

ESQUEMAS NUMÉRICOS PARA O TRATAMENTO DO TERMO ADVECTIVO DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES

Marcelo Maia Ribeiro Damasceno, Laboratório de Mecânica dos Fluidos, marcelomrd@gmail.com
João Marcelo Vedovoto, Laboratório de Mecânica dos Fluidos, jmvedovoto@mecanica.ufu.br
Aristeu da Silveira Neto, Laboratório de Mecânica dos Fluidos, aristeus@mecanica.ufu.br

Resumo: A escolha do esquema numérico, para a caracterização do termo advectivo das equações de Navier-Stokes, tem relação direta com a qualidade da representação do fenômeno estudado. Sabe-se, por exemplo, que o esquema *upwind* é estável e incondicionalmente livre de oscilações. Porém, este esquema induz um alto nível de falsa difusão. Por outro lado, esquemas de ordem elevada, tais como diferenças centradas e *quick*, tendem a gerar resultados oscilatórios com o aumento da importância dos efeitos advectivos, quando relacionados com o papel da difusão. Tais oscilações podem levar à instabilidades de execução, além da geração de valores fisicamente impossíveis. Neste âmbito, o presente trabalho visa a apresentação de alguns destes esquemas, bem como a introdução da metodologia TVD (*total variation diminishing*), que consiste na adequação de esquemas de ordens superiores para a eliminação de oscilações indesejáveis. A aplicação destes em problemas conhecidos da literatura, com posterior comparação dos resultados obtidos também faz parte do escopo deste trabalho, que traz interessantes resultados com a aplicação da metodologia TVD em um caso de *advecção pura*.

Palavras chave: *Advecção, esquemas numéricos, TVD*

1. INTRODUÇÃO

A escolha do esquema numérico, para a caracterização do termo advectivo das equações de Navier-Stokes, tem relação direta com a qualidade da representação do fenômeno estudado. Sabe-se, por exemplo, que o esquema *upwind* é estável e incondicionalmente livre de oscilações. Porém, este esquema induz um alto nível de falsa difusão, principalmente se a resultante das velocidades não apresentar-se de forma paralela ou perpendicular à malha de cálculo utilizada.

Por outro lado, esquemas de ordem elevada, tais como diferenças centradas e *quick*, tendem a gerar resultados oscilatórios com o aumento da importância dos efeitos advectivos, quando relacionados com o papel da difusão. Tais oscilações podem levar à instabilidades de execução, além da geração de valores fisicamente impossíveis, tais como energia cinética turbulenta negativa ou frações mássicas superiores a unidade e inferiores a zero, dentre outros.

Neste âmbito, o presente trabalho visa estudar diferentes esquemas numéricos, de forma a definir a melhor alternativa para a remoção desta tão indesejada situação.

2. MODELO MATEMÁTICO

O estudo supracitado fora realizado a partir de dois problemas conhecidos da literatura: *advecção-difusão* e *advecção pura*. Os modelos matemáticos para a caracterização dos mesmos, bem como a descrição dos esquemas numéricos utilizados no presente trabalho estão dispostos nas seções que se seguem.

2.1 Advecção-difusão

A equação de transporte para a conservação de uma propriedade ϕ , em sua forma unidimensional, permanente e representando os efeitos de *advecção-difusão*, é apresentada a seguir:

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (1)$$

Aplicando-se a metodologia de volumes finitos, para a resolução da equação anterior, obtém-se o seguinte resultado:

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w, \quad (2)$$

no qual os subscritos e e w denotam valores para a variável ϕ nas faces do domínio computacional, os quais são desconhecidos.

Considerando $F = \rho u$ e $D = \Gamma/\delta x$, bem como uma interpolação linear para o termo difusivo, a equação anterior é reescrita na forma:

$$F_e\phi_e - F_w\phi_w = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W), \quad (3)$$

que simplifica este problema para a determinação das variáveis ϕ_e e ϕ_w , já que os subscritos E , P e W dizem respeito a variáveis conhecidas, localizadas nos centros dos volumes de controle.

2.2 Advecção pura

Uma análise interessante de aplicação de esquemas numéricos para a representação do termo advectivo das equações de Navier-Stokes, pode ser realizada através do estudo de um caso do tipo advecção pura. Nesta situação, os efeitos advectivos apresentam-se infinitamente mais pronunciados do que os difusivos, desta forma, a equação de transporte para a conservação da propriedade ϕ em um domínio bidimensional, após a aplicação da metodologia de volumes finitos, é definida como sendo:

$$F_e\phi_e - F_w\phi_w + F_n\phi_n - F_s\phi_s = 0. \quad (4)$$

Desta maneira, o problema em questão é simplificado à determinação das variáveis ϕ_e , ϕ_w , ϕ_n e ϕ_s .

A determinação de tais variáveis, contemplando os dois problemas apresentados anteriormente, é realizada a partir de esquemas numéricos para a aproximação de tais indeterminações. Algumas das aproximações mais utilizadas são detalhadas a seguir, apenas para uma das direções.

- Upwind:

$$\phi_e = \max(F_e, 0)\phi_P + \min(F_e, 0)\phi_E \quad \phi_w = \max(F_w, 0)\phi_W + \min(F_w, 0)\phi_P. \quad (5)$$

- *Centered differences scheme* (CDS):

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad \phi_w = \frac{\phi_P + \phi_W}{2}. \quad (6)$$

- *Quadratic upstream interpolation for convective kinetics* (QUICK):

$$\begin{aligned} \phi_e &= \max(F_e, 0) \left(\frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{1}{8}\phi_W \right) + \min(F_e, 0) \left(\frac{6}{8}\phi_E + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{EE} \right) \\ \phi_w &= \max(F_w, 0) \left(\frac{6}{8}\phi_W + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{WW} \right) + \min(F_w, 0) \left(\frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_W - \frac{1}{8}\phi_E \right) \end{aligned} \quad (7)$$

2.3 Total variation diminishing - TVD

O conceito do TVD foi desenvolvido como uma generalização para os esquemas numéricos de ordens superiores, a partir de uma derivação do esquema upwind. Tal generalização fora, então, descrita como sendo:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{1}{2}\Psi(r)(\phi_E - \phi_P), \quad (8)$$

com $\Psi(r) = 0$ representando o esquema upwind, $\Psi(r) = 1$ para CDS e $\Psi(r) = (3 + r)/4$ denotando o esquema QUICK, no qual $r = (\phi_P - \phi_W)/(\phi_E - \phi_P)$.

Em resumo, o princípio de desenvolvimento de um esquema TVD consiste na introdução de uma modificação nos esquemas supracitados, de forma a restringir a faixa de possíveis valores a serem obtidos para as variáveis ϕ . Tal restrição é realizada por $\Psi(r)$, denominada de função limitadora de fluxo. Como consequência, os esquemas passam a satisfazer todos os requisitos necessários de transporte, conservação e estabilidade. Algumas das mais populares funções limitadoras encontradas na literatura são apresentadas na Tab. 1, disposta a seguir.

Tabela 1. Funções limitadoras

Nome	Função limitadora $\Psi(r)$	Fonte
Van Leer	$\frac{r + r }{1 + r}$	van Leer (1974)
Van Albada	$\frac{r + r^2}{1 + r^2}$	van Albada <i>et al.</i> (1982)
Min-Mod	$\min(r, 1)$ se $r > 0$ 0 se $r \leq 0$	Roe (1985)
SUPERBEE	$\max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)]$	Roe (1985)
QUICK	$\max[0, \min(2r, (3 + r)/4, 2)]$	Leonard (1988)

Na seção seguinte, os resultados obtidos com a utilização dos esquemas numéricos supracitados são apresentados e discutidos.

3. RESULTADOS

Os resultados apresentados na Fig. 1, disposta a seguir, representam a implementação de diferentes esquemas numéricos no cálculo de um problema do tipo advecção-difusão.

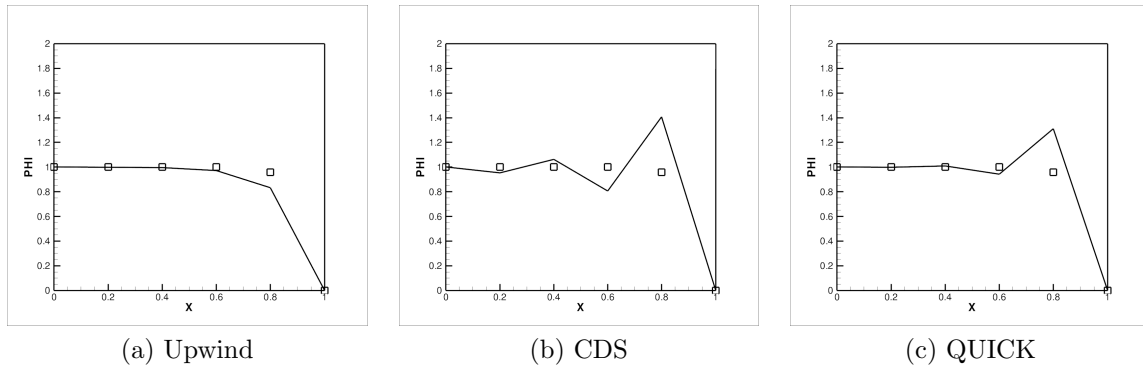


Figura 1. Comparativo entre diferentes esquemas numéricos em um caso de advecção-difusão.
□ solução exata — solução numérica

A análise dos resultados apresentados sugere que o esquema upwind é capaz de caracterizar o problema em questão de forma satisfatória. A utilização de diferenças centradas acarretou na geração de valores superestimados da solução desejada, comportamento similar ao observado com a aplicação do esquema QUICK. Entretanto, o último apresenta uma maior acurácia quando comparado com o outro esquema de segunda ordem. Tal situação se deve, principalmente, ao fato do QUICK apresentar características de transporte do upwind.

Os esquemas upwind e quick foram, então, aplicados em um caso do tipo advecção pura, em que os efeitos dos mesmos se tornam mais pronunciados. Os resultados obtidos são dispostos na Fig. 2.

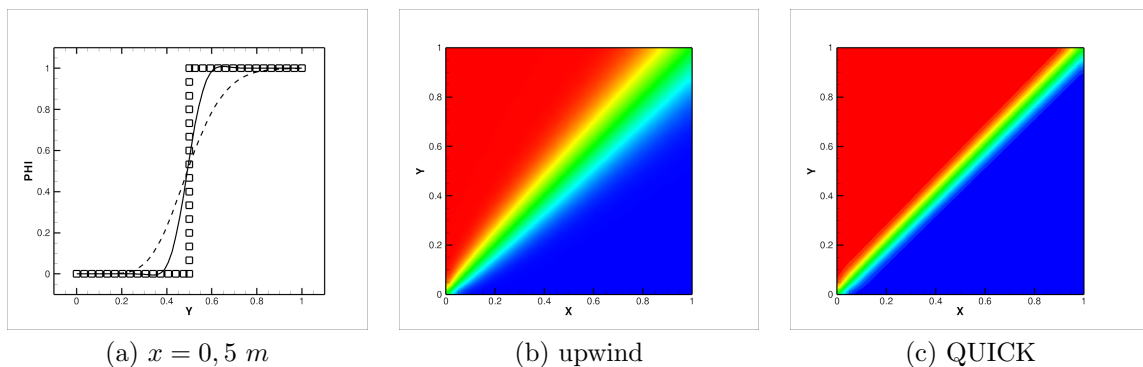


Figura 2. Comparativo entre os esquemas upwind e QUICK em um caso de advecção pura.
□ solução exata - - - upwind — quick.

A análise da Fig. 2 permite observar que o esquema upwind produz resultados mais dissipativos do que aqueles obtidos com QUICK. Tal resultado caracteriza a falsa difusão, gerada quando o escoamento não encontra-

se alinhado com as linhas da malha de cálculo. O esquema QUICK, por sua vez, produz superestimções e subestimções de valores, que não são esperados nesta situação.

Com o intuito de eliminar tais oscilações obtidas com o esquema QUICK, a função limitadora de van Albada *et al.* (1982) foi adicionada ao referido esquema e comparada com os resultados anteriores. Os resultados obtidos encontram-se na Fig. 3.

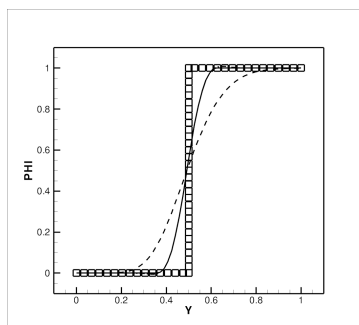


Figura 3. Comparativo entre os esquemas upwind, QUICK e QUICK com função limitadora de van Albada, em um caso de advecção pura. $\square$ solução exata - - - upwind - - - QUICK — QUICK com Van Albada

A solução proposta por van Albada *et al.* (1982) é bem menos difusiva do que o esquema upwind, além de ser tão próxima da solução exata quanto o esquema QUICK. Além do mais, não apresenta qualquer sub ou superestimção, diferentemente do que fora observado com a implementação pura do esquema QUICK.

4. CONCLUSÃO

O presente trabalho teve como objetivo o estudo de diferentes esquemas numéricos, para definir a melhor alternativa para a caracterização de escoamentos turbulentos reativos ou inertes. Dentre os modelos estudados, o esquema QUICK foi aquele que mais se adequou ao problema estudado, por ser menos difusivo do que o upwind e por resultar em uma maior acurácia, quando comparado com diferenças centradas.

Entretanto, o referido esquema também é caracterizado por sub e superestimções de valores para a variável de estudo, característica que fora contornada com a aplicação de funções limitadoras.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer à CAPES, PETROBRAS, CNPq, FAPEMIG e à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, por todo o apoio material e financeiro concedido.

6. REFERÊNCIAS

- Leonard, B.P., 1988. "Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities". *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 8, No. 10, pp. 1291–1318. ISSN 1097-0363. doi:10.1002/fld.1650081013. URL <http://dx.doi.org/10.1002/fld.1650081013>.
- Roe, P.L., 1985. "Some contributions to the modelling of discontinuous flows". In B.E. Engquist, S. Osher and R.C.J. Somerville, eds., *Large-Scale Computations in Fluid Mechanics*. pp. 163–193.
- van Albada, G.D., van Leer, B. and Roberts, Jr., W.W., 1982. "A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics". *aap*, Vol. 108, pp. 76–84.
- van Leer, B., 1974. "Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme". *Journal of Computational Physics*, Vol. 14, No. 4, pp. 361 – 370. ISSN 0021-9991. doi:[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(74\)90019-9](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(74)90019-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999174900199>.

7. RESPONSABILIDADE PELAS INFORMAÇÕES

Os autores são os únicos responsáveis pelas informações incluídas neste trabalho.