)a_W - \left(1-f\right)a_E\right]T_P^0 + \bar{S}\Delta x$$

sendo

$$\begin{cases} a_P = f\left(a_W + a_E\right) + a_P^0 \;\; ; \;\; a_P^0 = \rho c_p \Delta x/\Delta t \\ a_W = k_w/\delta x_{WP} \;\; ; \;\; a_E = k_e/\delta x_{PE} \end{cases}$$

Conexões espacial e temporal do volume *P* a depender da interpolação temporal utilizada



Esquema Explícito: gera conjuntos de equações desacopladas (não necessita de método numérico)

Esquema Semi-Implícito: gera sistemas de equações acopladas (necessita de método numérico)

Esquema Implícito: gera sistemas de equações acopladas (necessita de método numérico)

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

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

4. MVF para Problemas Difusivos Transientes

4.2 Vantagens e Desvantagens das Funções de Interpolação Temporal Apresentadas

a) Esquema Explícito

i) Vantagens:

Todas as propriedades são calculadas no tempo atual com base nos valores no tempo anterior, logo, o resultado é um conjunto de equações algébricas lineares e não um sistema de equações algébricas lineares, não requerendo, desta forma, um método numérico para a sua solução.

Neste caso, o termo fonte é linearizado como: $\overline{S}\Delta x = S_u + S_p T_P^0$

Logo, a equação discretizada final pode ser representada como:

$$a_P T_P = a_W T_W^0 + a_E T_E^0 + \left[a_P^0 - \left(a_W + a_E - S_P \right) \right] T_P^0 + S_u$$

sendo

$$\begin{cases} a_P = a_P^0 \;\; ; \;\; a_P^0 = \rho c_p \, \Delta x / \Delta t \\ a_W = k_w / \delta x_{WP} \;\; ; \;\; a_E = k_e / \delta x_{PE} \end{cases}$$

ii) Desvantagens:

O esquema numérico só se torna estável e gera resultados fisicamente coerentes caso todos os coeficientes sejam positivos (esta é uma condição necessária e será vista com maiores detalhes neste curso). Logo, considerando uma malha uniforme, *k* constante e sem termo fonte, a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$a_P^0 > a_E + a_W \Rightarrow \Delta t < \rho c_p \frac{\Delta x^2}{2k}$$

Observação 43: Esta inequação impõem uma séria limitação para o uso do esquema explícito, visto que ao se buscar uma maior acurácia por meio do refino da malha computacional, o passo de tempo deve ser reduzido pelo quadrado de *Δx*.

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

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

4. MVF para Problemas Difusivos Transientes

4.2 Vantagens e Desvantagens das Funções de Interpolação Temporal Apresentadas

b) Esquema Implícito

i) Vantagens:

É um esquema intrinsecamente estável, ou seja, não limita o passo de tempo (os coeficientes são sempre positivos).

Neste caso, o termo fonte é linearizado como: $\overline{S}\Delta x = S_u + S_p T_P$

Logo, a equação discretizada final pode ser representada como:

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_P^0 T_P^0 + S_u$$

sendo

$$\begin{cases} a_P = a_P^0 + a_W + a_E - S_P \;\; ; \;\; a_P^0 = \rho c_p \Delta x / \Delta t \\ a_W = k_w / \delta x_{WP} \;\; ; \;\; a_E = k_e / \delta x_{PE} \end{cases}$$

ii) Desvantagens:

Visto que todas as propriedades são calculadas no tempo atual com base nos valores no tempo atual, este esquema gera sistemas de equações algébricas lineares contendo todas as equações acopladas, sendo, necessário, utilizar um método numérico para resolvê-las (Método TDMA, Método de Gauss-Seidel, etc.).

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

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

4. MVF para Problemas Difusivos Transientes

4.2 Vantagens e Desvantagens das Funções de Interpolação Temporal Apresentadas

c) Esquema Semi-Implícito ou de Crank-Nicolson

i) Vantagens:

A proposta de um perfil linear é uma boa representação da relação tempo-temperatura para intervalos de tempo pequenos.

Neste caso, o termo fonte é linearizado como: $\bar{S}\Delta x = S_u + \frac{1}{2}S_p T_P + \frac{1}{2}S_p T_P^0$

Logo, a equação discretizada final pode ser representada como:

$$a_P T_P = a_W\left(\frac{T_W + T_W^0}{2}\right) + a_E\left(\frac{T_E + T_E^0}{2}\right) + \left(a_P^0 + \frac{a_E}{2} - \frac{a_W}{2}\right)T_P^0 + S_u + \frac{1}{2}S_P T_P^0$$

sendo

$$\begin{cases} a_P = 1/2\left(a_W + a_E\right) + a_P^0 + -1/2\,S_P \;\; ; \;\; a_P^0 = \rho c_p\,\Delta x/\Delta t \\ a_W = k_w/\delta x_{WP} \;\; ; \;\; a_E = k_e/\delta x_{PE} \end{cases}$$

ii) Desvantagens:

Visto que este esquema é uma hibridação entre o explícito e o implícito, possuem as mesmas desvantagens do esquema explícito descritas anteriormente.

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

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

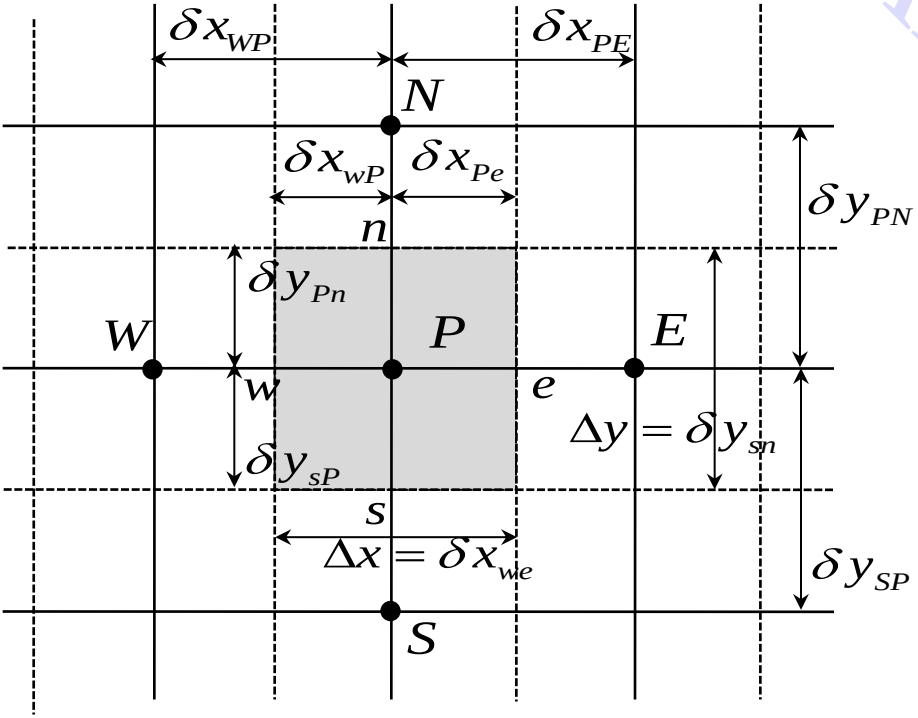
4. MVF para Problemas Difusivos Transientes

Observação 44: **O esquema implícito é o mais recomendado para simulações CFD devido à sua estabilidade intrínseca.**

4.3 Esquema Implícito para Difusão Bidimensional em Estado Transiente

A equação da condução de calor, transiente e com termo fonte na sua forma integral é dada por:

$$\int_{\Delta t}\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{VC}\rho c_p T d\vartheta\right)dt=\int_{\Delta t}\int_{A}\vec{n}.\left(k\nabla T\right)dA dt+\int_{\Delta t}\int_{VC}S_\phi d\vartheta dt$$



Logo, a equação discretizada para um problema bidimensional se torna:

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_S T_S + a_N T_N + a_P^0 T_P^0 + S_u$$

sendo

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

$$a_P^0 = \rho c_p \Delta x \Delta y / \Delta t$$

$$a_W = k_w \Delta y / \delta x_{WP}$$

$$a_E = k_e \Delta y / \delta x_{PE}$$

$$a_S = k_s \Delta x / \delta y_{SP}$$

$$a_N = k_n \Delta x / \delta y_{PN}$$

Prof. Dyrney Araújo dos Santos

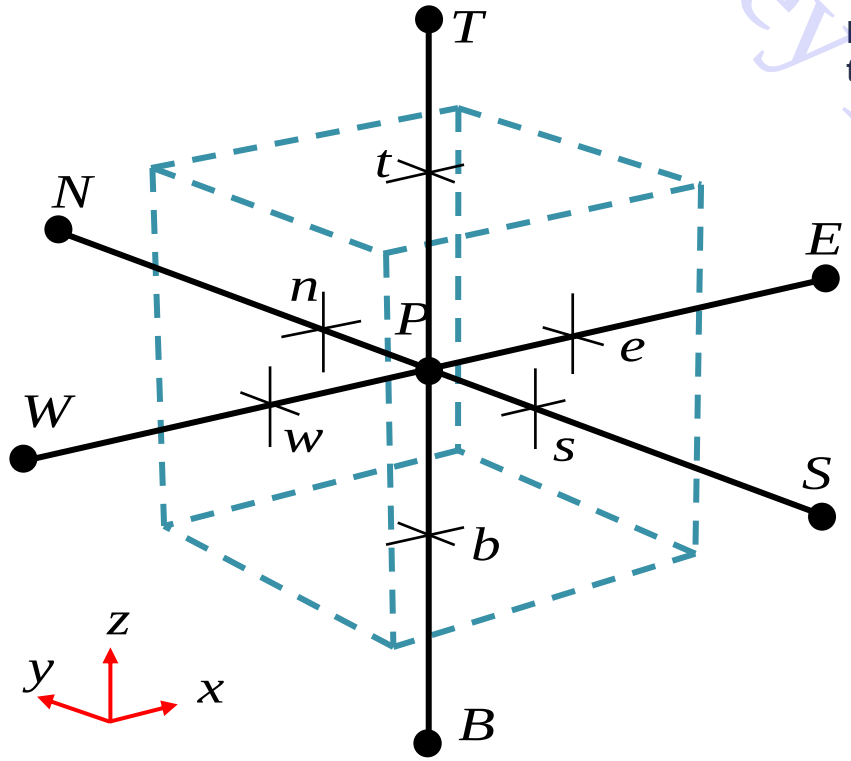
Professor Dyrney Araújo dos Santos
Universidade Federal de Goiás
Engenharia Química
site: www.dyrney.com

4. MVF para Problemas Difusivos Transientes

4.4 Esquema Implícito para Difusão Tridimensional em Estado Transiente

Novamente, a equação da condução de calor, transiente e com termo fonte na sua forma integral é dada por:

$$\int_{\Delta t}\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{VC}\rho c_p T d\vartheta\right)dt=\int_{\Delta t}\int_{A}\vec{n}.\left(k\nabla T\right)dA dt+\int_{\Delta t}\int_{VC}S_{\phi}d\vartheta dt$$



Logo, a equação discretizada para um problema tridimensional se torna:

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_S T_S + a_N T_N + \\ + a_B T_B + a_T T_T + a_P^0 T_P^0 + S_u$$

sendo

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

$$a_P^0 = \rho c_p \Delta x \Delta y \Delta z / \Delta t$$

$$a_W = k_w \Delta y \Delta z / \delta x_{WP}$$

$$a_E = k_e \Delta y \Delta z / \delta x_{PE}$$

$$a_S = k_s \Delta x \Delta z / \delta y_{SP}$$

$$a_N = k_n \Delta x \Delta z / \delta y_{PN}$$

$$a_B = k_b \Delta x \Delta y / \delta z_{BP}$$

$$a_T = k_t \Delta x \Delta y / \delta z_{PT}$$

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