

MÉTODO DE SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS CONVECTIVOS-DIFUSIVOS EM GEOMETRIAS COMPLEXAS

E.R. RONZANI
e
A.O. NIECKELE

*Departamento de Engenharia Mecânica
Pontifícia Universidade Católica - RJ
Rio de Janeiro, RJ, CEP 22453-900 - Brasil*

SUMÁRIO

Um método numérico usando a técnica de volumes finitos, baseado em coordenadas curvilíneas não-ortogonais generalizadas, é usado para a solução de problemas convectivos-difusivos em geometrias complexas. Uma configuração de malha totalmente co-localizada é adotada para os componentes da velocidade e para as variáveis escalares. Os termos de fluxo difusivo secundários e terciários oriundos da transformação de coordenadas são tratados explicitamente nos termos de fonte. Resultados da aplicação do método é apresentado.

SUMMARY

A numerical method using the finite volume technique, based in curvilinear non-orthogonal generalized coordinates, is used for the solution of convection-diffusion problems in complex geometrics. A co-localized grid configuration is used for the velocity components and for the scalar variables. The secondary and terciary diffusive terms arising from the coordinate mapping are treated explicitly in the source terms. Results of the application of the method are presented.

INTRODUÇÃO

Métodos numéricos para a solução de problemas envolvendo transporte de massa e energia são muito usados em engenharia. Esses métodos estão bem desenvolvidos para a solução em geometrias regulares. Na maioria das aplicações, porém, as geometrias encontradas são complexas, e a predição precisa dos fenômenos de transporte em tais geometrias requer técnicas especiais.

Estimulado pelo desenvolvimento de vários métodos de geração de malhas curvilíneas que se ajustam aos formatos dos contornos, tais como os propostos por

Recibido: Enero 1995

Thompson¹⁵, novos métodos computacionais passaram a ser desenvolvidos usando um sistema de coordenadas curvilíneas não-ortogonal generalizado, permitindo o uso de uma malha não-ortogonal que se adapta na geometria complexa requerida na maioria das predições precisas dos fenômenos de transporte. A desvantagem desses métodos é que eles requerem equações mais complexas para a solução dos problemas. Os seguintes trabalhos em coordenadas generalizadas podem ser citados: Maliska⁶, Peric⁸, Shyy¹², Reggio and Camarero⁹, Hadjisophocleous³, Karki e Patankar⁴, Davidson e Hedberg¹, Thangam e Knight¹⁴, Yang¹⁶, Deng², Piquet e Visionneau², Kerbar e Choudhury⁵; diferenciando-se entre si, basicamente, pela configuração de malha utilizada (co-localizada e deslocada), do tipo e local dos componentes da velocidade. Essas distinções são apresentadas por Shyy e Vu¹¹.

O presente trabalho apresenta um método computacional simples para solucionar problemas convectivos-difusivos em geometrias complexas usando coordenadas curvilíneas não-ortogonais, sistema bi e tridimensional. Este é o primeiro passo para o desenvolvimento de um algoritmo para solução de escoamentos.

Se os processos de transporte de massa e energia ocorrem em uma região física irregular (domínio físico), é necessário transformar esta em uma figura regular no domínio computacional, para simplificar a solução numérica. Isto é obtido por uma transformação em que as coordenadas cartesianas (x, y, z) para o domínio físico tornam-se variáveis dependentes, com as coordenadas curvilíneas (ξ, η, γ) como variáveis independentes. As equações diferenciais são inicialmente escritas em termos de coordenadas cartesianas e quando as variáveis curvilíneas são introduzidas as equações mudam de acordo com a transformação genérica $\xi = \xi(x, y, z)$, $\eta = \eta(x, y, z)$ e $\gamma = \gamma(x, y, z)$, utilizando-se a regra da cadeia. Neste trabalho as equações transformadas tomam uma forma mais simplificada com o uso dos tensores conjugados ou recíprocos (g) nos termos difusivos e dos componentes pseudo-contravariantes do vetor velocidade (U, V, W) nos termos convectivos das equações de conservação. Estas simplificações tornam-se mais significativas na implementação tridimensional.

O processo de discretização das equações diferenciais consiste em dividir o domínio de cálculo em um número de volumes de controle não sobrepostos, de forma que haja um volume ao redor de cada ponto nodal. As equações diferenciais são integradas sobre cada volume elementar. Assume-se perfis entre os pontos nodais para avaliar os fluxos convectivos e difusivos através das faces dos volumes de controle. O resultado é a equação de discretização contendo os valores das variáveis dependentes para um conjunto de pontos nodais. A equação obtida dessa forma expressa o princípio de conservação para a variável dependente para o volume finito, tal como a equação diferencial expressa o princípio de conservação para um volume infinitesimal. É essa discretização do espaço e da variável dependente que torna possível substituir as equações diferenciais por equações algébricas simples, que podem ser solucionadas com certa facilidade. No presente trabalho, o sistema de equações algébricas resultante é solucionado usando o algoritmo TDMA linha por linha, (Patankar⁷), e um algoritmo de correção por blocos é utilizado para acelerar a convergência, similar ao proposto por Settari e Aziz¹⁰.

EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO DAS LEIS FÍSICAS

As equações diferenciais que governam a conservação de massa, energia ou outras quantidades podem ser resumidas em uma forma mais geral como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot \vec{J} = S \quad , \quad \vec{J} = \rho \vec{u}\phi - \Gamma \nabla \phi \quad (1)$$

Nestas equações ϕ é uma variável dependente geral, ρ é a massa específica, Γ é o coeficiente de difusão efetivo, $\vec{u}$ é o vetor velocidade, e S indica a fonte volumétrica de ϕ . Na equação (1), $\vec{J}$ representa o fluxo total de ϕ , isto é, inclui tanto o fluxo convectivo quanto o difusivo.

TRANSFORMAÇÃO DAS EQUAÇÕES

A equação geral diferencial, equação 2.1, escrita em coordenadas cartesianas, pode ser transformada para o sistema curvilíneo se as derivadas com relação a, x , y e z forem substituídas, através da aplicação da regra da cadeia, por derivadas com relação a ξ , η e γ , resultando em

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{1}{J_a} \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho U \phi) + \frac{1}{J_a} \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho V \phi) + \frac{1}{J_a} \frac{\partial}{\partial \gamma}(\rho W \phi) = \\ & = \frac{1}{J_a} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\Gamma J_a \left(g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + g^{12} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + g^{13} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right) \right] + \\ & + \frac{1}{J_a} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\Gamma J_a \left(g^{21} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + g^{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + g^{23} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right) \right] + \\ & + \frac{1}{J_a} \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\Gamma J_a \left(g^{31} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + g^{32} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + g^{33} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right) \right] + S(\xi, \eta, \gamma) \end{aligned} \quad (2)$$

onde: g^{ij} são os tensores conjugados ou recíprocos dos tensores métricos g_{ij} definidos por $g^{ij} = G(i, j)/J_a^2$ onde $G(i, j)$ é o cofator de g_{ij} no determinante $|g_{ij}| = J_a^2 \neq 0$;

$$g_{ij} = \frac{\partial x_k}{\partial \xi^i} \frac{\partial x_k}{\partial \xi^j} \quad (\text{para } \xi^1 = \xi, \xi^2 = \eta, \xi^3 = \gamma \text{ e } i = j = k = 1, 2, 3) \quad (3)$$

Vale a pena ressaltar aqui que se o sistema de coordenadas ξ, η, γ for ortogonal $g_{ij} = 0$ se $i \neq j$.

Os pseudos-componentes contravariantes da velocidade são definidos por

$$\begin{aligned} U &= J_a V^\xi / g_{11}^{1/2} = u(y_\eta z_\gamma - y_\gamma z_\eta) + v(x_\gamma z_\eta - x_\eta z_\gamma) + w(x_\eta y_\gamma - x_\gamma y_\eta) \\ V &= J_a V^\eta / g_{22}^{1/2} = u(y_\gamma z_\xi - y_\xi z_\gamma) + v(x_\xi z_\gamma - x_\gamma z_\xi) + w(x_\xi y_\gamma - x_\gamma y_\xi) \\ W &= J_a V^\gamma / g_{33}^{1/2} = u(y_\xi z_\eta - y_\eta z_\xi) + v(x_\eta z_\xi - x_\xi z_\eta) + w(x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi) \end{aligned} \quad (4)$$

onde u, v, w e V^ξ, V^η, V^γ são os componentes cartesianos e contravariantes da velocidade, respectivamente. J_a representa o jacobiano dado por

$$J_a = x_\xi(y_\eta z_\gamma - y_\gamma z_\eta) + y_\xi(x_\gamma z_\eta - x_\eta z_\gamma) + z_\xi(x_\eta y_\gamma - x_\gamma y_\eta) \quad (5)$$

DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

De acordo com o método de volumes finitos, o domínio computacional é subdividido em volumes de controle. A equação de discretização é então obtida integrando a equação 3.1 no volume e usando o teorema do valor médio para as integrais. Para regime permanente tem-se

$$J_e - J_w + J_n - J_s + J_t - J_b = \bar{S}\Delta\forall + L[S^\phi] \quad (6)$$

onde: Os J representam os fluxos totais principais nas faces leste(e), oeste(w), norte(n), sul(s), superior(t) e inferior(b), por exemplo,

$$J_e = \left[\rho U \phi - (\Gamma J_a g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}) \right]_e \quad (7)$$

O valor médio da fonte no volume é representado por $\bar{S}$, podendo ser linearizado como $\bar{S} = S_c + S_P \phi_P$, com $S_P \leq 0$ (Patankar⁷). O volume elementar é $\Delta\forall = J_a \Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma$. Como no domínio computacional $\Delta\xi = \Delta\eta = \Delta\gamma = 1$ tem-se $\Delta\forall = J_a$.

O operador $L []$ denota uma aproximação numérica do termo no interior dos colchetes e S^ϕ engloba os termos de fluxos difusivos oriundos da transformação de coordenadas de um sistema não ortogonal, que neste trabalho foram denominados de fluxos secundários e terciários, e são tratados explicitamente no termo de fonte, isto é

$$S^\phi = (JS + JT)_e - (JS + JT)_w + (JS + JT)_n - (JS + JT)_s + \\ + (JS + JT)_t - (JS + JT)_b \quad (8)$$

onde

$$JS_e = \left(\Gamma J_a g^{12} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_e \quad ; \quad JT_e = \left(\Gamma J_a g^{13} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right)_e \quad (9)$$

Como os fluxos secundários e terciários são puramente difusivos, foram aproximados por expansão em série de Taylor de segunda ordem.

Para finalizar a discretização é preciso avaliar os fluxos principais através das faces do volume, já que os valores são armazenados nos pontos nodais. Existem vários esquemas que expressam esses valores nas faces. Entre esses optou-se pelo uso do esquema "Power-Law" descrito por Patankar⁷, devido a fundamentação física mais consistente que os outros esquemas.

Substituindo as equações dos fluxos nas faces na equação 4.1 obtém-se a equação discretizada na forma

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_T \phi_T + a_B \phi_B + b \quad (10)$$

onde

$$a_E = D_e^{11} A(|Pe|) + \llbracket -Fe, 0 \rrbracket \quad ; \quad A(|Pe|) = \llbracket 0, (1 - 0, 1 |Pe|)^5 \rrbracket$$

$$b = Sc J_{aP} + L[S^\phi] \quad \text{para} \quad \bar{S} = Sc + S_P \phi_P$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B - S_P J_{aP}$$

$$D_e^{11} = (\Gamma J_a g^{11})_e, \quad Fe = (\rho U)_e, \quad Pe = Fe/De^{11}$$

$\llbracket -Fe, 0 \rrbracket$ é um operador indicativo da seleção do maior valor entre os argumentos $-Fe$ e 0.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O método proposto é usado em três situações diferentes para sua validação. Os detalhes de cada uma e os resultados são discutidos em seguida.

Cilindros Concêntricos Rotativos

Cálculo do campo de temperatura de um escoamento laminar de um fluido incompressível entre dois cilindros concêntricos é considerado. O cilindro interno tem raio r_i , e está parado, o cilindro externo tem raio $r_o = 3r_i$ e está girando com uma velocidade angular constante w (Figura 1). Este problema é unidimensional em coordenadas cilíndricas e possui solução exata. Utilizando-se o paralelogramo mostrado na Figura 1 como domínio computacional obtém-se um sistema bidimensional não ortogonal. As condições de contorno relativas a equação da energia são prescritas usando a solução exata da temperatura e a solução numérica é obtida para o ângulo α variando de -15° a $+15^\circ$. As variáveis adimensionais apropriadas para este problema podem ser definidas como

$$X = x/r \quad , \quad Y = y/r \quad , \quad R^2 = X^2 + Y^2 \quad (11)$$

$$u^* = u/(w r_i) \quad , \quad v^* = v/(w r_i) \quad , \quad \theta = \frac{T - T_0}{T_i - T_0}$$

A equação da conservação da energia para esta situação é

$$\frac{\partial}{\partial X}(u^* \theta) + \frac{\partial}{\partial Y}(v^* \theta) = \frac{1}{Pe} \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} \right] \quad (12)$$

onde: o número de Peclet é definido como $Pe = \rho c_p w r_i^2 / k$

O campo de velocidade e a solução exata para este problema (a qual é independente do número de Peclet) são

$$u^* = -2Y \quad , \quad v^* = 2X \quad , \quad \theta_{ex} = 1 - \ln R^2 / (2 \ln 3) \quad (13)$$

O erro máximo percentual entre as soluções numérica e exata foi calculado por

$$\epsilon_{max} = \max \left| \frac{\theta - \theta_{ex}}{\theta_{ex \max} - \theta_{ex \min}} \right| \times 100 \quad (14)$$

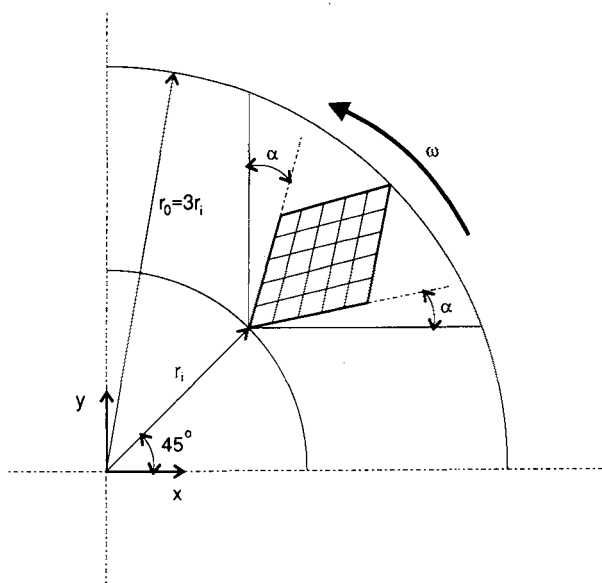


Figura 1. Cilindros Concêntricos Rotativos

Resultados

A Figura 2 mostra a comparação entre os valores exatos e os numéricos da temperatura adimensional ao longo da diagonal do domínio computacional. Utilizou-se uma malha 30×30 . Os valores numéricos apresentam bons resultados em comparação com os analíticos. Devido a falsa difusão, verifica-se que o erro numérico aumenta com o aumento do número de Peclet apresentando um erro máximo de 1,38% para $Pe = 100$ ($Pe = 1$, $\epsilon_{max} = 0,048\%$). O erro diminui a medida que o ângulo α aumenta, devido a diminuição do domínio computacional, uma vez que a influência das condições de contorno (exata) torna-se mais significativa.

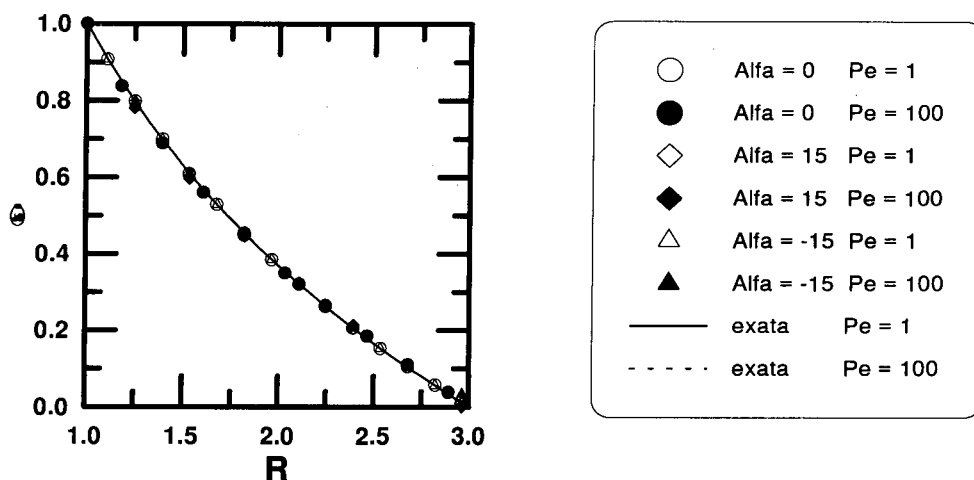


Figura 2. Temperatura Adimensional

Cilindros Excêntricos

Escoamento hidrodinamicamente desenvolvido em uma tubulação formada por dois cilindros excêntricos, o raio interno é r_i e do externo é r_o e a excentricidade é denominada de e (Figura 3). Devido a simetria apresentada no problema, solucionou-se o campo de escoamento apenas na metade do domínio. A malha utilizada foi de 30×30 e é mostrada na Figura 4. Considerou-se propriedades uniformes, isto é, massa específica ρ e viscosidade dinâmica μ constantes. O gradiente de pressão (dp/dz) é constante já que o escoamento é considerado hidrodinamicamente desenvolvido.

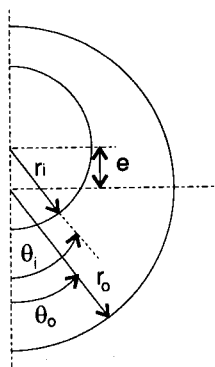
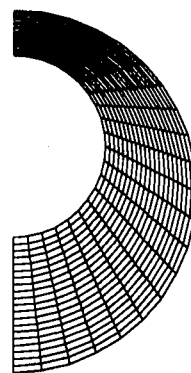


Figura 3. Cilindros Excêntricos

Figura 4. Malha 30×30 (Algoritmo Transfinito)

A equação da quantidade de movimento adimensional na direção axial z é

$$\nabla^2 W + 1 = 0 \quad (15)$$

onde $R = r/D_h$ e $W = \mu w / [(-dp/dz)D_h^2]$ e $D_h = 2(r_o - r_i)$

As tensões cisalhantes médias internas e externas adimensionais são

$$f_i = \bar{\tau}_i / (\rho \bar{w}^2 / 2) \quad , \quad f_o = \bar{\tau}_o / (\rho \bar{w}^2 / 2) \quad (16)$$

As condições de contorno são: velocidades nulas nas superfícies internas da região do escoamento e o gradiente da velocidade nulo nas linhas de simetria.

Resultados

A Figura 5 compara os valores numéricos obtidos com os dados de (Snyder e Goldsten¹³) para as tensões de cisalhamento internas e externas locais, normalizadas pela tensão média, em relação ao ângulo θ para uma razão de raio, $RR = r_i/r_o$ igual a 0,5 e uma excentricidade, $EC = e/(r_o - r_i)$, igual a 0,5, apresentando excelente concordância. Da mesma forma, a Figura 6 compara os coeficientes de atrito internos e externos médios em função da excentricidade para uma razão de raios de 0,5; através do produto fRe , onde $Re = \rho \bar{w} D_h / \mu$. Novamente excelentes resultados foram obtidos.

Escoamento em uma Quina Tridimensional

Considera-se um escoamento irrotacional em uma quina tridimensional, (Figura 7) onde o campo de velocidade é fornecido através dos componentes cartesianos $u^* = X$, $v^* = Y$ e $w^* = -2Z$, sendo X, Y, Z as coordenadas cartesianas adimensionais medidas do ponto de estagnação. O problema térmico é solucionado usando o domínio irregular indicado na figura e comparado com a solução exata previamente estabelecida, isto é

$$\theta_{ex} = X^2 + Y^2 - 2Z^2 + 50XYZ \quad (17)$$

O termo fonte da equação da energia para esta situação é

$$S^* = 2 X^2 + 2 Y^2 + 8 Z^2 \quad (18)$$

Os ângulos β e γ são variados de 0° a 25° . As condições de contorno relativas a equação da energia são prescritas usando a solução exata da temperatura.

A equação da conservação da energia adimensional tem a seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial X}(u^*\theta) + \frac{\partial}{\partial Y}(v^*\theta) + \frac{\partial}{\partial Z}(w^*\theta) = \frac{1}{Pe} \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Z^2} \right] + S^*$$

onde $Pe = \bar{U}L/\alpha$ é o número de Peclet.

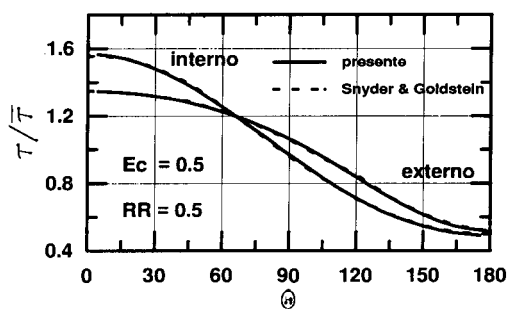


Figura 5. Tensões de Cisalhamento Locais

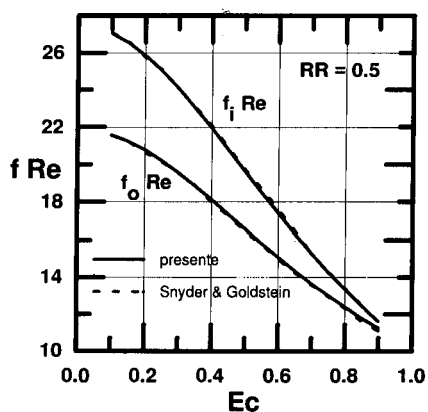


Figura 6. Fator de Atrito Local em Função da Excentricidade

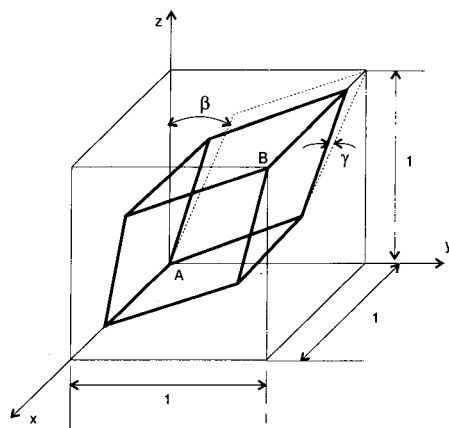


Figura 7. Escoamento em uma Quina Tridimensional

Resultados

O problema foi resolvido no domínio indicado na figura com uma malha $12 \times 12 \times 12$. O número de pontos internos é $N = 10 \times 10 \times 10$.

A Figura 8 apresenta o erro médio no domínio em função do número de Peclet onde

$$E_m = \frac{1}{N} \sum \left| \frac{\theta - \theta_{ex}}{\theta_{ex \max} - \theta_{ex \min}} \right| \times 100 \quad (19)$$

Mais uma vez excelente concordância com a solução exata foi obtida, porém com um aumento do erro com o número de Peclet devido a falsa difusão.

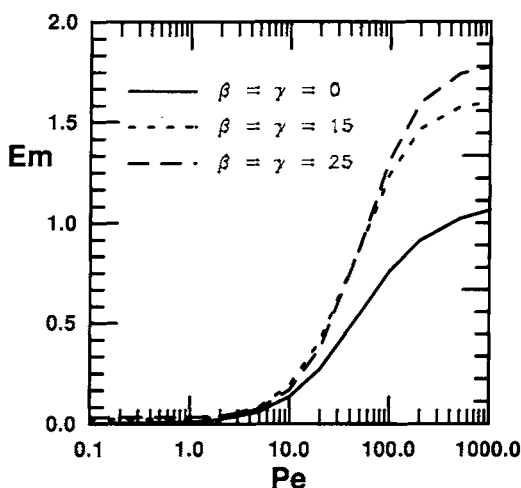


Figura 8. Erro Médio

CONCLUSÕES

Um método computacional, baseado em sistema de coordenadas curvilíneas não-ortogonais, para prever fenômenos convectivos-difusivos em geometrias complexas é apresentado. O uso dos tensores recíprocos aos métricos nos termos difusivos e dos componentes pseudo-contravariantes do vetor velocidade proporcionaram grandes simplificações na implementação computacional para sistema tridimensional. A aplicação em sistema bidimensional é tratada como um caso particular da anterior. O método proposto é validado pela comparação dos resultados numéricos com os exatos, em três situações distintas. O efeito da não ortogonalidade da malha é investigado. Em todos os casos, o resultado computacional proporciona excelente concordância com o analítico.

REFERÊNCIAS

1. L. Davidson e P. Hedberg, "Mathematical Derivation of a Finite Volume Formulation for Laminar Flow in Complex Geometries", *Int. J. Num. Methods Fluids*, Vol. **9**, pp. 531-540, (1989).
2. G.B. Deng, J. Piquet, P. Queutey e M. Visonneau, "Three-Dimensional Full Navier-Stokes Solvers for Incompressible Flows Past Arbitrary Geometries", *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Vol. **31**, pp. 1427-1451, (1991).
3. G.V. Hadjisophocleous, A.C.M. Souza, J.E.S. Venart, "Prediction of Transient Natural Convection in Enclosures fo Arbitrary Geometry Using a Nonorthogonal Numerical Model", *Numer. Heat Transfer*, Vol. **13**, pp. 373-392, (1988).
4. K.C. Karki, S.V. Patankar, "Calculation Procedure for Viscous Incompressible Flows in Complex Geometries", *Numer. Heat Transfer*, Vol. **14**, pp. 295-307, (1988).
5. K.M. Kerbar, D. Choudhury, M. Ambrosi, "Numerical Method for the Computation of Conjugate Heat Transfer in Boundary-Fitted Coordinates", *Numer. Heat Transfer*, Part B, Vol. **20**, pp. 25-40, (1991).
6. C.R. Maliska e G.D. Raithby, "Numerical for Computing Three Dimensional Flows Using Non-Orthogonal Boundary-Fitted Coordinates", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. **4**, pp. 519-537, (1984).
7. S.V. Patankar, "*Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*", McGraw-Hill, Washington, USA, (1980).
8. M. Peric, "A Finite Volume Method for the Prediction of Three-Dimensional Fluid Flow in Complex Ducts", Ph.D. thesis, University of London, UK, (1985).
9. M. Reggio, R. Camarero, "Numerical Solution Procedure for Viscous Incompressible Flows", *Numerical Heat Transfer*, Vol. **10**, pp. 131-146, (1986).
10. Settari e Aziz, "A Generalization of The Additive Correction Methods for the Iterative Solution of Matrix Equations", *SIAM Journal of Numerical Analysis*, Vol. **IV**, p. 506, (1973).
11. W. Shyy, T.C. Vu, "On the Adoption of Velocity Variable and Grid System for Fluid Flow Computation in Curvilinear Coordinates", *J. Comp. Physics*, Vol. **92**, pp. 82-105, (1991).
12. W. Shyy, S.S. Tong e S.M. Correa, "Numerical Recirculating Flow Calculations Using a Body-fitted Coordinate System", *Numer. Heat Transfer*, Vol. **8**, pp. 99-113, (1985).
13. W.T. Snyder e G.A. Goldstein, *AIChE Journal* Vol. **11**, pp. 462-470, (1965).
14. S. Thangam, D.D. Knight, "A Computational Schemes in Generalized Coordinates for Viscous Incompressible Flows", *Comput. Fluids*, Vol. **18**, 4, pp. 317-327, (1990).
15. J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi e C.W. Mastin, "*Numerical Grid Generation*", North Holland, Amsterdam, Holland, (1985).
16. H.Q. Yang, K.T. Yang e J.R. Lloyd, "A Control Volume Finite Difference Method for Buoyant Flow in Three-Dimensional Curvilinear Non-Orthogonal Coordinates", *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Vol. **10**, pp. 199-211, (1990).