

UMA FORMULAÇÃO EM VOLUMES FINITOS USANDO MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS

Fábio Alencar Schneider – schneider@sinmec.ufsc.br

Clovis Raimundo Maliska – maliska@sinmec.ufsc.br

SINMEC – Lab. de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Engenharia Mecânica
Cx. P. 476 – 88040-900 – Florianópolis, SC, Brasil

***Resumo.** O uso de malhas não-estruturadas para discretização de domínios está cada vez mais presente nos métodos numéricos. Isto se justifica pela facilidade de adaptação destas malhas em geometrias complexas, permitindo que refinamentos locais possam ser feitos em regiões específicas. Por outro lado o emprego de malhas estruturadas, quando possível, facilita significativamente o esforço computacional empregado. Este trabalho propõe a solução numérica da equação de conservação de uma variável escalar, utilizando o método dos Volumes Finitos aplicado para malhas que usam quadriláteros e triângulos. O método proposto é uma fusão entre a metodologia FIELDS (Schneider & Raw, 1987) que utiliza elementos quadriláteros para formação dos volumes e a metodologia CVFEM (Baliga & Patankar, 1988) que utiliza elementos triangulares na formação dos volumes. Tal combinação permite que o método possa ser aplicado com maior flexibilidade de discretização. A metodologia proposta neste trabalho é comparada com a formulação tradicional de Volumes Finitos (Maliska, 1995) e a formulação dos Diagramas de Voronoi (Maliska & Vasconcellos, 2000), utilizando o problemas teste do transporte, com convecção dominante, de um salto em uma variável escalar.*

***Palavras-chave:** Métodos numéricos, Malhas Não-Estruturadas, Escoamento de Fluidos.*

1. INTRODUÇÃO

O uso de malhas não-estruturadas na solução numérica de problemas de mecânica dos fluidos está se tornando cada vez mais frequente (Mavriplis, 1992), (Maliska & Vasconcellos, 2000), entre outros. Isto se deve à facilidade com que geometrias bastante irregulares podem ser discretizadas através do uso das malhas não-estruturadas. Portanto, para a mecânica dos fluidos computacional, revelam-se bastante promissores os métodos que possuem maior versatilidade geométrica e que utilizam técnicas de balanço de

conservação das propriedades no volume de controle. Como exemplos podem ser citadas as metodologias CVFEM (Baliga & Patankar, 1988) e FIELDS (Schneider & Raw, 1987).

Para obter os volumes de controle elementares a partir de uma malha não-estruturada, dispõe-se de algumas técnicas. Uma delas é o método das medianas, onde os volumes são gerados a partir de uma triangulação, normalmente encontrada no método dos elementos finitos, e que também pode ser aplicado a uma discretização por quadriláteros. Esse processo de obtenção dos volumes é empregado no modelo numérico desenvolvido neste trabalho e é encontrado nas metodologias CVFEM e FIELDS.

O presente trabalho, propõe a solução numérica da equação de conservação de uma variável escalar, através de uma metodologia originada da fusão entre as metodologias CVFEM e FIELDS. A metodologia dos Diagramas de Voronoi (Maliska & Vasconcellos, 2000), e a formulação tradicionalmente estruturada do método dos volumes finitos (Maliska, 1995), servem como referência para a avaliação do desempenho da formulação aqui proposta. Para validação dos esquemas numéricos aplicados e comparações, o problema teste escolhido foi o transporte, com convecção dominante, de um salto em uma variável escalar, com solução analítica aproximada dada por (Raithby, 1976).

1.1 Revisão Bibliográfica

As primeiras formulações envolvendo volumes poligonais gerados a partir de malhas triangulares surgiram na década de 70 e 80 e receberam a denominação de Control Volume Finite Element Method – CVFEM (Baliga & Patankar, 1988). Paralelamente, outras metodologias se desenvolveram baseadas em malhas não-estruturadas. Como exemplo podemos citar as metodologias que usam quadriláteros para gerar os volumes de controle, Finite Element Differential Scheme – FIELDS (Schneider e Raw, 1987); as metodologias que usam a própria triangulação para representar os volumes (Mavriplis, 1992); e ainda as metodologias que utilizam os volumes de Voronoi (Maliska e Vasconcellos, 2000).

O emprego destas metodologias, que usam malhas não-estruturadas, progrediu modestamente dentro do método dos volumes finitos. O grande destaque das últimas duas décadas é o uso de coordenadas generalizadas para discretização do domínio, que se difundiu rapidamente dentro do método devido a facilidade de geração das malhas, que neste caso, são estruturadas. Com as dificuldades encontradas para discretização de geometrias muito irregulares através de coordenadas generalizadas, a discretização em malhas não-estruturadas tornou-se novamente alvo de estudo, originando um interesse crescente por metodologias que ofereçam maior flexibilidade de discretização.

2. FORMULAÇÃO BÁSICA

A formulação proposta neste trabalho é uma união entre as metodologias FIELDS (Schneider & Raw, 1987) e CVFEM (Baliga e Patankar, 1988). A discretização das equações segue a forma original, comum às duas metodologias. Os itens a seguir descrevem os aspectos básicos referentes à formulação aqui proposta.

2.1 Volume de controle

Uma forma de se obter os volumes de controle não-estruturados é através do método das medianas, onde os volumes são gerados a partir de uma triangulação, conhecida como

triangulação de Delaunay. É possível combinar a discretização por triângulos, utilizada na metodologia CVFEM, com uma discretização por quadriláteros, utilizada na metodologia FIELDS. A Figura 1 apresenta volumes construídos com elementos triangulares e quadrangulares e que serão aplicados na formulação aqui proposta.

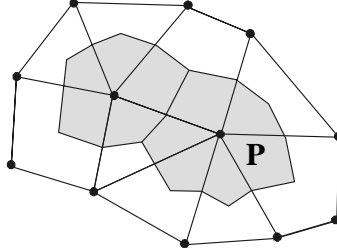


Figura 1 – Volumes finitos originados pelo processo da mediana.

2.2 Equações Governantes

Admitindo conhecido o campo de velocidades e adotando um sistema de coordenadas cartesianas (x,y) , temos, para o problema convectivo/difusivo bidimensional transiente, a seguinte equação de conservação para uma variável genérica ϕ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + S^\phi \quad (1)$$

onde Γ^ϕ é o coeficiente difusivo, S representa o termo fonte, ρ é a massa específica do fluido e t o tempo. Condensando os fluxos advectivo e difusivos em um único termo, a Eq. (1) pode ser reescrita na forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\vec{J}) = S^\phi \quad (2)$$

$$\vec{J} = \rho \vec{V} \phi - \Gamma^\phi \nabla \phi \quad (3)$$

onde \vec{J} representa o fluxo total (advectivo e difusivo) e \vec{V} é o vetor velocidade.

2.3 Função de interpolação

A função de interpolação tem o objetivo de avaliar o valor de uma propriedade genérica ϕ na interface do volume de controle bem como de suas derivadas. A proposta básica é modificar algumas características da função de interpolação utilizada na metodologia FIELDS, que utiliza elementos quadriláteros para discretização, e aplicá-la também nos elementos triangulares. A metodologia FIELDS, em sua formulação básica, utiliza duas funções de interpolação. Uma para determinação dos valores das derivadas de ϕ e outra para a determinação dos valores de ϕ nas interfaces de integração. As funções são aproximadas para qualquer ponto interno do elemento quadrilátero em função dos valores

armazenados nos pontos nodais. Portanto apresentaremos a função de interpolação em duas etapas: avaliação das derivadas de ϕ e avaliação de ϕ nos pontos de integração.

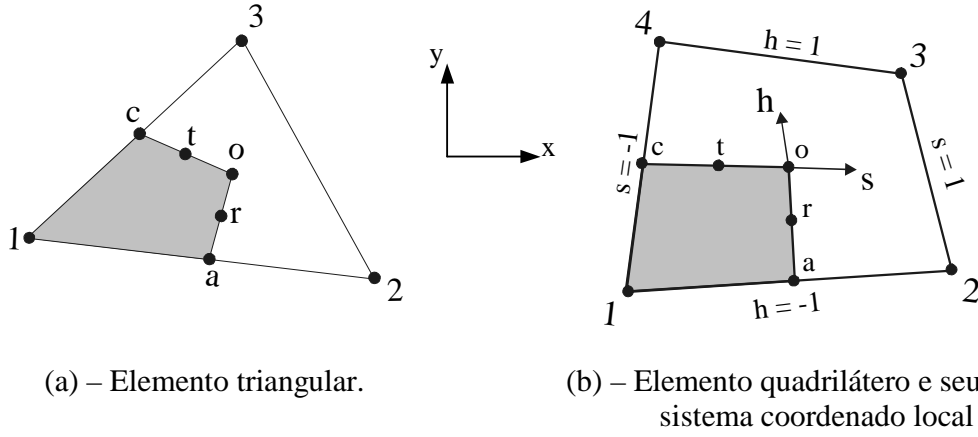


Figura 2 – Elementos triangular e quadrilátero que compõe o volume elementar.

Avaliação das derivadas de ϕ . Considere inicialmente a Fig. 2 que ilustra um elemento triangular 123 e um elemento quadrilátero 1234 . Para qualquer um dos elementos podemos escrever uma função de interpolação bilinear na forma

$$\phi = \sum_{i=1}^n N_i \Phi_i \quad (4)$$

onde $n=3$ para o triângulo, $n=4$ para o quadrilátero, N_i são as funções peso, e Φ_i são os valores de ϕ armazenados nos vértices do triângulo ou quadrilátero. Note que a Eq. (4) para o caso do triângulo é a equação do plano que passa pelos valores de Φ dos vértices do triângulo. Para obter as derivadas de ϕ , a Eq. (4) é derivada em relação a (x, y) fornecendo

$$\frac{\partial \phi}{\partial(x, y)} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial N_i}{\partial(x, y)} \Phi_i \quad (5)$$

Para o triângulo, os valores dos coeficientes N_i são dados por

$$N_1(x, y) = [(y_2 - y_3)x + (x_3 - x_2)y + (x_2y_3 - x_3y_2)] / DET \quad (6)$$

$$N_2(x, y) = [(y_3 - y_1)x + (x_1 - x_3)y + (x_3y_1 - x_1y_3)] / DET \quad (7)$$

$$N_3(x, y) = [(y_1 - y_2)x + (x_2 - x_1)y + (x_1y_2 - x_2y_1)] / DET \quad (8)$$

$$DET = (x_2y_3 + x_3y_1 + x_1y_2 - x_2y_1 - x_1y_3 - x_3y_2) \quad (9)$$

No caso do elemento quadrilátero, conforme representado na a Fig. 2.b, um novo sistema coordenado local (s,h) é adotado, fornecendo para os coeficientes N_i , as seguintes expressões

$$N_1(s, h) = (1/4)(1 - s)(1 - h) \quad (10)$$

$$N_2(s, h) = (1/4)(1 + s)(1 - h) \quad (11)$$

$$N_3(s, h) = (1/4)(1 + s)(1 + h) \quad (12)$$

$$N_4(s, h) = (1/4)(1 - s)(1 + h) \quad (13)$$

Observe que, as derivadas presentes na Eq. (5), envolverão, no caso do quadrilátero, derivadas das coordenadas (x,y) em relação ao sistema (s,h) . Estas expressões, referentes ao elemento quadrilátero, são detalhadas na metodologia FIELDS (Schneider & Raw, 1987).

Avaliação de ϕ nos pontos de integração. Considere inicialmente as Fig. 3.a e 3.b, que representam um ponto de integração genérico ip_1 , para um triângulo e um quadrilátero, respectivamente. Para a determinação dos valores de ϕ no ponto de integração ip_1 é adotada a função de interpolação completa, ou seja, obter o valor da função a partir da equação diferencial em sua forma mais geral possível. Para este caso temos,

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho V \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} - \Gamma^\phi \nabla^2 \phi = S^\phi \quad (14)$$

onde \vec{n} é um vetor unitário com a orientação de V_{av} , representado nas Fig. 3.a e 3.b. As aproximações dos termos temporal, convectivo, difusivo e fonte da Eq. (14) são dadas por

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{ip} = \rho \frac{\phi_{ip} - \phi_{ip}^0}{\Delta t} \quad (15)$$

$$\rho V \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \Big|_{ip} = \rho V_{av} \frac{\phi_{ip} - \phi_u}{L_c} \quad (16)$$

$$-\Gamma^\phi \nabla^2 \phi \Big|_{ip} = -\Gamma^\phi \left[\sum_{j=1}^4 N_j \Phi_j - \phi_{ip} \right] / L_d^2 \quad (17)$$

$$S^\phi \Big|_{ip} = d_{ip}^\phi \quad (18)$$

onde ϕ_{ip}^0 é conhecido da iteração anterior, Δt é o incremento temporal, V_{av} é o valor do escoamento médio que pode ser obtido como uma média dos valores nodais, e, ϕ_u , L_c e L_d são valores característicos de acordo com o esquema de interpolação adotado, e que será descrito a seguir.

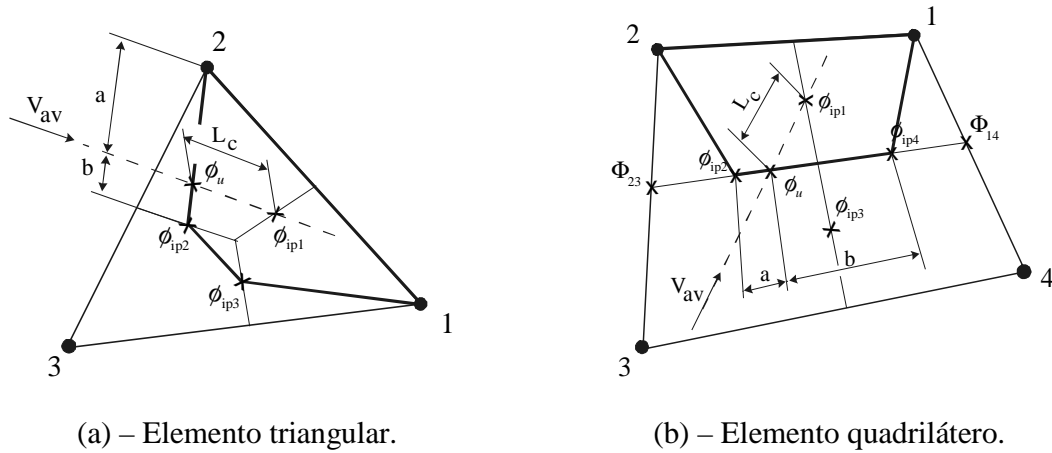


Figura 3 – Parâmetros da função de interpolação.

No caso dos elementos triangular e quadrilátero, representados na Fig. 3, o valor de L_c é lido diretamente na figura e o valor de ϕ_u , para o quadrilátero, por exemplo, é dado por

$$\phi_u = \frac{a \cdot \phi_{ip4} + b \cdot \phi_{ip2}}{a + b} \quad (\text{Fig. 3.b}) \quad (19)$$

Para o comprimento difusivo L_d , a metodologia FIELDS propõe, para um quadrilátero, o uso do valor

$$L_{d_{quadr}}^2 = \frac{\Delta x^2}{2} + \frac{3\Delta y^2}{8} \quad (20)$$

No caso do elemento triangular um novo valor deve ser aproximado. Considere inicialmente a Fig. 4, onde um elemento triangular esta representado.

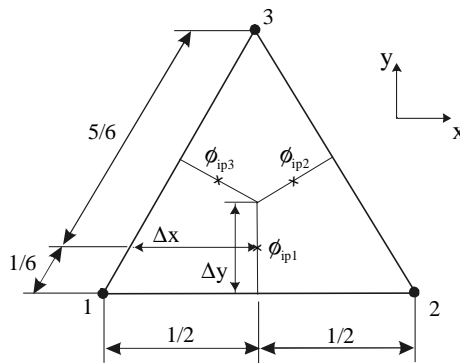


Figura 4 – Elemento triangular e parâmetros difusivos.

Utilizando diferenças centrais para aproximar as derivadas de segunda ordem nas direções coordenadas x e y , temos, respectivamente

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{ip_1} \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} \left\{ \frac{5}{6} \Phi_1 + \frac{5}{6} \Phi_2 - 2\phi_{ip_1} + \frac{1}{3} \Phi_3 \right\} \quad (21)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right|_{ip_1} \approx \frac{1}{(\Delta y)^2} \left\{ \Phi_1 + \Phi_2 - \frac{12}{5} \phi_{ip_1} + \frac{2}{5} \Phi_3 \right\} \quad (22)$$

Combinando as Eq. (21) e (22) temos o gradiente de ϕ e o parâmetro L_d para o triângulo como

$$\left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right] \Big|_{ip_1} = \frac{\left\{ \frac{5}{12} \Phi_1 + \frac{5}{12} \Phi_2 - \phi_{ip_1} + \frac{1}{6} \Phi_3 \right\}}{(\Delta x)^2/2 + 5(\Delta y)^2/12}. \quad (23)$$

$$L_{d_{triang}}^2 = \frac{\Delta x^2}{2} + \frac{5\Delta y^2}{12} \quad (24)$$

As aproximações referentes as Eq. (15) à (18) são introduzidas na Eq. (14) fornecendo uma equação para ϕ em qualquer ponto de integração. A formulação referente ao elemento quadrilátero é original da metodologia FIELDS (Schneider & Raw, 1987). Neste trabalho, além da formulação apresentada para o elemento triangular, o esquema de interpolação apresentado para os parâmetros da Eq. (16) foi modificado. Na formulação FIELDS original, o valor de ϕ_u poderá estar interpolado entre seis intervalos: $[\phi_{ip4}, \phi_{ip2}]$, $[\phi_{ip2}, \Phi_{23}]$, $[\Phi_{23}, \Phi_2]$, $[\Phi_2, \Phi_1]$, $[\Phi_1, \Phi_{14}]$, $[\Phi_{14}, \phi_{ip4}]$, vistos na Fig. 3.b. No esquema de interpolação aqui apresentado, estes intervalos se reduzem a quatro: $[\phi_{ip4}, \phi_{ip2}]$, $[\phi_{ip2}, \Phi_2]$, $[\Phi_2, \Phi_1]$, $[\Phi_1, \phi_{ip4}]$, simplificando a implementação computacional. Estes intervalos estão grifados tanto na Fig. 3.b para o quadrilátero, como na Fig. 3.a, para o triângulo.

2.4 Discretização das equações para ϕ

A integração da equação de conservação, Eq. (2), segue a formulação básica das metodologias CVFEM e FIELDS. Esta integração é realizada sobre o volume de controle P , representado na Fig. 1. Note que este volume é formado por vários elementos, triângulos e quadriláteros, que contribuirão individualmente para obtenção das equações aproximadas de cada volume. Os sub-volumes de controle $1aoc$, hachurado nas Fig. 2.a e 2.b, são parte do volume de controle no qual é realizada a integração. Portanto, tanto o elemento triangular 123 , quanto o elemento quadrilátero 1234 , contribuirão no balanço total da propriedade ϕ do volume com dois fluxos \vec{J} . Um para o segmento \overline{ao} e outro para o segmento \overline{oc} , calculados, respectivamente, nos pontos r e t das Fig. 2.a e 2.b. Portanto, integrando a Eq. (2) no volume de controle P , temos

$$\frac{M_P \phi_P - M_P^o \phi_P^o}{\Delta t} + \int_a^o \vec{J} \cdot \vec{n} ds + \int_o^c \vec{J} \cdot \vec{n} ds - \int_{1aoc} S^\phi dV + \left[\begin{array}{c} \text{contribuição de outros} \\ \text{elementos associados ao nó } P \end{array} \right] = 0 \quad (25)$$

Quando as parcelas correspondentes a todos os elementos for adicionada e aplicadas as condições de contorno, teremos uma equação algébrica de conservação do volume de controle centrado em P , conectado a todos os seus vizinhos, na forma

$$A_i \phi_i = \sum_n A_{nb} \phi_{NB} + B_i \quad (26)$$

onde i indica o número do volume de controle e nb os volumes vizinhos. Resolvendo o sistema linear obtido através de um algoritmo adequado, teremos os valores de ϕ determinados em todos os vértices dos triângulos ou quadriláteros, ou seja, no centro de todos os volumes.

2.5 Condições de contorno

No método de discretização adotado, os volumes que se encontram na fronteira do domínio tem seus centros localizados sobre essa fronteira. Portanto, para ϕ prescrito a equação do volume de fronteira passa assumir a forma $\phi = \phi_{\text{prescrito}}$. Em caso de fluxo prescrito, a equação do volume de fronteira é empregada e o fluxo conhecido acrescido ao termo fonte.

3. RESULTADOS

Para avaliar o desempenho da formulação proposta o problema teste escolhido foi o transporte, com velocidade uniforme, de um salto na variável escalar ϕ . A equação governante deste problema é a Eq. (1), excluído o termo temporal e o termo fonte. A Figura 5 ilustra o problema e o formato das malhas utilizadas.

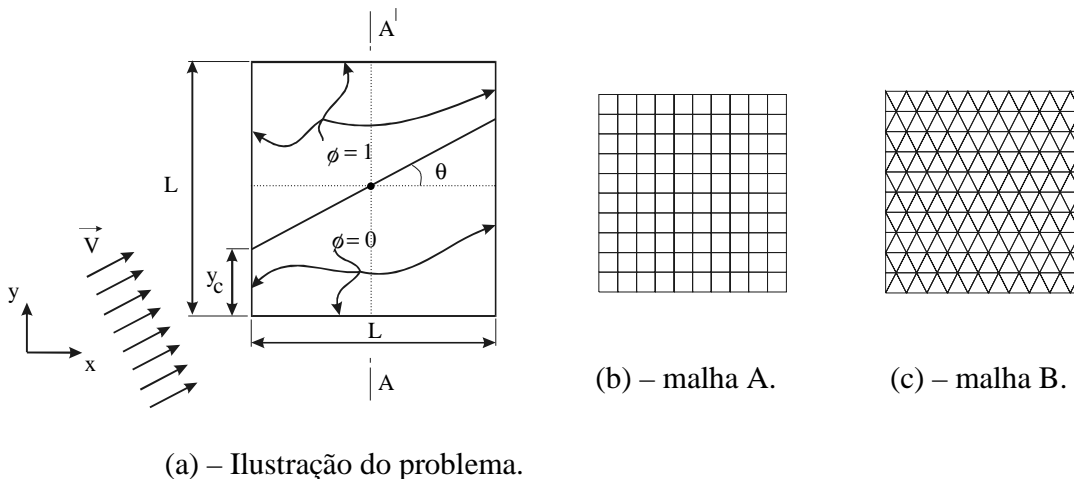


Figura 5 – Transporte da variável ϕ , com velocidade uniforme e formato de malhas.

Este problema foi resolvido para o número de Reynolds $Re=250$ e $Re \rightarrow \infty$. Para comparação dos resultados obtidos nesta formulação, resultados de outras duas metodologias foram utilizadas: a metodologia dos diagramas de Voronoi (Maliska &

Vasconcellos, 2000) que é baseada na construção dos volumes através de uma triangulação do tipo representada na Fig. 5.c, e a metodologia tradicional estruturada (Maliska, 1995) que utiliza malhas em coordenadas generalizadas ou cartesianas, como na Fig. 5.b. Como referência é adotada a solução analítica aproximada, apresentada por Raithby (1976). As condições de contorno são $\phi = 1$, acima da linha paralela ao escoamento e que passa através do centro do domínio e $\phi = 0$, abaixo dessa linha. A solução obtida é plotada ao longo da seção AA', onde $x = 0,25$. A solução deste problema foi obtida para $\theta = 26,57^\circ$, $\theta = 45^\circ$ e malha 31×31 . As Figuras 6 à 9 apresentam os resultados obtidos.

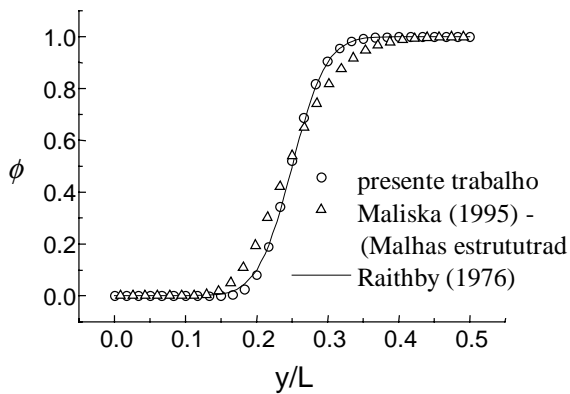


Figura 6 - Perfil de ϕ , $x = 0.25$, $\theta = 26.57^\circ$, $Re = 250$, malha A (31×31).

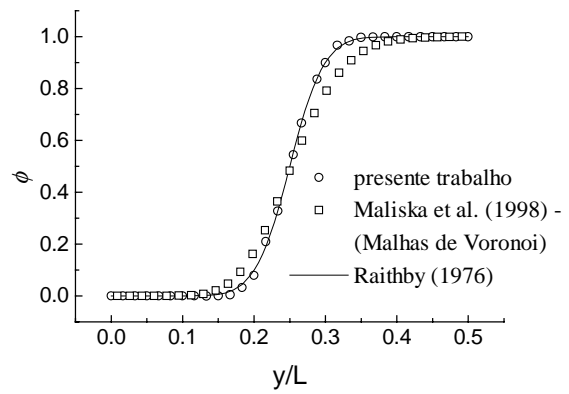


Figura 7 - Perfil de ϕ , $x = 0.25$, $\theta = 26.57^\circ$, $Re = 250$, malha B (31×31).

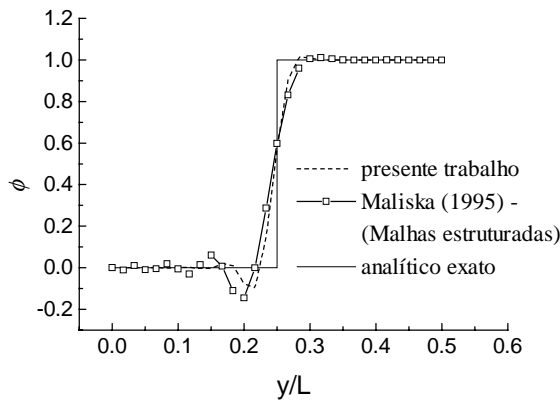


Figura 8 - Perfil de ϕ , $x = 0.25$, $\theta = 26.57^\circ$, $Re \rightarrow \infty$, malha A (31×31).

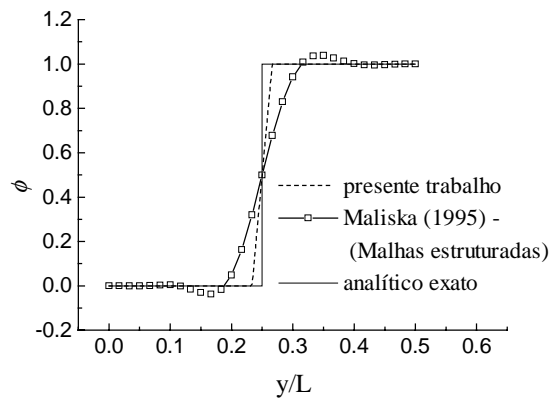


Figura 9 - Perfil de ϕ , $x = 0.25$, $\theta = 45^\circ$, $Re \rightarrow \infty$, malha A (31×31).

Para o modelo numérico deste trabalho, a função de interpolação é aplicada na direção do escoamento, já para a metodologia Voronoi e estruturada a interpolação é aplicada sempre normal as faces do volume de controle, que nem sempre estão alinhadas com o escoamento. Esta é a provável razão pela qual melhores resultados foram obtidos com esta proposta. Um esquema de segunda ordem nos termos convectivos da função de interpolação, Eq. (16), possivelmente minimizem as oscilações numéricas que aparecem nas soluções da Fig. 8.

4. CONCLUSÕES

O objetivo deste trabalho foi a implementação de uma metodologia, usando malhas não-estruturadas formada por quadriláteros e triângulos, baseada nas metodologias CVFEM (Baliga & Patankar, 1988) e FIELDS (Schneider & Raw, 1987), para a solução numérica da equação de conservação de uma variável escalar. A metodologia dos Diagramas de Voronoi (Maliska & Vasconcellos, 2000), e a formulação estruturada do método dos volumes finitos (Maliska, 1995), serviram como referência para a comparação do desempenho da formulação aqui proposta.

Para validação dos esquemas numéricos aplicados, o problema teste escolhido foi o transporte, com convecção dominante, de um salto em uma variável escalar, que possui solução analítica aproximada dada por (Raithby, 1976).

A metodologia possui versatilidade para discretização de domínios, pois possibilita o emprego de malhas estruturadas e não-estruturadas. O emprego de discretizações triangular e quadrangular associado a um esquema de interpolação que segue a direção média do escoamento proporciona bons resultados para problemas de convecção dominante.

REFERÊNCIAS

- Baliga, B.R. & Patankar, S.V., 1988, Elliptic Systems: Finite Element Method II, Handbook of Numerical Heat Transfer, pp. 421-455, John Wiley & Sons.
- Maliska, C.R., 1995, Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, LTC, Rio de Janeiro.
- Maliska, C.R. & Vasconcellos, J.F.V., 2000, An Unstructured Finite Volume Procedure for Simulating Flows with Moving Fronts, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier Science S.A, vol. 182, pp.401-420.
- Mavriplis, D.J., 1992, Three dimensional unstructured multigrid for the Euler equations, *AIAA Journal*, n. 30, pp. 1753-1761.
- Raithby, G.D., 1976, Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow, Computational Method Applied Mechanical Engineering, vol. 9, pp. 153-164.
- Schneider, G.E. & Raw, M.J., 1987, Control Volume Finite Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Co-Located Variables – 2: Application and Validation, Numerical Heat Transfer, vol. 11, pp. 391-400, 1987.

Title: A Finite Volume Formulation Using Unstructured and Hybrid Grids

Abstract: The use of unstructured grids for domain discretization has increased significantly in recent years. These grids have better adaptative ness for complex domains. However, the use of structured grids, when possible, reduces significantly the computational effort. This work proposes a numerical solution for the convection-diffusion equation for a scalar variable using the Finite Volume Method in hybrid grids, i.e., a grid composed by quadrilateral and triangles. The method result from a combination of the FIELDS method (Schneider & Raw, 1987) and CVFEM method (Baliga and Patankar, 1988).

Key words: Numerical Method, Unstructured grids, Fluid Flow.