

PROBLEMAS DIFUSIVOS-CONVECTIVOS ABORDADOS PELO MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS CENTRADAS E *UPWIND*

Victor de Souza Coelho Freitas
Universidade Federal Fluminense
victorcoelho@id.uff.br

Gustavo Benitez Alvarez
Universidade Federal Fluminense
gustavobenitez@id.uff.br

Cleyton Senior Stampa
Universidade Federal Fluminense
cleytons@id.uff.br

Panters Rodríguez Bermúdez
Universidade Federal Fluminense
pantersrb@id.uff.br

Resumo: O presente trabalho tem como objetivo abordar numericamente problemas governados pela equação de transporte difusiva-convectiva em regime permanente. Mais especificamente, foram estudados cenários bidimensionais nos quais há o predomínio do fenômeno da convecção, uma vez que desta forma tem-se um problema de perturbação singular. Para a abordagem numérica foi escolhido o método de diferenças finitas centradas e o método de diferenças finitas *upwind*. Foram implementados problemas contendo ou não camadas-limite em suas soluções. Ambos os métodos foram avaliados, com seus resultados comparados para determinar suas vantagens e desvantagens no contexto deste estudo.

Palavras-chave: Diferenças finitas centradas. Diferenças finitas *upwind*. Problema difusivo-convectivo. Oscilações espúrias.

Introdução

Problemas difusivos-convectivos dizem respeito à cenários nos quais tem-se um fenômeno físico no qual partículas, energia, ou outra quantidade física é transportada dentro de um domínio por meio de dois processos acoplados: difusão e convecção. A difusão é o mecanismo de transporte no qual a quantidade do elemento físico de interesse se desloca de um meio mais concentrado para o meio menos concentrado. Já a convecção se dá pela translação desse elemento através do domínio no qual ele está presente.

A Equação 1 abaixo representa a forma geral da equação difusiva-convectiva, na qual U é a quantidade física de interesse. Sendo \vec{w} um campo vetorial de velocidade, k denota o coeficiente difusivo e f representa uma fonte ou sumidouro dentro do domínio estabelecido. Para esta equação, temos que a solução é uma função $U(x, y, t)$ que varia de acordo com o tempo, dentro de um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Com Ω sendo aberto e delimitado, cujo limite Γ é suave e definido.

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \vec{w} \cdot \nabla U = \nabla \cdot (v \nabla) U + f \quad (1)$$

Considerando que U não varia com o tempo, ou seja, se encontra em regime permanente e depende apenas de suas variáveis espaciais, tem-se que $\frac{\partial U}{\partial t} = 0$. Assim, pode-se rescrever a Equação 1 conforme demonstrado pela Equação 2 abaixo. Se caracterizando como uma equação diferencial parcial (EDP) elíptica.

$$-k\Delta U + \vec{w} \cdot \nabla U = f \quad (2)$$

Sabendo que o número de Péclet (P_e) é dado como a razão entre o coeficiente convectivo e o coeficiente difusivo, pode-se definir ε como o inverso de P_e , com $\vec{w} = (a_1, a_2)$, tal que $\varepsilon_n = \frac{k}{a_n}$, para $n = 1, 2$. É esperado que, para casos de convecção dominante, ou seja, $\varepsilon_n \rightarrow 0$, a Equação 2 tende a se reduzir a uma equação diferencial parcial de primeira ordem, que só permite uma condição de contorno.

Entretanto, como $\varepsilon_n > 0$, ainda que muito pequeno, tem-se uma equação de segunda ordem que necessita de duas condições de contorno. Logo, é esperado um panorama de solução anormal próximo às condições de contorno, já que para $\varepsilon_n \rightarrow 0$ o problema está super-especificado.

Conforme discutido por Carmo e Benitez (2003), assim como Volker e Knobloch (2007), este panorama anormal é o que se chamam as oscilações espúrias, uma vez que a solução da equação difusiva-convectiva possui camadas-limite, que são pequenas regiões do domínio que possuem alto gradiente. Haja vista que o tamanho das malhas normalmente utilizadas em soluções numéricas é significativamente maior que a espessura da camada-limite, essa região não é resolvida de forma adequada. Dando assim, origem à tais oscilações que não são físicas, ou seja, não representam a solução do problema posto, mas sim instabilidades no método numérico.

Como discutido por Zhao (2018), problemas convectivos-difusivos, nos quais existe dominância da convecção, apresentam para os métodos clássicos de resolução, como o método das diferenças finitas (MDF) e elementos finitos, instabilidades em seu panorama de solução. Como mostrado por Frerichs e John (2021), pode-se contornar esse problema com artifícios para melhorar a estabilidade, como o método *Upwind* para a metodologia de diferenças finitas. Neste caso, é adicionado uma difusividade numérica na solução, proveniente da formulação matemática do método. Entretanto, esse procedimento tende a prejudicar a precisão dos resultados obtidos, com uma difusão excessiva em alguns casos. Atualmente, não se tem uma formulação que seja ao mesmo tempo estável e precisa, para soluções com a presença de camadas-limite.

Método das diferenças finitas centradas e *upwind*

De acordo com Tanehill, Anderson e Pletcher (2012), a abordagem do método das diferenças finitas se caracteriza como a discretização de um problema inicialmente contínuo, de forma que as variáveis de interesse existam unicamente em pontos discretos. Por essa metodologia, as derivadas presentes são substituídas por diferenças entre tais pontos, logo tem-se uma representação algébrica de uma EDP, na qual tem-se ao final do processo um sistema linear que pode ser facilmente resolvido.

Partindo da Equação 3 abaixo, como mostrado por Maliska (2017) e Pantakar (2018), pode-se substituir as derivadas de segunda ordem (termo difusivo) pela formulação centrada de 2ª ordem. Já as derivadas de primeira ordem (termo convectivo) são substituídas pela formulação centradas de 2ª ordem, obtendo-se assim a discretização pelo método das diferenças centradas, considerando um campo de velocidades $\vec{w} = (a_1, a_2)$, tem-se a Equação 4.

$$-k \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) + \vec{w} \cdot \left(\frac{\partial U}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial U}{\partial y} \hat{j} \right) = f \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & -k \left[\left(\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) + \left(\frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{\Delta y^2} \right) \right] + \dots \\ & \dots + \left[\left(a_1 \frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2\Delta x} \right) + \left(a_2 \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j-1}}{2\Delta y} \right) \right] = f \end{aligned} \quad (4)$$

Já para o MDF *upwind*, como mostrado por Thomas (2013), a discretização do termo convectivo irá depender da direção do campo de velocidade. Para um valor de velocidade positivo, utiliza-se a

formulação atrasada de 1ª ordem; já para um valor de velocidade negativo, utiliza-se a formulação avançada de 1ª ordem. De maneira que a formulação *upwind* para velocidades positivas e negativas estão representadas, respectivamente, pelas Equações 5 e 6 abaixo.

$$\begin{aligned}
 & -k \left[\left(\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) + \left(\frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{\Delta y^2} \right) \right] + \dots \\
 & \dots + \left[\left(a_1 \frac{U_{i,j} - U_{i-1,j}}{\Delta x} \right) + \left(a_2 \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \right] = f
 \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
 & -k \left[\left(\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) + \left(\frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{\Delta y^2} \right) \right] + \dots \\
 & \dots + \left[\left(a_1 \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{\Delta x} \right) + \left(a_2 \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{\Delta y} \right) \right] = f
 \end{aligned} \tag{6}$$

Para ambos métodos, após realizada a discretização apropriada, concatena-se os termos de mesmo índice de maneira que se tenha uma equação matricial $MU = f$, conforme mostrada pela Equação 7 abaixo, sendo esta a equação a partir da qual foram construídos os algoritmos computacionais.

$$AU_{i,j-1} + BU_{i-1,j} + CU_{i,j} + DU_{i+1,j} + EU_{i,j+1} = f \tag{7}$$

Na qual M é a matriz dos coeficientes resultantes da formulação de diferenças finitas utilizada, sendo uma matriz pentadiagonal esparsa de tamanho $n^2 \times n^2$, correspondendo à uma malha com n nós em cada eixo.

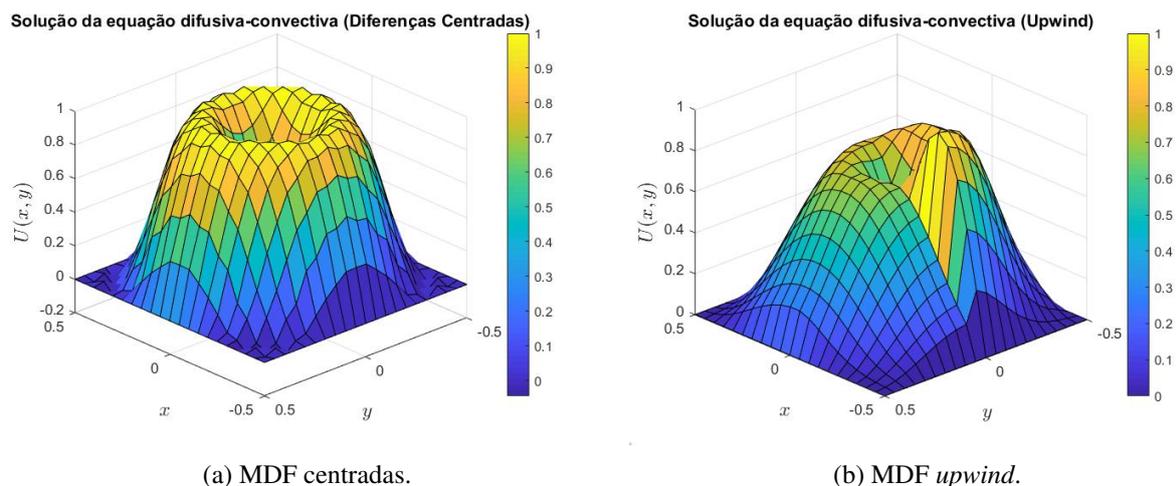
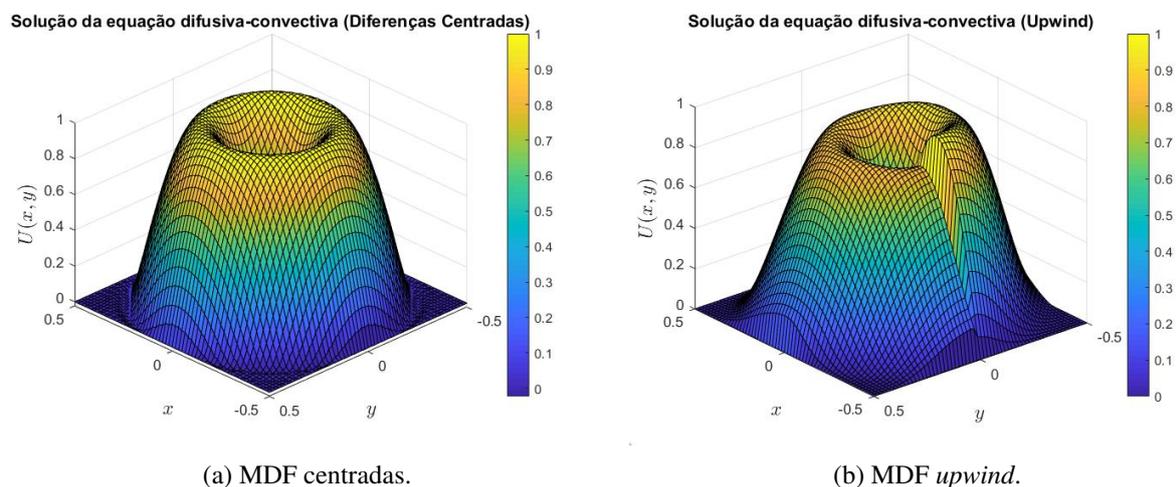
Metodologia

Para o contexto da equação difusiva-convectiva aplicada a um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, não se obteve, para este trabalho, soluções exatas para que se possa validar os códigos criados. Nesse caso optou-se por utilizar casos clássicos da literatura. Assim, os panoramas das soluções são conhecidos de forma que é possível avaliar os resultados obtidos por meio dos códigos criados, para o método das diferenças finitas centradas e *upwind*.

Os casos de estudo implementados tem a finalidade de promover situações de convecção dominante, de forma que se possa constatar a presença, ou não, de oscilações espúrias (instabilidades). Os problemas escolhidos se dividem em dois grupos: os que possuem camada-limite em sua solução e os que possuem solução suave. Com os resultados obtidos, será possível constatar qual método forneceu os melhores resultados para cada um dos cenários propostos.

Resultados numéricos

Para o primeiro problema estudado foi escolhido um cenário no qual não há camadas-limite na solução, de forma que para este foi definido um domínio $(-0.5 < x < 0.5, -0.5 < y < 0.5)$, o campo de velocidades é definido como $\vec{w} = (-y, x)$, a condição de contorno é zero ao redor de todo o domínio, já o coeficiente difusivo é dado por $k = 10^{-10}$. Para este estudo foi também imposta a condição interna dada pela função seno $f(0, y) = \sin(2\pi y) \forall y \in [-0.5, 0]$. Por fim, foram utilizadas as malhas quadradas de tamanhos $n_x = n_y = 20$ e $n_x = n_y = 60$.


 Figura 1: Solução do primeiro problema para $nx = ny = 20$.

 Figura 2: Solução do primeiro problema para $nx = ny = 60$.

Para este problema pode-se perceber que as soluções apresentadas pelo MDF *upwind* apresentam grande difusão numérica introduzida pelo método, constatada pelo degrau próximo à condição interna imposta. Analisando as Figuras 1 e 2, é visto que conforme a malha é refinada, a diferença entre os valores da solução próximo aos pontos com $y \in [-0.5, 0]$ é reduzida, mas não é eliminada.

Em contraste, as soluções obtidas com o MDF centradas apresentaram um panorama coerente com o esperado, sem a presença de tal degrau. Isso se deve à maior precisão da formulação centrada, e também à tendência do MDF *upwind* de suavizar as soluções, que neste caso resultou em uma diferença significativa em relação ao que era esperado.

Para o segundo problema, as condições de contorno foram consideradas zero, já o termo fonte foi definido como a função Gaussiana representada pela Equação 8 abaixo. O campo de velocidades considerado será variável dentro do domínio, de maneira que $\vec{w} = (y, -x)$. Já o coeficiente difusivo será $k = 10^{-3}$ e $k = 10^{-6}$, com uma malha $nx = ny = 60$.

$$f(x, y) = \frac{1}{0.02\pi} e^{-\frac{1}{0.02}[(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2]} \quad (8)$$

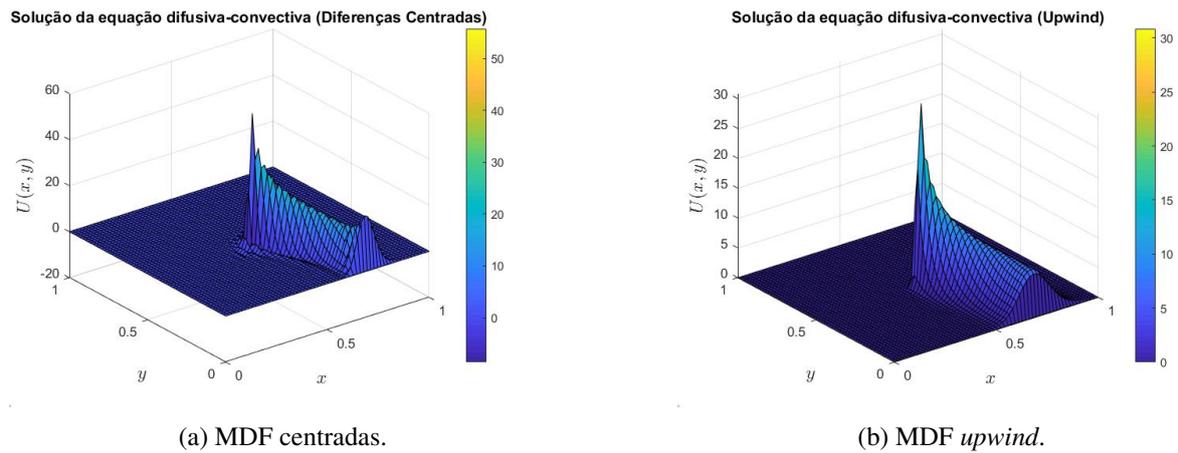


Figura 3: Solução do segundo problema para $k = 10^{-3}$.

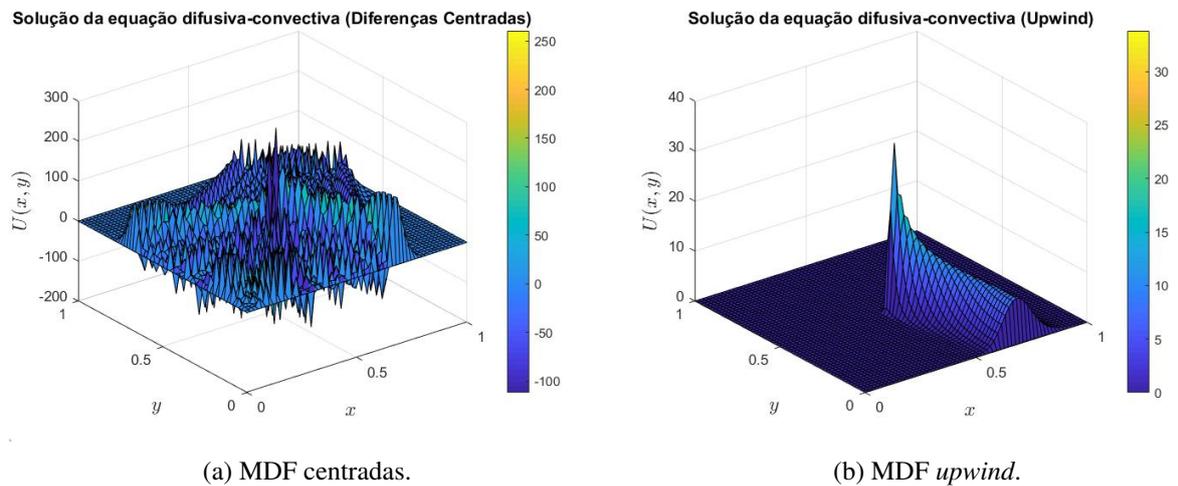


Figura 4: Solução do segundo problema para $k = 10^{-6}$.

Observa-se que conforme o coeficiente difusivo é reduzido, o panorama do solução se torna dominado pelo fenômeno convectivo e desta forma tem-se uma concentração maior de U na direção do fluxo de velocidade circular imposto. Nota-se também que para $k = 10^{-3}$ o MDF centradas apresenta instabilidade na forma de oscilações espúrias na base da função Gaussiana e próximo à região de condição de contorno, já para $k = 10^{-6}$ o panorama está povoado de oscilações, sendo coerente com esperado de acordo com a literatura, uma vez que $P_e \gg 1$.

O terceiro e último problema analisado contém as condições de contorno dada pelas Equações 9 a 16. O coeficiente difusivo considerado é $k = 10^{-2}$, já o campo de velocidade adotado é $\vec{w} = (y, -x)$. Por fim, as malhas consideradas são $n_x = n_y = 20$ e $n_x = n_y = 60$, para que se possa observar como a solução se altera com o maior número de pontos discretos. Abaixo podem ser vistos as soluções numéricas obtidas, representas pelas Figuras 5 e 6.

$$\begin{cases} U(x,0) = 0 \quad \forall x \in [0,1] & (9) \\ U(x,1) = 1 \quad \forall x \in [0,1] & (10) \\ U(1,y) = 0 \quad \forall y \in [0,1] & (11) \\ U(0,y) = 0 \quad \forall y \in [0,0.6[& (12) \\ U(0,y) = y - 0.6 \quad \forall y \in [0.6,0.65[& (13) \\ U(0,y) = 18(y - 0.65) + 0.05 \quad \forall y \in [0.65,0.70[& (14) \\ U(0,y) = (y - 0.70) + 0.95 \quad \forall y \in [0.70,0.75[& (15) \\ U(0,y) = 1 \quad \forall y \in [0.75,1] & (16) \end{cases}$$

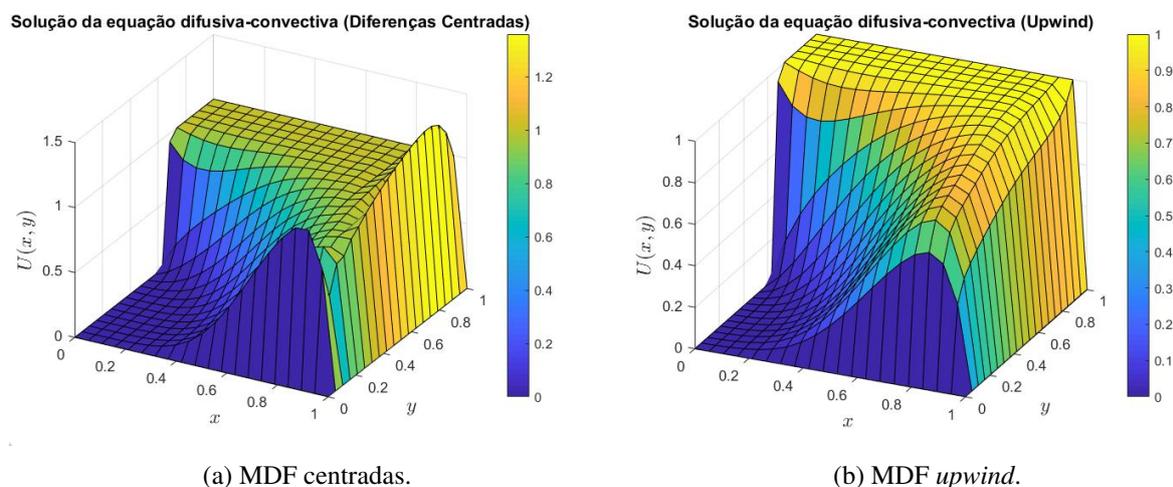


Figura 5: Solução do segundo problema para $nx = ny = 20$.

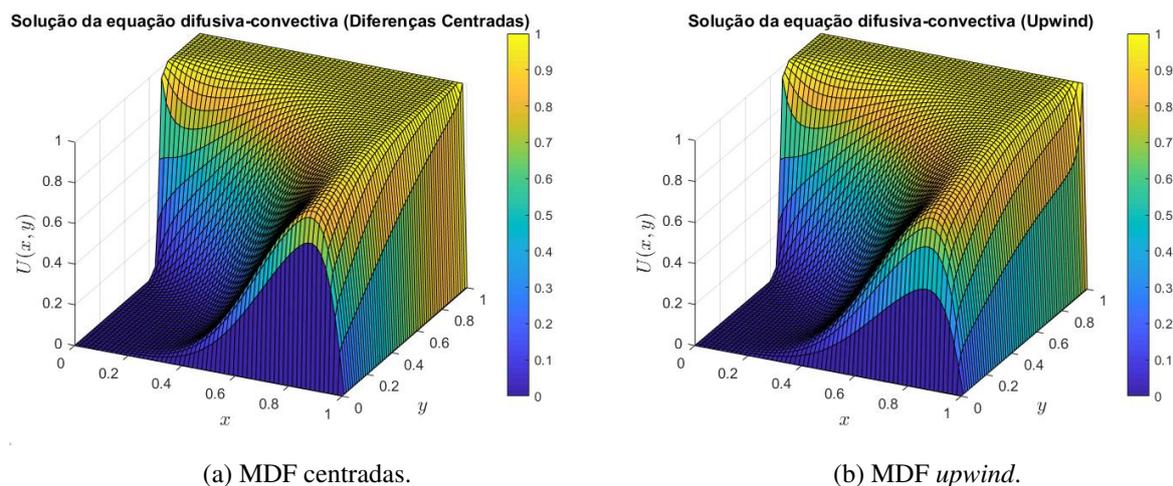


Figura 6: Solução do segundo problema para $nx = ny = 60$.

Considerando as Figuras 5 e 6, percebe-se que conforme a malha se torna mais densa em relação ao número de nós, a solução apresentada pelo MDF centradas se torna mais suave, com a solução apresentada por $nx = ny = 60$ se mostrando livre de instabilidades, com um panorama similar ao apresentado

pelo MDF *upwind*. Ainda, pode se notar que a solução apresentada nesse caso pelo MDF *upwind* indica maior difusão numérica, evidenciada pela suavização da região adjacente aos pontos próximos à condição de contorno $x \in [0.6, 1]$, em comparação ao observado com a formulação centrada.

Conclusões

Para o primeiro problema, com solução sem camadas-limite, a formulação centrada é mais precisa que o *upwind*, se apresentando livre de instabilidades, sendo esta uma constatação coerente com o esperado uma vez que o MDF centradas é uma metodologia de segunda ordem de precisão, e o *upwind* é de primeira ordem de precisão, tendo esta última apresentado excessiva suavização da solução.

Para o segundo e terceiro problema, que possuem camadas-limite em suas soluções, a formulação centrada apresenta oscilações espúrias, resultantes da instabilidade que surge quando o método é submetido à um cenário de convecção dominante. Neste contexto, percebe-se que o refino da malha tende à reduzir o número de oscilações percebidas. Entretanto, o aumento do número de nós na malha, acarreta no aumento do uso de memória e tempo de processamento, recursos estes escassos.

Ainda, para o segundo problema, mesmo nas malhas mais refinadas produzidas neste estudo foram observadas oscilações espúrias quando o coeficiente difusivo utilizado é inferior à 10^{-3} , para o MDF centradas. Neste contexto de convecção dominante, a formulação *upwind* se mostrou estável, uma vez que não apresentou oscilações espúrias para os problemas contendo camada-limite interna ou externa.

Referências

- CARMO, Eduardo Gomes Dutra do; BENITEZ, Gustavo Alvarez. A new stabilized finite element formulation for scalar convection–diffusion problems: the streamline and approximate upwind/Petrov–Galerkin method. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, v. 192, n. 31-32, p. 3379-3396, 2003.
- FRERICHS, Derk; JOHN, Volker. On reducing spurious oscillations in discontinuous Galerkin (DG) methods for steady-state convection–diffusion equations. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 393, p. 113487, 2021.
- LEVEQUE, Randall J. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems**. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007.
- MALISKA, Clovis Raimundo. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Grupo Gen-LTC, 2017.
- PATANKAR, Suhas. **Numerical heat transfer and fluid flow**. Taylor & Francis, 2018.
- PLETCHER, Richard H.; TANNEHILL, John C.; ANDERSON, Dale. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. CRC press, 2012.
- THOMAS, James William. **Numerical partial differential equations: finite difference methods**. Springer Science & Business Media, 2013.
- VOLKER, John; KNOBLOCH, Petr. On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection–diffusion equations: Part I–A review. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, v. 196, n. 17-20, p. 2197-2215, 2007.
- ZHAO, Shubo et al. Two types of spurious oscillations at layers diminishing methods for convection–diffusion–reaction equations on surface. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications**, v. 74, n. 7, p. 1387-1404, 2018.