



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS  
FACULDADE DE MATEMÁTICA

ALANA PAULA MONTEIRO SANTOS

**SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE  
CONVECÇÃO-DIFUSÃO NO OPENFOAM: UMA  
APLICAÇÃO DO MÉTODO DE VOLUMES  
FINITOS**

BELÉM

2023

ALANA PAULA MONTEIRO SANTOS

**SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE  
CONVECÇÃO-DIFUSÃO NO OPENFOAM: UMA  
APLICAÇÃO DO MÉTODO DE VOLUMES  
FINITOS**

Trabalho de conclusão de curso apresentado para obtenção do grau de Licenciado(a) em Matemática da Universidade Federal do Pará.

Orientador: Prof. Dr. Manoel Silvino Batalha de Araújo.

BELÉM

2023

CERTIFICADO DE AVALIAÇÃO

ALANA PAULA MONTEIRO SANTOS

**SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE  
CONVECÇÃO-DIFUSÃO NO OPENFOAM: UMA  
APLICAÇÃO DO MÉTODO DE VOLUMES  
FINITOS**

Trabalho de conclusão de curso apresentado como requisito para obtenção do título de Licenciado(a) Pleno(a) em Matemática da Universidade Federal do Pará, pela seguinte banca examinadora:

---

Prof. Dr. Manoel Silvino Batalha de Araújo (Orientador)  
Faculdade de Matemática, UFPA

---

Prof. Dr. Anderson David de Souza Campelo (Membro)  
Faculdade de Matemática, UFPA

---

Prof. Dr. Samuel Levi Freitas da Luz (Membro)  
Faculdade de Matemática, UFPA campus Castanhal

DATA DA DEFESA: 19/12/2023

Conceito: \_\_\_\_\_

Belém - Pará

2023

*Com gratidão a Deus, dedico à minha família, aos meus amigos e aos meus professores.*

*"Distante de ti, Senhor, não posso viver, não vale a pena existir."*

Diante do Trono.

---

# AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente a Deus, por ter me sustentado e capacitado até aqui, pois sem Ele eu nada seria e nada poderia fazer.

Agradeço também aos meus pais, Paulo e Alessandra, por terem cuidado de mim e sempre me apoiado. Além do esforço para me permitir ter uma boa educação e chegar até aqui. Obrigada mesmo, amo muito vocês e reconheço tudo que fizeram e ainda fazem por mim!

Agradeço aos meus irmãos Iana e Ian, que sempre me acompanharam, apoiaram e ajudaram quando foi preciso. Obrigada por tornarem meus dias mais fáceis e saibam que o seus companheirismos e incentivos foram mais que essenciais pra mim, amo muito vocês!

Agradeço a cada um dos meus amigos que estiveram comigo durante essa caminhada, não citarei nomes, por medo de esquecer alguém, mas saibam que eu amo cada um e se não fosse por vocês eu não teria conseguido. Vocês tornaram a minha vida acadêmica menos solitária e mais leve. Eu não tive uma turma fixa, devido à pandemia de ocorreu em 2020, ano em que ingressei no curso. Porém, isso me permitiu conhecer várias pessoas diferentes, as quais, por muitas delas, eu tenho um carinho imenso. Enfim, muito obrigada amigos, sem vocês a faculdade seria algo muito mais pesado, vocês tornaram meus dias mais alegres e me ajudaram a continuar nos momentos mais difíceis.

Agradeço a cada um dos professores com quem pude ter contato durante esta graduação, os quais contribuíram para a minha formação e me mostraram a beleza que a matemática pode ter. Admiro muito vocês, obrigada!

Agradeço ao Professor Manoel Silvino pelas contribuições e pela paciência ao me orientar na realização deste trabalho. Além disso, agradeço aos professores membros da banca, os quais leram e contribuíram para este trabalho.

Finalmente, agradeço a cada um que me ajudou direta ou indiretamente para chegar até aqui! Deixo aqui o meu muito obrigada a todos!

---

# RESUMO

Este trabalho foi elaborado vislumbrando a contribuição para o conhecimento e compreensão de uma parte da Matemática Aplicada. Esta pesquisa foi desenvolvida com base em referências bibliográficas. Baseado nos estudos desenvolvidos, constatou-se que as técnicas mais populares de solução numérica de equações diferenciais parciais (EDPs) são os seguintes métodos: Diferenças Finitas, Elementos Finitos e Volumes Finitos. Para a Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) o método de Volumes Finitos se destaca, pois tem a vantagem da conservação dos fluxos nas grandezas trabalhadas, em sua formulação, o que possibilita a utilização de malhas não estruturadas de uma maneira mais natural. O OpenFOAM é um software de código aberto no qual estão implementadas várias bibliotecas para a discretização de Equações Diferenciais Parciais pelo método de Volumes Finitos. A sua utilização de forma eficiente requer um estudo teórico prévio sobre as Equações Diferenciais, o próprio método de Volumes Finitos juntamente com as técnicas de discretização dos termos convectivo e difusivo presentes nas equações de conservação. A equação de convecção-difusão, em uma e duas dimensões, é a EDP com a qual podemos fazer os primeiros estudos dessa teoria, possibilitando entender as principais técnicas de uma forma prática e fazendo os estudos necessários para trabalhar com equações mais complexas da DFC. Este trabalho tem como objetivos estudar EDPs de segunda ordem, estudar o método de volumes finitos e sua utilização para a discretização da equação de convecção-difusão em duas dimensões, além de fazer a implementação numérica das equações no OpenFOAM.

**Palavras-chave:** Equações Diferenciais Parciais. OpenFOAM. Equação de convecção e difusão. Método de Volumes Finitos. Dinâmica dos Fluidos Computacional.

# SUMÁRIO

	<b>Página</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>11</b>
<b>2 Noções Iniciais</b>	<b>15</b>
2.1 Equações Diferenciais Parciais . . . . .	15
2.2 Discretização de uma EDP . . . . .	17
2.3 Métodos Numéricos . . . . .	18
2.3.1 Método de Volumes Finitos . . . . .	19
2.4 OpenFOAM . . . . .	20
<b>3 O Método de Volumes Finitos para Problemas de Convecção-Difusão</b>	<b>22</b>
3.1 Equação de Convecção e Difusão Unidimensional no estado Estacionário . . . . .	25
3.2 Método de Diferenças Centrais . . . . .	27
3.3 Avaliação do Método de Diferenças Centrais . . . . .	31
3.4 O método Upwind . . . . .	35
3.5 Avaliação do Método Upwind . . . . .	39
3.6 O Método QUICK . . . . .	42
3.7 Avaliação do Método QUICK . . . . .	51
<b>4 Aplicação no OpenFOAM</b>	<b>52</b>
4.1 Considerações Finais . . . . .	62
<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>64</b>

---

---

# CAPÍTULO 1

---

## INTRODUÇÃO

Ao trabalhar com conceitos da Matemática Aplicada temos muitos tópicos importantes, dentre eles destacamos a dinâmica dos fluidos. Esse tópico possui grande relevância devido à sua variedade de aplicações, desde a estudos relacionados ao corpo humano, como a corrente sanguínea, até os mais diversos, como o funcionamento de motores. Sendo assim, como afirma White (2009) [11], a maioria das coisas ou são um fluido, ou se movem em um ou estão próximas a um. Assim, tentamos mostrar a importância deste objeto de estudo.

Dentro deste conteúdo, existem vários aspectos que podem ser abordados. Nesta pesquisa, buscou-se estudar o movimento de uma propriedade em um fluido onde ocorre o fenômeno da convecção e difusão, fazendo a discretização da sua equação.

Ao falar destes fenômenos, convecção e difusão, precisa-se entender o que eles representam. Sendo assim considere os exemplos nas imagens 1.1 e 1.2, onde tenta-se representar o movimento que uma propriedade qualquer realiza em um fluxo, dependendo do fenômeno que exerce maior influência naquele escoamento. Dessa forma, temos que na imagem 1.1 o fluxo é convectivo e na imagem 1.2 o fluxo é difusivo:

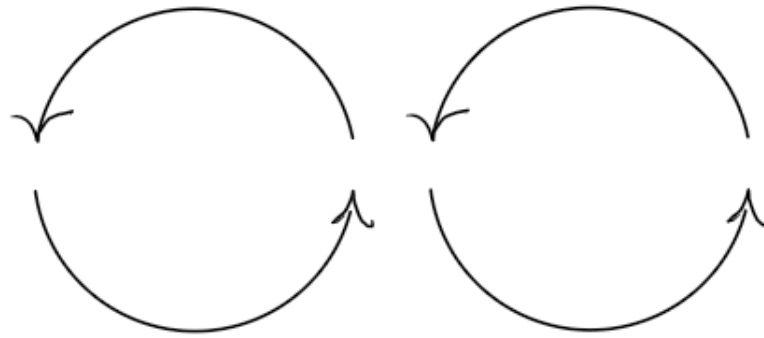


Figura 1.1: Movimento que uma propriedade faz em um fluxo convectivo

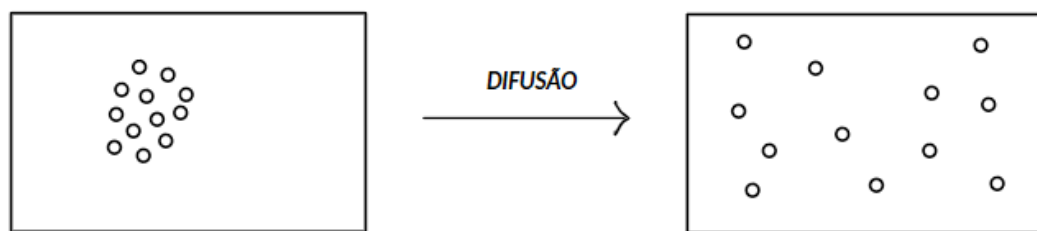


Figura 1.2: Movimento que uma propriedade faz em um fluxo difusivo

Assim, é necessário estudar como a propriedade se comporta em um fluxo onde ocorre os dois fenômenos citados. Além disso, a convecção e difusão estão presentes em muitos fenômenos da natureza, como exemplo podemos citar a propagação do calor. Por isso, é importante estudar este fenômeno.

Dentre os métodos de discretização de EDP's, destacamos o Método de Volumes Finitos (MVF), pois ele apresenta algumas vantagens. Fortuna (2000) [4] afirma que as equações obtidas na utilização desse método permitem interpretações físicas diretas, além de possibilitar a utilização de malhas não estruturadas que são malhas onde os elementos não são definidos de uma maneira ordenada, ou seja, os espaçamentos entre os elementos não são uniformes. Esse tipo de malha permite trabalhar em geometrias mais complexas, entretanto são mais difíceis de construir. Nesse sentido, o MVF permite trabalhar com essas malhas, ampliando a variedade de geometrias que o domínio do escoamento pode apresentar.

Seguindo, o software utilizado nesta pesquisa foi o OpenFOAM [6], onde conseguimos simular o comportamento do fluido nas condições desejadas. A utilização desse software se mostrou muito eficiente e vantajosa, enriquecendo bastante este trabalho.

A seguir, apresentamos a forma como esta monografia está estruturada, citando de maneira bem resumida os principais tópicos que serão abordados e como eles estão organizados nesta pesquisa.

Neste trabalho, será apresentado a solução da equação de convecção e difusão utilizando Métodos de Volumes Finitos (MVF), mais especificamente, discorre-se sobre três MVF que são utilizados para resolver esta equação, sendo eles o método de Diferenças Centrais, o Upwind e o QUICK. Tem-se o intuito de explorar esse assunto pois esta equação rege muitos fenômenos que acontecem na natureza, por isso ela possui grande importância. Assim, ao pesquisar formas de resolver esta Equação Diferencial Parcial (EDP), constatou-se que o MVF é vantajoso, pois pode conservar o fluxo nas grandezas desejadas em sua formulação. Dessa forma, o presente objeto de estudo mostrou-se relevante.

Destaca-se que a metodologia utilizada no desenvolvimento deste trabalho consiste, principalmente, em pesquisas bibliográficas vislumbrando mostrar e explicar os métodos de discretização: Diferenças Centrais, Upwind e QUICK, além de implementar suas aplicações para o melhor entendimento e visualização dos problemas estudados.

Esta pesquisa, está estruturada em capítulos, onde trabalha-se conceitos iniciais importantes e a equação de convecção-difusão, com foco em sua solução, utilizando diferentes métodos e suas implementações em um software que nos permite compreender melhor estas soluções.

A princípio, no capítulo inicial, pretende-se contextualizar os leitores, trazendo algumas noções iniciais que são importantes para a compreensão e deste trabalho. Abordamos, os principais conceitos de alguns conteúdos importantes, como Equações Diferenciais Parciais (EDP's), Métodos Numéricos e sobre o software OpenFOAM [6], no qual simulamos resultados importantes. Os temas são apresentados de maneira direta e resumida, pois não são eles o foco principal desta pesquisa, mas são tidos como contextualizadores importantes para ter uma compreensão mais completa do trabalho.

Prosseguindo, no capítulo dois, abordamos a principal parte teórica do trabalho. Apresentando os três métodos: Diferenças Centrais, Upwind e QUICK, destacando suas características e seus meios de resolução para encontrar o valor do fluxo nas faces, pois são estes os valores buscados para definir uma solução para a equação de convecção-difusão. Neste capítulo, mostra-se definições importantes para entender as especificidades de cada método, além de uma breve

avaliação sobre seus resultados e suas principais vantagens e desvantagens.

Finalmente, no capítulo três, mostra-se a implementação de um problema em uma malha bidimensional, utilizando o software OpenFOAM e é dissertado um pouco sobre o software e sobre a solução do problema em malhas 2D. Além disso, são feitas algumas considerações finais sobre os métodos.

As referências são apresentadas ao final do trabalho, destacando que a pesquisa foi desenvolvida baseada nos estudos destas referências, com destaque ao livro do Versteeg e Malalasekera (2007) [10], onde o estudo obteve grande enfoque. Finalizando, é apresentado o apêndice, onde ficam os códigos desenvolvidos no Octave para apresentar graficamente a solução gerada pelos métodos apresentados nesta pesquisa.

---

---

# CAPÍTULO 2

---

## NOÇÕES INICIAIS

Para começar este trabalho, faz-se necessário entender alguns conceitos iniciais. Destacamos os principais nas seções a seguir.

### 2.1 Equações Diferenciais Parciais

Inicialmente, citamos que assim como é colocado em Cunha (2003) [3], podemos afirmar que a maioria dos fenômenos físicos podem ser descritos matematicamente por meio de equações ou sistemas de equações, que envolvem as derivadas parciais da função incógnita. Daí, a importância de estudar essas equações diferenciais, e em especial para este trabalho, equações diferenciais parciais (EDP's).

Sendo assim, fazendo um breve comentário sobre EDP's, tomando como principal referência, para esta seção, Fortuna (2000) [4], temos que, uma equação diferencial é aquela cuja incógnita é uma função de uma ou mais variáveis e envolve as derivadas dessa função em relação às suas variáveis. Nesse contexto, tratando-se de uma Equação Diferencial Parcial (EDP), temos que uma EDP é uma equação que envolve as derivadas parciais de, no mínimo, duas variáveis independentes de uma função desconhecida qualquer.

Por exemplo, a EDP com a variável dependente sendo a função  $u$  e as variáveis independentes  $x$  e  $y$ , é uma equação que pode ser posta na forma

$$F\left(x, y, u(x, y), \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = 0$$

onde  $F$  é uma função das variáveis indicadas e pelo menos uma derivada parcial aparece nessa expressão, representando assim uma EDP. Neste caso, temos duas variáveis independentes, mas podem aparecer mais, podendo ser generalizada da forma:

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_n, u(x_1, x_2, \dots, x_n), \frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_n}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^k}\right) = 0$$

Sobre esse tipo de equação, ela pode ser classificada de acordo com a sua ordem, podendo ser de primeira ordem se sua derivada parcial de maior ordem for igual a 1, de segunda ordem se sua derivada parcial de maior ordem for 2 e assim sucessivamente. Sendo assim, podemos dizer que a ordem de uma EDP se dá de acordo com a sua derivada parcial de maior ordem.

Além disso, podemos classificá-la como linear ou não linear. Neste caso, uma EDP é tida como linear se atua linearmente sobre a variável dependente e suas derivadas parciais. Caso isso não ocorra, a EDP é dita não linear.

As EDP's não possuem uma única solução, por isso, dá-se a ela condições de contorno para garantir a existência e unicidade na solução. Assim, com as condições de contorno podemos afunilar a resposta para a que mais se encaixa naquela que se deseja. Pode-se dizer que as condições de contorno definem uma região na qual queremos resolver o problema, para isso há uma especificação nos requisitos de resolução.

Ao falar de EDP's de segunda ordem, existem 3 tipos principais: Parabólica, Elíptica e Hiperbólica. Sendo assim, a seguir destaca-se, de maneira resumida, as principais características de cada uma delas.

EDP Elíptica é aquela que simula a maioria dos problemas de equilíbrio, que são aqueles nos quais a propriedade não se altera com o tempo.

EDP Parabólica e Hiperbólica são aquelas que modelam a maioria dos problemas transitentes, que são aqueles onde o fenômeno observado se altera com o decorrer do tempo. Entretanto

a diferença entre essas duas equações é que a Parabólica modela os problemas onde ocorre a dissipação de energia, chamados de fenômenos dissipativos. Por outro lado, se não ocorre a dissipação de energia, ou se ela pode ser considerada ínfima, então a equação que modela o problema é a Hiperbólica.

De maneira resumida, podemos apresentar o modelo geral de uma Equação Diferencial Parcial linear de segunda ordem, com duas variáveis,  $x$  e  $y$ , como sendo:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x, y) + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y) + D \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) + E \frac{\partial u}{\partial y}(x, y) + Fu(x, y) = G(x, y) \quad (2.1)$$

Assim, temos que:

- Se  $B^2 - 4AC < 0$ , então a equação é Elíptica.
- Se  $B^2 - 4AC = 0$ , então a equação é Parabólica.
- Se  $B^2 - 4AC > 0$ , então a equação é Hiperbólica.

Destacando agora uma equação Parabólica de grande importância para este trabalho, temos a *Equação de Convecção-Difusão*:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -v \frac{\partial \phi}{\partial x} + \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2.2)$$

Sendo  $v \frac{\partial \phi}{\partial x}$  o termo convectivo e  $\Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$  o termo difusivo. Neste caso, temos um termo transitório, ou seja, que depende da variação de tempo, onde  $t$  pode ser visto como uma variável  $y$  para atender as condições da equação parabólica citadas anteriormente. Além disso, esta equação (2.2) é dita parabólica pois nela ocorre a dissipação de energia.

## 2.2 Discretização de uma EDP

Uma equação diferencial que simula um fenômeno é um algo contínuo, portanto trazer um resultado para uma distribuição que é contínua, é uma impossibilidade. Assim, é necessário um processo que transforme essa distribuição em algo calculável. Para isso, aplicamos a discretização, que implica em transformar a equação diferencial em um conjunto de equações algébricas lineares,

agora independentes e resolvíveis. Esse processo, torna possível determinar valores da propriedade de interesse dentro de pontos discretos do domínio do escoamento do fluxo.

Esse processo possibilita a análise de fluxos em domínios com geometrias complexas, utilizando malhas estruturadas ou não, dependendo do tipo de problema e o método de discretização que mais se adequará. Além disso, facilita o processo de resolução do problema, modelado por uma equação diferencial, que está sendo trabalhado.

Nesse sentido, baseado em Silva e Freire (2020) [9], sabe-se que tratamento numérico de uma equação diferencial parcial só é possível quando elas são expressas na forma de expressões algébricas. Nesse contexto, destaca-se que essa discretização ocorre através de um método numérico. Existem vários tipos de métodos numéricos para discretizar equações diferenciais, o que define qual método será utilizado é a conveniência e o contexto do fenômeno que será analisado.

Sendo assim, é possível entender que o método numérico tem por função discretizar essa EDP, ou seja, transformar o seu operador diferencial numérico em expressões algébricas.

Assim como afirmado por Marques, Pereira, Almeida e Franco (2014) [5], pode-se dizer que o produto final de qualquer método numérico é a solução aproximada da variável em cada ponto discretizado, resultando em um, ou mais, conjuntos numéricos.

## 2.3 Métodos Numéricos

Ao definirmos nosso objeto de estudo que é regido por uma equação matemática, é preciso resolver esta equação para que possamos entender o comportamento do nosso fenômeno em questão. Entretanto, nem sempre resolver esta equação é tão simples. Portanto, é necessário uma forma de simplificar, discretizar, esta equação para obter uma aproximação satisfatória do resultado desejado, com esse propósito aplicam-se os métodos numéricos.

Existem muitos métodos numéricos que geram aproximações para os mais diversos contextos e problemas, alguns são mais simples e podem ser resolvidos normalmente, mas a maioria deles resolve problemas muito complexos e longos, os quais não poderiam ser resolvidos de maneira ágil sem a utilização de recursos apropriados.

Devido a isso, como é colocado em Cunha (2003) [3], depois que o método numérico é escolhido, visando sempre aplicar o mais adequado ao contexto do problema, torna-se necessário sua implementação computacional. Isso ocorre porque a máquina possui mais recursos e velocidade para resolver os problemas, principalmente aqueles mais complexos. Assim, considerando a capacidade da máquina e a margem de erro que pode ocorrer, que geralmente é mínima, utiliza-se este recurso na resolução do problema.

Para este trabalho, focamos em um método para resolver equações diferenciais parciais, mais especificamente a equação de convecção e difusão. Para isso, utilizamos o Método de Volumes Finitos.

### 2.3.1 Método de Volumes Finitos

Baseado em Silva e Freire (2020) [9], pode-se dizer que o Método de Volumes Finitos (M.V.F.) é o método numérico mais utilizado em problemas que envolvem fluxo de fluidos, pois apresenta algumas vantagens, dentre elas, a interpretação física das equações e a sua aplicação na malha computacional.

Este método consiste em dividir o domínio da função em regiões menores nas quais são mais fáceis de se trabalhar com a propriedade desejada. Isto é feito pela integração da EDP trabalhada, nessas regiões menores, chamadas Volumes de Controle (V.C.), para obter uma equação discretizada nesse volume menor.

De maneira direta e resumida, pode-se explicar o método da seguinte forma, o domínio do escoamento é dividido em V.C.'s e no centro de cada um desses volumes de controle existe um nó, no qual são calculados os valores das variáveis. Dessa forma, calcula-se os valores na superfície do V.C. através de uma interpolação dos valores nos nós central e adjacentes.

Definidos os volumes de controle, as equações de conservação, que são as equações que regem o fluxo, são integradas em cada um deles. Dessa forma, entra em aplicação o Teorema da Divergência ou de Gauss, descrito abaixo, para converter integrais de volume em integrais de superfície.

**Teorema 2.3.1 Teorema da Divergência:** *Ao somar todos os pequenos pedaços de fluxo para fora de um volume usando uma integral tripla de divergência, a soma resulta no fluxo para fora*

*total desse volume, como medido pelo fluxo através de sua superfície.*

$$\iiint_V \operatorname{div} F \, dV = \iint_S F \cdot n \, dS \quad (2.3)$$

*onde, a integral tripla calcula partes do fluxo para fora no volume  $V$  e a integral dupla calcula o fluxo para fora na fronteira de  $V$*

Daí, obtidas essas integrais, elas são aproximadas utilizando os métodos mais adequados. Assim, resulta uma equação algébrica para cada controle de volume, na qual são definidos valores das variáveis do nó central e de seus nós adjacentes. Essas equações geram um sistema que é resolvido pelo método que mais se adequa.

Finalizando, vale destacar que uma das vantagens do Método de Volumes Finitos é a sua versatilidade, podendo ser aplicado em qualquer malha que defina as fronteiras do volume de controle. Dessa forma, o método não fica limitado à geometria do domínio do fluxo, que muitas vezes pode ser mais complexo para se trabalhar.

## 2.4 OpenFOAM

Baseado em Cheng, Xiong, Morris, Paterson, Sergeev e Wang (2014) [2], podemos dizer que mecânica e a matemática computacional fornecem métodos e ferramentas fundamentais para simular processos físicos. A computação numérica pode oferecer percepções e dados importantes que são difíceis ou demasiadamente custosos financeiramente, para medir ou testar de forma experimental. Assim, percebe-se a importância da ciência computacional. Um dos focos principais desta ciência é a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), que é o objeto de estudo deste trabalho.

Softwares capazes de calcular propriedades importantes e simular fenômenos da dinâmica dos fluidos, fazem-se muito necessários para o desenvolvimento do estudo da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). Dentre as tecnologias disponíveis, destacamos o OpenFOAM [6], que é um software de código aberto gratuito, que tem sido utilizado em larga escala e consegue fazer uma simulação satisfatória. Nesse sentido, Baseado em Cheng, Xiong, Morris, Paterson, Sergeev e Wang (2014) [2] aponta que o fato de o OpenFOAM ser gratuito, facilita o seu acesso e utilização,

tanto em ambientes acadêmicos quanto industriais.

A sigla OpenFOAM significa Open Source Field Operation and Manipulation, traduzindo, Operação e Manipulação de Campo de Código Aberto.

Dados do OpenFOAM [7], mostram que este software, primeiramente foi lançado como código aberto pela OpenCFD Ltd. em 2004. A partir de então, cresceu e tornou-se o principal software de código aberto para Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). A ampla base de usuários do OpenFOAM cresceu e produziu funcionalidades valiosas para complementar as versões oficiais, implementando em sua biblioteca de códigos, funcionalidades úteis.

Sendo assim, neste trabalho, foi escolhido a utilização deste software para simular os métodos de volumes finitos que abordaremos no desenvolver deste projeto.

---

---

## CAPÍTULO 3

---

# O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS PARA PROBLEMAS DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO

A priori, ressalto que este capítulo foi desenvolvido com base no estudo de um capítulo da principal referência teórica deste trabalho, Versteeg e Malalasekera (2007) [10].

Em problemas onde o fluxo do fluido desempenha um papel importante, faz-se necessário estudar os efeitos de convecção, que pode ser interpretado como a transmissão de matéria de um lugar para outro no domínio em que ocorre o escoamento. No entanto, como este efeito, na natureza, sempre aparece acompanhado da difusão, que é o movimento do fluxo para as diferentes regiões de concentração no mesmo domínio, neste trabalho será abordado esses dois objetos em conjunto.

Sabendo que a equação do transporte de uma propriedade genérica  $\phi$  é:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla(\rho\phi u) = \nabla(\Gamma \nabla \phi) + S\phi \quad (3.1)$$

salienta-se que a equação que representa o estado estacionário da convecção-difusão advém dessa equação (3.1), sendo que  $\phi$  é uma propriedade geral e, na equação de convecção-difusão, o termo transitório desaparece, pois estamos trabalhando com o caso estacionário, em que o decorrer do tempo não altera o problema. Dessa forma, temos que a equação estacionária de convecção e difusão é:

$$\text{div}(\rho\phi u) = \text{div}(\Gamma \text{grad } \phi) + S\phi \quad (3.2)$$

Sendo  $\Gamma$  o coeficiente de difusão de  $\phi$  e  $\rho$  uma unidade relacionada à massa da propriedade. Podemos escrever como:

$$\nabla \cdot (\rho\phi u) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S\phi \quad (3.3)$$

Nesta equação,  $\nabla \cdot (\rho\phi u)$  é o termo convectivo,  $\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)$  é o termo difusivo e  $S\phi$  é o termo fonte .

Buscamos trabalhar com o método de volumes finitos, onde o domínio é dividido em partes menores, chamadas de volumes de controle (V.C.):



Figura 3.1: Domínio unidimensional, dividido em partes menores chamadas Volumes de Controle

Ampliando uma parte da reta, que representa o domínio de um problema unidimensional, podemos verificar os Volumes de Controle e os nós. Assim, temos um V.C., onde  $w$  e  $e$  são as faces e  $P$  é o nó central, com  $W$  e  $E$  sendo os nós adjacentes, ou vizinhos, a ele:

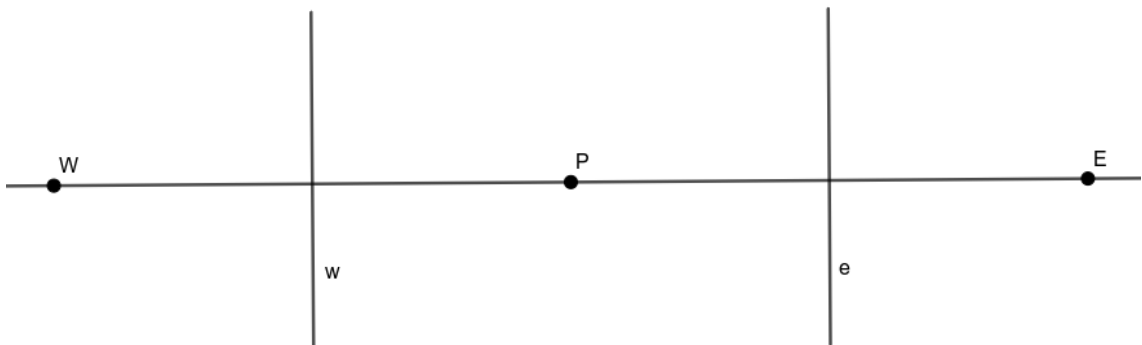


Figura 3.2: Volume de Controle

Portanto, a integração formal sobre um volume de controle resulta na equação seguinte (3.4), que é a equação de equilíbrio do fluxo nesse volume de controle:

$$\int_V \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dV = \int_V \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV + \int_V S \phi dV \quad (3.4)$$

Pelo Teorema da Divergência, de Gauss (2.3.1), podemos escrever esta equação em termos da integral de superfície, onde o volume da equação inicial pode ser colocado em termos de área e aparece um vetor  $\mathbf{n}$ , que representa um vetor normal unitário em cada ponto da superfície:

$$\int_A \mathbf{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dA = \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_V S \phi dV \quad (3.5)$$

Esta equação é conservativa e o termo à esquerda da igualdade representa o fluxo convectivo, enquanto o da direita representa o fluxo difusivo e a geração, ou dissipação, da propriedade geral  $\phi$  dentro daquele V.C. em que houve a integração. Assim, pode-se entender que a interpretação física do produto presente na equação (3.5) é a propriedade do fluxo nos termos convectivo e difusivo indo na direção do vetor normal  $\mathbf{n}$ .

Durante o processo de discretizar os termos de convecção pode-se dizer que o valor da propriedade  $\phi$  é "guardado" no centro, ou seja,  $\phi$  possui um valor definido nos pontos nodais. Porém, nas faces do volume de controle o valor não é conhecido. Assim, encontramos a principal dificuldade, que é calcular o valor da propriedade transportada,  $\phi$ , nas faces do V.C. e verificar o seu fluxo nas fronteiras.

Nesse sentido, se pararmos para estudar métodos de discretização para problemas apenas de difusão o método de diferenças centrais vai funcionar muito bem, por isso, utilizá-lo para discretizar a equação de convecção-difusão de imediato parece ser uma boa estratégia. Entretanto, no processo de difusão a distribuição da propriedade transportada é influenciada em todas as direções e no processo de convecção a propriedade se espalha apenas na direção do fluxo. Devido a isso, seria necessário estabelecer um limite superior rigoroso, para que os cálculos para os termos convecção e para os termos de difusão, sejam estáveis utilizando diferenças centrais.

Assim, buscar uma forma alternativa de discretizar a equação (3.5), permitindo cálculos estáveis com condições menos restritivas torna-se necessário. Devido a isso, veremos alguns métodos que podem ser usados para a discretização desta equação (3.5) de maneira mais satisfatória,

para isso, como uma análise inicial, consideraremos o caso unidimensional.

### 3.1 Equação de Convecção e Difusão Unidimensional no estado Estacionário

Podemos dizer que a equação que representa a convecção e difusão estacionária da propriedade  $\phi$  em um campo de fluxo unidimensional, onde  $u$  é a velocidade, é:

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left( \Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (3.6)$$

O fluxo também deve satisfazer a equação de continuidade para problemas unidimensionais, mostrada a seguir, que garante que não haverá acúmulo líquido ou esgotamento de massa.

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0 \quad (3.7)$$

Considerando o volume de controle unidimensional da figura 3.3, focaremos no nó central, que denominamos  $P$ , o qual tem como seus nós vizinhos  $W$  e  $E$ , à esquerda e à direita respectivamente. Colocando de outra forma, considerando a direção do fluxo, podemos dizer que  $W$  está atrás de  $P$  (à montante) e  $E$  está na frente de  $P$  (à jusante). As faces são  $w$  e  $e$ , à esquerda e à direita respectivamente.

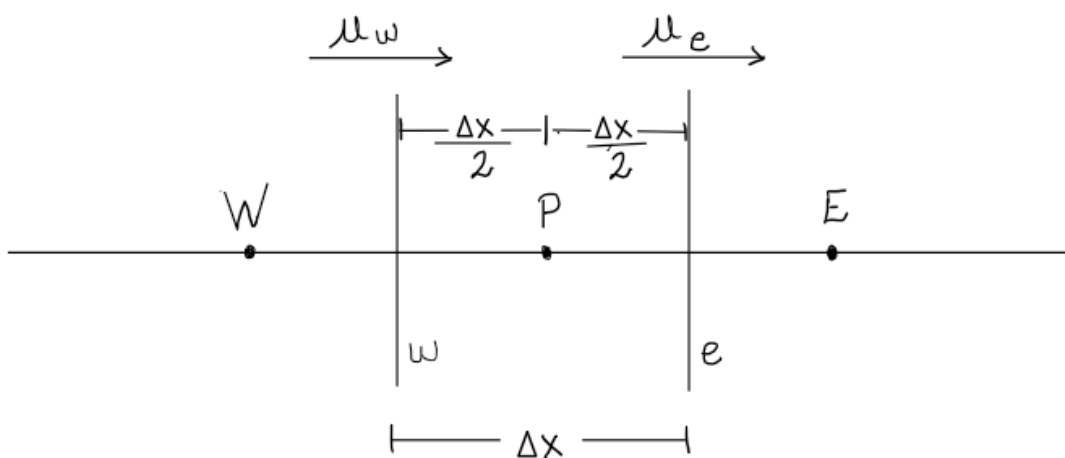


Figura 3.3: Volume de Controle ao redor do nó P

A integração da equação (3.6) sobre o volume de controle da Figura 3.3, onde as faces  $w$  e  $e$  são os limites de integração inferior e superior respectivamente, resulta em:

$$\int_w^e \frac{d}{dx}(\rho u \phi) A dx = \int_w^e \frac{d}{dx} \left( \Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) A dx$$

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w \quad (3.8)$$

De forma análoga, a integração da equação de continuidade (3.7) leva a:

$$\int_w^e \frac{d}{dx}(\rho u) A dx = 0$$

$$(\rho u A)_e - (\rho u A)_w = 0 \quad (3.9)$$

Para obter o resultado desejado, que são as equações discretizadas para o problema de convecção e difusão, deve-se aproximar os termos da equação (3.8). Para isso, por conveniência, definimos duas variáveis  $F$  e  $D$ , onde:

$$F = \rho u \quad \text{e} \quad D = \frac{\Gamma}{\Delta x} \quad (3.10)$$

Os valores de  $F$  e  $D$  nas faces das células podem ser expressos como:

$$F_w = (\rho u)_w \quad \text{e} \quad F_e = (\rho u)_e \quad (3.11)$$

$$D_w = \frac{\Gamma_w}{\Delta x_{WP}} \Rightarrow D_w = \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \quad \text{e} \quad D_e = \frac{\Gamma_e}{\Delta x_{PE}} \Rightarrow D_e = \frac{\Gamma_e}{\Delta x} \quad (3.12)$$

Prosseguindo, assumimos que  $A_w = A_e = A$ , para que aconteça a divisão de ambos os lados da equação (3.8) pela área  $A$ . Assim, no lado direito da equação, onde temos os termos de difusão, podemos utilizar as diferenças centrais para escrever a equação como:

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (3.13)$$

A equação de continuidade integrada (3.9) também pode ser expressa como:

$$F_e - F_w = 0 \quad (3.14)$$

Assumimos também que o campo de velocidade é de alguma forma conhecido. Por isso, os valores de  $F_e$  e  $F_w$  são igualmente conhecidos. Dessa forma, para resolver a equação (3.13), só precisamos calcular a propriedade transportada,  $\phi$ , nas faces  $e$  e  $w$ , que são os valores que ainda não temos definidos em (3.13). Nesse contexto, serão analisados 3 esquemas para esse propósito, nas seções a seguir, sendo eles: Método de Diferenças Centrais, Método Upwind, Método QUICK.

## 3.2 Método de Diferenças Centrais

A aproximação por diferenças centrais é usada para representar os termos de difusão que aparecem no lado direito da equação (3.13) em problemas de convecção e difusão em uma dimensão. Porém, os termos convectivos ainda ficam em função de  $\phi_e$  e  $\phi_w$ , os quais pretendemos calcular. Para isso, utilizando a interpolação polinomial, por diferenças divididas, podemos calcular os valores nas faces das células para os termos convectivos. Nesse sentido, podemos calcular o valor dos termos convectivos utilizando uma interpolação polinomial, podendo ser pelo método de Newton, de Lagrange ou outro. Neste trabalho, utilizaremos o polinômio interpolador de Newton, seguindo o esquema da figura 3.4:

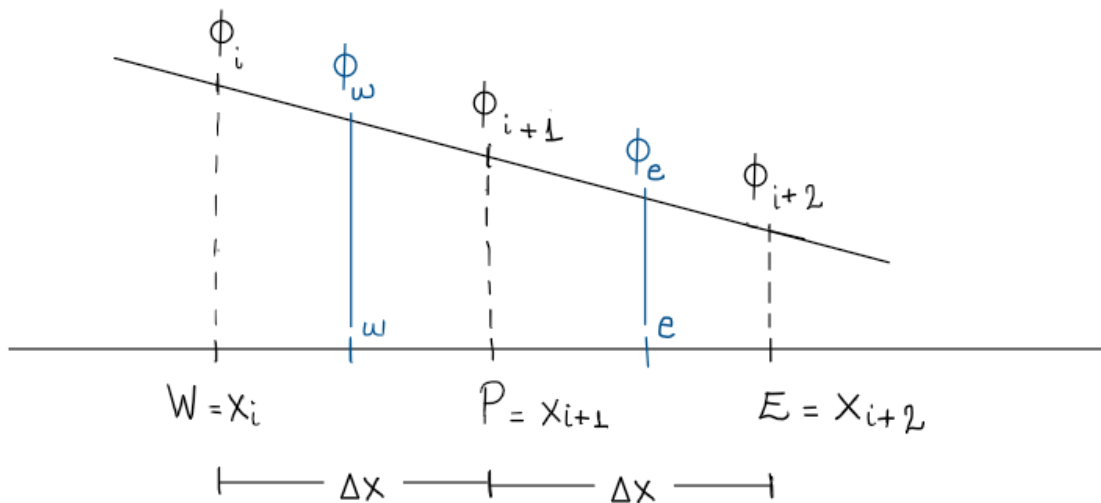


Figura 3.4: Interpolação para Diferenças Centrais

Utilizando o método de Diferenças Divididas, descrito por Burden, Faires e Burden (2015) [1] como sendo a interpolação iterada, usada para gerar aproximações polinomiais de graus sucessivamente mais altos em um ponto específico, o qual se procura determinar. Neste momento nos limitaremos ao problema de grau 1.

Queremos calcular  $\phi_w$  e  $\phi_e$ , para isso usaremos o método de interpolação de Newton, diferenças divididas, sendo  $Q_1(x)$  o polinômio interpolador de grau 1. Primeiramente, definimos que:  $x_i = W$ ;  $x_{i+1} = P$ ;  $x_{i+2} = E$ ;  $f[x_i] = \phi_i$ ;  $f[x_{i+1}] = \phi_{i+1}$ ;  $f[x_{i+2}] = \phi_{i+2}$ .

O polinômio interpolador então, para  $\phi_w$ , é dado por:

$$Q_1(x) = \phi_i + f[x_i, x_{i+1}](x - x_i)$$

calcularemos as diferenças divididas:

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_i - x_{i+1}}$$

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$$

substituindo no polinômio o valor de  $f[x_i, x_{i+1}]$ , temos:

$$Q_1(x) = \phi_i + \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}(x - x_i).$$

Com este polinômio podemos encontrar  $\phi_w$ , que é o valor da propriedade na face  $w$ . Para isso, basta substituir o valor que se deseja encontrar no polinômio interpolador. Assim, seja  $x_w$  o ponto que usaremos para encontrar  $\phi_w$ , de forma que  $f(x_w) = \phi_w$ :

$$Q_1(x_w) = \phi_i + \frac{x_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}(x_w - x_i)$$

$$Q_1(x_w) = \phi_i + \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} \left( \frac{\Delta x}{2} \right)$$

$$Q_1(x_w) = \phi_i + \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{2}$$

$$Q_1(x_w) = \frac{\phi_i + \phi_{i+1}}{2}.$$

Portanto, obtemos

$$\phi_w = \frac{\phi_i + \phi_{i+1}}{2}$$

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2}. \quad (3.15)$$

De forma análoga, calculamos  $\phi_e$ , o qual o polinômio interpolador é dado por:

$$Q_1(x) = \phi_{i+1} + f[x_{i+1}, x_{i+2}](x - x_{i+1})$$

calcularemos as diferenças divididas:

$$f[x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{x_{i+2} - x_{i+1}}$$

$$f[x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}$$

substituindo no polinômio o valor de  $f[x_{i+1}, x_{i+2}]$ , temos:

$$Q_1(x) = \phi_{i+1} + \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}(x - x_{i+1}).$$

Com este polinômio podemos encontrar  $\phi_e$ , que é o valor da propriedade na face  $e$ . Para isso, basta substituir o valor que se deseja encontrar no polinômio interpolador. Dessa forma, seja  $x_e$  o ponto que utilizaremos para encontrar  $\phi_e$ , de modo que  $f(x_e) = \phi_e$ :

$$Q_1(x_e) = \phi_{i+1} + \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}(x_e - x_{i+1})$$

$$Q_1(x_e) = \phi_{i+1} + \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x} \left( \frac{\Delta x}{2} \right)$$

$$Q_1(x_e) = \phi_{i+1} + \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{2}$$

$$Q_1(x_e) = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i+2}}{2}.$$

Portanto, obtemos

$$\phi_e = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i+2}}{2}$$

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (3.16)$$

Substituindo os termos (3.15) e (3.16) na equação (3.13) podemos calcular da seguinte forma:

$$\begin{aligned} F_e \left( \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \right) - F_w \left( \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \right) &= D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \\ \frac{F_e}{2}(\phi_P + \phi_E) - \frac{F_w}{2}(\phi_W + \phi_P) &= D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \end{aligned} \quad (3.17)$$

Esta equação pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \left[ \left( D_w - \frac{F_w}{2} \right) + \left( D_e + \frac{F_e}{2} \right) \right] \phi_P &= \left( D_w + \frac{F_w}{2} \right) \phi_W + \left( D_e - \frac{F_e}{2} \right) \phi_E \\ \left[ \left( D_w + \frac{F_w}{2} \right) + \left( D_e - \frac{F_e}{2} \right) + (F_e - F_w) \right] \phi_P &= \left( D_w + \frac{F_w}{2} \right) \phi_W + \left( D_e - \frac{F_e}{2} \right) \phi_E. \end{aligned}$$

Identificando os coeficientes de  $\phi_W$  e  $\phi_E$  como  $a_W$  e  $a_E$  respectivamente, a expressão da equação de convecção-difusão discretizada, pelo método de diferenças centrais é:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (3.18)$$

onde

$$\begin{aligned} a_W &= D_w + \frac{F_w}{2} \quad ; \\ a_E &= D_e - \frac{F_e}{2} \quad ; \\ a_P &= a_W + a_E + (F_e - F_w). \end{aligned}$$

Para resolver um problema de convecção-difusão unidimensional estacionários, onde a

direção do fluxo não se aplica, escrevemos equações discretizadas na forma (3.18) para todos os nós da malha. Isso resulta em um conjunto de equações algébricas que é resolvido para obter a distribuição da propriedade transportada  $\phi$ .

### 3.3 Avaliação do Método de Diferenças Centrais

Para avaliar o método de diferenças centrais utilizaremos um exemplo, baseado em Versteeg e Malalasekera (2007) [10], onde é fornecido as seguintes condições de contorno em um problema unidimensional com 5 nós:  $\phi_0 = 1$  em  $x = 0$  e  $\phi_1 = 0$  em  $x = L$ ,  $u = 0.1\text{m/s}$ ,  $L = 1\text{m}$ ,  $\rho = 1\text{kg/m}^3$  e  $\Gamma = 0.1\text{kg/m.s}$ .

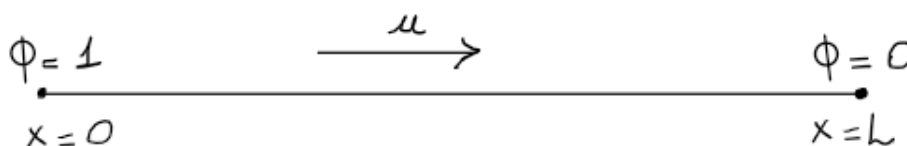


Figura 3.5: Domínio do problema

Dessa forma, para calcular o problema de convecção e difusão, utilizamos o Octave, que é uma linguagem de programação computacional. Este programa consegue solucionar problemas lineares e não lineares, sistemas de equações algébricas, operações com matrizes e muitas outras funcionalidades, além de conseguir plotar gráficos 2D e 3D. Sua interface é baseada em linhas de comando, onde se expressa o problema e como se deseja resolvê-lo.

Baseado nisso, para este trabalho, foi desenvolvido um código no Octave (o código se encontra no apêndice deste trabalho) para resolver o problema e plotar um gráfico do resultado, para podermos analisar o comportamento da solução utilizando diferenças centrais. O código consiste em colocar as condições iniciais e montar as etapas de resolução do problema seguindo as etapas teóricas apresentadas.

A princípio, para as condições iniciais dadas, a solução funciona muito bem:

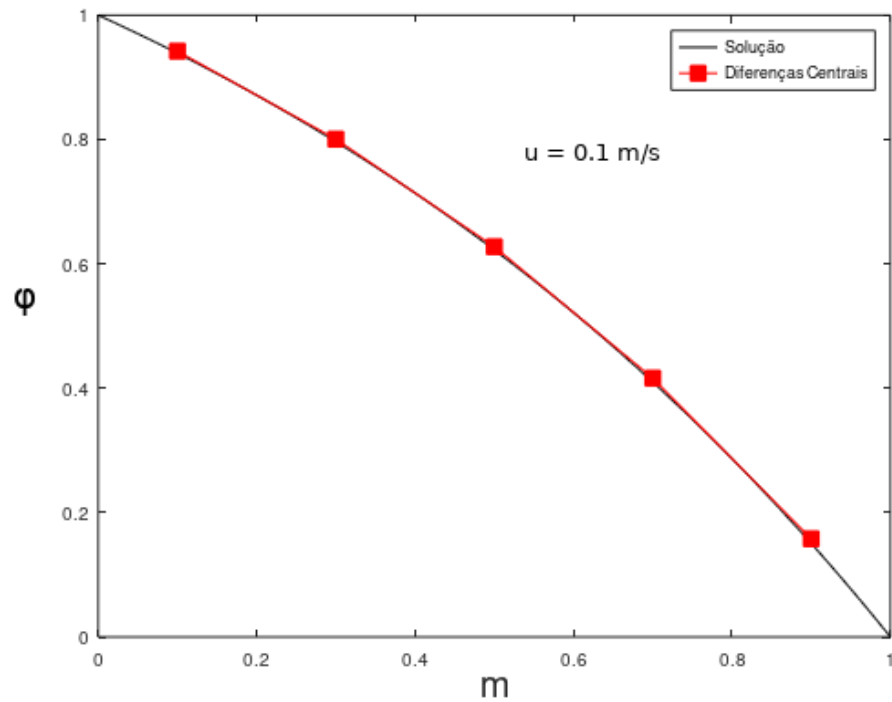


Figura 3.6: Gráfico inicial gerado pelo Octave

Mas ao mudar as condições de contorno, aumentando o valor da velocidade nos termos do código, a solução começa a oscilar:

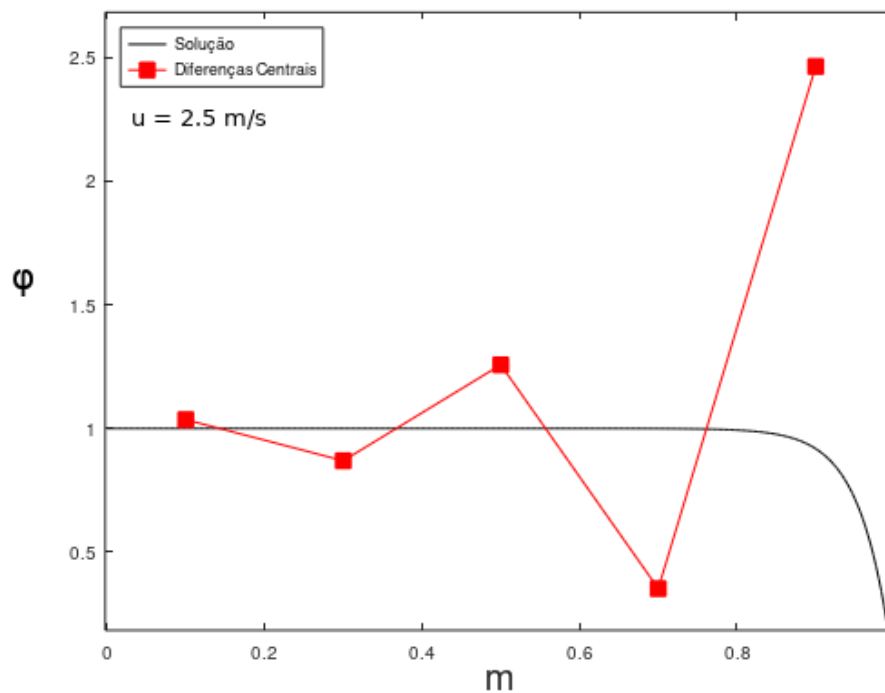


Figura 3.7: Gráfico gerado pelo Octave

Mantendo a velocidade  $u = 2.5\text{ m/s}$ , mas aumentando o número de nós na malha, é possível aproximar mais a solução. Seja agora o mesmo problema, mas com 20 nós:

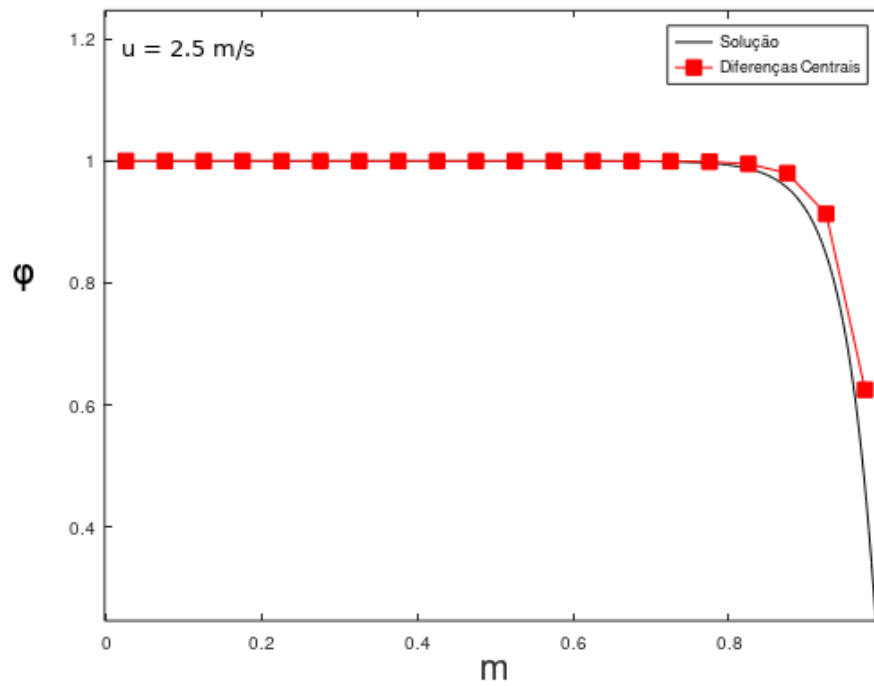


Figura 3.8: Gráfico gerado pelo Octave

Porém ao aumentar mais a velocidade, a instabilidade aparece novamente:

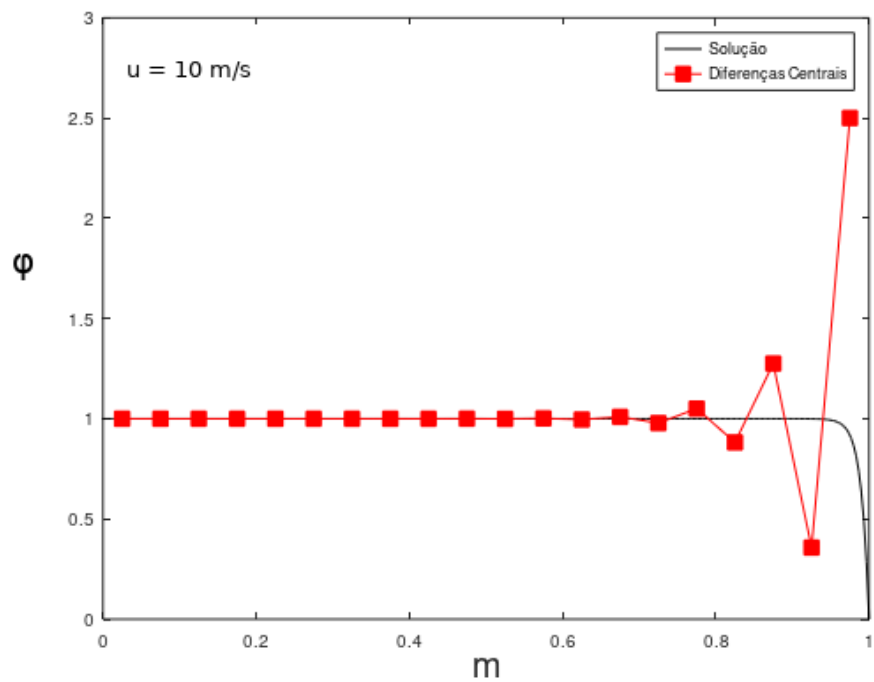


Figura 3.9: Gráfico gerado pelo Octave

Assim, percebe-se que, muitas vezes, aparecem oscilações no método de diferenças centrais. Isso ocorre porque os efeitos da convecção estão muito presentes, o que faz com que o método de diferenças centrais apresente instabilidade, o que mostra que esse método nem sempre será muito eficiente.

Pode-se dizer que em problemas onde o número de Peclet ( $Pe$ ) é alto, o método de diferenças centrais apresenta muitas oscilações. Sendo que o número de Peclet pode ser entendido, de maneira simplificada, como:

$$Pe = \frac{\text{convecção}}{\text{difusão}}$$

Nessa relação percebe-se que quanto maior a difusão, menor será o número de Peclet, enquanto que, quanto maior convecção, maior será o número de Peclet. Assim, quando os efeitos de convecção são altos ou a difusão tem pouca influência,  $Pe$  é grande, o que faz a solução ser instável.

Mostramos também essa relação que se destaca quando a influência da difusão for bem baixa, verifique:

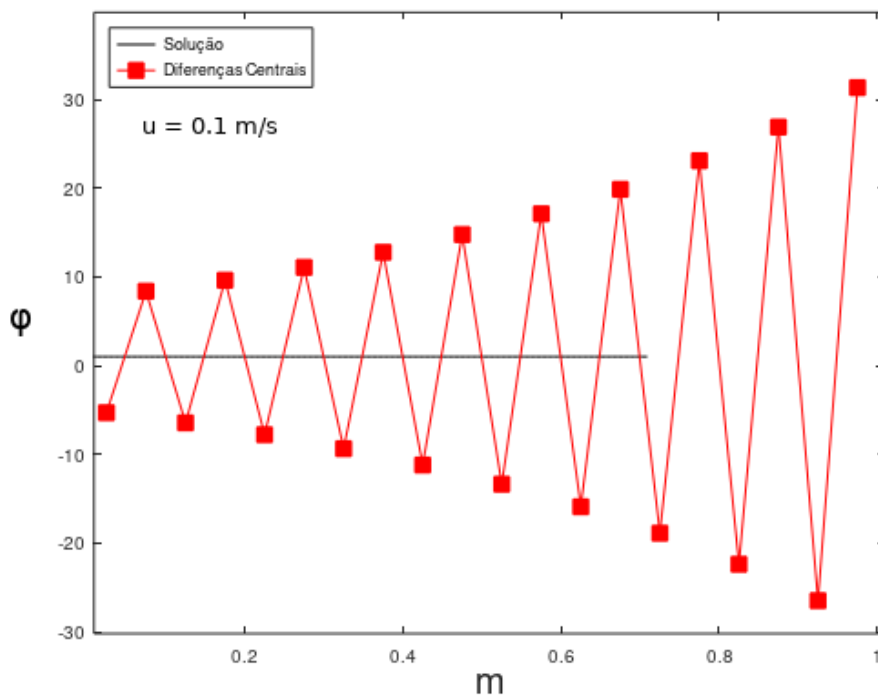


Figura 3.10: Gráfico com  $\Gamma = 0.0001$  gerado pelo Octave

Note que, apesar da velocidade ser a mesma da figura 3.6, onde a solução era estável, ao diminuir a difusão o número de Peclet aumentou, o que fez o gráfico oscilar.

Portanto, percebe-se que a solução dada pelo método de diferenças centrais é instável para problemas com  $Pe$  muito alto. Assim, este método nem sempre irá fornecer uma aproximação satisfatória, dependerá das condições do problema que será trabalhado

### 3.4 O método Upwind

Além de não ter uma solução estável, uma das principais deficiências do esquema de diferenças centrais é identificar a direção do fluxo. Nesse método, o valor da propriedade  $\phi$  na face recebe a mesma influência de seus dois nós vizinhos, independente da direção em que o fluxo corre.

Assim, em um fluxo onde a influência é forte indo da esquerda para a direita (positiva), o esquema de diferenças centrais seria ineficiente, pois a face à esquerda,  $w$  deveria receber uma influência muito maior do nó à montante,  $W$ , do que do nó à jusante,  $P$ . Da mesma forma que a face  $e$  deveria receber uma influência maior do nó à montante,  $P$ , do que do nó à jusante,  $E$  :

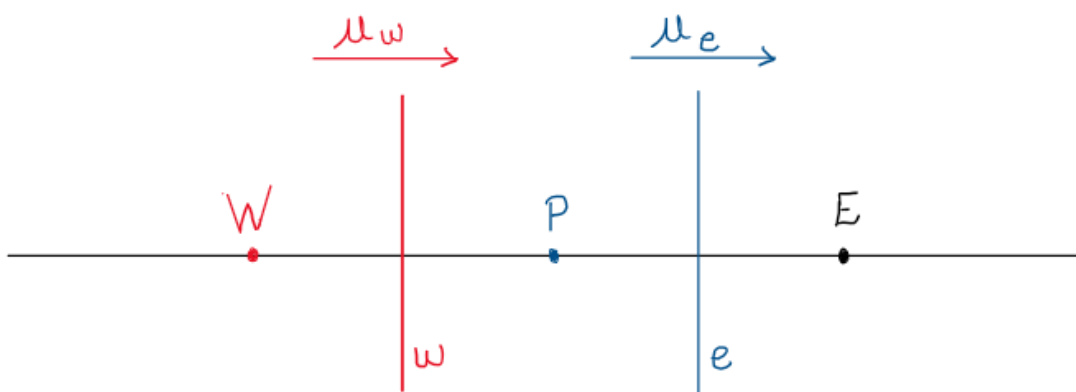


Figura 3.11: Influência do fluxo na direção positiva

De modo análogo, o mesmo se aplica no direção oposta do fluxo, indo da direita para a esquerda (negativa), onde a face  $w$  recebe mais influência do nó  $P$  e a face  $e$  recebe mais influência do nó  $E$  :

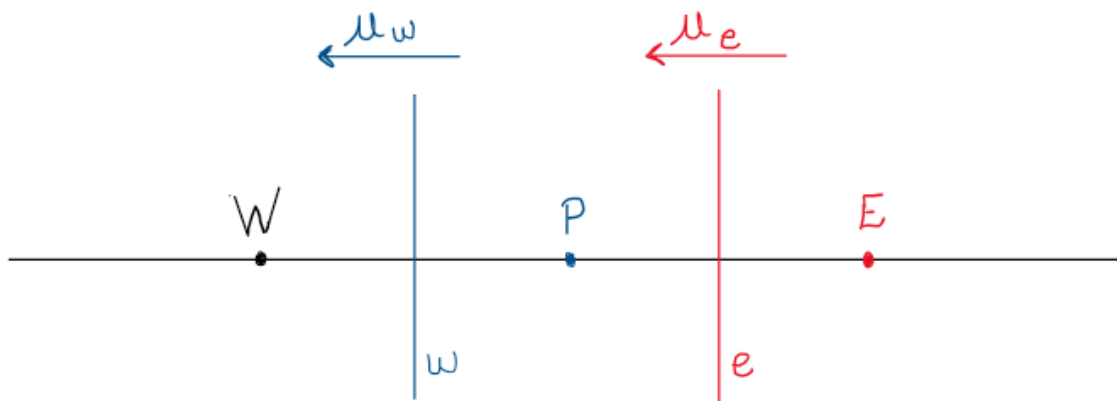


Figura 3.12: Influência do fluxo na direção negativa

Portanto, faz-se necessário estudar outro método de discretização. Nesse contexto, abordamos o método Upwind que, fazendo uma tradução livre, podemos chamar de Método da Interpolação à Montante.

O esquema Upwind leva em consideração a direção do fluxo para calcular o valor da propriedade na face da célula. Nesse sentido, temos que o valor da propriedade  $\phi$  na face da célula é considerado igual ao valor de  $\phi$  no nó atrás desta face (à montante). Por isso o nome Método da Interpolação à Montante, pois será tomado um ponto a mais para calcular o valor de  $\phi$  na face, o qual deve estar à montante da face, seja qual for a direção do fluxo. Para melhor compreensão, serão apresentados exemplos a seguir.

Na figura abaixo (3.13) os valores da propriedade nos nós estão sendo usados para calcular o valor da propriedade nas faces do volume de controle, estando o fluxo na direção positiva, ou seja da esquerda para a direita.

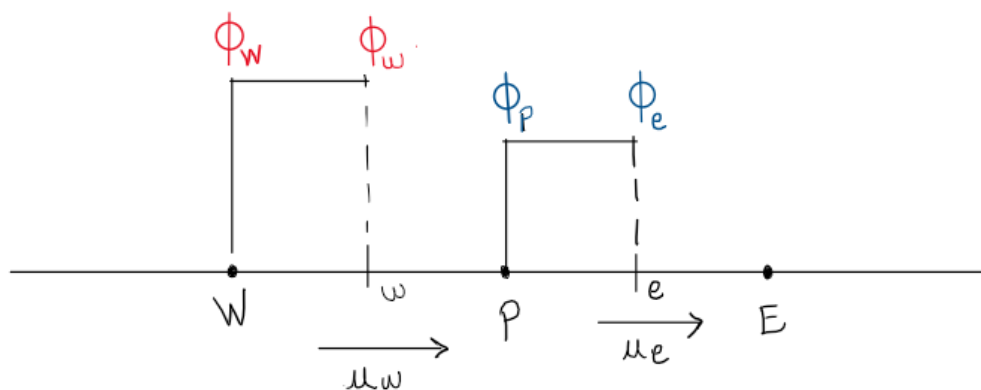


Figura 3.13: Direção Positiva do Fluxo no Upwind

Nesta direção, temos que  $u_w > 0$ ,  $u_e > 0$  ou seja,  $F_w > 0$ ,  $F_e > 0$ , assim, este método define:

$$\phi_w = \phi_W \quad \text{e} \quad \phi_e = \phi_P. \quad (3.19)$$

Dáí, a equação discretizada (3.13) fica da forma:

$$F_e \phi_P - F_w \phi_W = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (3.20)$$

podemos reescrever como:

$$\begin{aligned} F_e \phi_P - F_w \phi_W &= D_e \phi_E - D_e \phi_P - D_w \phi_P + D_w \phi_W \\ F_e \phi_P + D_e \phi_P + D_w \phi_P &= D_e \phi_E + D_w \phi_W + F_w \phi_W \\ (D_w + D_e + F_e) \phi_P &= (D_w + F_w) \phi_W + D_e \phi_E. \end{aligned}$$

Assim, obtemos:

$$[(D_w + F_w) + D_e + (F_e - F_w)] \phi_P = (D_w + F_w) \phi_W + D_e \phi_E \quad (3.21)$$

Na direção oposta, ou seja, na direção negativa do fluxo, temos como exemplo:

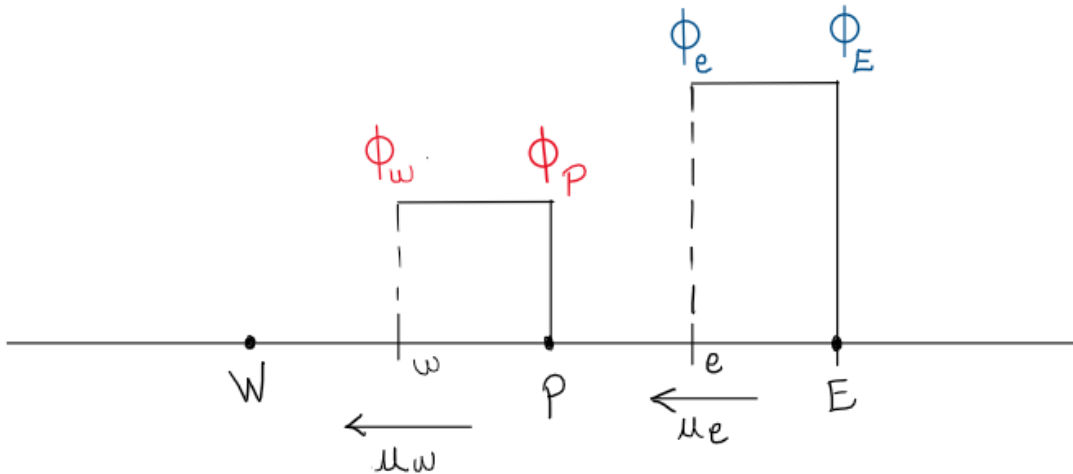


Figura 3.14: Direção Negativa do Fluxo no Upwind

Onde,  $u_w < 0$ ,  $u_e < 0$ , ou seja,  $F_w < 0$ ,  $F_e < 0$ , assim é definindo:

$$\phi_w = \phi_P \quad \text{e} \quad \phi_e = \phi_E. \quad (3.22)$$

Com a equação discretizada (3.13), sendo:

$$F_e\phi_E - F_w\phi_P = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (3.23)$$

Podemos escrever como:

$$F_e\phi_E - F_w\phi_P = D_e\phi_E - D_e\phi_P - D_w\phi_P + D_w\phi_W$$

$$D_e\phi_P + D_w\phi_P - F_w\phi_P = D_e\phi_E + D_w\phi_W - F_e\phi_E$$

$$(D_w + D_e - F_e)\phi_P = D_w\phi_W + (D_e - F_e)\phi_E$$

$$[D_w + (D_e - F_e)]\phi_P = D_w\phi_W + (D_e - F_e)\phi_E$$

Assim, temos:

$$[D_w + (D_e - F_e) + (F_e - F_w)]\phi_P = D_w\phi_W + (D_e - F_e)\phi_E \quad (3.24)$$

Identificando os coeficientes de  $\phi_W$  e  $\phi_E$  como sendo, respectivamente,  $a_W$  e  $a_E$ , podemos substituir nas equações acima, (3.21) e (3.24), generalizando a fórmula como:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E \quad (3.25)$$

com coeficiente central sendo:

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w)$$

e os coeficientes vizinhos sendo:

- Para o fluxo positivo, ( $F_w > 0, F_e > 0$ ):

$$a_W = D_w + F_w \quad \text{e} \quad a_E = D_e$$

- Para o fluxo negativo, ( $F_w < 0, F_e < 0$ ):

$$a_W = D_w \quad \text{e} \quad a_E = D_e - F_e$$

Uma forma de notação para os coeficientes vizinhos no método de diferenciação Upwind que cobre as duas direções do fluxo pode ser:

$$a_W = D_w + \max(F_w, 0) \quad \text{e} \quad a_E = D_e + \max(0, -F_e)$$

### 3.5 Avaliação do Método Upwind

Seguindo o mesmo direcionamento da seção anterior, foi desenvolvido um código no Octave, para simular o comportamento da solução de um problema utilizando o método Upwind.

O problema é mesmo da seção de avaliação anterior, com as condições de contorno de um problema unidimensional, utilizando 5 nós:  $\phi_0 = 1$  em  $x = 0$  e  $\phi_1 = 0$  em  $x = L$ ,  $u = 0.1 \text{ m/s}$ ,  $L = 1 \text{ m}$ ,  $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$  e  $\Gamma = 0.1 \text{ kg/m.s}$ . O domínio é o mesmo da figura 3.5. Analisaremos os resultados:

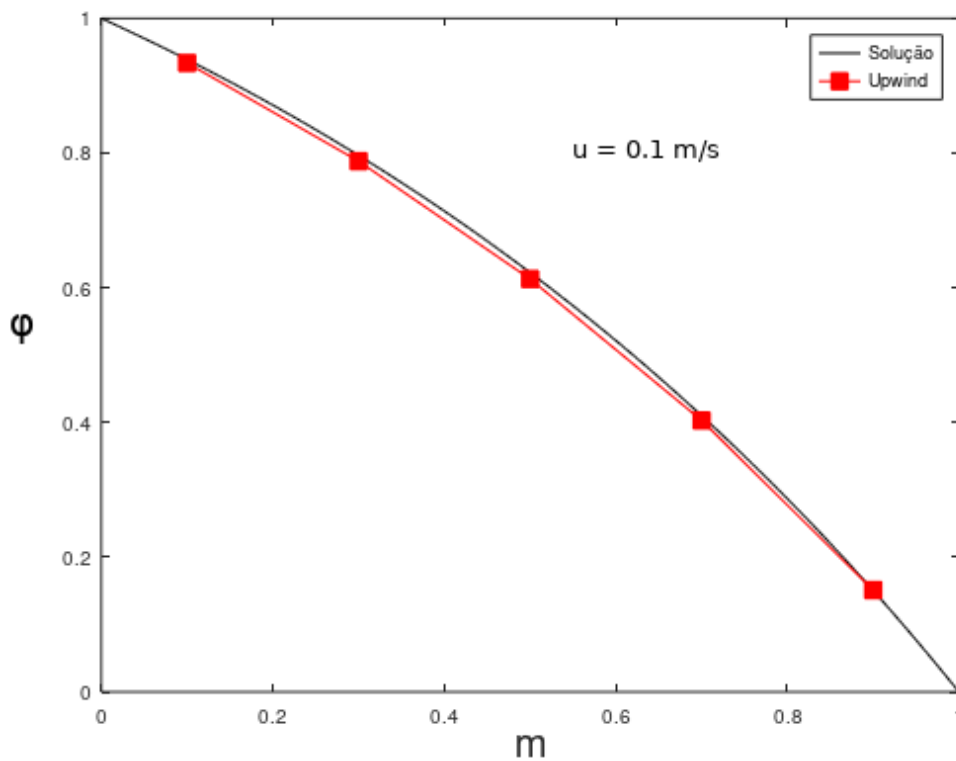


Figura 3.15: Gráfico inicial gerado pelo Octave

A priori, os resultados são satisfatórios. Porém, assim como o método de diferenças centrais parecia estável inicialmente, é importante variar as condições de contorno do problema para verificar a confiabilidade da aproximação gerada pelo método. Assim, seguiremos os mesmos passos que usamos para avaliar o esquema de diferenças centrais, aumentando gradativamente a velocidade e o número de pontos para analisar o comportamento da solução fornecida pelo método e verificar se sua aproximação é satisfatória.

Por isso, testaremos agora para condições de contorno diferentes, onde variamos a velocidade para verificar se a estabilidade se mantém:

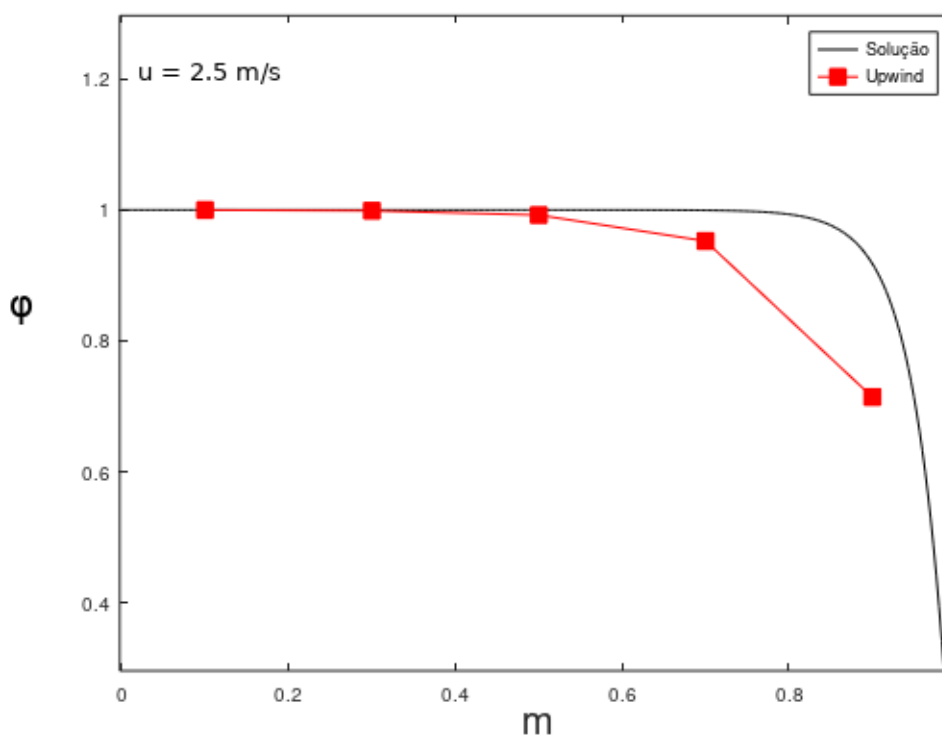


Figura 3.16: Gráfico gerado pelo Octave

Nesse caso, a estabilidade se manteve, apesar da aproximação ter sido um pouco menos precisa. Pode-se resolver isso aumentando o número de pontos nodais, nesse caso aumentamos para 20 nós, com intuito de tentar melhorar a aproximação, obtendo:

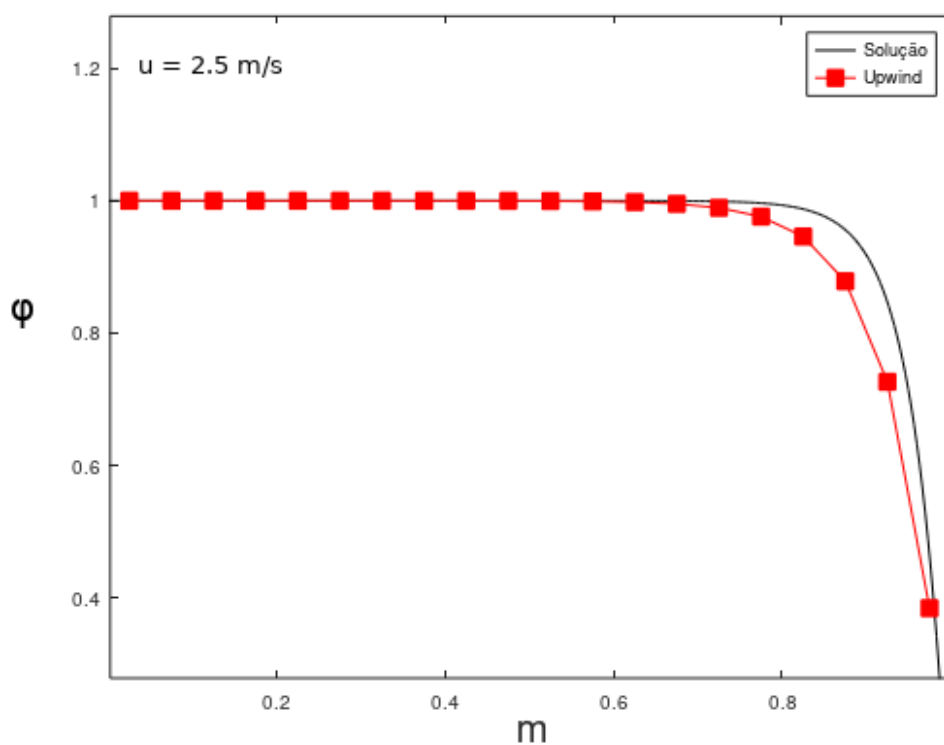


Figura 3.17: Gráfico com gerado pelo Octave

Agora, aumentando mais a velocidade, para verificar a estabilidade em condições de contorno em que a convecção é grande, ou seja,  $Pe$  é alto, temos:

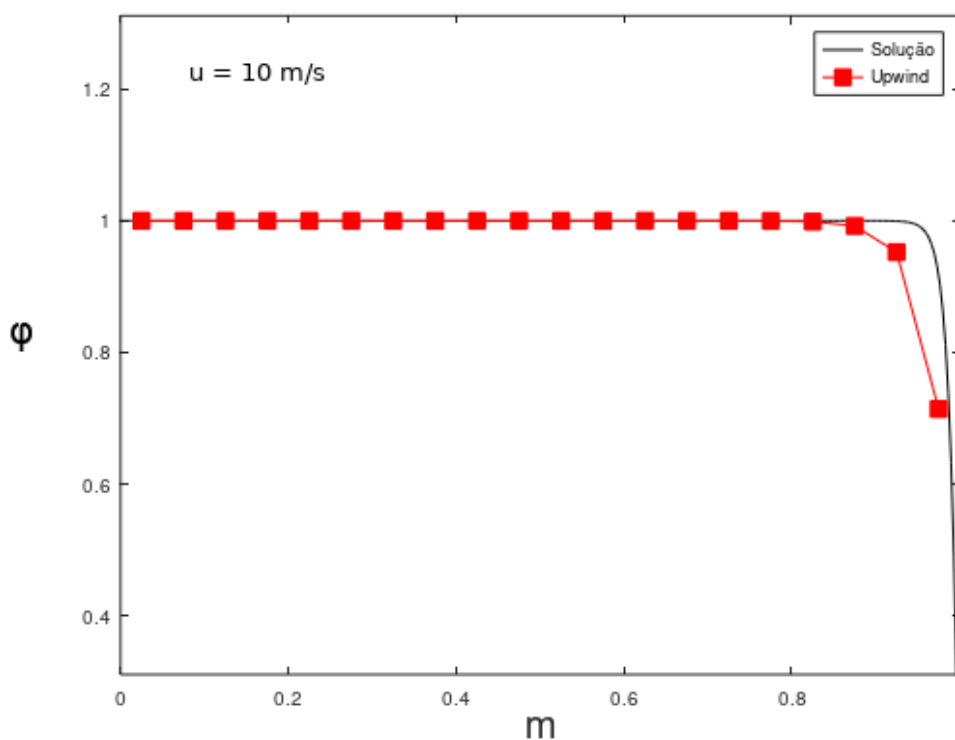


Figura 3.18: Gráfico com gerado pelo Octave

Assim, percebe-se que a aproximação é estável e quanto maior o número de pontos nodais utilizados, mais próxima será a solução. Entretanto, apesar de a solução não oscilar, como foi no caso de diferenças centrais, existe uma certa "suavização" do gráfico. Sendo assim, entende-se que o Upwind, forneceu uma solução estável e mais próxima da resposta real do problema, porém houve um "amortecimento" no resultado. Esse erro numérico é chamado de falsa difusão, que é um erro que deve ser considerado na solução ao utilizar este método.

### 3.6 O Método QUICK

Na seção anterior, discorremos sobre o método Upwind, que apesar de representar uma boa solução para problemas em que a direção do fluxo é importante, ele fornece uma precisão de primeira ordem em termos de erro de truncamento da série de Taylor (3.6.1), o que faz com que esse método esteja propenso a erros numéricos, como é o caso da difusão falsa. Todavia, se usarmos uma precisão de segunda ordem, os erros são minimizados. Nesse contexto, apresentamos o método QUICK, que significa *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics*, fazendo uma tradução livre: "Interpolação Quadrática à Montante para Cinética Convectiva".

**Observação 3.6.1** *Para ficar mais claro, destacamos que a série de Taylor é de grande importância para o estudo de métodos numéricos, pois fornece um meio de aproximar uma função  $f(x)$  qualquer, por um polinômio de grau adequado nas proximidades de um ponto de interesse, o qual se deseja encontrar. Em resumo, podemos dizer que a série de Taylor fornece um meio de achar o valor da função em um ponto. Isso nos permite, por exemplo, manipular o polinômio ao invés de manipular a função em si, resultando numa simplificação dos cálculos em troca de uma perda de precisão aceitável.*

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n$$

*Esta é a série de Taylor centrada em  $a$ .*

**Definição 3.6.1** *Erro de truncamento na série de Taylor: é a diferença entre o valor real de uma função e o valor aproximado calculado utilizando um número limitado de termos na expansão da série de Taylor.*

Esquemas de ordem superior envolvem mais pontos adjacentes e assim, reduzem os erros de discretização ao incorporar uma influência mais ampla. O método de diferenças centrais, estudado anteriormente, apesar de possuir uma precisão de segunda ordem, se mostrou instável em problemas onde a convecção é forte. Normalmente, formulações que não levam em consideração a direção do fluxo, como a de diferenças centrais, são instáveis. Devido a isso, faz-se necessário estudar um método de ordem superior mais preciso, que preserve a estabilidade e leve em conta a direção do fluxo, assim como o método Upwind. Assim, analisaremos o esquema QUICK de Leonard, que é um esquema de ordem superior que possui essas duas propriedades.

O método QUICK de Leonard (1979 apud Versteeg e Malalasekera, 2007 [10], p.156), utiliza uma interpolação de segunda ordem, considerando três pontos para calcular o valor na face da célula. Nesse método, o valor de  $\phi$  é obtido a partir de uma função, que passa por dois nós, um em cada lado da face, de modo que a face esteja entre esses dois pontos nodais, e um nó à montante, ou seja, considerando a direção do fluxo, é o ponto que se encontra atrás do primeiro nó.

Explicando de outra forma, podemos dizer que para calcular o valor de  $\phi$  na face leva-se em consideração dois nós à montante, antes da face e um depois dela, sempre levando em conta a direção do fluxo para entender onde é a montante e onde é a jusante.

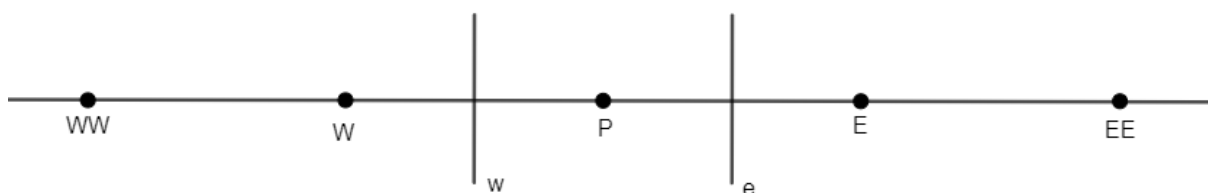


Figura 3.19: Volume de controle com um nó central e dois nós à montante e à jusante

Na figura 3.19, podemos visualizar os nós que serão usados para calcular o valor da propriedade na face, de modo que, considerando a direção positiva do fluxo (da esquerda para a direita), temos que, para calcular  $\phi$  na face  $w$ , usaremos dois nós à montante,  $WW$  e  $W$ , e um à jusante,  $P$ . Usando a mesma lógica, para calcular  $\phi$  em  $e$ , usaremos  $W$ ,  $P$  e  $E$ . Contudo, se a direção do fluxo for negativa, os pontos usados para os cálculos muda. Para melhorar o entendimento, veremos exemplos a seguir.

Tomemos como exemplo, quando  $u_w > 0$  e  $u_e > 0$ . Dessa forma, é usada uma interpolação

de ordem dois que passa por  $WW$ ,  $W$  e  $P$  para avaliar  $\phi_w$ . Além disso, para calcular  $\phi_e$  temos mais uma interpolação de segunda ordem que passa por  $W$ ,  $P$  e  $E$ .

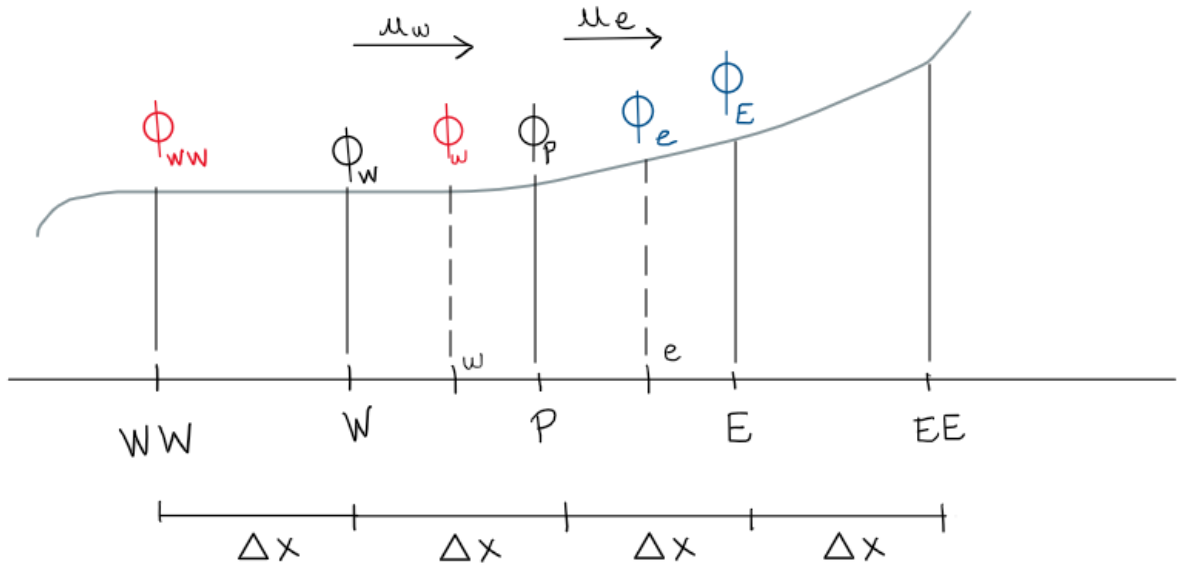


Figura 3.20: QUICK na direção positiva do fluxo

Agora, para  $u_w < 0$  e  $u_e < 0$  os valores de  $\phi$  em  $W$ ,  $P$  e  $E$  são usados para calcular  $\phi_w$  e os valores em  $P$ ,  $E$  e  $EE$  são usados para verificar  $\phi_e$ .

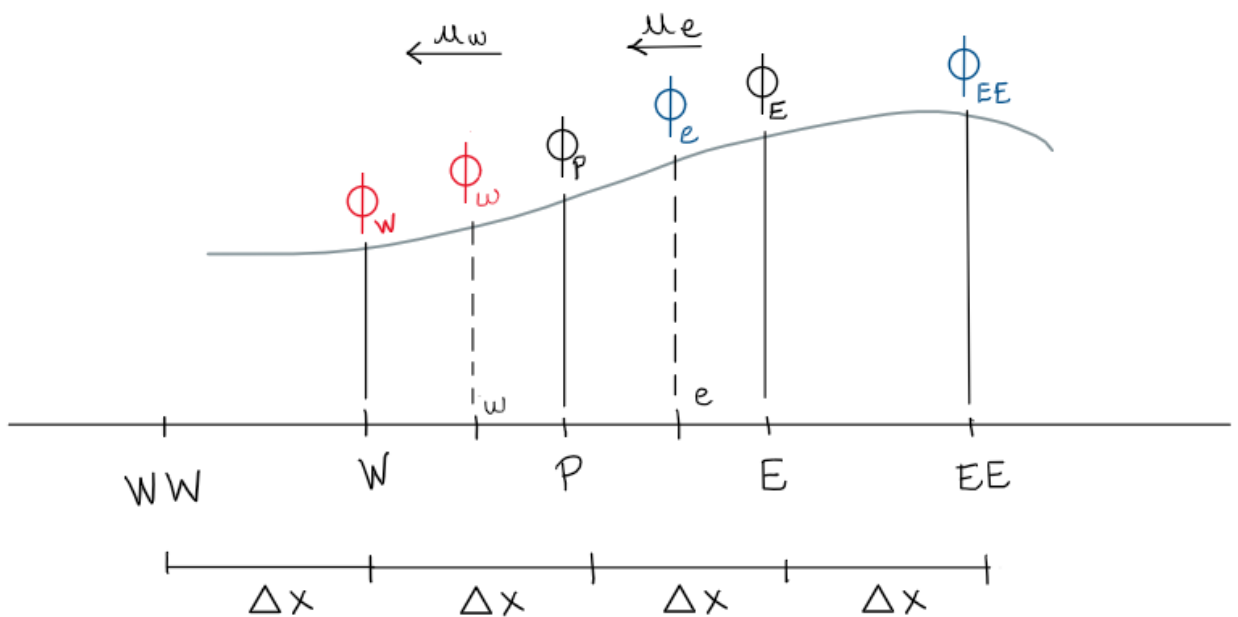


Figura 3.21: QUICK na direção negativa do fluxo

Explicando sobre a interpolação, sejam os nós de índices  $i$ ,  $i - 1$  e  $i - 2$ , com  $i$  sendo o índice no ponto  $P$ ,  $i - 1$  o índice no ponto adjacente  $W$  ou  $E$  e  $i - 2$  o índice no ponto à montante, que pode ser  $WW$  ou  $EE$ , depende da direção do fluxo e em qual face se deseja calcular o valor da propriedade. Podemos calcular, pelo método de diferenças divididas, o valor de  $\phi$  na face.

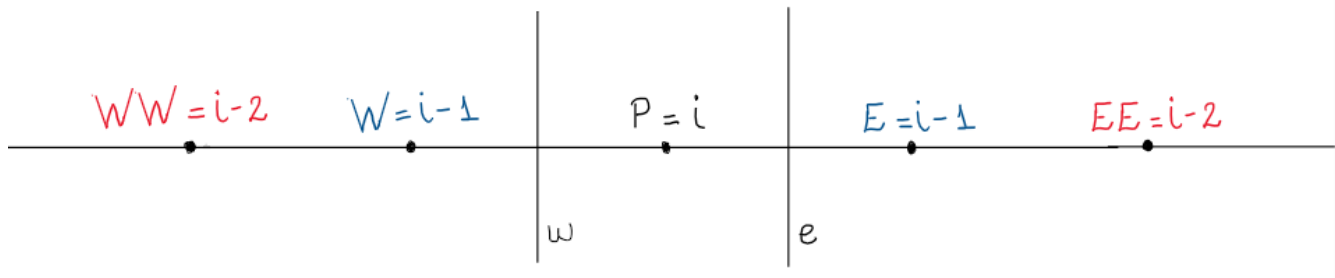


Figura 3.22: Índices dos pontos nodais no QUICK

Assim como no método de diferenças centrais, aplicamos novamente o método de diferenças divididas de Newton, mas dessa vez, considerando mais um ponto, ou seja, procuramos um polinômio interpolador de segunda ordem. Assim, calcularemos da seguinte forma:

Para calcular o polinômio interpolador,  $Q_n(x)$ , onde  $n$  é o grau do polinômio, que nesse caso é 2, temos:

$$Q_2(x) = f[x_{i-2}] + f[x_{i-2}, x_{i-1}](x - x_{i-2}) + f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i](x - x_{i-2})(x - x_{i-1})$$

onde,  $f[x_i] = f(x_i)$  e  $f[x_{i-2}, x_{i-1}]$  é calculado por:

$$f[x_{i-2}, x_{i-1}] = \frac{f[x_{i-1}] - f[x_{i-2}]}{x_{i-1} - x_{i-2}}$$

e  $f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i]$  é calculado por:

$$f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i] = \frac{f[x_{i-1}, x_i] - f[x_{i-2}, x_{i-1}]}{x_i - x_{i-2}}$$

Assim, sendo  $f[x_{i-2}] = \phi_{i-2}$ ,  $f[x_{i-1}] = \phi_{i-1}$ ,  $f[x_i] = \phi_i$ , podemos calcular o polinômio interpolador da seguinte forma:

$$Q_2(x) = \phi_{i-2} + f[x_{i-2}, x_{i-1}](x - x_{i-2}) + f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i](x - x_{i-2})(x - x_{i-1})$$

Calculando as diferenças divididas, temos:

(i) Primeiramente,

$$f[x_{i-2}, x_{i-1}] = \frac{f[x_{i-1}] - f[x_{i-2}]}{x_{i-1} - x_{i-2}}$$

$$f[x_{i-2}, x_{i-1}] = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}.$$

(ii) Ainda,

$$f[x_{i-1}, x_i] = \frac{f[x_i] - f[x_{i-1}]}{x_i - x_{i-1}}$$

$$f[x_{i-1}, x_i] = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}.$$

(iii) Por último,

$$f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i] = \frac{f[x_{i-1}, x_i] - f[x_{i-2}, x_{i-1}]}{x_i - x_{i-2}}$$

$$f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i] = \frac{\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} - \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}}{2\Delta x}$$

$$f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i] = \frac{\phi_i - \phi_{i-1} - \phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{2(\Delta x)^2}$$

$$f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i] = \frac{\phi_i - 2\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{2(\Delta x)^2}.$$

Assim, substituimos no polinômio:

$$Q_2(x) = \phi_{i-2} + f[x_{i-2}, x_{i-1}](x - x_{i-2}) + f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i](x - x_{i-2})(x - x_{i-1})$$

$$Q_2(x) = \phi_{i-2} + \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}(x - x_{i-2}) + \frac{\phi_i - 2\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{2(\Delta x)^2}(x - x_{i-2})(x - x_{i-1})$$

Para encontrar o valor de  $\phi$  na face basta substituir o valor de  $x$  no polinômio por aquele que desejamos encontrar. Dessa forma, sabemos que os índices dos nós adjacentes à face são  $i$  e  $i - 1$ , e o nó a montante tem índice  $i - 2$ . Portanto, o que pretendemos calcular é o valor de  $\phi$  em um ponto da face, o qual está entre  $i$  e  $i - 1$ . Daí, obtemos:

$$Q_2(x) = \phi_{i-2} + \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}(x - x_{i-2}) + \frac{\phi_i - 2\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{2(\Delta x)^2}(x - x_{i-2})(x - x_{i-1})$$

$$Q_2(x_{face}) = \phi_{i-2} + \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}(x_{face} - x_{i-2}) + \frac{\phi_i - 2\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{2(\Delta x)^2}(x_{face} - x_{i-2})(x_{face} - x_{i-1})$$

$$Q_2(x_{face}) = \phi_{i-2} + \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x} \left( \frac{3\Delta x}{2} \right) + \frac{\phi_i - 2\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{2(\Delta x)^2} \left( \frac{3\Delta x}{2} \right) \left( \frac{\Delta x}{2} \right)$$

$$Q_2(x_{face}) = \phi_{i-2} + (\phi_{i-1} - \phi_{i-2}) \left( \frac{3}{2} \right) + \frac{\phi_i - 2\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{2} \left( \frac{3}{2} \right) \left( \frac{1}{2} \right)$$

$$Q_2(x_{face}) = \phi_{i-2} - \frac{3\phi_{i-2}}{2} + \frac{3\phi_{i-2}}{8} + \frac{3\phi_{i-1}}{2} - \frac{6\phi_{i-1}}{8} + \frac{3\phi_i}{8}$$

$$Q_2(x_{face}) = \frac{8\phi_{i-2} - 12\phi_{i-2} + 3\phi_{i-2}}{8} + \frac{12\phi_{i-1} - 6\phi_{i-1}}{8} + \frac{3\phi_i}{8}$$

$$Q_2(x_{face}) = -\frac{\phi_{i-2}}{8} + \frac{6\phi_{i-1}}{8} + \frac{3\phi_i}{8}$$

Dessa forma, mostramos que em uma malha uniforme, o valor de  $\phi$  na face da célula é dado pela seguinte fórmula:

$$\phi_{face} = \frac{6}{8}\phi_{i-1} + \frac{3}{8}\phi_i - \frac{1}{8}\phi_{i-2} \quad (3.26)$$

Quando  $u_w > 0$ , os nós mais próximos à face  $w$  são  $W$  e  $P$ , e o nó mais à montante é  $WW$ , então temos:

$$\phi_w = \frac{6}{8}\phi_W + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{WW} \quad (3.27)$$

Quando  $u_e > 0$ , os nós mais próximos à face  $e$  são  $P$  e  $E$ , e o nó mais à montante é  $W$ , então:

$$\phi_e = \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{1}{8}\phi_W \quad (3.28)$$

Os termos de difusão podem ser avaliados usando o gradiente de aproximação da parábola. É interessante notar que, em uma malha uniforme, essa prática fornece as mesmas expressões que o método de diferenças centrais para a difusão, uma vez que a inclinação da corda entre dois pontos em uma parábola é igual à inclinação da tangente à parábola em seu ponto médio. Se  $F_w > 0$ ,  $F_e > 0$  e se usarmos as equações (3.27) e (3.28) para os termos convectivos e diferenças centrais para os termos de difusão, a formação discretizada da equação de transporte de convecção-difusão unidimensional (3.13) pode ser escrita como:

$$\left[ F_e \left( \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{1}{8}\phi_W \right) - F_w \left( \frac{6}{8}\phi_W + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{WW} \right) \right] = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W).$$

Rearranjando a equação, obtemos:

$$F_e \left( \frac{6}{8}\phi_P \right) + F_e \left( \frac{3}{8}\phi_E \right) - F_e \left( \frac{1}{8}\phi_W \right) - F_w \left( \frac{6}{8}\phi_W \right) + F_w \left( \frac{3}{8}\phi_P \right) - F_w \left( \frac{1}{8}\phi_{WW} \right) = D_e\phi_E - D_e\phi_P - D_w\phi_P - D_w\phi_W$$

$$F_e \left( \frac{6}{8}\phi_P \right) + F_w \left( \frac{3}{8}\phi_P \right) + D_e\phi_P + D_w\phi_P = D_e\phi_E - D_w\phi_W - F_e \left( \frac{3}{8}\phi_E \right) + F_e \left( \frac{1}{8}\phi_W \right) + F_w \left( \frac{6}{8}\phi_W \right) + F_w \left( \frac{1}{8}\phi_{WW} \right)$$

$$\left[ D_w + \frac{3}{8}F_w + D_e + \frac{6}{8}F_e \right] \phi_P = \left[ D_w + \frac{6}{8}F_w + \frac{1}{8}F_e \right] \phi_W + \left[ D_e - \frac{3}{8}F_e \right] \phi_E - \frac{1}{8}F_w\phi_{WW} \quad (3.29)$$

Agora, temos a equação discretizada da forma:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_{WW}\phi_{WW} \quad (3.30)$$

onde,

$$\begin{aligned} a_W &= D_w + \frac{6}{8}F_w + \frac{1}{8}F_e \quad ; \\ a_E &= D_e - \frac{3}{8}F_e \quad ; \\ a_{WW} &= -\frac{1}{8}F_w \quad ; \\ a_P &= a_W + a_E + a_{WW} + (F_e - F_w) \end{aligned}$$

Para  $F_w < 0$  e  $F_e < 0$ , o fluxo através das fronteiras à esquerda e à direita é dado pelas expressões

$$\phi_w = \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_W - \frac{1}{8}\phi_E \quad \text{e} \quad \phi_e = \frac{6}{8}\phi_E + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{EE}. \quad (3.31)$$

O processo para descobrir essas expressões é análogo ao mostrado anteriormente, porém como a direção do fluxo mudou, os pontos tomados para fazer o cálculo serão diferentes, mas os valores permanecem.

A substituição dessas duas fórmulas para os termos convectivos na equação discretizada de convecção-difusão (3.13), juntamente com a diferença central para os termos de difusão, leva,

$$\left[ F_e \left( \frac{6}{8}\phi_E + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{EE} \right) - F_w \left( \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_W - \frac{1}{8}\phi_E \right) \right] = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W)$$

Após o rearranjo, de forma análoga ao que foi feito acima para encontrar (3.29), temos a seguinte equação:

$$\left[ D_w - \frac{6}{8}F_w + D_e + \frac{3}{8}F_e \right] \phi_P = \left[ D_w + \frac{3}{8}F_w \right] \phi_W + \left[ D_e - \frac{6}{8}F_e - \frac{1}{8}F_w \right] \phi_E + \frac{1}{8}F_e\phi_{EE} \quad (3.32)$$

onde a equação discretizada é:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_{EE}\phi_{EE} \quad (3.33)$$

com os coeficientes sendo:

$$\begin{aligned}
 a_W &= D_w + \frac{3}{8}F_w \quad ; \\
 a_E &= D_e - \frac{6}{8}F_e - \frac{1}{8}F_w \quad ; \\
 a_{EE} &= \frac{1}{8}F_e \quad ; \\
 a_P &= a_W + a_E + a_{EE} + (F_e - F_w)
 \end{aligned}$$

Assim, temos um conjunto de duas equações discretizadas pelo método QUICK, porém, uma expressão geral, válidas para direções de fluxo positivas e negativas, podem ser obtidas combinando os dois conjuntos de coeficientes acima.

O esquema QUICK para problemas de convecção-difusão unidimensional pode ser resumido da seguinte forma:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_{WW} \phi_{WW} + a_{EE} \phi_{EE} \quad (3.34)$$

com coeficiente central

$$a_P = a_W + a_E + a_{WW} + a_{EE}(F_e - F_w)$$

e coeficientes vizinhos

$$a_W = D_w + \frac{6}{8}\alpha_w F_w + \frac{1}{8}\alpha_e F_e + \frac{3}{8}(1 - \alpha_w)F_w \quad ;$$

$$a_{WW} = -\frac{1}{8}\alpha_w F_w \quad ;$$

$$a_E = D_e + \frac{3}{8}\alpha_e F_e - \frac{6}{8}(1 - \alpha_e)F_e - \frac{1}{8}(1 - \alpha_w)F_w \quad ;$$

$$a_{EE} = \frac{1}{8}(1 - \alpha_e)F_e$$

Onde

$$\alpha_w = \begin{cases} 1, & \text{se } F_w > 0 \\ 0, & \text{se } F_w < 0 \end{cases}$$

$$\alpha_e = \begin{cases} 1, & \text{se } F_e > 0 \\ 0, & \text{se } F_e < 0 \end{cases}$$

### 3.7 Avaliação do Método QUICK

O esquema QUICK possui maior precisão formal do que o método de diferenças centrais e ainda mantém o peso das características do Upwind. As soluções obtidas, muitas vezes, são consideravelmente mais precisas que as do método Upwind.

No próximo capítulo, mostraremos uma solução numérica, comparando o Upwind e o QUICK, o que possibilitará perceber que o QUICK é mais próximo da solução real do que o Upwind. Então, pode-se dizer que para problemas mais complexos, o método QUICK apresenta as soluções mais satisfatórias dentre os três métodos estudados. Note que a avaliação do método QUICK não foi feita em uma dimensão utilizando o Octave como nos casos anteriores, pois o código seria bem mais complexo, então optou-se por realizar o teste apenas no OpenFOAM, utilizando duas dimensões.

---

---

## CAPÍTULO 4

---

# APLICAÇÃO NO OPENFOAM

No capítulo anterior, analisamos a equação de convecção e difusão para problemas unidimensionais. Neste capítulo, mostraremos solução numérica para problemas bidimensionais, onde a aplicação pode ser mostrada no OpenFOAM [6].

Primeiramente, dissertando um pouco sobre o OpenFOAM, destacamos que ele é um software gratuito e *open source*, ou seja de código aberto. Isso traz uma vantagem em relação a este programa, pois ao permitir acesso ao seu código de execução, ele possibilita ao usuário customizar e entender o funcionamento do software de maneira mais completa.

De acordo com OpenFOAM [8], este programa teve sua primeira versão lançada em dezembro de 2004 pela OpenCFD e desde então, ele tem sido trabalhado para aumentar suas funcionalidades, que o permitem uma variedade de aplicações.

Além disso, ele utiliza a linguagem C++ em sua programação, que é uma linguagem bastante usual para programas computacionais, o que o é um facilitador para sua utilização. Portanto, pode-se perceber que este software apresenta vários benefícios, por isso, escolher utilizá-lo para este trabalho foi algo simples.

Além de várias funcionalidades importantes, o fato do OpenFOAM ser gratuito e possuir código aberto foi essencial para esta pesquisa, pois permitiu que, além de usá-lo sem custo, o processo de resolução dos problemas fossem melhor compreendidos. Muitos softwares que não possuem código aberto não permitem o acesso aos processos de resolução. Assim, o OpenFOAM não só permitiu enriquecer a pesquisa, como também a melhor compreensão do fenômeno estudado.

O OpenFOAM é capaz de simular o comportamento do fluido em malhas 2D e 3D, porém para este momento do trabalho, estudaremos o comportamento somente em duas dimensões. Para isso, como já falamos dos métodos, procurou-se fazer uma simulação de um problema, onde construiu-se uma malha com determinadas condições de contorno e fez-se a comparação dos resultados utilizando o Upwind e o QUICK.

Como mencionado anteriormente, o OpenFOAM é um software de código aberto, com linguagem C++, onde podemos montar a estrutura do problema que queremos simular. Para isso, é necessário seguir alguns passos. De maneira resumida, pretende-se mostrar o que foi feito para simular este problema.

Primeiramente, dentro do OpenFOAM, temos algumas pastas que contém suas informações e condições de aplicação, as quais podem ser copiadas e modificadas para atender às condições do usuário. Nesse sentido, Dentre essas pastas, temos os *solvers*, são eles que definem como o problema será resolvido. O *solver* utilizado para a simulação tratada neste trabalho é chamado de *scalarTransportFoam*. Assim, segue o código do *scalarTransportFoam*:

```

38
39 int main(int argc, char *argv[])
40 {
41     #include "setRootCaseLists.H"
42     #include "createTime.H"
43     #include "createMesh.H"
44
45     simpleControl simple(mesh);
46
47     #include "createFields.H"
48
49     // * * * * * //
50
51     Info<< "\nCalculating scalar transport\n" << endl;
52
53     #include "CourantNo.H"
54
55     while (simple.loop(runTime))
56     {
57         Info<< "Time = " << runTime.userTimeName() << nl << endl;
58
59         fvModels.correct();
60
61         while (simple.correctNonOrthogonal())
62         {
63             fvScalarMatrix TEqn
64             (
65                 fvm::ddt(T)
66                 + fvm::div(phi, T)
67                 - fvm::laplacian(DT, T)
68                 ==
69                 fvModels.source(T)
70             );
71
72             TEqn.relax();
73             fvConstraints.constrain(TEqn);
74             TEqn.solve();
75             fvConstraints.constrain(T);
76         }
77
78         runTime.write();
79     }
80
81     Info<< "End\n" << endl;
82
83     return 0;
84 }
85

```

Figura 4.1: *solver scalarTransportFoam* [1]

Definido o *solver*, temos que escolher qual caso queremos simular e qual método vamos utilizar. Para isso, precisamos adequar a malha, no *blockMesh*. Nesse arquivo, podemos definir como será a malha trabalhada, desde os vértices, os formatos, quais faces serão móveis e outras funcionalidades necessárias para a criação da malha.

```

1 |*-----*- C++ -*-----*|
2 |=====|
3 |  \ \ /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4 |  \ \ /  O p e r a t i o n | Website: https://openfoam.org
5 |   \ \ /  A n d          | Version: 10
6 |    \ \ /  M a n i p u l a t i o n |
7 |*-----*-|
8 FoamFile
9 {
10  format      ascii;
11  class       dictionary;
12  object      blockMeshDict;
13 }
14 // ***** //
15
16 convertToMeters 1;//0.1;
17
18 vertices
19 (
20   (0 0 0)
21   (1 0 0)
22   (1 1 0)
23   (0 1 0)
24   (0 0 0.1)
25   (1 0 0.1)
26   (1 1 0.1)
27   (0 1 0.1)
28 );
29
30 blocks
31 (
32   hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (50 50 1) simpleGrading (1 1 1)
33 );
34

```

Figura 4.2: *blockMesh [1]*

```

34
35 boundary
36 (
37     topLeftWall
38     {
39         type wall;
40         faces
41         (
42             (3 7 6 2)
43             (0 4 7 3)
44         );
45     }
46     botRightWall
47     {
48         type wall;
49         faces
50         (
51
52             (2 6 5 1)
53             (1 5 4 0)
54         );
55     }
56     frontAndBack
57     {
58         type empty;
59         faces
60         (
61             (0 3 2 1)
62             (4 5 6 7)
63         );
64     }
65 );
66
67
68 // ***** //

```

Figura 4.3: *blockMesh* [2]

O método é definido no arquivo *fvSchemes*. Onde podemos escolher o esquema de discretização que iremos usar para resolver o problema proposto. Para isso, observando a figura 4.4, na linha 30 do código, onde está escrito *upwind*, pode-se trocar e colocar o método que se deseja.

```

2  =====
3  \ \ / / F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \ \ / / O p e r a t i o n | Website: https://openfoam.org
5  \ \ / / A n d           | Version: 10
6  \ \ / / M a n i p u l a t i o n |
7  |*-----*/
8  FoamFile
9  {
10     format      ascii;
11     class        dictionary;
12     location     "system";
13     object       fvSchemes;
14 }
15 // *****
16
17 ddtSchemes
18 {
19     default      Euler;
20 }
21
22 gradSchemes
23 {
24     default      Gauss linear;
25 }
26
27 divSchemes
28 {
29     default      none;
30     div(phi,T)   Gauss upwind;//colocar o método aqui
31 }
32
33 laplacianSchemes
34 {
35     default      none;
36     laplacian(DT,T) Gauss linear corrected;
37 }
38
39 interpolationSchemes
40 {
41     default      linear;
42 }
43
44 snGradSchemes
45 {
46     default      corrected;

```

Figura 4.4: *fvSchemes*

Além disso, podemos definir durante quanto tempo o problema vai correr e quantas etapas queremos calcular, definimos isso no *controlDict*.

```

1 /*-----*- C++ -*-----*/
2 =====
3  \ \      /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \ \      /  O p e r a t i o n | Website: https://openfoam.org
5   \ \     /  A n d          | Version: 10
6   \ \    /  M a n i p u l a t i o n |
7 /*-----*-*/
8 FoamFile
9 {
10     format      ascii;
11     class        dictionary;
12     location     "system";
13     object       controlDict;
14 }
15 // *****
16
17 application     scalarTransportFoam;
18
19 startFrom       startTime;
20
21 startTime       0;
22
23 stopAt          endTime;
24
25 endTime         1;
26
27 deltaT          0.0001;
28
29 writeControl    timeStep;
30
31 writeInterval   500;
32
33 purgeWrite      0;
34
35 writeFormat     ascii;
36
37 writePrecision  6;
38
39 writeCompression off;
40
41 timeFormat      general;
42
43 timePrecision   6;
44
45 runTimeModifiable true;

```

Figura 4.5: *controlDict*

Definidos estes aspectos, podemos simular o problema. Neste trabalho tomaremos como exemplo o problema, retirado de Versteeg e Malalasekera (2007) [10], que é o seguinte: Em um domínio onde a velocidade é uniforme,  $v = u = 2\text{ m/s}$ , e é paralela à diagonal da malha. As condições de contorno são  $\phi = 0$  na face de baixo (sul) e na face à direita (leste) e  $\phi = 100$  na face à esquerda (oeste) e na face de cima (norte).

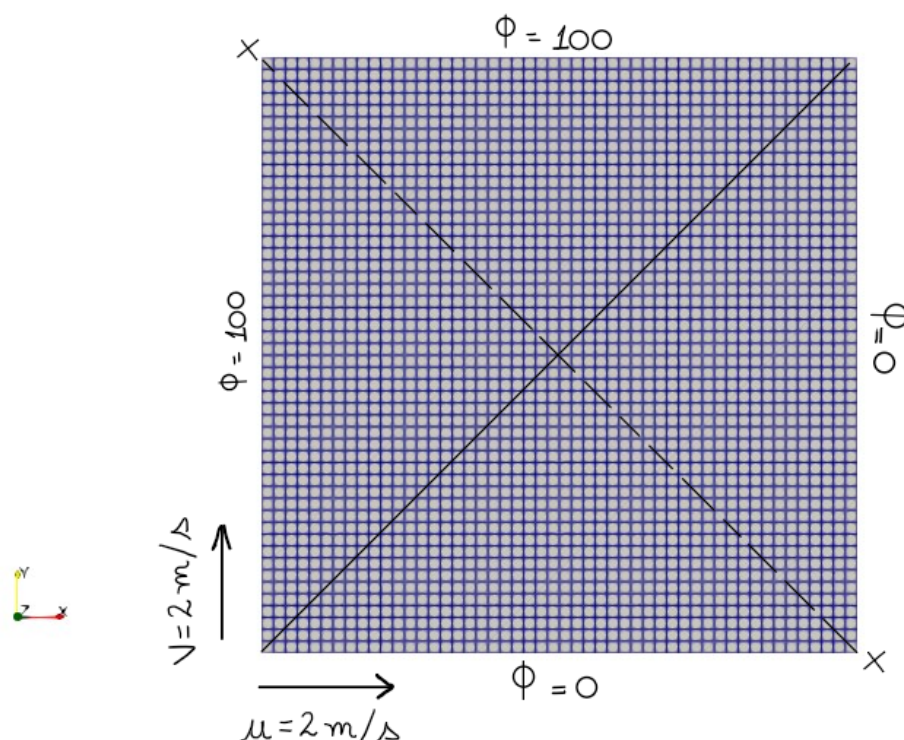


Figura 4.6: Domínio do fluxo

Neste problema, fazemos uma comparação entre o esquema Upwind e o QUICK podendo mostrar, sob essas condições, um teste para um caso bidimensional em uma malha de 50 X 50.

Assim, geramos a malha, com o *blockMesh* e aplicamos o *solver*, *scalarTransportFoam*, e para visualizar a malha, utilizamos o *paraview*, que é um visualizador que abre arquivos com a extensão *.foam*, o qual criamos com os comandos *paraFoam -touch* para gerar um arquivo *.OpenFOAM* e depois usamos o *mv .OpenFOAM .foam*. Assim, podemos abrir a malha no visualizador, pois já temos a extensão necessária para abrir o arquivo. Assim, colocamos o problema para rodar.

Temos assim, duas malhas geradas no OpenFOAM, sendo a primeira 4.7, gerada utilizando o método Upwind e a segunda 4.8, gerada pelo método QUICK.

Primeiro, veremos a malha gerada pelos dois esquemas:

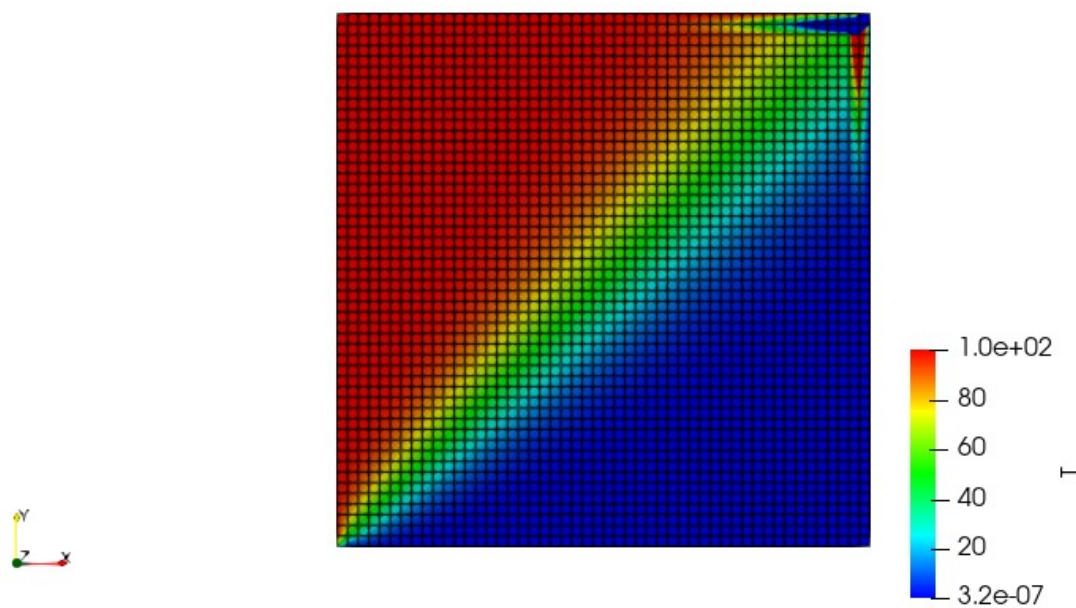


Figura 4.7: Malha gerada utilizando o método upwind

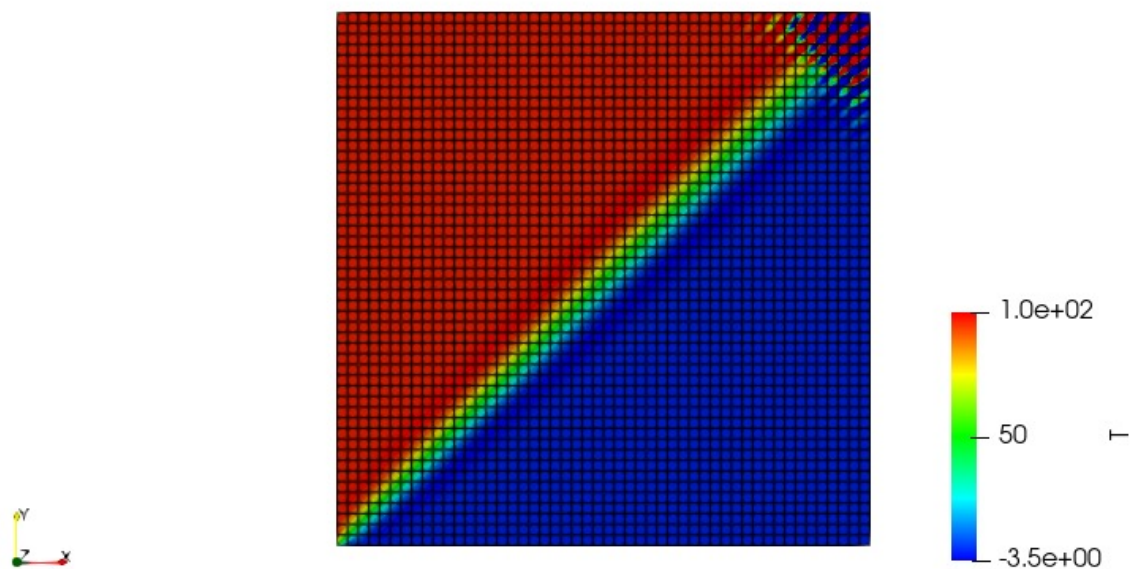


Figura 4.8: Malha gerada utilizando o método QUICK

Agora, mostrando graficamente as soluções, utilizando a ferramenta *Plot Over Line* do *paraview*, temos:

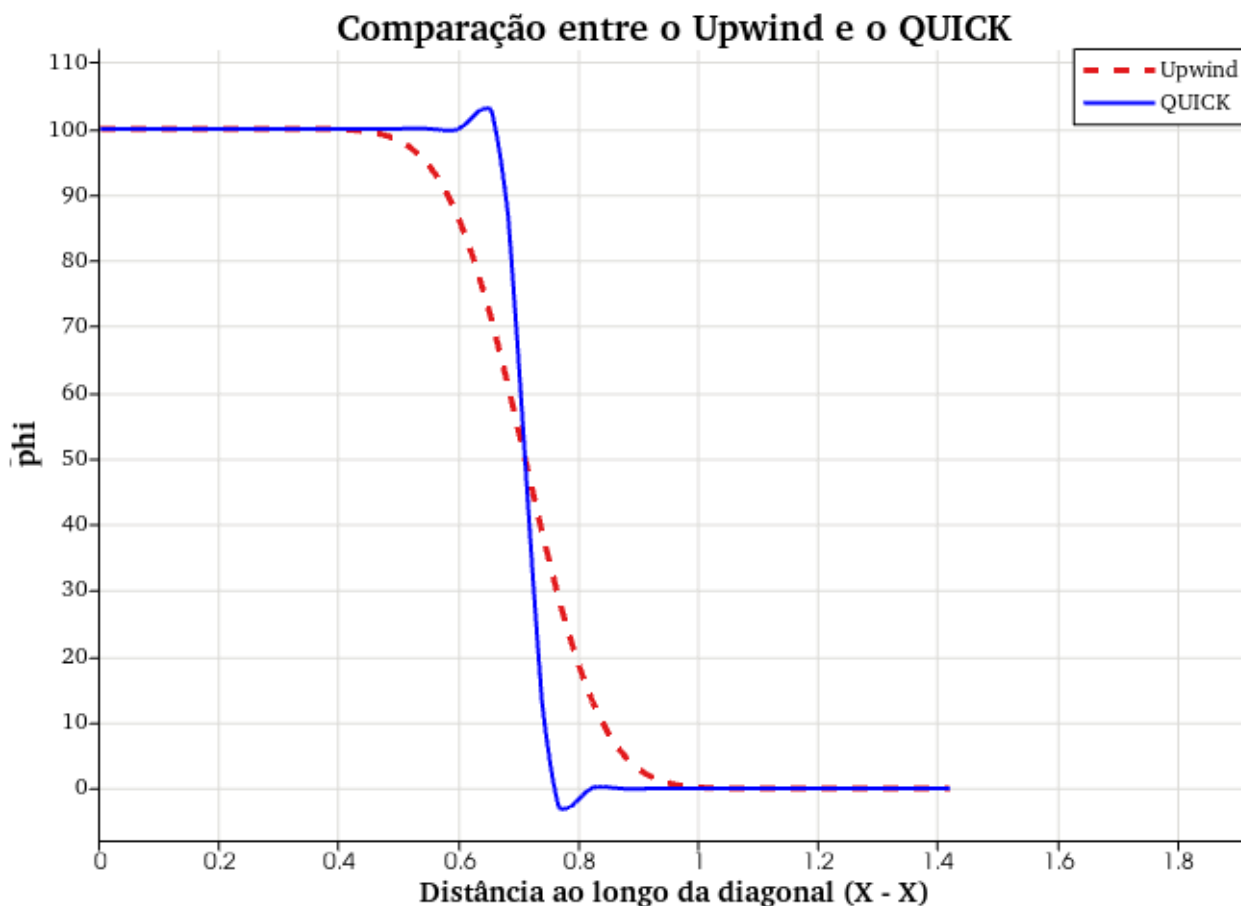


Figura 4.9: Comparação da solução bidimensional do QUICK e Upwind

Pelo gráfico, pode-se observar que o esquema QUICK coincide muito mais precisamente com a solução exata do problema, do que o Upwind .

No upwind existe uma suavização da solução do problema. O Esquema QUICK é mais próximo da solução real, no entanto, pode causar, mínimas, falhas por subestimação e superestimação, como evidenciado na Figura 4.9, onde existe uma pequena elevação tanto acima (na linha 100) quanto abaixo (na linha 0) no gráfico. Porém, ainda sim, o QUICK mostra-se uma aproximação mais exata. Mas, possibilidade de subestimações e superestimações deve ser considerada ao interpretar as soluções dadas por este método.

## 4.1 Considerações Finais

Neste trabalho, buscou-se entender e comparar as vantagens e desvantagens na utilização de três métodos de Volumes Finitos diferentes, sendo eles o de Diferenças Centrais, o Upwind e o QUICK. Cada um desses métodos pode ser empregado dependendo do problema e do grau de precisão desejada, como foi visto o QUICK é o mais apropriado, entre os três, para problemas mais complexos. Por outro lado, para problemas mais simples, mas em que a direção do fluxo faz-se importante, a utilização do Upwind seria adequada. Já em problemas onde a direção do fluxo não é relevante, o método de Diferenças Centrais pode ser aplicado.

Assim, mostra-se a importância de estudar estes métodos, para entender onde empregá-los da melhor forma para agilizar e facilitar a resolução do problema, visando o menor erro possível ou a aproximação mais satisfatória, dependendo do caso.

Além disso, tentamos mostrar o quanto os softwares, e mais especificamente o OpenFOAM, são relevantes na resolução de problemas como esse (solução da equação de convecção e difusão) em que os métodos para a solução da equação podem ser implementados computacionalmente, o que facilita sua compreensão e permite a visualização de sua eficiência.

---

# REFERÊNCIAS

- [1] BURDEN, R. L.; FAIRES, D. J.; BURDEN, A. M. **Análise Numérica**. 3 ed. São Paulo: Cengage Learning, 2015.
- [2] CHEN, G. et al. OpenFOAM for Computational Fluid Dynamics. **Notices of the AMS**, v. 61, n. 4, p. 354-363, abr., 2014.
- [3] CUNHA, C. **Métodos Numéricos**. 2 ed. Campinas, SP: Editora da UNICAMP, 2003.
- [4] FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações**. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2000.
- [5] MARQUES, G. N. et al. Visualização Científica no Contexto de Métodos Meshfree: Aprimoramento de Algoritmos Clássicos. **Revista de Exatas e Tecnológicas**, jan., 2014.
- [6] **OpenFOAM**, <https://www.openfoam.com/>. Acesso em : 3 nov., 2023.
- [7] **OpenFOAM**, <https://www.openfoam.com/governance/overview>. Acesso em : 3 nov., 2023.
- [8] **OpenFOAM**, <https://www.openfoam.com/news/history>. Acesso em : 6 dez., 2023.
- [9] SILVA, P. J. A. da; FREIRE, E. R. C. G. Simulação Computacional do escoamento em Degrau por Volumes Finitos Utilizando OpenFOAM. **Revista de Matemática da UFOP**, Ouro Preto, Minas Gerais, v. 1, p. 131-150, 2020.

[10] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: THE FINITE VOLUME METHOD**. 2 ed. Inghilterra: Pearson Education Limited, 2007.

[11] WHITE, F. M. **Fluid Mechanics**. 7 ed. Nova York: McGraw-Hill, 2009

---

# APÊNDICE

Código do Octave, desenvolvido pela autora, utilizado para gerar as figuras: [3.6](#), [3.7](#), [3.8](#), [3.9](#) e [3.10](#)

```
1 clear all;
2 clc;
3
4 %Condições iniciais do problema
5 L=1;
6 u=0.1;
7 rho=1;
8 Gamma=0.0001;
9 N=20;
10 phi_0=1;
11 phi_L=0;
12
13 %Montagem do código para solução
14 xface=linspace(0,L,N+1);
15 dx=xface(2)-xface(1);
16 for i=1:N
17     xnode(i)=(xface(i+1)+xface(i))*0.5;
18 endfor
19
20 D=Gamma/dx;
21 F=rho*u;
22
23 for i=1:N
24     aW(i)=D+F/2;
25     aE(i)=D-F/2;
26     SP(i)=0;
27     aP(i)=aW(i)+aE(i)-SP(i);
28     Su(i)=0;
29 endfor
```

Figura 4.10: Código do Octave para Diferenças Centrais [1]

```

30 L
31 aW(1)=0;
32 SP(1)=-2*(D+F/2);
33 Su(1)=2*(D+F/2)*phi_0;
34 aP(1)=aW(1)+aE(1)-SP(1);
35
36 aE(N)=0;
37 SP(N)=-2*(D-F/2);
38 Su(N)=2*(D-F/2)*phi_L;
39 aP(N)=aW(N)+aE(N)-SP(N);
40
41 phi=tdma(-aW,aP,-aE,Su);
42
43 Nex=300;
44 x_ex=linspace(0,L,Nex);
45 for i=1:Nex
46     phi_ex(i)=phi_0+(phi_L-phi_0)*(exp(rho*u*x_ex(i)/Gamma)-1)/(exp(rho*u*L/Gamma)-1);
47 endfor
48
49 plot_h=plot(x_ex,phi_ex,'-k', xnode,phi,'-r','marker','s','markerfacecolor','r');
50 xlabel_h=xlabel('m','fontsize',20);
51 ylabel_h=ylabel('', 'fontsize',20);
52 legend_h=legend(plot_h, "Solução", "Diferenças Centrais",'location', 'northwest');

```

Figura 4.11: Código do Octave para Diferenças Centrais [2]

Código do Octave, desenvolvido pela autora, utilizado para gerar as figuras: [3.15](#), [3.16](#), [3.17](#), [3.18](#)

```

1 clear all;
2 clc;
3
4 %Condições iniciais do problema
5 L=1;
6 u=10;
7 rho=1;
8 Gamma=0.1;
9 N=20;
10 phi_0=1;
11 phi_L=0;
12
13 %Código para a solução
14 xface=linspace(0,L,N+1);
15 dx=xface(2)-xface(1);
16 for i=1:N
17     xnode(i)=(xface(i+1)+xface(i))*0.5;
18 endfor
19
20 D=Gamma/dx;
21 F=rho*u;
22
23 for i=1:N
24     aW(i)=D+max(0,F);
25     aE(i)=D+max(0,-F);
26     SP(i)=0;
27     aP(i)=aW(i)+aE(i)-SP(i);
28     Su(i)=0;
29 endfor

```

Figura 4.12: Código do Octave para Upwind [1]

```

30 L
31 aW(1)=0;
32 SP(1)=-(2*D+max(0,F));
33 Su(1)=(2*D+max(0,F))*phi_0;
34 aP(1)=aW(1)+aE(1)-SP(1);
35
36 aE(N)=0;
37 SP(N)=-(2*D+max(0,-F));
38 Su(N)=(2*D+max(0,-F))*phi_L;
39 aP(N)=aW(N)+aE(N)-SP(N);
40
41 phi=tdma(-aW,aP,-aE,Su);
42
43 Nex=300;
44 x_ex=linspace(0,L,Nex);
45 for i=1:Nex
46     phi_ex(i)=phi_0+(phi_L-phi_0)*(exp(rho*u*x_ex(i)/Gamma)-1)/(exp(rho*u*L/Gamma)-1);
47 endfor
48
49 plot_h=plot(x_ex,phi_ex,'-k', xnode,phi,'-r','marker','s','markerfacecolor','r');
50 xlabel_h=xlabel('m','fontsize',20);
51 ylabel_h=ylabel(' ','fontsize',20);
52 legend_h=legend(plot_h, "Solução", "Upwind");

```

Figura 4.13: Código do Octave para Upwind [2]