PLANTEO MATRICIAL DE ESQUEMAS TEMPORALES

MECÁNICA COMPUTACIONAL

UNL - FICH - NOV - 2018

1. Ecuación de Transporte

La Ecuación de Transporte con todos sus términos se puede expresar como:

$$\rho c_p \dot{\phi} - \nabla \cdot (k \nabla \phi) + v \nabla \phi + c\phi = Q \tag{1}$$

donde:

$$\begin{aligned} \text{Término Temporal} &: \rho c_p \dot{\phi} \\ \text{Término Difusivo} &: \nabla \cdot (k \nabla \phi) \\ \text{Término Advectivo} &: v \nabla \phi \\ \text{Término Reactivo} &: c\phi \\ \text{Término Fuente} &: Q \end{aligned}$$

Si consideramos un sistema arbitrario en estado estacionario, es decir, $\rho c_p \dot{\phi} = 0$, luego el sistema de la *ec.* (1) queda reducido a:

$$-\nabla \cdot (k \nabla \phi) + v \nabla \phi + c\phi = Q \tag{2}$$

2. Planteo matricial del problema estacionario

La expresión (2) es una ecuación diferencial en derivadas parciales, la cual puede ser resuelta de distintas formas. Una de ella es plantear métodos numéricos como *Diferencias Finitas* o *Volúmenes Finitos* en forma de sistemas algebraicos de ecuaciones que permitan hallar de manera discreta una aproximación a la solución en un dominio dado. Por ejemplo, se puede pensar en una solución a la *ec.* (2) como el siguiente sistema:

$$\underline{\underline{K}}\,\underline{\phi} = \underline{F} \tag{3}$$

donde $\underline{\phi}$ representa el vector de incógnitas a resolver, $\underline{\underline{K}}$ es la matriz del sistema y $\underline{F}$ es el vector RHS. Luego el sistema anterior se puede resolver según:

$$\underline{\phi} = (\underline{\underline{K}})^{-1} \underline{F} \tag{4}$$

3. Discretización temporal

Para discretizar el término temporal de la *ec.* (1) se puede utilizar una aproximación de orden 1 según:

$$\rho c_p \dot{\underline{\phi}} \simeq \rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n}}{\Delta t} \right] \tag{5}$$

donde, Δt es el paso temporal, $\underline{\phi}^n$ es el vector solución para el instante de tiempo $n = t(n)$ y $\underline{\phi}^{n+1}$ es el correspondiente al instante $n+1 = t(n) + \Delta t$. Luego podemos combinar los resultados de las *ec.* (3) y (5) de la siguiente manera:

$$\rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n}}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n+\theta} = \underline{F} \tag{6}$$

siendo θ el parámetro temporal que determina el esquema a utilizar según:

$\theta = 0,$	Forward-Euler o Esquema Explícito
$\theta = 1,$	Backward-Euler o Esquema Implícito
$\theta = 1/2,$	Crank-Nicolson

A partir de la *ec.* (6) y con la correspondiente selección del parámetro θ se pueden econtrar las expresiones matriciales para cada esquema.

4. Forward-Euler o Esquema Explícito

Se parte de la *ec.* (6) con $\theta = 0$:

$$\rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n}}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n} = \underline{F}$$
$$\Rightarrow \underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n} + \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{F}$$

Se debe recordar que un vector puede expresarse como el producto de él mismo por la matriz identidad: $\underline{\underline{I}}\,\underline{\phi}^n = \underline{\phi}^n$. En otras palabras, si multiplicamos un vector por una matriz cuadrada con 1 en la diagonal principal y 0 fuera de ella obtendremos como resultado el mismo vector. Luego utilizando esta propiedad se arriba a:

$$\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\underline{I}}\,\underline{\phi}^{n} + \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{F}$$
$$\Rightarrow \underline{\phi}^{n+1} - \left[\underline{\underline{I}} - \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^{n} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{F}$$

$$\boxed{\underline{\phi}^{n+1} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{F} + \left[\underline{\underline{I}} - \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^{n}} \tag{7}$$

Puede comprobarse en la *ec.* (7) que el vector $\underline{\phi}^{n+1}$ puede ser obtenido como resultado de multiplicaciones entre matrices y vectores con datos conocidos para el tiempo $n = t(n)$.

5. Backward-Euler o Esquema Implícito

Se parte de la *ec.* (6) con $\theta = 1$:

$$\begin{aligned}
\rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n}}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n+1} &= \underline{F} \\
\Rightarrow \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n+1} - \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n} + \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n+1} &= \underline{F} \\
\Rightarrow \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}}\,\underline{\phi}^{n+1} - \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n} + \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n+1} &= \underline{F} \\
\Rightarrow \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^{n+1} &= \underline{F} + \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\underline{\phi}^{n+1} = \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}} \right]^{-1} \left[\underline{F} + \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n} \right]} \tag{8}$$

Obsérvese que la *ec.* (8) conduce a la resolución de un sistema de ecuaciones similar al planteado previamente en la *ec.* (4):

$$\underline{\phi}^{n+1} = (\underline{\underline{K}}^{imp})^{-1}\,\underline{F}^{imp}$$

donde

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{K}}^{imp} &= \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}} \right] \\
\underline{F}^{imp} &= \left[\underline{F} + \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n} \right]
\end{aligned}$$

6. Crank-Nicolson

El método Crank-Nicolson produce una aproximación de orden 2 al promediar las soluciones para los instantes $n = t(n)$ y $n + 1 = t(n) + \Delta t$. Partiendo de la (6) con $\theta = 1/2$ tiene entonces:

$$\begin{aligned}
\rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n}}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}} \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} + \underline{\phi}^{n}}{2} \right] &= \underline{F} \\
\Rightarrow \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n+1} - \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n} + \frac{1}{2}\underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n+1} + \frac{1}{2}\underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n} &= \underline{F} \\
\Rightarrow \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}}\,\underline{\phi}^{n+1} - \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}}\,\underline{\phi}^{n} + \frac{1}{2}\underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n+1} + \frac{1}{2}\underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^{n} &= \underline{F} \\
\Rightarrow \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \frac{1}{2}\underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^{n+1} &= \underline{F} + \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} - \frac{1}{2}\underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^{n}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\underline{\phi}^{n+1} = \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \frac{1}{2}\underline{\underline{K}} \right]^{-1} \left[\underline{F} + \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} - \frac{1}{2}\underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^{n} \right]} \tag{9}$$

Nuevamente tenemos un sistema de la forma:

$$\underline{\phi}^{n+1} = (\underline{\underline{K}}^{cn})^{-1}\,\underline{F}^{cn}$$

donde

$$
\begin{aligned}
\underline{\underline{K}}^{cn} &= \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t}\right)\underline{\underline{I}} + \frac{1}{2}\underline{\underline{K}}\right] \\
\underline{F}^{cn} &= \left[\underline{F} + \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t}\right)\underline{\underline{I}} - \frac{1}{2}\underline{\underline{K}}\right]\underline{\phi}^n\right]
\end{aligned}
$$

7. Expresiones para el Método de Elementos Finitos

Al momento de plantear esquemas temporales para resolver la ecuación del calor por medio del Método de Elementos Finitos (FEM), tenemos que considerar la aparición de una matriz que surge de la discretización temporal. Puede comprobarse que el término temporal luego de aplicar las expresiones correspondientes de FEM queda como:

$$
\begin{aligned}
\rho c_p \dot{\phi} &\simeq \rho c_p \sum_{m=1}^{M}\sum_{l=1}^{M}\left[\int_{\Omega^e} N_l^e N_m^e d\Omega\right]\left[\frac{\underline{\phi}^{n+\theta} - \underline{\phi}^n}{\Delta t}\right] \\
\rho c_p \dot{\phi} &\simeq \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t}\right)\underline{\underline{C}}\left(\underline{\phi}^{n+\theta} - \underline{\phi}^n\right)
\end{aligned}
\tag{10}
$$

donde la matriz $\underline{\underline{C}}$ se conoce como **matriz de masa**, cuya expresión viene dada por la *ec.* (11)

$$
\underline{\underline{C}} = \sum_{m=1}^{M}\sum_{l=1}^{M}\left[\int_{\Omega^e} N_l^e N_m^e d\Omega\right] \tag{11}
$$

A continuación se deducen las ecuaciones correspondientes a la aplicación de un esquema explícito, dejando para el lector la deducción de las expresiones para los demás esquemas.

Se parte nuevamente de la *ec.* (6) con $\theta = 0$, y reemplazando la discretización temporal por los resultados obtenidos en (10):

$$
\begin{aligned}
&\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t}\right)\underline{\underline{C}}\left(\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n\right) + \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^n = \underline{F} \\
\Rightarrow\ &\underline{\underline{C}}\left(\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n\right) + \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p}\right)\underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^n = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p}\right)\underline{F} \\
\Rightarrow\ &\underline{\underline{C}}\,\underline{\phi}^{n+1} + \left[\left(\frac{\Delta t}{\rho c_p}\right)\underline{\underline{K}} - \underline{\underline{C}}\right]\underline{\phi}^n = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p}\right)\underline{F}
\end{aligned}
$$

Finalmente, arribamos a:

$$
\boxed{\underline{\phi}^{n+1} = \left(\underline{\underline{C}}\right)^{-1}\left[\left(\frac{\Delta t}{\rho c_p}\right)\left(\underline{F} - \underline{\underline{K}}\,\underline{\phi}^n\right) + \underline{\underline{C}}\,\underline{\phi}^n\right]} \tag{12}
$$