

Formulação de volumes finitos para as faces

Diego Fernando Moro

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
Universidade Federal do Paraná
Curitiba-PR, Brasil
email: difmoro@gmail.com, difmoro@ufpr.br

Carlos Henrique Marchi

Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal do Paraná
Curitiba-PR, Brasil
email: chmcfd@gmail.com, marchi@ufpr.br

Resumo—Neste trabalho uma formulação alternativa de volumes finitos é apresentada, chamada de formulação de volumes finitos para as faces (VFF), a qual se baseia na aproximação numérica dos termos integrados pelo método de volumes finitos usando as faces dos volumes de controle. A maior vantagem desta formulação é que se torna desnecessário a aproximação dos termos advectivos das equações diferenciais, ou seja, os termos de derivada primeira na equação diferencial; é nestes termos que surgem os problemas de convergência que geram maior esforço computacional em CFD. Para apresentar esta formulação é realizado um experimento numérico com o problema de Burgers 1D usando, além da formulação VFF, as formulações de diferenças finitas (DF) e volumes finitos tradicional (VF). Foram simulados malhas compreendendo desde 4 volumes e 5 nós até 131.072 volumes e 131.073 nós, isto nas formulações VF, VFF usando os volumes e DF usando os nós. Foram utilizados aproximações de segunda ordem de acurácia, todas as variáveis foram calculadas utilizando precisão quádrupla (cerca de 34 algarismos significativos) e a parada do sistema iterativo ocorreu na tolerância de 10^{-30} na média da norma L1 do resíduo do sistema linear. Conclui-se que a formulação VFF é robusta e que possui uma característica nativa de suavização da solução numérica nos casos onde as outras formulações nem convergem para segunda ordem de acurácia, casos estes nos altos números de Reynolds. Lembrando que este comportamento só pode ser obtido na formulação tradicional ao utilizar métodos de redução da variação total (Total Variation Diminishing) o qual mescla aproximações de primeira e segunda ordens, mas na formulação VFF proposta neste trabalho este comportamento apresenta-se de forma nativa.

Palavras-chave—Volumes Finitos; Volumes Finitos para as Faces; Diferenças Finitas; CFD; Burgers 1D; TVD

I. INTRODUÇÃO

Os problemas na engenharia são atualmente resolvidos utilizando-se em conjunto a teoria e o empirismo. De qualquer forma, ao resolver os problemas utilizando a teoria, via modelos matemáticos, não se conhece a priori uma forma de resolvê-los analiticamente. Por este motivo utilizam-se métodos numéricos para sua resolução e geralmente estes modelos matemáticos são compostos por sistemas de equações diferenciais e/ou integrais.

Entre os métodos de resolução de equações diferenciais, o mais simples é o método das diferenças finitas [4] o qual se baseia na aproximação direta dos termos da equação diferencial ao longo dos nós da malha. Já o método dos volumes finitos [2] se baseia em discretizar o domínio em volumes de controle, no qual as equações de conservação são integradas,

os termos resultantes desta integração são aproximados sendo diferenciais ou integrais.

O objetivo deste trabalho é a geração de uma formulação de volumes finitos baseada na malha das faces dos volumes (que neste trabalho coincide com a malha de diferenças finitas utilizada), a qual facilita a aplicação das condições de contorno e torna desnecessária a aproximação das derivadas de primeira ordem na equação diferencial, os também chamados termos advectivos, que são o maior problema ao resolver com acurácia os modelos numéricos em CFD.

Para tanto será dado uma base no método das diferenças finitas aplicado a um problema modelo, em seguida será apresentado o método de volumes finitos para este mesmo modelo junto com a formulação proposta neste trabalho para o mesmo problema, as variáveis de interesse são apresentadas, os resultados e sua discussão e finalmente a conclusão do trabalho.

II. PROBLEMA MODELO - BURGERS 1D

O problema de Burgers 1D pode modelar o escoamento laminar unidimensional de um fluido com propriedades constantes. Sua equação diferencial é dada pela Eq. (1).

$$Re \frac{du^2}{dx} = \frac{d^2u}{dx^2} + S(x, Re) \quad (1)$$

onde Re é o número de Reynolds do escoamento, definido por $Re = \frac{\rho U L}{\mu}$.

III. DISCRETIZAÇÃO VIA MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

O método das diferenças finitas baseia-se na aproximação direta dos termos diferenciais da equação diferencial na malha. Uma malha genérica que será utilizada na discretização deste problema está mostrada na Fig. 1, onde o espaçamento h_d é dado por $h_d = \frac{L}{N-1}$, L é o comprimento do domínio na direção x e N é o número de nós da malha.

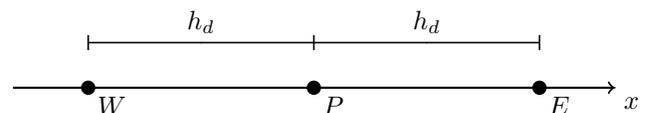


Figura 1. Malha genérica para a discretização do problema modelo usando diferenças finitas

As aproximações adotadas serão de segunda ordem de acurácia (CDS-2), dadas pelas Eqs. (2) e (3).

$$\left(\frac{du^2}{dx}\right)_P \approx \frac{u_E^2 - u_W^2}{2h_d} \quad (2)$$

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_P \approx \frac{u_E + u_W - 2u_P}{h_d^2} \quad (3)$$

O valor do termo $S(x, Re)$ será dado em cada nó P pela Eq. (4) para permitir uma solução fabricada na forma da Eq. (5), que pode ser obtida ao resolver analiticamente a equação diferencial $\frac{du^2}{dx} = \frac{1}{Re} \frac{d^2u}{dx^2}$ e aplicando as condições de contorno $u(0) = 0$ e $u(1) = 1$, mesmas condições de contorno que serão aplicadas no problema modelo.

$$S(x, Re) = Re^2 e^{xRe} \frac{2e^{xRe} - e^{Re} - 1}{(e^{Re} - 1)^2} \quad (4)$$

$$u(x) = \frac{e^{xRe} - 1}{e^{Re} - 1} \quad (5)$$

O comportamento da solução deste problema para alguns números de Reynolds: 1, 5, 25 e 125 é dado na Fig. 2.

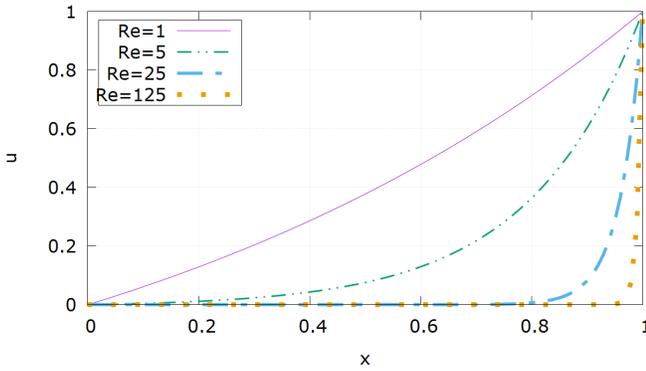


Figura 2. Comportamento da solução para $Re = 1, 5, 25$ e 125

Substituindo os termos da Eq. (1) com as aproximações dadas pelas Eqs. (2) e (3), também avaliando o termo $S(x, Re)$ em cada nó P pela Eq. (4) e chamando-a de S_P , teremos uma equação que se comparada à Eq. (6) (a equação geral do sistema linear tridiagonal) fornecerá os coeficientes e termos fontes dados na Eq. (7), notando a linearização onde o superescrito '*' denota a cada passo iterativo o valor conhecido da variável de interesse.

$$a_P u_P = a_e u_E + a_w u_W + b_P \quad (6)$$

$$\begin{aligned} P &= 2, \dots, N-1 \\ a_P &= 4 \\ a_e &= 2 - Reh_d u_E^* \\ a_w &= 2 + Reh_d u_W^* \\ b_P &= 2h_d^2 S_P \end{aligned} \quad (7)$$

Para finalizar, faltam apenas as condições de contorno, as quais são aplicadas diretamente nos nós coincidentes no contorno, ou seja, $u(1) = 0$ e $u(N) = 1$.

Assim é possível resolver a cada passo iterativo o sistema linear gerado com um método adequado; neste trabalho foi utilizado o método TriDiagonal Matrix Algorithm (TDMA) [7] o qual é direto a cada passo iterativo. O sistema teve que ser linearizado para ser resolvido com este *solver*, no entanto existem na literatura formas de resolução de sistemas de equação não lineares.

IV. DISCRETIZAÇÃO VIA MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

A formulação atual de volumes finitos, como pode ser vista em diversos autores [1, 2, 5, 7] é a discretização do volume finito considerando os valores nodais, os quais podem estar centrado entre as faces ou não. Esta abordagem se dá ao considerar o teorema do valor médio no interior dos volumes finitos. A malha genérica que será utilizada na discretização deste problema está mostrada na Fig. 3, onde o espaçamento h_v é dado por $h_v = \frac{L}{N_v}$ onde N_v é o número de volumes da malha.

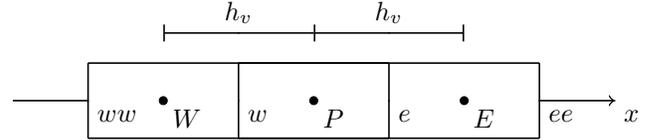


Figura 3. Malha genérica para a discretização do problema modelo usando volumes finitos

A discretização via volumes finitos baseia-se na integração da equação diferencial sobre cada volume de controle. Ao aplicar na aproximação da integral no termo fonte a regra do retângulo obtém-se assim a Eq. (8).

$$\begin{aligned} \int_w^e \left(Re \frac{du^2}{dx} \right) dx &= \int_w^e \left(\frac{d^2u}{dx^2} + S(x, Re) \right) dx \\ Re (u_e^2 - u_w^2) &= \left(\frac{du}{dx} \right)_e - \left(\frac{du}{dx} \right)_w + h_v S_P \end{aligned} \quad (8)$$

As aproximações para os termos presentes na Eq. (8) serão de segunda ordem de acurácia (CDS-2) dadas pelas Eqs. (9) e (10); novamente o superescrito '*' denota a cada passo iterativo o valor conhecido da variável de interesse.

$$\begin{aligned} u_e^2 &\approx u_e^* u_e = \frac{u_P^* + u_E^*}{2} \frac{u_P + u_E}{2} \\ u_w^2 &\approx u_w^* u_w = \frac{u_W^* + u_P^*}{2} \frac{u_W + u_P}{2} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{du}{dx} \right)_e &\approx \frac{u_E - u_P}{h_d} \\ \left(\frac{du}{dx} \right)_w &\approx \frac{u_P - u_W}{h_d} \end{aligned} \quad (10)$$

Substituindo as Eqs. (9) e (10) na Eq. (8), rearranjando os termos e comparando com a Eq. (6) obteremos os coeficientes e termos fontes dados pela Eq. (11).

$$\begin{aligned} P &= 2, \dots, N_v - 1 \\ a_P &= 8 + Reh_v (u_E^* - u_W^*) \\ a_e &= 4 - Reh_v (u_P^* + u_E^*) \\ a_w &= 4 + Reh_v (u_W^* + u_P^*) \\ b_P &= 4h_v^2 S_P \end{aligned} \quad (11)$$

A aplicação das condições de contorno foi realizada nas próprias aproximações da equação diferencial. Esta forma de aplicação é mais genérica e pode ser aplicada em qualquer caso, razão pela qual foi escolhida neste trabalho, assim os volumes vizinhos aos contornos, ou seja, $P = 1$ e $P = N_v$ terão os coeficientes e termos fontes dados pelas Eqs. (12) e (13) respectivamente ao aplicar as condições de contorno $u_w(0) = 0$ e $u_e(N_v) = 1$.

$$\begin{aligned} P = 1 \\ a_P = 12 - Reh_v(u_E + u_P) \\ a_e = 4 - Reh_v(u_P + u_E) \\ a_w = 0 \\ b_P = 4h_v^2 S_P \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} P = N_v \\ a_P = 12 - Reh_v(u_W + u_P) \\ a_e = 0 \\ a_w = 4 + Reh_v(u_W + u_P) \\ b_P = 8 + 4h_v(h_v S_P - Re) \end{aligned} \quad (13)$$

Desta forma, como no caso anterior, será utilizado o método TDMA para a resolução do sistema linear gerado a cada passo iterativo.

V. DISCRETIZAÇÃO VIA FORMULAÇÃO DE VOLUMES FINITOS PARA AS FACES

A formulação proposta por este trabalho é a discretização direta das faces dos volumes de controle (w e e na Fig. 3), ou seja, tirando a dependência dos nós dos volumes. Isto é feito da seguinte maneira: na Eq. (8) não será aplicado nenhuma aproximação para os termos da esquerda (advectivos) mas será aplicado uma aproximação envolvendo as faces vizinhas para os termos da direita (difusivos) na forma da Eq. (14), será aplicado ainda a regra do trapézio no termo fonte (a qual envolve as faces w e e) ao invés da regra do retângulo no caso anterior.

$$\begin{aligned} \left(\frac{du}{dx}\right)_e &\approx \frac{u_{ee} - u_w}{2h_v} \\ \left(\frac{du}{dx}\right)_w &\approx \frac{u_e - u_{ww}}{2h_v} \end{aligned} \quad (14)$$

Desta forma substituindo a Eq. (14) na Eq. (8), reorganizando os termos e modificando a aproximação da integral pela regra do trapézio, ficamos com a Eq. (15).

$$2Reh_v(u_e u_e^* - u_w u_w^*) = u_{ee} - u_w - u_e + u_{ww} + h_v^2(S_e + S_w) \quad (15)$$

onde os termos S_w e S_e são os termos fontes avaliados nas faces w e e dos volumes de controle.

O objetivo agora é organizar a Eq. (15) na forma da Eq. (16) a qual será quadradiagonal, assim obtêm-se os coeficientes e termos fontes da Eq. (17).

$$a_e u_e = a_w u_w + a_{ww} u_{ww} + a_{ee} u_{ee} + b_P \quad (16)$$

$$\begin{aligned} P = 2, \dots, N_v - 1 \\ a_{ww} = 1 \\ a_w = -1 + 2Reh_v u_w^* \\ a_e = 1 + 2Reh_v u_e^* \\ a_{ee} = 1 \\ b_P = (S_e + S_w) h_v^2 \end{aligned} \quad (17)$$

Foi escolhido neste trabalho resolver a face leste para todos os volumes de controle, lembrando que a face leste (e) do volume de controle P coincide com a face oeste (w) do volume de controle E . No entanto não exclui-se portanto a opção de resolver a face oeste (w) para todos os volumes de controle, o que dependendo da direção do escoamento pode ser aplicada.

Para aplicar as condições de contorno, surge a necessidade de realizar uma aproximação diferente no primeiro volume real, pois este não possuirá a face ww . Neste caso, portanto, a aproximação utilizada será de primeira ordem (a qual de forma superconvergente aumenta para segunda ordem de acurácia) envolvendo as faces w e e da forma da Eq. (18), assim ao substituir na Eq. (15) obteremos coeficientes e termos fontes na forma da Eq. (19).

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_w \approx \frac{u_e - u_w}{h_v} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} P = 1 \\ a_{ww} = 0 \\ a_w = -3 + 2Reh_v u_w \\ a_e = 2 + 2Reh_v u_e \\ a_{ee} = 1 \\ b_P = (S_e + S_w) h_v^2 \end{aligned} \quad (19)$$

Assim como no método de diferenças finitas, as condições de contorno serão aplicadas diretamente nas faces coincidentes dos contornos, ou seja, $u_w(P = 1) = 0$ e $u_e(P = N_v) = 1$ não há a necessidade portanto de resolver o volume $P = N_v$.

Diferente das outras formulações, o sistema gerado é quadradiagonal, ou seja, possui apenas quatro diagonais não nulas na matriz dos coeficientes; há mais um problema: o sistema gerado não é diagonal dominante, o que significa que um sistema iterativo convencional não deve convergir. Para vencer estes problemas foi implementado uma variação do TDMA considerando uma diagonal adicional, a qual não apresenta problemas de convergência por ser um método direto.

VI. VARIÁVEIS DE INTERESSE E CRITÉRIO DE PARADA DO SISTEMA ITERATIVO

Para analisar os resultados obtidos com as três formulações, Diferenças Finitas (DF), Volumes Finitos (VF) e Volumes Finitos para as Faces (VFF) do problema modelo foram separadas duas variáveis de interesse, uma pontual e outra global.

A variável de interesse pontual analisada é a velocidade no centro do domínio ($u_{1/2}$) a qual é obtida diretamente pela resolução do sistema de equações para a formulação DF e VFF pois esta coincide com um nó no primeiro e uma face no segundo. Já para a formulação VF obtêm-se via média

aritmética dos nós dos volumes vizinhos por esta posição coincidir com um face do volume de controle. O valor analítico desta variável é dado por $u(1/2) = \frac{e^{Re/2}-1}{e^{Re}-1}$.

A variável de interesse global analisada é a velocidade média do escoamento (\bar{u}), sendo definida como: $\frac{1}{L} \int_0^L u(x) dx$. O valor analítico desta variável é dado por $\bar{u} = \frac{1}{Re} - \frac{1}{e^{Re}-1}$. Aproximando a integral pela regra do trapézio obteremos as Eqs. (20) a (22) para volumes finitos, diferenças finitas e volumes finitos para as faces, respectivamente.

$$\bar{u}_{VF} \approx h_v \left(\frac{0+u_1}{4} + \sum_{P=2}^{N_v} \left[\frac{u_P+u_W}{2} \right] + \frac{1+u_{N_v}}{4} \right) \quad (20)$$

$$\bar{u}_{DF} \approx h_d \sum_{P=2}^N \left[\frac{u_P+u_W}{2} \right] \quad (21)$$

$$\bar{u}_{VFF} \approx h_v \sum_{P=1}^{N_v} \left[\frac{u_e+u_w}{2} \right] \quad (22)$$

Para analisar a ordem de acurácia verdadeira das variáveis analisadas, foi calculado a ordem efetiva equivalente da solução numérica [6], definida pela Eq. (23).

$$p_E^* = \frac{\log\left(\left|\frac{E_h(\phi_1)}{E_h(\phi_2)}\right|\right)}{\log(r)} \quad (23)$$

onde E_h é o erro de discretização da solução numérica, definido por $E_h = \Phi - \phi$, Φ é a solução analítica, ϕ é a solução numérica, os subscritos 1 e 2 indicam a malha grossa (h_1) e malha fina (h_2) respectivamente, e a razão de refino é definida por $r = \frac{h_1}{h_2}$.

O critério de parada do sistema iterativo se deu pela tolerância de 10^{-30} na média da norma L1 [6] do resíduo do sistema de equações. Se em 100.000 iterações não chegou-se na convergência do sistema iterativo, não é mostrado o valor da variável de interesse. Para usar esta precisão na tolerância, o código foi implementado em linguagem Fortran utilizando precisão quádrupla (cerca de 31 algarismos significativos).

VII. RESULTADOS

Foram analisadas as duas variáveis de interesse nas três formulações. As malhas utilizadas foram 5, 9, ..., 131073 nós e 4, 8, ..., 131072 volumes de controle, totalizando 16 malhas para cada formulação, além disso foram analisados diferentes números de Reynolds. Neste trabalho serão mostrados os resultados apenas para \bar{u} por simplicidade, isto pois para a variável $u(1/2)$ resultados semelhantes foram obtidos.

As Figs. 4 a 7 mostram a ordem efetiva do erro de discretização de \bar{u} para os números de Reynolds 1, 100, 1000 e 5000, respectivamente.

Estes valores de número de Reynolds (1, 100, 1000 e 5000) foram utilizados para denotar a diferença que o método proposto neste trabalho apresenta em comparação aos demais métodos testados (os quais convergem apenas para malhas refinadas nos casos de número de Reynolds elevado), outro motivo é que o termo fonte, Eq. (4), inserido na equação diferencial dada a solução fabricada proposta, Eq. (5), gera problemas numéricos (divisão entre números muito grandes) conforme o número de Reynolds aumenta.

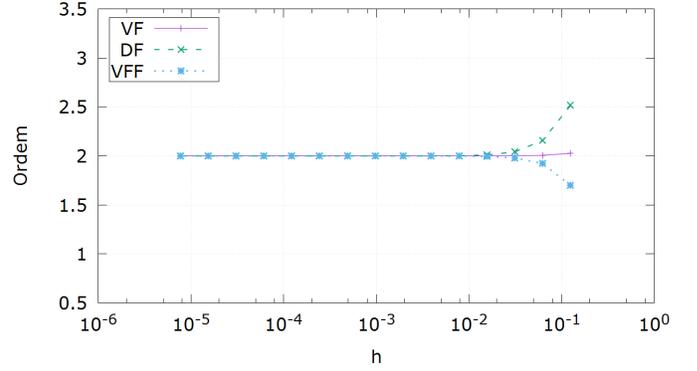


Figura 4. Ordem efetiva de \bar{u} , $Re = 1$

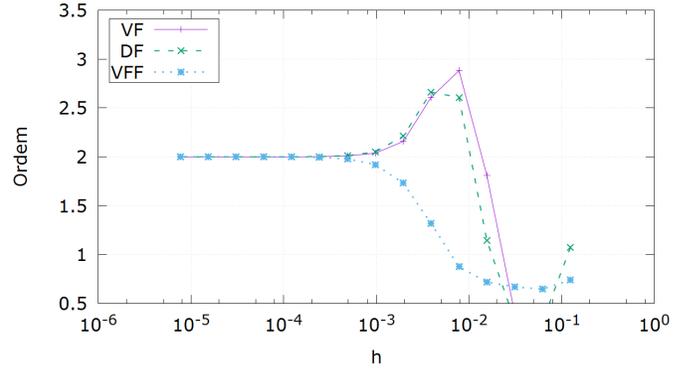


Figura 5. Ordem efetiva de \bar{u} , $Re = 100$

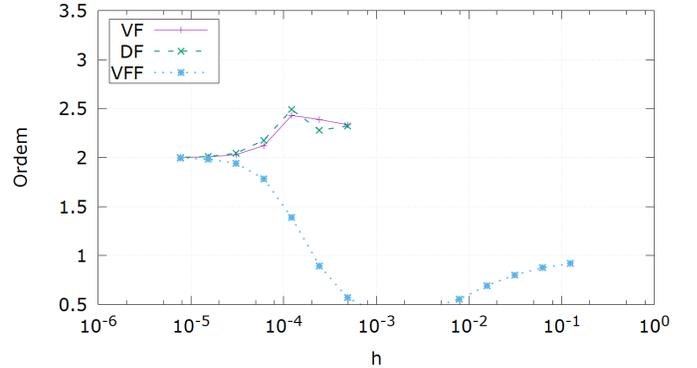


Figura 6. Ordem efetiva de \bar{u} , $Re = 1000$

A ordem efetiva reflete a ordem da aproximação utilizada na discretização do problema. As Figs 8 a 11 mostram o erro de discretização de \bar{u} para os mesmos números de Reynolds.

VIII. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Está mostrado nas Figs. 4 a 7 as ordens efetivas da solução numérica. Assim fica provado que as ordens de acurácia obtidas com as formulações citadas (DF, VF e VFF) são de segunda ordem de acurácia, tanto para a variável \bar{u} quanto para $u(1/2)$, omitida neste trabalho, isto é evidenciado nas malhas mais finas resolvidas em cada número de Reynolds testado.

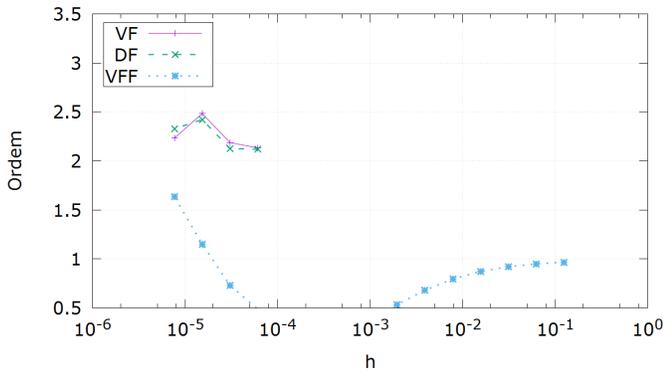


Figura 7. Ordem efetiva de \bar{u} , $Re = 5000$

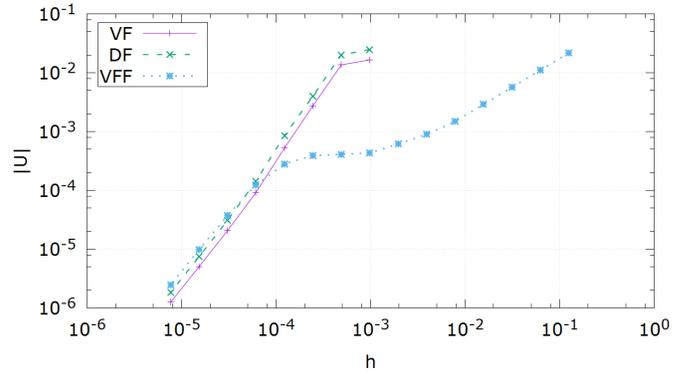


Figura 10. Módulo do erro de \bar{u} , $Re = 1000$

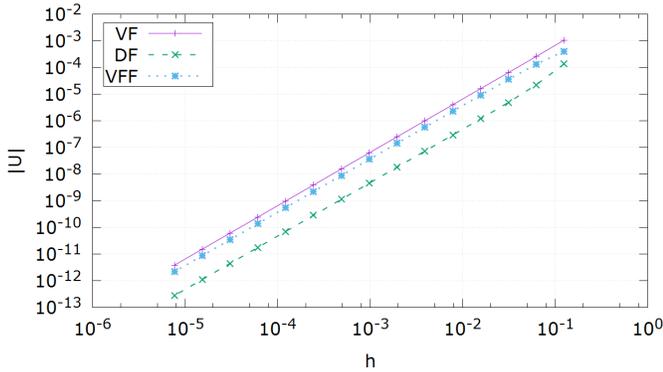


Figura 8. Módulo do erro de \bar{u} , $Re = 1$

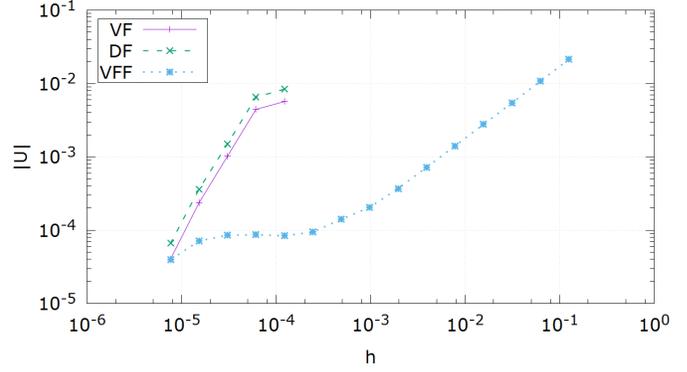


Figura 11. Módulo do erro de \bar{u} , $Re = 5000$

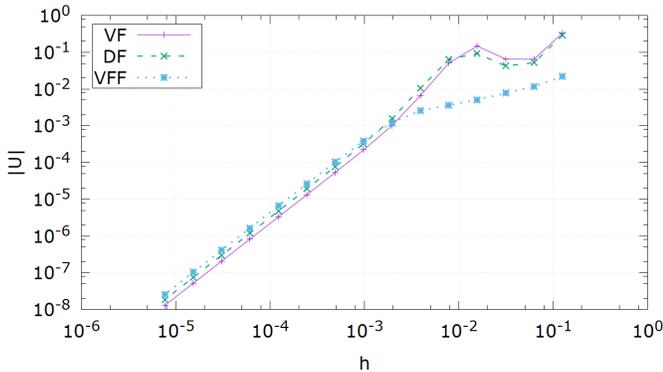


Figura 9. Módulo do erro de \bar{u} , $Re = 100$

Algo inusitado ocorre para os maiores números de Reynolds usando a formulação VFF (proposta neste trabalho): em malhas mais grossas (maior h) a ordem efetiva tende à unidade e para malhas mais refinadas (menor h) esta ordem efetiva volta para a ordem 2 (utilizada na aproximação), isto é uma característica que apenas em formulações mais complexas chamadas Total Variation Diminishing (TVD) [3] podem ser obtidas e é sem dúvida almejada para problemas fortemente advectivos, como é o caso de altos números de Reynolds. Provavelmente esta característica foi obtida pois

nesta formulação não há a necessidade de aproximar o termo advectivo, o qual é o principal problema nas aproximações numéricas em CFD.

Analisando também as Figs. 8 a 11, percebe-se que esta característica é vantajosa ao permitir a convergência de várias malhas especialmente no caso de alto número de Reynolds. E mesmo nos casos onde as outras formulações já atingiram a convergência a formulação VFF gerou menores erros, embora ao chegar em determinada malha, onde a ordem efetiva começa a tender a 2, todas as formulações possuem mesma inclinação.

IX. CONCLUSÃO

Este trabalho comparou três diferentes formulações: Diferenças Finitas (DF), Volumes Finitos para os nós (VF) e a formulação proposta neste trabalho: Volumes Finitos para as Faces (VFF), aplicados em um problema modelo Burgers - 1D o qual pode simular o escoamento unidimensional de um fluido com propriedades constantes, em diferentes números de Reynolds (1, 100, 1000 e 5000) e malhas desde 5 nós (DF) e 4 volumes (VF e VFF) até 131073 nós e 131072 volumes.

Os resultados apontam que a formulação proposta pelo presente trabalho é robusta o bastante para convergir mesmo no caso onde as outras formulações não convergem (Diferenças Finitas e Volumes Finitos para os nós) suavizando a ordem de acurácia da solução para a unidade (o que ocorre apenas

para alto número de Reynolds). Lembra-se também que este comportamento é muito desejado em problemas fortemente advectivos em CFD e pode ser obtido apenas com formulações mais complexas como TVD.

Apresenta mesmo nos casos onde há a convergência em todas as formulações um menor erro, isto até determinada malha ao refinar a partir desta malha leva a todas as formulações alcançarem segunda ordem de acurácia e o erro cai conforme esperado.

Na presente formulação, quadridiagonal, lembra-se que o sistema linear gerado não é diagonal dominante embora para todas as malhas e número de Reynolds testados houve a convergência da solução, fato que não ocorreu sempre nas outras formulações.

AGRADECIMENTOS

O primeiro autor agradece a CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pelo suporte financeiro com a bolsa de Doutorado e o segundo autor agradece ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pelo suporte financeiro com bolsa de pesquisador.

REFERÊNCIAS

- [1] J. H. Ferziger and M. Perić. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, New York, 3 edition, 2002.
- [2] A. O. Fortuna. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos*. Edusp, São Paulo, 2000.
- [3] S. Gottlieb and C. Shu. Total variation diminishing runge-kutta schemes. *Mathematics of Computation*, 67:73–85, 1998.
- [4] F. P. Incropera and D. P. DeWitt. *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*. LTC, Rio de Janeiro, 5 edition, 2003.
- [5] C. R. Maliska. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. LTC, rev. e ampliada, [reimpr.], Rio de Janeiro, 2 edition, 2010.
- [6] C. H. Marchi and M. A. Martins. Effect of p-norms on the accuracy order of numerical solutions errors in CFD. *Proceedings of 13th Congresso Brasileiro de Ciências Térmicas e Engenharia*, 2010.
- [7] H. K. Versteeg and W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. Prentice Hall, Harlow, England, 2 edition, 2007.