

## ESQUEMA FLUX-SPLINE APLICADO A PROBLEMAS DIFUSIVOS TRIDIMENSIONAIS EM REGIME PERMANENTE

Paulo César Oliveira<sup>1</sup>

### RESUMO

Este trabalho teve por finalidade apresentar um esquema de discretização mais eficiente que o tradicional esquema de diferenças centrais, denominado Flux-Spline, a fim de simular, numericamente, problemas tridimensionais governados por difusão. A eficiência do esquema proposto foi avaliada por meio da resolução de problemas-teste com solução analítica conhecida. Verificou-se que tal esquema possui características adequadas de precisão e, portanto, uma opção recomendável para a solução de problemas difusivos tridimensionais.

**Palavras-chave:** difusão, volumes finitos, transferência de calor, métodos numéricos

### FLUX-SPLINE SCHEME APPLIED TO STEADY STATE TRIDIMENSIONAL DIFFUSIVE PROBLEMS

### ABSTRACT

This objective of this research was to present a discretization scheme more efficient than the traditional central difference scheme, called Flux-Spline, in order to simulate tridimensional problems governed by diffusion. The efficiency of the proposed scheme was evaluated by means of the resolution of two test problems with a known analytical solution. The results showed a discretization scheme with adequate characteristics of accuracy that is, therefore, a recommendable option for the solution of tridimensional diffusive problems.

**Key words:** diffusion, finite volumes, heat transfer, numerical methods

### INTRODUÇÃO

Processos físicos governados por difusão pura aparecem em fenômenos de interesse prático, como escoamento em meios porosos, tais como solos agrícolas e materiais biológicos, no processamento de alimentos, na condução de calor em sólidos, em processos metalúrgicos contendo mudanças de fase, nos escoamentos potenciais ou completamente desenvolvidos em dutos, na difusão e transferência de massa.

Embora em alguns casos particulares se conheça uma solução analítica para as equações diferenciais parciais que

governam tais fenômenos, a presença de geometrias não regulares e a ausência de linearidade devido à variação das propriedades do meio ou a existência de condições de contorno particulares, impossibilitam a solução desses problemas com os métodos analíticos atualmente conhecidos, tornando obrigatória a utilização de métodos numéricos.

Exemplos de aplicação do método de volumes finitos, usando-se o tradicional esquema de discretização em problemas bidimensionais de secagem, são encontrados no trabalho de França & Fortes (1991) que trata da simulação bidimensional de secagem de milho em leito fixo, e em Oliveira et al. (1991) que

<sup>1</sup> Professor, Doutor, Departamento de Engenharia Rural, Centro Agropecuário, UFES, CP 16, CEP 29500 - 000, Alegre, ES, Fone: (027) 552 1400 - Ramal: 233, Fax: (027) 552 2622, E-mail :caufes@ npd.ufes.br

abordaram a secagem de milho acoplada à convecção natural em uma das faces do silo.

Com o objetivo de se reduzir o esforço computacional, pode ser empregado, nesses casos, um esquema de discretização denominado Flux-Spline que, como mostram os trabalhos de Varejão (1979), Nieckele (1985), Varejão et al. (1991a), Varejão et al. (1991b), e Oliveira (1997) tem desempenho superior aos esquemas tradicionais utilizados por Patankar (1980) para problemas difusivos e convectivos bidimensionais em regime permanente. Este trabalho pretende mostrar que tal superioridade se mantém para casos difusivos tridimensionais, podendo-se obter resultados adequados em termos de erro, com malhas relativamente grosseiras.

## MATERIAL E MÉTODOS

### Desenvolvimento do Esquema Flux-Spline

Nesta seção, o esquema será detalhado para o caso unidimensional em regime permanente, a partir do qual será gerada a formulação multidimensional. A discretização é baseada sobre uma formulação de volumes de controle.

### Difusão Unidimensional em Regime Permanente

A equação de governo para problemas difusivos tridimensionais em regime permanente é:

$$\frac{\partial Jx}{\partial x} + \frac{\partial Jy}{\partial y} + \frac{\partial Jz}{\partial z} = S^{\phi} \quad (1)$$

em que  $J$  é o fluxo difusivo nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  e  $S^{\phi}$  o termo fonte.

Para um caso unidimensional:

$$\frac{\partial J}{\partial x} = S^{\phi} \quad (2)$$

O termo fonte  $S^{\phi}$  é linearizado ao longo do domínio da variável dependente  $\phi$ , na forma  $S^{\phi} = S_c + S_p \cdot \phi$  (Patankar, 1980) sendo  $S_c$  a parte constante do termo fonte e  $S_p$  função da variável dependente  $\phi$ . O fluxo difusivo  $J$ , na direção  $x$ , é dado por:

$$J = -K \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3)$$

em que  $K$  representa o coeficiente de difusão, podendo ser ou não função da variável dependente  $\phi$ .

Integrando a equação de governo (2) sob as hipóteses de que o termo fonte é distribuído uniformemente em cada volume de controle de comprimento  $\Delta x_i$  e que os fluxos são distribuídos uniformemente nas interfaces dos volumes de controle, como mostrado na Figura 1 obtém-se, pelo método dos volumes finitos, a expressão (4):

$$J_{i+1} - J_i = (S_c + S_p \cdot \phi_i) \cdot \Delta x_i \quad (4)$$

A variável dependente  $\phi_i$  a ser calculada quando da simulação, é posicionada no centro do volume de controle correspondente, em  $x_i = D\Delta x_i/2$ . O esquema Flux-Spline assume que o fluxo em cada volume de controle varia linearmente, enquanto no esquema tradicional o fluxo é assumido, ou seja,  $J_i = A_i \cdot x_i + B_i$  sendo  $A_i = (J_{i+1} - J_i)/\Delta x_i$  e  $B_i = J_i$ . Substituindo-se esses valores na Eq. (3) e, após integração, impondo-se a

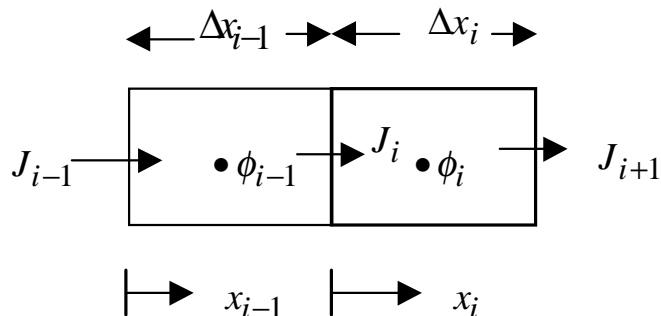


Figura 1. Discretização para volumes finitos

condição  $\phi(x_i = D\Delta x_i/2) = \phi_i$  no volume de controle  $i$ , obtém-se:

$$\phi = \phi_i - \frac{(J_{i+1} - J_i) \cdot \Delta x_i}{2} \cdot \frac{\Delta x_i}{K_i} \left( \frac{x_i^2}{\Delta x_i^2} - \frac{1}{4} \right) - J_i \cdot \frac{\Delta x_i}{K_i} \left( \frac{x_i}{\Delta x_i} - \frac{1}{2} \right) \quad (5)$$

Note-se que  $(J_{i+1} - J_i)$  aparece no termo quadrático da Eq. (5) num caso unidimensional, de acordo com a Eq. (4) representando a influência do termo fonte em cada volume de controle. Para um caso multidimensional se incluiria, também, a influência das outras direções pois, usando-se Eq. (1) mostra-se que:

$$\frac{\partial Jx}{\partial x} = S^{\phi} - \left( \frac{\partial Jy}{\partial y} + \frac{\partial Jz}{\partial z} \right) \quad (6)$$

Assim, embora o perfil interpolante tenha sido derivado a partir da hipótese de unidimensionalidade, casos multidimensionais podem ser tratados de forma adequada e eficiente, devido a esta característica particular do esquema Flux-Spline.

Dois volumes de controle adjacentes, como mostrado na Figura 1 possuem o mesmo valor de  $\phi$  na interface comum. Assim, com  $\phi(x_i = 0) = \phi(x_{i-1} = D\Delta x_{i-1})$  por meio da Eq. (5) obtém-se a equação para os fluxos na direção coordenada:

$$J_i = J_{i+1} + DJ_i \cdot (\phi_{i-1} - \phi_i) \quad (7)$$

em que:

$$DJ_i = \frac{2 \cdot 0}{\left( \frac{\Delta x_{i-1}}{K_{i-1}} + \frac{\Delta x_i}{K_i} \right)} \quad (8)$$

$$J_{i+1} = BJ_i \cdot (J_i - J_{i+1}) + CJ_i \cdot (J_i - J_{i-1}) \quad (9)$$

$$BJ_i = DJ_i \cdot \frac{\Delta x_i}{K_i} \cdot \frac{1}{8} \quad \text{e} \quad CJ_i = DJ_i \cdot \frac{\Delta x_{i-1}}{K_{i-1}} \cdot \frac{1}{8} \quad (10)$$

Note-se que, como os fluxos são armazenados nas interfaces e assumidos com variação linear dentro dos volumes de controle, é assegurada a continuidade da derivada  $\partial \phi / \partial x$  ao longo de todo o domínio. A Eq. (7) quando substituída na equação de governo integrada (4) fornece a equação de discretização da variável dependente, representada por:

$$AIP_i \cdot \phi_i = AIM_i \cdot \phi_{i-1} + AIP_{i+1} \cdot \phi_{i+1} + S_c \cdot \Delta x_i + S_p \phi_i \quad (11)$$

em que,

$$AIM_i = DJ_{i+1} \quad \text{e} \quad AIP_i = DJ_i \quad (12)$$

$$AP_i = AIM_i + AIP_i - Sp_i \cdot \Delta x_i \quad (13)$$

$$Ssp_i = (Jhat_i - Jhat_{i+1}) \quad (14)$$

O método de solução empregado consiste em arbitrar, inicialmente, uma distribuição para a variável dependente e calcular os fluxos que são então usados para obter-se o termo fonte adicional  $Ssp$ , característico do esquema Flux-Spline. O sistema de equações algébricas para a variável dependente forma uma matriz tridiagonal, que é então resolvida usando-se o algoritmo TDMA (Tridiagonal-Matrix Algorithm) como mostrado em Patankar (1980). Com esses valores retorna-se ao cálculo dos fluxos até a obtenção da convergência da variável dependente e um resíduo aceitável para a equação de governo. O erro percentual cometido na simulação é definido para cada ponto do domínio, na forma:

$$Erro = 100 \cdot abs \left( 1 - \frac{\phi_{num}}{\phi_{exato}} \right) \quad (15)$$

em que  $\phi_{num}$  é o valor da variável dependente obtida pelo procedimento numérico e  $\phi_{exato}$  o valor obtido pelo procedimento analítico. Será usado, para a construção do gráfico de erro, o valor do máximo erro cometido no domínio de cálculo como, função de uma malha regular com  $n$  volumes de controle em cada direção coordenada, de forma a comparar a ordem de precisão dos esquemas de discretização.

### Difusão Multidimensional

Integrando-se, de acordo com o método de volumes finitos, a Eq. (1) e aplicando, então, a expressão desenvolvida para o fluxo na direção  $x$ , às outras direções coordenadas, obtém-se as equações de discretização para os fluxos em  $x$ ,  $y$  e  $z$  e para a variável dependente. As equações são:

$$AP_{i,j,k} \cdot \phi_{i,j,k} = \sum Anb_{i,j,k} \cdot \phi nb_{i,j,k} + Sc_{i,j,k} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z_k + Ssp_{i,j,k} \quad (16)$$

em que,

$$AP_{i,j,k} = AIM_{i,j,k} + AIP_{i,j,k} + AJM_{i,j,k} + AJP_{i,j,k} + AKM_{i,j,k} + AKP_{i,j,k} - Sp_{i,j,k} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z_k \quad (17)$$

$$\sum Anb_{i,j,k} \cdot \phi nb_{i,j,k} = AIM_{i,j,k} \cdot \phi_{i-1,j,k} + AIP_{i,j,k} \cdot \phi_{i+1,j,k} + AJM_{i,j,k} \cdot \phi_{i,j-1,k} + AJP_{i,j,k} \cdot \phi_{i,j+1,k} + AKM_{i,j,k} \cdot \phi_{i,j,k-1} + AKP_{i,j,k} \cdot \phi_{i,j,k+1} \quad (18)$$

$$Ssp_{i,j,k} = (JhatX_{i,j,k} - JhatX_{i+1,j,k}) \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z_k + (JhatY_{i,j,k} - JhatY_{i,j+1,k}) \cdot \Delta x_i \cdot \Delta z_k + (JhatZ_{i,j,k} - JhatZ_{i,j,k+1}) \cdot \Delta x_i \cdot \Delta y_j \quad (19)$$

$$AIM_{i,j,k} = DJX_{i,j,k} \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z_k \quad (20)$$

$$AIP_{i,j,k} = DJX_{i+1,j,k} \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z_k \quad (21)$$

$$AJM_{i,j,k} = DJY_{i,j,k} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta z_k \quad (22)$$

$$AJP_{i,j,k} = DJY_{i,j+1,k} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta z_k \quad (23)$$

$$AKM_{i,j,k} = DJZ_{i,j,k} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta y_j \quad (24)$$

$$AKP_{i,j,k} = DJZ_{i,j,k+1} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta y_j \quad (25)$$

As expressões para os fluxos  $JX$ ,  $JY$ ,  $JZ$ , os pseudo-fluxos  $JhatX$ ,  $JhatY$  e  $JhatZ$  e os demais coeficientes,  $DJX$ ,  $BJX$ ,  $CJX$ ,  $DJY$ ,  $BJY$ ,  $CJY$ ,  $DJZ$ ,  $BJZ$  e  $CJZ$ , são análogas àquelas deduzidas para o caso unidimensional. O método de solução para casos tridimensionais é similar ao utilizado no caso unidimensional, sendo que na resolução do sistema de equações algébricas é usado o método Line-by-Line, descrito por Patankar (1980) em cada plano coordenado nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ .

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### Aplicação do esquema a problemas-teste

A distribuição da variável dependente  $\phi$ , num domínio adimensional entre zero e um para todos os eixos coordenados, com o coeficiente de difusão  $K$  assumido como constante, obedece às seguintes distribuições adimensionais:

Caso 1:

$$F1(X,Y,Z) = \exp(X) \cdot \exp(Y) \cdot \exp(Z) \quad (26)$$

Substituindo-se essa distribuição na equação de governo (1) obtém-se a distribuição dos termos-fonte que, para este caso, é fornecida pela expressão:

$$S^{F1} = -3 \cdot F1 \quad (27)$$

Caso 2:

$$F2(X,Y,Z) = \sin\left(\frac{\pi \cdot X}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi \cdot Y}{2}\right) \cdot \exp(Z) \quad (28)$$

Da mesma forma, obtém-se a distribuição dos termos-fonte que, neste caso, é:

$$S^{F2} = \left( \frac{\pi^2}{2} - 1 \right) \cdot F2 \quad (29)$$

A curva representando o erro percentual máximo, função de uma malha com  $N$  volumes de controle, em cada direção, para os dois casos, está plotada na Figura 2.

Como mostrado graficamente para os casos tratados, o esquema Flux-Spline necessita para determinado nível de erro, de malhas menos refinadas que o tradicional esquema de diferenças centrais. A razão disto, é o perfil interpolante característico do esquema descrito pela Eq. (5) cujo termo quadrático, que contém a variação do fluxo ao longo do volume de controle promove, ao mesmo tempo, o tratamento do termo fonte e da influência das outras dimensões. Esta característica fornece ao esquema maior precisão, possibilitando menor esforço computacional ao se simular problemas onde seja necessário abordar o comportamento transiente dos fenômenos. Para problemas envolvendo escoamentos como os que ocorrem no transporte de calor e massa durante a secagem e/ou armazenamento de grãos, as equações de governo possuem, além do termo difusivo, termos de transporte convectivo, devido ao campo de velocidades. Assim, o perfil interpolante a ser gerado pelo esquema é mais complexo que o parabólico aqui derivado para difusão pura, sendo composto por uma reta mais um termo exponencial.

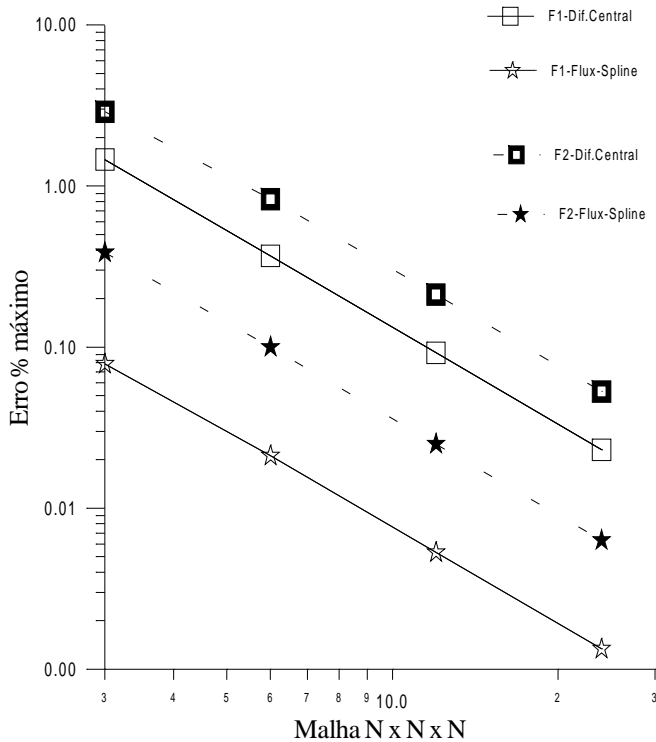


Figura 2. Erro como função da malha

## CONCLUSÕES

Com base nas discussões referentes aos resultados obtidos neste trabalho, pode-se concluir que:

1. O esquema Flux-Spline mostrou-se, em termos de erro, mais preciso que o tradicional esquema de diferença central, para problemas difusivos tridimensionais em regime permanente.
2. Ao se fixar certo nível de erro, a malha empregada para alcançá-lo utilizando-se o esquema proposto, envolve um número significativamente menor de volumes de controle que o empregado pelo esquema de diferença central.

3. A utilização do esquema Flux-Spline em problemas difusivos tridimensionais transientes, pode ser recomendada com a finalidade de se diminuir o esforço computacional.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- FRANÇA, A.S.; FORTES, M. Simulação bidimensional de secadores de grãos. In: SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL, 1991, Belo Horizonte. **Anais...** Belo Horizonte: UFMG, 1991. p.518-527.
- NIECKELE, A.O. **Development and evaluation of numerical schemes for the solution of convection-diffusion equations.** Minnesota, USA: University of Minnesota, 1985, 296p. Ph.D. Thesis.
- OLIVEIRA, L.S.; FORTES, M.; FERREIRA, W.R. Natural drying of a vertical slab of a biological material. In: SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL, 1991, Belo Horizonte. **Anais...** Belo Horizonte: UFMG, 1991. p.286-294.
- OLIVEIRA, P.C. **Esquema FLUX-SPLINE aplicado em cavidades abertas com convecção natural.** Campinas: UNICAMP, 1997. 196p. Tese Doutorado
- PATANKAR, S.V. **Numerical heat transfer and fluid flow.** New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. 197 p.
- VAREJÃO, L.M.C. **Flux-Spline method for heat, mass and momentum transfer** Minnesota, USA: University of Minnesota, 1979. 235p. Ph. D. Thesis.
- VAREJÃO, L.M.C.; PATANKAR, S.V.; KARKI, K.C. Flux-Spline method for convection-diffusion problems. In: SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL, 1991, Belo Horizonte. **Anais...** Belo Horizonte: UFMG, 1991a. p.161-174.
- VAREJÃO, L.M.C.; PATANKAR, S.V.; KARKI, K.C. Flux-Spline method for conduction-type problems. In: SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL, 1991, Belo Horizonte. **Anais...** Belo Horizonte: UFMG, 1991b. p. 175-184.