

Método de los Volúmenes Finitos (MVF)¹

Introducción

En el primer capítulo de las notas llegamos a una ecuación de balance a la que denominamos “Ecuación General de Advección-Difusión no Estacionaria con Fuente en Forma Integral”. Tal como se discutió, es posible a partir de allí encontrar la ecuación diferencial asociada, la cual si es resuelta permite encontrar la solución para el campo en estudio en cualquier punto del dominio y para cualquier instante de tiempo. Encontrar soluciones analíticas es en general imposible con lo cual en la práctica de ingeniería se recurre a aproximaciones o bien a soluciones numéricas tabuladas. Una forma de extender el universo de soluciones es aplicar métodos numéricos flexibles que permitan hallar soluciones aproximadas en geometría generales. El objetivo ahora es presentar el Método de Volúmenes Finitos. Este método comenzó a aplicarse en los años 1960 a problemas de difusión de neutrones², al mismo tiempo también fue utilizado en mecánica de fluidos computacional durante los años 1970. El término *Método de Volúmenes Finitos* fue utilizado por primera vez por Jameson en 1979. Durante los años 1980 el número de códigos basados en este método creció, sentando las bases para las herramientas más utilizadas hoy en día. Ya en los años 1990 se consolidó la posibilidad de utilizar mallas generales³. En los últimos veinte años este método ha sido incorporado en las herramientas de Diseño Asistido por Computadora (CAD/CAM/CAE) tanto en aplicaciones de escritorio como en la nube.

Forma discreta de las ecuaciones de conservación escalar

Sea $\phi(x, y, z, t)$ una magnitud escalar, Ω un dominio en \mathbb{R}^3 y Γ su frontera, podemos escribir una ecuación de conservación de esta cantidad en forma integral como

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \vec{v}\phi \cdot d\vec{\Gamma} = \int_{\Gamma} v\vec{\nabla}\phi \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} S d\Omega. \quad (1)$$

El primero de los términos representa la variación de ϕ en el tiempo, el segundo el flujo a través de Γ debido al campo de velocidades, el tercero el flujo debido a la difusión y finalmente el cuarto la fuente. Reordenando los términos podemos ver que

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} - S \right] d\Omega = \int_{\Gamma} [v\vec{\nabla}\phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma} \quad (2)$$

de donde se ve que el desbalance de ϕ en el interior de Ω es simplemente lo que atraviesa la frontera Γ . Dividiremos ahora el dominio Ω en m elementos cuyos volúmenes no se solapan, tal como en la Figura (1).

Reescribiendo la Ec. (2) como suma de los volúmenes que constituyen Ω se tiene,

$$\sum_{i=1}^m \int_{\Omega_i} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} - S \right] d\Omega - \int_{\Gamma_i} [v\vec{\nabla}\phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma} = 0. \quad (3)$$

¹Versión original por el Dr. Santiago Márquez Damián. Primera transcripción digital por el Dr. Santiago Daniel Costarelli (discretización del problema de difusión).

²K. W. Morton y E. Süli. Finite Volume Methods and their Analysis. *IMA Journal of Numerical Analysis*. (1991) 11, 241-260

³J.H. Ferziger y M. Perić. *Computational methods for fluid dynamics*. Berlin. Ed. Springer (2002)

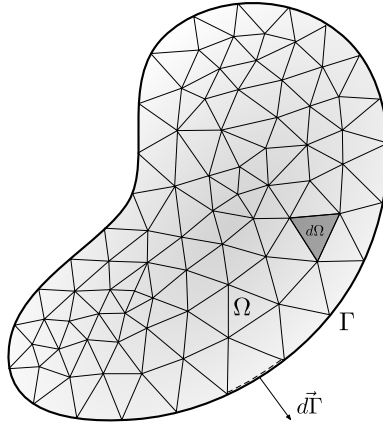


Figura 1: Dominio discretizado.

Para el caso de las integrales volumétricas la interpretación es directa, no así para las de superficie. En este caso se debe tener en cuenta que las caras de los volúmenes que no coinciden con la frontera del dominio son incluidas en las integrales de sus vecinos, es así como los flujos en estas caras se anulan. De esta forma la Ec. (3) se reduce a la Ec. (2).

Podemos avanzar en el análisis si consideramos que los volúmenes correspondientes a la discretización son poliedros, es decir, volúmenes facetados con una cantidad finita n de caras. Tenemos entonces que la Ec. (3) puede reescribirse como,

$$\sum_{i=1}^m \int_{\Omega_i} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} - s \right] d\Omega - \left\{ \sum_{j=1}^{n_i} \int_{\Gamma_j} [\nu \vec{\nabla} \phi - \vec{\tau} \phi] \cdot d\vec{\Gamma}_j \right\}_i = 0. \quad (4)$$

Si se consideran los valores de ϕ constantes por celda y por cara se pueden realizar las siguientes aproximaciones

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_i} \phi d\Omega_i &= \bar{\phi}_i V_i \\ \int_{\Gamma_j} \phi d\vec{\Gamma}_j &= \bar{\phi}_{f_j} \vec{S}_{f_j} \end{aligned} \quad (5)$$

con lo cual, eliminando las barras, se tiene que,

$$\sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial t} - s \right) V_i - \left\{ \sum_{j=1}^{n_i} (\nu \vec{\nabla} \phi - \vec{\tau} \phi)_{f_j} \cdot \vec{S}_{f_j} \right\}_i = 0, \quad (6)$$

siendo ésta la expresión discretizada, espacialmente, de una ecuación de conservación para una magnitud escalar. Desde ya es necesario definir la manera de expresar los operadores diferenciales en tiempo y espacio, así como los valores de ϕ en las caras a partir de los valores de ϕ en los centros de los volúmenes, estos últimos las incógnitas de la formulación.

Es importante tener en cuenta aquí que la Ec. (6) es todavía una ecuación exacta en el dominio continuo, sin embargo para ello es necesario conocer la *ubicación* dentro de cada celda y cada cara de los $\bar{\phi}_i$ y los $\bar{\phi}_{f_j}$. Así pues el proceso de subdividir el dominio en m volúmenes y determinar la posición de las incógnitas en ellos es lo que conoce como **discretizar el dominio** o **mallar el dominio** es decir obtener una malla de elementos geométricos simples que representen con cierto grado de aproximación el dominio original. Luego de ello es posible **discretizar las ecuaciones gobernantes** y obtener un sistema de ecuaciones discreto,

cuya cantidad de ecuaciones es finita. Una de las propiedades necesarias para que el método de discretización propuesto pueda ser considerado un método numérico es la **convergencia** en la reducción del error, es decir que en la medida que la discretización sea más fina la solución se acerque a la solución analítica.

Aplicaciones del Método de Volúmenes Finitos

Difusión estacionaria en 1D

Sea un problema de difusión estacionaria 1D con condiciones de borde Dirichlet homogéneas en ambos extremos, es decir

$$\begin{cases} -\vec{\nabla} \cdot (v\vec{\nabla}\phi) = S \\ \phi(0) = 0 \quad \phi(L) = 0 \end{cases} \quad (7)$$

Dividimos ahora el problema en N segmentos y representamos el dominio como si fuera tridimensional pero cuya área transversal resulta unitaria, tal como se muestra en la Figura (2). En la figura, los puntos llenos representan los centros de las celdas hexahedricas utilizadas y las cruces los centros de sus caras.

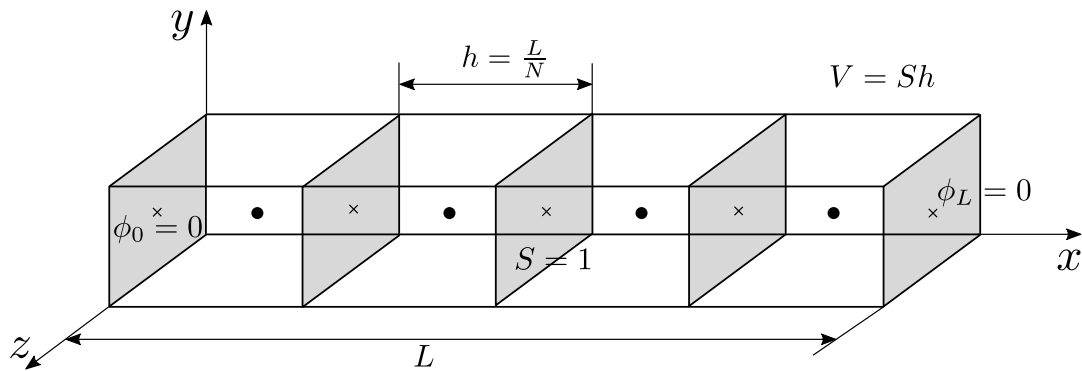


Figura 2: Discretización para un problema unidimensional.

Aplicando la Ec. (6) al dominio de la Figura (2) y, en particular, a un volumen i , se tiene que

$$\left\{ \sum_{j=1}^{n_i} (-v\vec{\nabla}\phi)_{f_j} \cdot \vec{S}_{f_j} \right\}_i = S_i V_i, \quad (8)$$

la cual suele escribirse en forma abreviada como

$$\left\{ \sum_f (-v\vec{\nabla}\phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_i = S V_i \quad (9)$$

Sea ahora el volumen que se desea analizar, se hace necesario pues definir los vectores \vec{S}_f , los cuales son normales a la cara y en magnitud igual a su área. Como convención en el mallado del dominio se suele considerar que cada celda es propietaria de una cierta cantidad de caras que lo conforman. Es así como, para una cara dada, de un lado se encuentra su volumen propietario y del otro su vecino (*owner cell and neighbour cell*).

Las normales apuntarán siempre desde la celda propietaria en dirección a su vecina. Así pues aislando el volumen 2 se tendrá lo indicado en la Figura (3). Recordando la definición adoptada se ve que cada volumen es propietario de todas sus caras a excepción de la

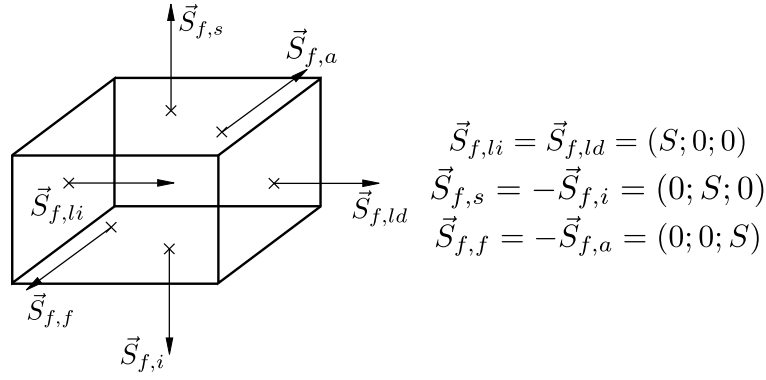


Figura 3: Vectores normales a las caras del segundo volumen del dominio. *s*: superior, *i*: inferior, *li*: lateral izquierda, *ld*: lateral derecha, *f*: frente, *a*: atrás.

izquierda. Ahora bien, al momento de realizar las integrales de superficie, cuando se toma un determinado volumen las normales deberán apuntar hacia afuera o hacia adentro de dicho volumen, con lo cual será necesario incorporar el cambio de signos que corresponda en cada caso.

Para el cálculo del gradiente utilizamos una aproximación centrada, considerando que la variación de ϕ es lineal entre dos centros (centroides) de volumen, tal y como es esquematizado en la Figura (4).

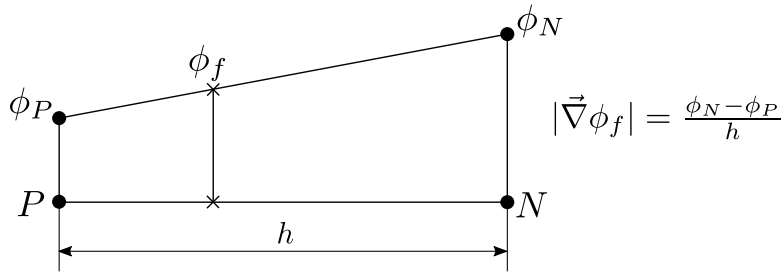


Figura 4: Vectores normales a las caras del segundo volumen del dominio. *P*: celda en estudio, *N*: celdas vecinas, *f* cara entre celdas.

Si se considera la dirección del gradiente se tendrá entonces,

$$(\vec{\nabla}\phi)_f = \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{h}; 0; 0 \right) \quad (10)$$

Dado que la Ec. (9) requiere el producto escalar $(\nu \vec{\nabla}\phi) \cdot \vec{S}_f$ se puede ver que éste sólo será no nulo en aquellas caras no ortogonales a $\hat{i} = (1; 0; 0)$, es decir, a izquierda y derecha de cada volumen. Se tiene entonces

$$\left\{ -\nu \sum_{f=li,ld} (\vec{\nabla}\phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_i = SV_i \quad (11)$$

que expandiendo resulta

$$-\nu \left[\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{h} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_i = SV_i \quad (12)$$

y, finalmente

$$-\nu \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h} \right) = SV_i \quad (13)$$

En el cálculo de las expresiones anteriores se ha tenido en cuenta que para el cálculo del gradiente se realiza la resta de la magnitud en la celda vecina con la de la celda en análisis. La expresión obtenida en la Ec. (13) puede reducirse a un *stencil* de Diferencias Finitas ya que $V_j = S_i h = h$ (área transversal unitaria), con lo cual

$$-v \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h^2} \right) = S S_i \quad (14)$$

Esta ecuación representa el stencil laplaciano de segundo orden. Se debe considerar que en Volúmenes Finitos la magnitud característica de la discretización es V_j y no h_j .

Una nota especial merece ser introducida para el tratamiento de las condiciones de borde. Como surge de la Figura (2) éstas están impuestas en las caras de las celdas y no en los centros, con lo cual es necesario algún tipo de reconstrucción o interpolación. Esto se debe a que se ha adoptado un esquema de Volúmenes Finitos centrado en celda (*cell based*), cada uno con sus ventajas y desventajas. Utilizamos de esta manera para la cara izquierda de la primera celda una aproximación descentrada del gradiente, y de esta forma

$$(\nabla \phi)_{fi} = \frac{\phi_0 - \phi_1}{h/2}, \quad (15)$$

con lo cual aplicando (9) a la celda 1 se tendrá

$$-v \left[\left(\frac{\phi_0 - \phi_1}{h/2} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_1 = SV_1, \quad (16)$$

y de esta forma

$$-v \left(\frac{2\phi_0 - 3\phi_1 + \phi_2}{h} \right) = SV_1. \quad (17)$$

Para el caso de la celda 4 se tendrá que

$$-v \left[\left(\frac{\phi_3 - \phi_4}{h} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_L - \phi_4}{h/2} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_4 = SV_4, \quad (18)$$

y así

$$-v \left(\frac{\phi_3 - 3\phi_4 + 2\phi_L}{h} \right) = SV_4. \quad (19)$$

Considerando que las normales de caras pertenecientes a otra celda tienen dirección opuesta. Finalmente para todas las celdas se obtiene el siguiente sistema lineal

$$\begin{cases} -\frac{v}{h} (-3\phi_1 + \phi_2) = SV_1 + \frac{2v}{h} \phi_0 \\ -\frac{v}{h} (\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3) = SV_2 \\ -\frac{v}{h} (\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4) = SV_3 \\ -\frac{v}{h} (\phi_3 - 3\phi_4) = SV_4 + \frac{2v}{h} \phi_L \end{cases} \quad (20)$$

que puede ser escrito matricialmente como $A \phi = b$, o bien $\sum_{j=1}^n a_{ij} \phi_j = b_i$, siendo esta última similar a (6). Resolviendo el sistema es posible hallar los valores de ϕ para cada centro de celda de la discretización.

Imposición de condiciones de borde Neumann

Estas condiciones de borde resultan naturales para el término difusivo tomando directamente $(\nabla\phi)_f = (\nabla\phi)_{borde}$. Para los términos advectivos será,

$$\phi_{borde} = (\nabla\phi)_{borde} \cdot \vec{d} + \phi_P, \quad (21)$$

lo cual es una reconstrucción del valor en el borde a partir del correspondiente al del centroide propietario de la cara.

Adición de términos advectivos

En los términos advectivos es necesario evaluar

$$\left\{ \sum_{j=1}^{n_i} (\vec{v}\phi)_{f_j} \cdot \vec{S}_{f_j} \right\}_i \quad (22)$$

es decir, se requiere conocer la expresión de los valores ϕ en las caras. Estos valores se obtienen a partir de los valores en los centros de celda. Las dos aproximaciones más sencillas corresponden al valor aguas arriba (*upwind value*) y a la interpolación lineal (*central differences*). Considerando entonces el esquema presentado en la Figura (5).

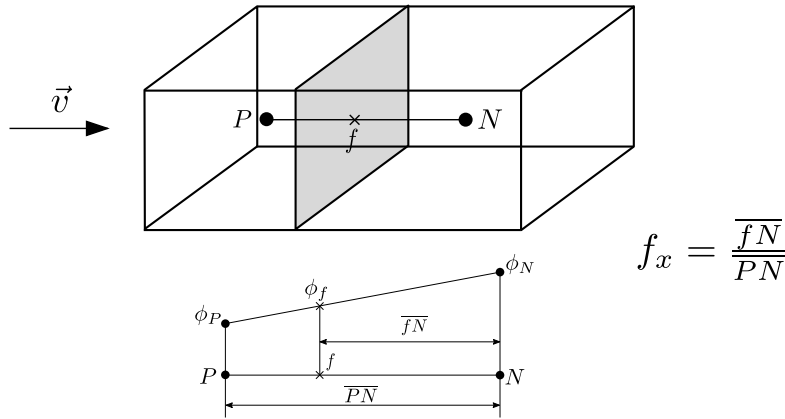


Figura 5: Aproximación para ϕ_f .

Tomar el valor aguas arriba corresponde a hacer $\phi_f = \phi_P$, mientras que la interpolación lineal resulta ser $\phi_f = f_x\phi_P + (1 - f_x)\phi_N$. Pueden tomarse otras aproximaciones basadas en $\vec{\nabla}\phi$ dando lugar a los esquemas de alto orden. En cuanto a las condiciones de borde, aquellas de valor fijo se aplican directamente como $\phi_f = \phi_{borde}$, a menos que se utilice el esquema upwind.

Discretización del término temporal. Forma semidiscreta

Como se indicó previamente la Ec. (6) es una forma discretizada en el espacio de la Ecuación General de Advección-Difusión no Estacionaria con Fuente en Forma Integral. La discretización posterior del operador nabla y la relación de las incógnitas en centros de celda y caras nos permitió obtener un sistema de ecuaciones lineales cuya resolución da lugar a

una solución discreta del problema original. Para el caso estacionario este problema puede escribirse como:

$$(K + A) \phi = b \quad (23)$$

donde K y A son las matrices del problema espacial, forma discretizada de los términos de difusión y advección. El vector ϕ contiene los resultados en centros de celda y el vector b las contribuciones de los términos fuente constantes y las condiciones de borde. Podemos entonces reescribir la Ec. (6) como,

$$\sum_{i=1}^m \left[\frac{\partial \phi_i}{\partial t} V_i + (K_{ij} + A_{ij}) \phi_j - b_i \right] = 0 \quad (24)$$

Ahora bien, esta igualdad se satisface si lo hacen cada una de las igualdades en celda, es decir,

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} V_i + (K_{ij} + A_{ij}) \phi_j = b_i \quad (25)$$

Como vemos en esta expresión parte de ella son operadores en el dominio continuo y parte en el dominio discreto, de allí que se la conozca como **forma semidiscreta** de la Ecuación General de Advección-Difusión no Estacionaria con Fuente en Forma Integral. Resta ahora discretizar el término temporal de manera que sea resoluble mediante una máquina de precisión finita. Para ello nos valdremos del Método θ en el que se utilizan diferencias finitas para obtener una aproximación del término temporal. Así pues tenemos,

$$\frac{\phi_i^{k+1} - \phi_i^k}{\Delta t} V_i + (K_{ij} + A_{ij}) [\theta \phi_j^{k+1} + (1 - \theta) \phi_j^k] = b_i \quad (26)$$

Donde el factor θ indica la implicitud del problema, conociéndose particularmente el caso para $\theta = 0$ como **Método de Forward Euler**, $\theta = 1$ como **Método de Backward Euler** y $\theta = 1/2$ como **Método de Crank Nicolson**, finalmente ϕ_i^k y ϕ_i^{k+1} representan el vector solución en el paso de tiempo actual y el siguiente siendo k el índice de paso temporal. Nótese que para el caso de $\theta = 0$ el método es completamente explícito en el tiempo,

$$\frac{\phi_i^{k+1} - \phi_i^k}{\Delta t} V_i + (K_{ij} + A_{ij}) \phi_j^k = b_i$$

dado que los valores de ϕ_i^{k+1} pueden obtenerse a partir de los de ϕ_i^k sin resolver un sistema de ecuaciones. Como ve, este método permitiría hallar una solución estacionaria sin necesidad de invertir matrices a expensas de tener que resolver tantos pasos de tiempo como sean necesarios para obtener una solución sin cambios significativos respecto de la solución anterior (estacionario).

Volviendo a la Ec. (26) podemos entonces despejar ϕ_i^{k+1} para el caso de un θ general, para ello reescribimos esta expresión como,

$$\frac{\phi_i^{k+1}}{\Delta t} V_i - \frac{\phi_i^k}{\Delta t} V_i + (K_{ij} + A_{ij}) \theta \phi_j^{k+1} + (K_{ij} + A_{ij}) (1 - \theta) \phi_j^k = b_i$$

Agrupando del lado derecho aquellos términos con valores conocidos tenemos,

$$\frac{\phi_i^{k+1}}{\Delta t} V_i + (K_{ij} + A_{ij}) \theta \phi_j^{k+1} = b_i + \frac{\phi_i^k}{\Delta t} V_i - (K_{ij} + A_{ij}) (1 - \theta) \phi_j^k$$

o bien,

$$\left[\frac{V_i}{\Delta t} I_{ij} + (K_{ij} + A_{ij}) \theta \right] \phi_j^{k+1} = b_i + \frac{\phi_i^k}{\Delta t} V_i - (K_{ij} + A_{ij}) (1 - \theta) \phi_j^k$$

$$M_{ij} \phi_j^{k+1} = b_i + \frac{\phi_i^k}{\Delta t} V_i - (K_{ij} + A_{ij}) (1 - \theta) \phi_j^k$$

donde $M_{ij} = \left[\frac{V_i}{\Delta t} I_{ij} + (K_{ij} + A_{ij}) \theta \right]$. Finalmente,

$$\phi_j^{k+1} = M_{ji}^{-1} \left[b_i + \frac{\phi_i^k}{\Delta t} V_i - (K_{ij} + A_{ij}) (1 - \theta) \phi_j^k \right] \quad (27)$$

Como se ve es necesario invertir una matriz para poder avanzar en el tiempo. Esta matriz puede preinvertirse y utilizarse en cada paso de tiempo ya que es constante si no cambia la malla o los parámetros físicos. En la práctica esta matriz no es constante, en el caso más sencillo por cambios en el campo advectivo. Por otra parte, dado que las matrices originales son ralas, la matriz M también lo es, con lo cual realizar su inversión es prohibitivo prefiriéndose resolver el sistema la Ec. (27) utilizando métodos iterativos.

Respecto al método de Forward Euler previamente presentando debe tenerse en cuenta que la facilidad de cálculo al no ser necesario invertir una matriz debe ponderarse con limitaciones en su estabilidad. Es posible demostrar que la solución se mantiene acotada bajo la condición que,

$$Fo = \frac{2 v \Delta t}{h^2} < 1$$

donde Fo es el número adimensional de Fourier. Los métodos implícitos, por otra parte, no sufren de esta restricción.

Problemas de advección-difusión. Monotonidad. Difusión numérica

Hasta ahora hemos estudiado como discretizar la advección y la difusión y la manera de resolver en el tiempo un problema combinado. Los esquemas presentados para discretizar el término advectivo poseen características que deben ser estudiadas en detalle, para ello nos remitiremos al problema *Problema modelo de advección-difusión estacionaria unidimensional sin fuente* que se analiza en detalle en la sección de Advección-Difusión en medios continuos. Este problema y su solución se presentan en las siguientes expresiones,

$$\begin{cases} v \frac{\partial \phi}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \\ \phi(0) = 0 \quad \phi(L) = 1 \end{cases} \quad (28)$$

$$\phi(x) = \frac{1 - e^{2 Pe_L x/L}}{1 - e^{2 Pe_L}}$$

donde $Pe_L = 1/2 v L / \nu$, con $v > 0$. Esta solución se presenta en la Figura 6 para $Pe_L = 0.1, 1, 10$ y $L = 1$.

Tal como se ve en la figura a medida que el número de Peclet aumenta, la solución se vuelca hacia el lado derecho. Si vemos la definición del número de Peclet (en este caso calculado con la longitud característica del dominio),

$$Pe_L = \frac{1}{2} \frac{v L}{\nu}$$

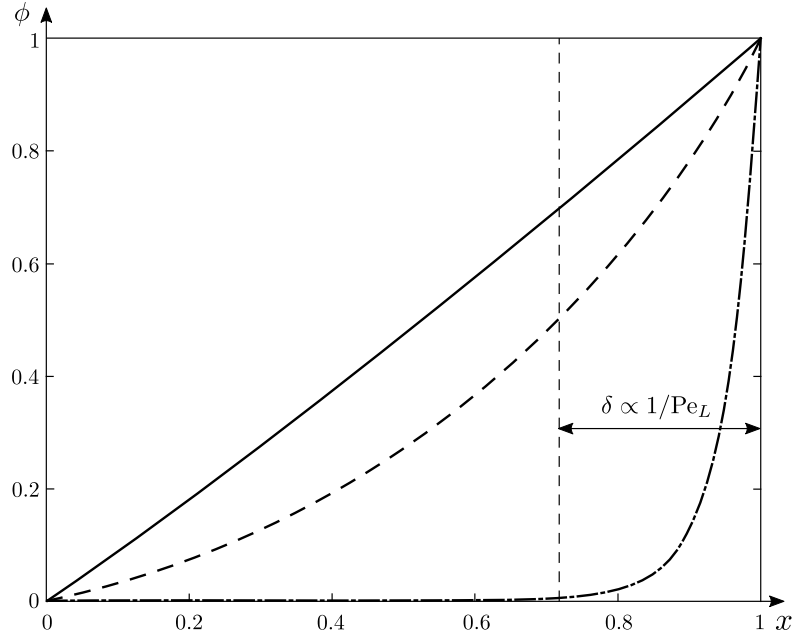


Figura 6: Solución para el problema modelo de advección-difusión estacionaria sin fuente. Línea continua, $Pe_L = 0,1$; línea de trazos, $Pe_L = 1$; línea de trazos y puntos, $Pe_L = 10$.

vemos que valores altos del número de Peclet implican velocidades de advección altas o difusividades pequeñas (problemas eminentemente advectivos) y viceversa para el caso de números de Peclet pequeños (problemas eminentemente difusivos). Podemos además definir un número de Peclet de la malla,

$$Pe_x = \frac{1}{2} \frac{v h}{\nu} \quad (29)$$

donde h es el paso de la malla utilizada. Como todo número adimensional el valor unitario marca un límite entre dos fenómenos, en este caso es nuevamente la relación entre la advección y la difusión pero teniendo en cuenta la malla, o en definitiva, la discretización. Apliquemos entonces los esquemas vistos hasta ahora para discretizar la Ec. (28). Para el caso de $Pe_x = 0,25 < 1$ obtenemos los resultados presentados en la Figura 7. Como se ve, tanto la solución numérica obtenida mediante el método de diferencias aguas arriba (UD) como aquella obtenida mediante el método de diferencias centradas (CD) se asemejan a la solución analítica. Cabe aclarar que la solución por UD es más difusiva que la obtenida mediante CD y además es menos precisa, es decir se encuentra más alejada puntualmente a la solución analítica. Se realizó un estudio de reducción del error de las soluciones numéricas respecto de la analítica se puede concluir que el error decrece de la siguiente forma (ver ejercicios de difusión),

$$e_{UD} \propto h$$

$$e_{CD} \propto h^2$$

es decir el error para el método de diferencias aguas arriba decrece linealmente con el paso de malla, mientras que para el método de diferencia centradas lo hace cuadráticamente. La forma como decrece el error para una determinada discretización es una característica fundamental. En general se conoce como *métodos de alto orden* a aquellos en los cuales el error decrece en forma proporcional a h^p con $p \geq 2$. En problemas reales es siempre deseable resolver con este tipo de esquemas dejándose aquellos de orden menor para corridas precursoras.

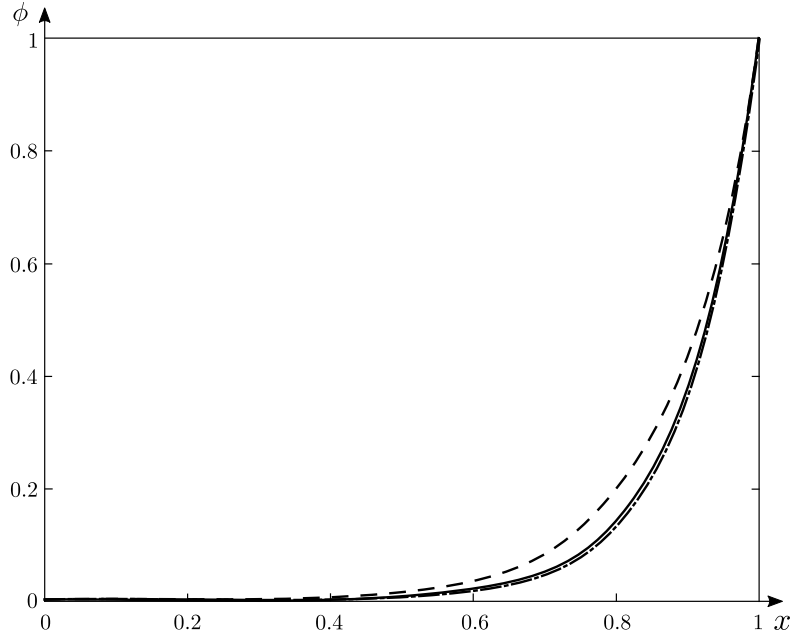


Figura 7: Solución para el problema modelo de advección-difusión estacionaria sin fuente. Línea continua, solución analítica; línea de trazos, solución mediante diferencias aguas arriba; línea de trazos y puntos, solución mediante diferencias centradas. Caso para $Pe_x = 0,25$

Veamos ahora que sucede al utilizar una malla tal que $Pe_x > 1$. Este caso se presenta en la Figura 8 para $Pe_x = 1,25$. En este caso la solución mediante UD es similar a la del caso para $Pe_x < 1$ mostrándose un resultado aún más difusivo, lo cual induce cierta relación entre la difusión agregada por el método numérico y el paso de malla en forma proporcional. La solución para CD presenta ahora características completamente diferentes al caso anterior, vemos que es oscilante y no respeta los máximos y mínimos requeridos por la solución analítica. El fenómeno que se observa se debe a una inestabilidad numérica propia del método de diferencias centradas y que lleva a que la solución pierda la *monotonidad*, entendiéndose como solución monótona a aquella que en todo instante de tiempo respeta los máximos y mínimos impuestos por la condición inicial y las condiciones de borde.

Tenemos entonces una encrucijada, por lado el método UD es monótono para todo rango de Pe_x a expensas de introducir una difusión no física cada vez mayor en la medida que el paso de malla es mayor. Por otro lado contamos con el método CD, el cual es más preciso que UD bajo la condición que $Pe_x < 1$. En las condiciones planteadas no sería posible utilizar un esquema de segundo orden como CD en mallas “gruesas”.

Cuando tomamos la palabra gruesas entre comillas lo hacemos dado que en realidad esta es una medida cualitativa de tamaño tomada en relación al número de Peclet de la malla. Lograr mallas que permitan que el Pe_x del problema sea menor a la unidad se torna a veces prohibitivo. Para fijar ideas veamos la relación entre el número de Peclet y otros números adimensionales usuales en la Mecánica de Fluidos Computacional. Por ejemplo si tomamos ν como la difusividad de cantidad de movimiento, o viscosidad cinemática, llegamos directamente, a menos del factor $1/2$, a la definición del número de Reynolds.

$$Re = \frac{vL}{\nu} = 2 Pe_L$$

Así pues, en el caso de un vehículo moviéndose a 100 km/h tenemos $Re = 2,4 \times 10^6$, $Pe = 1,2 \times 10^6$, como se ve este valor es muchísimo mayor a uno. Podría de todas maneras

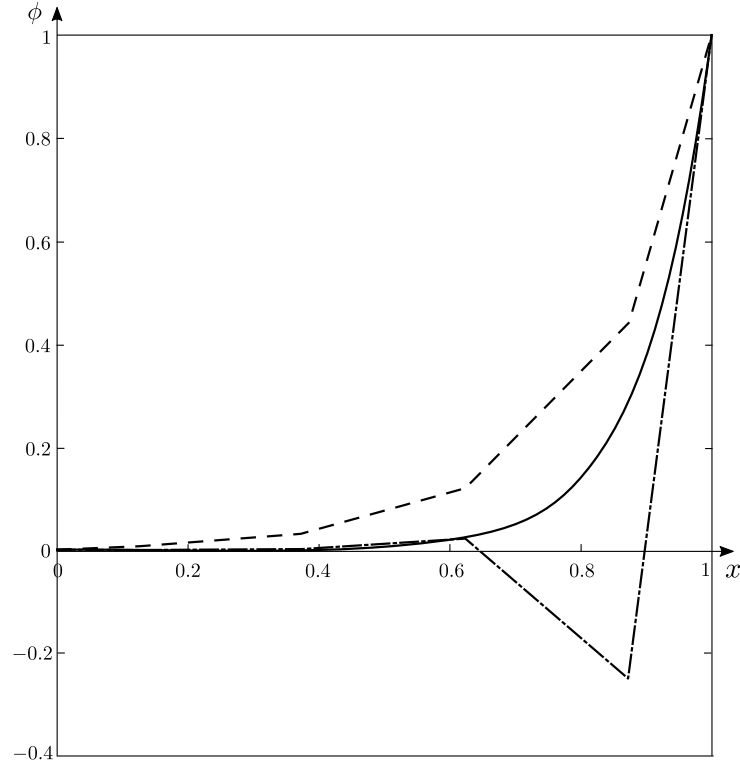


Figura 8: Solución para el problema modelo de advección-difusión estacionaria sin fuente. Línea continua, solución analítica; línea de trazos, solución mediante diferencias aguas arriba; línea de trazos y puntos, solución mediante diferencias centradas. Caso para $Pe_x = 1,25$

argumentarse que corresponde al número de Peclet físico y no al de la malla. Esto es verdad, sin embargo, para que el número de Peclet de la malla quede por debajo de la unidad es necesario reducir las dimensiones $1,2 \times 10^6$ veces en cada dirección espacial, obteniéndose una malla de $1,728 \times 10^{18}$ celdas que está muy lejos de la capacidad de cómputo accesible hoy en día o en el futuro próximo. Vemos entonces la necesidad de recurrir a otros métodos que nos permitan mantener la precisión de la solución sin perder estabilidad o monotonicidad.

Difusión numérica. Estabilización.

De los ejemplos dados se ve, tal como se comentó, que el esquema de diferencias aguas arriba introduce una difusión adicional a la física que crece con el paso de malla del problema. Podemos estudiar este problema en el contexto de un caso unidimensional y comparar el esquema de diferencias aguas arriba respecto de una referencia de alto orden, en este caso el esquema de diferencia centradas, y ver de que magnitud es la difusión adicional introducida al discretizar el término advectivo. Recordemos primeramente la versión discretizada por el MVF de este término, lo cual se presentó en la Ec. (22) y que repetimos aquí,

$$\left\{ \sum_{j=1}^{n_i} (\vec{v}\phi)_{f_j} \cdot \vec{S}_{f_j} \right\}_i$$

Tomando una velocidad en el sentido del eje x positivo y un área transversal unitaria, la discretización por los esquemas UD y CD será,

$$UD : v (\phi_i - \phi_{i-1})$$

$$CD : v/2 (\phi_{i+1} - \phi_{i-1})$$

Podemos calcular ahora la diferencia entre ambas discretizaciones, es decir UD - CD, obteniéndose,

$$-v/2 \phi_{i-1} + v \phi_i - v/2 \phi_{i+1} \quad (30)$$

Recordamos ahora cual era la expresión de la discretización del operador de difusión,

$$v (\phi_{i-1} - 2 \phi_i + \phi_{i+1})/h$$

Multiplicando el numerador y el denominador de la Ec. (30) por dos y reordenando se obtiene,

$$-v/2 (\phi_{i-1} - 2 \phi_i + \phi_{i+1})$$

Si adicionalmente multiplicamos numerador y denominador por h queda finalmente,

$$-v h/2 (\phi_{i-1} - 2 \phi_i + \phi_{i+1})/h$$

que no es más que la discretización del operador de difusión citada más arriba, considerando que $\nu = v h/2$ y que corresponde a haber discretizado en el continuo un término del tipo,

$$-v h/2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

Claramente el pasar de un esquema de diferencias centradas a uno de diferencias aguas arriba implica agregar difusión numérica. Esta difusión juega un rol fundamental en la estabilidad del esquema, nótese que la expresión de la difusividad numérica es,

$$\nu_N = \frac{v h}{2}$$

Como se ve la difusividad numérica aumenta en la medida que lo hace el paso de malla h , de igual forma con la velocidad v , de esta manera la discretización por diferencias centradas del operador de advección se *estabiliza* numéricamente (o artificialmente). El efecto de estabilización se evidencia claramente mediante el siguiente análisis. La difusividad total resulta ser,

$$\nu_T = \nu + \nu_N = \nu + \frac{v h}{2}$$

Si calculamos ahora el número de Peclet de la malla del problema estabilizado tenemos,

$$Pe_{xE} = \frac{1}{2} \frac{v h}{\nu_T} = \frac{\frac{v h}{2}}{\nu + \frac{v h}{2}} < 1$$

Como se ve para el caso de una difusividad no nula el número de Peclet de la malla del problema estabilizado es siempre menor a 1, con lo cual el esquema UD es estable para cualquier combinación de difusividad física, paso de malla y velocidad.

Teorema de Godunov. Esquemas de alta resolución

En la sección anterior vimos que mediante los esquemas de diferencias centradas y diferencias aguas arriba por separado no es posible obtener soluciones monótonas y a su vez de alto orden. El método de diferencias aguas arriba nos permitía tener soluciones monótonas pero de primer orden, mientras que el método de diferencias centradas nos proveía soluciones de segundo orden de reducción de error pero aplicables solamente en el caso que el número de Peclet fuera inferior a la unidad. Podemos plantear entonces utilizar una combinación de ambas técnicas. Para ello recordemos primeramente como se obtienen valores en caras a partir de los valores en celdas, los cuales son las verdaderas incógnitas. Con la ayuda de la Figura 5 habíamos definido que, si la cara f se encontraba entre dos celdas, P (aguas arriba), y N (aguas abajo), considerando una velocidad de izquierda a derecha el valor en la cara podía calcularse por medio de interpolación lineal (diferencias centradas) como,

$$\phi_{fCD} = f_{xCD}\phi_P + (1 - f_{xCD})\phi_N$$

donde $f_{xCD} = \overline{fN}/\overline{PN}$ es el factor que ya habíamos presentado y que en el caso de una malla unidimensional uniforme vale $1/2$. Podemos escribir de la misma forma para el caso de la discretización por diferencias aguas arriba,

$$\phi_{fUD} = f_{xUD}\phi_P + (1 - f_{xUD})\phi_N$$

En este caso f_{xUD} es simplemente $f_{xUD} = 1$. Como se ve esto reduce la expresión a $\phi_{fUD} = \phi_P$ tal como sabemos que sucede para el método UD. Podemos ahora combinar ambos métodos en forma lineal mediante un coeficiente γ

$$\phi_f = (1 - \gamma)\phi_{fUD} + \gamma\phi_{fCD} \quad (31)$$

El valor de γ permite utilizar los esquemas UD y CD o combinaciones de ambos, tal que:

- $\gamma = 0 \rightarrow \phi_f = \phi_{fUD}$ (diferencias aguas arriba)
- $\gamma = 1 \rightarrow \phi_f = \phi_{fCD}$ (diferencias centradas)
- $0 < \gamma < 1 \rightarrow$ Combinación de UD y CD (*blending*)

Los valores en caras para UD y CD se pueden escribir ahora como,

$$\phi_{fCD} = f_{xCD}\phi_P + (1 - f_{xCD})\phi_N$$

$$f_{xCD}\phi_P + \phi_N - f_{xCD}\phi_N =$$

$$f_{xCD}(\phi_P - \phi_N) + \phi_N$$

$$\phi_{fUD} = f_{xUD}(\phi_P - \phi_N) + \phi_N$$

Reemplazando estas expresiones en la Ec. (31) se obtiene,

$$\phi_f = (1 - \gamma)\phi_{fUD} + \gamma\phi_{fCD}$$

Desarrollando,

$$\phi_f = [(1 - \gamma)f_{xUD} + \gamma f_{xCD}](\phi_P - \phi_N) + \phi_N \quad (32)$$

Como se ve tenemos ahora una esquema combinado de diferencias aguas arriba y diferencias centradas que podría potencialmente permitirnos hacer uso de las bondades de ambos esquemas. Ahora bien ¿Habrá algún valor óptimo para γ ?. Al respecto de esta pregunta se deben tener en cuenta las siguientes consideraciones,

- El valor de γ depende del problema,
- podría tener que cambiar dentro del dominio, especialmente en las zonas de gran variación de la solución (gradiente),
- puede ser constante (esquema lineal) o bien
- variable y dependiente de ϕ , con lo cual se llega a un esquema para el cálculo de ϕ_f no lineal.

En la última de las opciones donde $\gamma = \gamma(\phi)$ el factor de blending es una función de las incógnitas, por lo tanto al discretizar las ecuaciones diferenciales se llegará un sistema de ecuaciones algebraicas del tipo,

$$[K + A(\phi)] \phi = b$$

A diferencia del sistema presentado en la Ec. (23) vemos que la matriz de advección A depende ahora de las incógnitas ϕ por lo tanto no es posible invertir el sistema en forma directa para hallar la solución sino que se requiere algún método iterativo para sistemas de ecuaciones no lineales como el método de Newton-Raphson. Otra manera de resolver este problema es calcular la función γ utilizando valores de la solución, ϕ , del paso de tiempo o iteración anterior, lo cual implica desde ya un error, el cual usualmente aceptable.

El uso de funciones $\gamma(\phi)$ da lugar a lo que se conoce como limitadores o esquemas de alta resolución que permiten mantener el orden de aproximación sin perder estabilidad.

Teorema de Godunov

Recordando la definición de solución monótona como aquella que no genera nuevos máximos ni mínimos respecto de la condición inicial y las condiciones de borde podemos enunciar el *Teorema de Godunov*⁴,

“Todos los esquemas *lineales* monótonos para la ecuación de advección son necesariamente de primer orden de precisión.”

De aquí se ve que tener un factor de blending que en realidad es una función de ϕ no solamente es una opción más en el tratamiento del término advectivo sino que es la única forma de conseguir un esquema monótono de alto orden. El teorema de Godunov nos da una conclusión teórica de fundamental importancia ya que da por cerrada la discusión en cuanto a la posibilidad de tener tener esquemas de alto orden monótonos. Si bien sabemos mediante este teorema que debemos recurrir a funciones $\gamma(\phi)$ no sabemos que tipo de expresiones serán estas.

⁴C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows. Volume 1. Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. (2007).

Esquemas de alta resolución

El uso de esquemas de alta resolución es una de los grandes avances en la Mecánica Computacional de Fluidos de los últimos años. La manera de crear esquemas de este tipo que satisfagan las condiciones de monotonicidad siguen varias líneas de trabajo, entre las más conocidas están los esquemas de disminución de la variación total (*Total Variation Diminishing*, TVD) y los obtenidos mediante el diagrama de variable normalizada (*Normalized Variable Diagram*, NVD). Estudiaremos brevemente los primeros, para ello introduciremos primeramente el concepto de Variación Total (TV) creado por Amiram Harten⁵, el cual está relacionado con las funciones de variación acotada.

Sea $\phi(x, t)$ la solución de un problema de advección pura,

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [\vec{v} \phi(x, t)] = 0$$

y el gráfico presentado en el Figura 9 su representación para un dado tiempo, t_0 ,

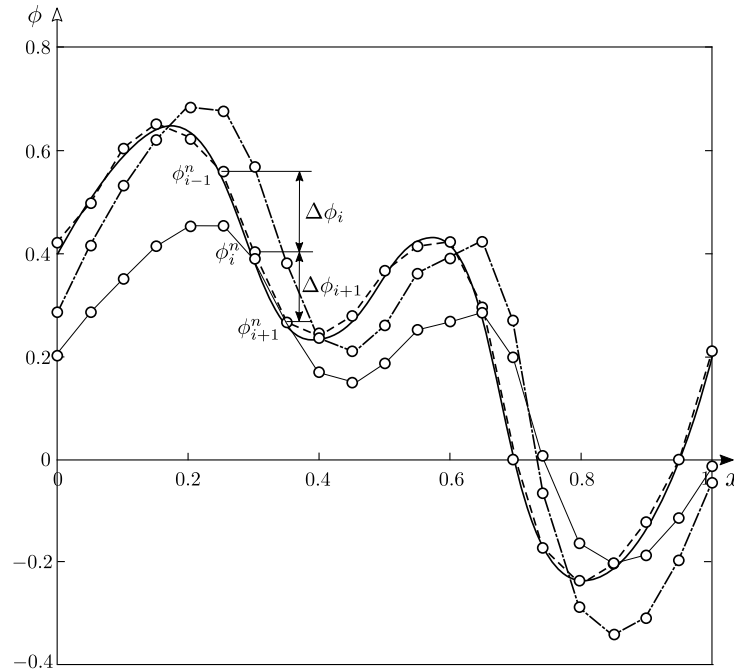


Figura 9: Solución para la ecuación de advección pura en un instante de tiempo t_0 . Línea llena: solución analítica a tiempo t_0 . Línea de trazos: solución numérica a tiempo t_0 . Línea de trazos y puntos: solución numérica no monótona a tiempo $t_0 + \Delta t$. Línea llena fina: solución numérica monótona a tiempo $t_0 + \Delta t$

definimos la variación total como⁶

$$TV[\phi(x, t)] = \int \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} \right| dx$$

Para una solución discreta tendríamos,

$$TV[\phi^n] = \sum_i |\phi_{i+1}^n - \phi_i^n| = \sum_i |\Delta \phi_i^n|$$

⁵Harten, A. *High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*. J. Comput. Phys. 49 (3):357–393 (1983).

⁶Wikipedia: [Total variation diminishing](#)

En el caso continuo la variación total es la integral del valor absoluto del gradiente en todo el dominio de la solución, lo que se integra en definitiva es la variación infinitésima de la solución entre un punto y otro, al hacerlo en valor absoluto se tienen en cuenta tanto ascensos como descensos en los valores de la solución. En el caso discreto es más sencillo de ver, es simplemente sumar los saltos en la solución desde una posición discreta a la otra.

En la Figura 9 se observan varias soluciones, una de ellas es la solución analítica a tiempo t_0 , representada en el línea llena gruesa, luego con línea de trazos se encuentra una solución numérica para ese mismo instante de tiempo y una discretización. A partir de estas soluciones podemos realizar comparaciones con soluciones para un instante posterior $t_0 + \Delta t$, la representada con línea de trazos y puntos es no monótona, ya que produce nuevos máximos y mínimos y posee una variación total (TV) mayor. Por otra lado, la solución en línea llena fina tiende a reducir los máximos y mínimos con una TV menor, lo cual puede expresarse como,

$$TV[\phi^{n+1}] \leq TV[\phi^n]$$

Un esquema que produce este tipo de soluciones se denomina entonces de “disminución de variación total” o en inglés Total Variation Diminishing. Harten demostró que *un esquema es TVD si y solo si es monótono* realizando una contribución fundamental. Es importante aclarar que este marco teórico es válido solamente en una dimensión, la extensión a más dimensiones no se ha logrado a menos de algunas contribuciones puntuales. Por lo general en dos y tres dimensiones se aplican los esquemas TVD considerando la dirección perpendicular a las caras de las celdas, lo mismo sucede para los esquemas NVD.

Más adelante en el tiempo Sweby⁷ complementó la teoría de los esquemas TVD al definir condiciones que estos deben cumplir y presentar diagramas de monotonicidad. Sweby definió un cociente de gradientes sucesivos, r , como,

$$r_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_i}$$

y condiciones para que las funciones $\gamma(r)$ sean TVD,

$$\left\{ \begin{array}{ll} r \leq \gamma(r) \leq 2r & \text{si } 0 \leq r \leq 1 \\ 1 \leq \gamma(r) \leq r & \text{si } 1 \leq r \leq 2 \\ 1 \leq \gamma(r) \leq 2 & \text{si } r > 2 \\ \gamma(1) = 1 \end{array} \right.$$

Estas condiciones son más claras presentándolas en forma gráfica en lo que se conoce como *diagrama de Sweby*⁸, tal como muestra en la Figura 10.

Todas las funciones $\gamma(r)$ cuya gráfica se encuentra dentro de los límites dados por la región en gris serán TVD de segundo orden. Vale recordar que $\gamma = 0$ corresponde al esquema UD y $\gamma = 1$ al esquema CD. Como se ve estos son simplemente puntos en el diagrama de Sweby y por lo tanto corresponden a valores únicos de r de todos los que puede tomar una solución $\phi(x, t)$. En la figura están indicados los límites superior e inferior del diagrama. El primero de ellos es equivalente al limitador Superbee, cuya expresión analítica es,

⁷Sweby, P.K. *High resolution schemes using flux-limiters for hyperbolic conservation laws*. SIAM J. Numer. Anal., 21 (5): 995–1011 (1984).

⁸Wikipedia: Flux limiter

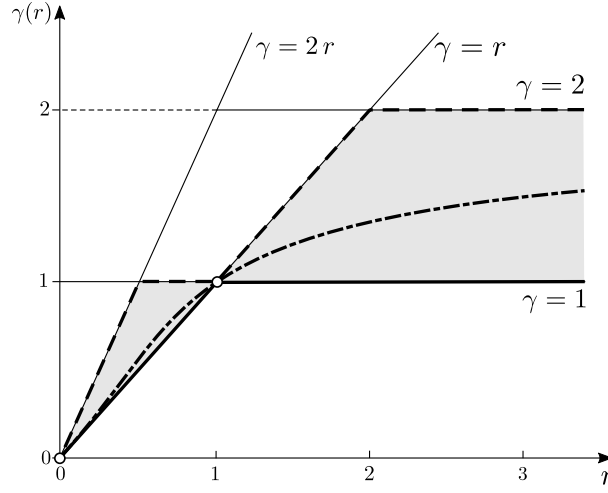


Figura 10: Región admisible para esquemas TVD de segundo orden. Línea de trazos: límite superior, esquema Superbee. Línea llena gruesa: límite inferior, esquema MinMod. Línea de trazos y puntos: esquema van Leer.

$$\gamma(r) = \max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)]; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \gamma(r) = 2$$

El límite inferior del diagrama coincide con el limitador MinMod,

$$\gamma(r) = \max[0, \min(1, r)]; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \gamma(r) = 1$$

En la figura se presenta adicionalmente otro limitador como ejemplo, en este caso el limitador van Leer,

$$\gamma(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|}; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \gamma(r) = 2$$

Nótese que la teoría de Sweby presentada en el diagrama del mismo nombre predice que el factor de blending γ puede alcanzar el valor de dos. Si recordamos la Ec. (32),

$$\phi_f = [(1 - \gamma)f_{xUD} + \gamma f_{xCD}](\phi_P - \phi_N) + \phi_N$$

vemos que para el caso de $\gamma = 2$, el valor en la cara resulta ser,

$$\phi_f = \phi_N$$

es decir el valor aguas abajo de la cara en estudio. Este valor es completamente no físico para el caso de un campo de velocidades con dirección desde la celda P hacia la N , con lo cual su objetivo es cumplir las condiciones de monotonicidad y alta resolución bajo ciertos valores de la solución. Vemos como el marco teórico propuesto por Sweby no solamente incluye el concepto de blending previamente presentado sino que predice nuevos valores para la función γ y les asigna propiedades.

Tratamiento de las condiciones de borde

Veremos ahora como incorporar condiciones de borde al discretizar el operador de advección mediante esquemas tipo blended. Para el caso de una celda de un problema unidimensional las únicas dos caras que aportan a la discretización son la izquierda y la derecha, recordando la Ec. (22) tendremos,

$$\left\{ \sum_{f=li, lid} (\vec{v}\phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_i = |\vec{v}| |\vec{S}_f| [\phi_d - \phi_i] = 0$$

En el caso de la primera celda, que involucra la frontera izquierda, será,

$$|\vec{v}| |\vec{S}_f| \left[\phi_1 + \frac{\gamma_d}{2} (\phi_2 - \phi_1) - \phi_0 \right] = 0$$

siendo ϕ_0 el valor de ϕ en la frontera a izquierda. Reordenando,

$$|\vec{v}| |\vec{S}_f| \left[\phi_1 \left(1 - \frac{\gamma_d}{2} \right) + \phi_2 \frac{\gamma_d}{2} \right] = \phi_0 |\vec{v}| |\vec{S}_f|$$

En la frontera derecha tendremos,

$$|\vec{v}| |\vec{S}_f| \left[\phi_{N-1} \left(\frac{\gamma_i}{2} - 1 \right) - \phi_N \frac{\gamma_i}{2} \right] = -\phi_L |\vec{v}| |\vec{S}_f|$$

donde ϕ_L es el valor de ϕ en la frontera derecha y N el índice de la última celda del dominio.

Discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes

Nos proponemos ahora discretizar las ecuaciones de Navier-Stokes para el caso incompresible. Recordaremos primeramente su expresión por componentes de la velocidad,

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \rho u + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 u + \rho g_x \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho v + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} v) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \nabla^2 v + \rho g_y \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho w + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} w) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \nabla^2 w + \rho g_z \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \end{cases} \quad (33)$$

Tomemos ahora la ecuación correspondiente a la dirección x ,

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \rho u}_{\text{T. Temporal}} + \underbrace{\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} u)}_{\text{T. Adectivo}} = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial x}}_{\text{T. Fuente de presión}} + \underbrace{\mu \nabla^2 u}_{\text{T. Difusivo}} + \underbrace{\rho g_x}_{\text{T. Fuente de gravedad}}$$

Como se ve esta expresión contiene los mismos términos que la Ecuación General de Advección-Difusión no Estacionaria con Fuente. Tal como se estudió en el capítulo de las ecuaciones de Navier-Stokes el término advectivo posee la particularidad de ser no-lineal. Esta característica da lugar a comportamientos caóticos desde el punto de vista físico, tales como la turbulencia y la alta sensibilidad a las condiciones iniciales; desde el punto de vista numérico requiere un tratamiento especial. Adicionalmente, al ser un término advectivo requiere estabilización. El término de gradiente de presión será tratado aquí desde el punto de vista numérico como un término fuente volumétrico, aunque en realidad actúa en las superficies. Otro de los aspectos a tener en cuenta es la necesidad de cumplir la *restricción de incompresibilidad*, es decir los campos de velocidades que se obtengan como solución de las ecuaciones de momento deben satisfacer al mismo tiempo la condición de divergencia nula. Así pues, podemos resumir las particularidades de la discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes por el Método de Volúmenes Finitos como,

- No-linealidad
- Advección
- Incompresibilidad

La primera de estas particularidades puede tratarse de varias maneras, una de ellas es plantear directamente un sistema de ecuaciones no-lineal que luego se resolverá mediante métodos como Newton-Raphson. Este enfoque lleva generalmente a esquemas *monolíticos*, es decir donde las tres ecuaciones de momento y la restricción de incompresibilidad se resuelven en simultáneo. Otra manera de resolver este problema es realizar una linealización del término advectivo de la forma,

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} u) \cong \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}^n u^{n+1})$$

es decir utilizar como campo advectivo el campo de velocidades del paso (o iteración) anterior. Esta técnica no solamente permite resolver la no linealidad sino que también evita los productos entre incógnitas cruzadas (u , v y w), volviendo las ecuaciones por componentes independientes entre si. Como ventaja adicional encontramos que el término advectivo no-lineal se transforma en un término advectivo tal como los estudiados previamente con lo cual las técnicas de esquemas de alta resolución se pueden aplicar directamente. Queda resuelta de esta manera también la segunda de las particularidades expuestas. El tratamiento de la incompresibilidad requiere una nota separada.

Tratamiento de la incompresibilidad. Método PISO

El sistema compuesto por la ecuaciones de Navier-Stokes y la restricción de incompresibilidad, Ec. (33), posee cuatro incógnitas, las tres componentes de la velocidad y la presión. Como se ve contamos con cuatro ecuaciones también, sin embargo no tenemos una ecuación evolutiva para la presión, es decir no tenemos una ecuación de transporte para la presión. De aquí que será necesario obtener una ecuación que nos permita resolver la presión, como se verá resolver la presión implica directamente satisfacer la incompresibilidad.

Estudiaremos ahora el Método PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) presentado por Raad Issa en 1986⁹ tal como está implementado en OpenFOAM(R). El método PISO se encuentra implementado en casi todas las plataformas de Mecánica de Fluidos Computacional basadas en el Método de Volúmenes Finitos, entre ellas las que dominan el mercado.

Para comenzar la derivación del método utilizaremos la versión integral de la ecuación de momento en la dirección x (el mismo planteo es válido en las otras direcciones) y aplicaremos el Teorema de la Divergencia a los términos de flujo. Dividiremos a ambos lados del igual por ρ y no consideraremos el término de gravedad por ahora, la presión utilizada será $p' = p/\rho$ que por conveniencia continuaremos escribiendo como p .

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \vec{v} u \cdot d\vec{\Gamma} = \int_{\Omega} -\frac{\partial p}{\partial x} d\Omega + \int_{\Gamma} \nu \vec{\nabla} u \cdot d\vec{\Gamma}$$

Como se ve hemos llegado a una expresión similar a las utilizadas para otras cantidades escalares estudiadas previamente. Aplicando el Método de Volúmenes Finitos a esta ecuación y considerando una discretización implícita en el tiempo obtendremos lo ya estudiado en la Ec. (26). Ajustando la notación tendremos para una dada celda,

⁹Issa, R. I. (1986). Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of computational physics*, 62(1), 40-65.

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} V_i + (K_{ij} + A_{ij}) u_j^{n+1} = b_i$$

El primer término es la versión discreta del término temporal. El segundo término incluye las matrices K y A , la primera de ellas corresponde al término difusivo o término viscoso; la segunda al término advectivo linealizado. Finalmente el término b_i incluye los efectos del término de presión y las condiciones de borde. Reescribiremos esta ecuación de forma más conveniente como,

$$\left(\frac{V_i}{\Delta t} I_{ij} + K_{ij} + A_{ij} \right) u_j^{n+1} = b_i + \frac{u_i^n}{\Delta t} V_i - \frac{\partial p}{\partial x} V_i$$

$$A_{ij} u_j^{n+1} = b_i + \frac{u_i^n}{\Delta t} V_i - \frac{\partial p}{\partial x} V_i$$

donde hemos reutilizado la variable A para representar la matriz completa del problema. Ahora bien si consideramos el producto matrix-vector para la fila i tendremos,

$$a_P(\Phi^n) u_P^{n+1} + \sum_N a_N(\Phi^n) u_N^{n+1} = b_P + \frac{u_P^n}{\Delta t} V_P - \frac{\partial p}{\partial x} V_P \quad (34)$$

donde hemos vuelto a la notación de P para indicar la celda en estudio y N para las celdas vecinas por caras. Nótese que debido a la linealización los coeficientes a son función del campo de velocidades en el paso anterior, estrictamente del flujo en caras de la velocidad ($\Phi_f^n = \vec{v} \cdot \vec{S}_f$) en el paso anterior como se verá más adelante.

La restricción de incompresibilidad también puede discretizarse por el Método de Volúmenes Finitos como,

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} d\Omega = \int_{\Gamma} \vec{v} \cdot d\vec{\Gamma} \cong \sum_f \vec{v}_f \cdot \vec{S}_f = \sum_f \Phi_f = 0 \quad (35)$$

Podemos re-escribir la Ec. (34) como,

$$a_P(\Phi^n) u_P^{n+1} = - \sum_N a_N(\Phi^n) u_N^{n+1} + \frac{u_P^n}{\Delta t} V_P - \frac{\partial p}{\partial x} V_P + b_P$$

Diviando a ambos lados por el volumen de la celda V_P ,

$$a_P(\Phi^n) u_P^{n+1} = - \sum_N a_N(\Phi^n) u_N^{n+1} + \frac{u_P^n}{\Delta t} - \frac{\partial p}{\partial x} + b_P$$

donde ahora a_P , a_N y b_P corresponden a los valores originales divididos por V_P . Escribimos ahora,

$$a_P(\Phi^n) u_P^{n+1} = H \left[a_N(\Phi^n), u_N^{n+1} \right] - \frac{\partial p}{\partial x}$$

Como se ve hemos definido el operador,

$$H \left[a_N(\Phi^n), u_N^{n+1} \right] = - \sum_N a_N(\Phi^n) u_N^{n+1} + \frac{u_P^n}{\Delta t} + b_P$$

Podemos ahora despejar u_p^{n+1} como,

$$u_p^{n+1} = \frac{H[a_N(\Phi^n), u_N^{n+1}]}{a_p} - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{a_p} \quad (36)$$

Interpolando en las caras y considerando las mismas operaciones en las otras dos direcciones del espacio tenemos¹⁰,

$$\bar{u}_f = \frac{\overline{H_x[a_N(\Phi^n), u_N^{n+1}]}}{a_p} - \frac{\overline{\partial p}}{\partial x} \frac{V_p}{a_p}$$

$$\bar{v}_f = \frac{\overline{H_y[a_N(\Phi^n), v_N^{n+1}]}}{a_p} - \frac{\overline{\partial p}}{\partial y} \frac{V_p}{a_p}$$

$$\bar{w}_f = \frac{\overline{H_z[a_N(\Phi^n), w_N^{n+1}]}}{a_p} - \frac{\overline{\partial p}}{\partial z} \frac{V_p}{a_p}$$

Con estas componentes de la velocidad podemos escribir la velocidad en caras como,

$$\vec{v}_f = (\bar{u}_f, \bar{v}_f, \bar{w}_f)$$

Ahora podemos reemplazar esta velocidad en la versión discreta de la ecuación de continuidad, Ec. (35),

$$\sum_f \left[\frac{\overline{H_x[a_N(\Phi^n), u_N^{n+1}]}}{a_p} - \frac{\overline{\partial p}}{\partial x} \frac{1}{a_p}, \frac{\overline{H_y[a_N(\Phi^n), v_N^{n+1}]}}{a_p} - \frac{\overline{\partial p}}{\partial y} \frac{1}{a_p}, \frac{\overline{H_z[a_N(\Phi^n), w_N^{n+1}]}}{a_p} - \frac{\overline{\partial p}}{\partial z} \frac{1}{a_p} \right]_f \cdot \vec{S}_f = 0$$

que puede escribirse en forma vectorial como,

$$\sum_f \left[\frac{\vec{H}[a_N(\Phi^n), \vec{v}_N^{n+1}]}{a_p} - \vec{\nabla} p \frac{1}{a_p} \right]_f \cdot \vec{S}_f = 0$$

De donde se ve que,

$$\Phi_f = \left[\frac{\vec{H}[a_N(\Phi^n), \vec{v}_N^{n+1}]}{a_p} - \vec{\nabla} p \frac{1}{a_p} \right]_f \cdot \vec{S}_f \quad (37)$$

Reordenando,

$$\sum_f \left[\vec{\nabla} p \frac{1}{a_p} \right]_f \cdot \vec{S}_f = \sum_f \left[\frac{\vec{H}[a_N(\Phi^n), \vec{v}_N^{n+1}]}{a_p} \right]_f \cdot \vec{S}_f$$

El término de la izquierda que corresponde al gradiente de presión interpolado en las caras puede reemplazarse por un gradiente calculado directamente en las caras tal como se hace para discretizar el término difusivo. Este procedimiento implica, implícitamente, la

¹⁰En la práctica los operadores a_p y H se computan para una matriz promedio en las todas las direcciones del espacio, en el caso tridimensional $A = (A_x + A_y + A_z)/3$ y las condiciones de borde correspondiente a cada dirección.

aplicación de la Interpolación de Rhie-Chow¹¹ lo cual permite evitar el desacoplamiento de la presión entre celdas vecinas; además da lugar a una discretización más compacta ya que solo involucra primeros vecinos por caras. En el término de la izquierda es posible interpolar el numerador y el denominador por separado y realizar el producto. Este cálculo es válido para el caso de variaciones suaves de las cantidades interpoladas y se lo considera una aproximación útil para facilitar la discretización. Tenemos entonces,

$$\sum_f \left[\frac{1}{a_p} \vec{\nabla} p \right]_f \cdot \vec{S}_f = \sum_f \left[\frac{\vec{H} [a_N(\Phi^n), \vec{v}_N^{n+1}]}{a_p} \right]_f \cdot \vec{S}_f \quad (38)$$

Hemos llegado a una ecuación para la presión. Podemos hacer ahora un resumen de las ecuaciones más relevantes presentadas, Ec. (34), (38), (37) y (36) en forma vectorial y sus denominaciones usuales.

$$a_p(\Phi^n) \vec{v}_p^{n+1} + \sum_N a_N(\Phi^n) \vec{v}_N^{n+1} = \vec{b}_p + \frac{\vec{v}_p^n}{\Delta t} V_p - \vec{\nabla} p V_p \quad \text{Predictor de momento}$$

$$\sum_f \left[\frac{1}{a_p} \vec{\nabla} p \right]_f \cdot \vec{S}_f = \sum_f \left[\frac{1}{a_p} \vec{H} [a_N(\Phi^n), \vec{v}_N^{n+1}] \right]_f \cdot \vec{S}_f \quad \text{Ecuación de presión}$$

$$\Phi_f = \left[\frac{\vec{H} [a_N(\Phi^n), \vec{v}_N^{n+1}]}{a_p} - \vec{\nabla} p \frac{1}{a_p} \right]_f \cdot \vec{S}_f \quad \text{Corrección de flujos}$$

$$\vec{v}_p^{n+1} = \frac{\vec{H} [a_N(\Phi^n), \vec{v}_N^{n+1}]}{a_p} - \vec{\nabla} p \frac{1}{a_p} \quad \text{Corrección explícita de velocidad}$$

A partir de estas ecuaciones podemos generar el algoritmo de acoplamiento presión-velocidad PISO.

1. Resolver el predictor de momento para \vec{v}^{n+1} , utilizando un campo de presiones conocido p^n
2. Resolver la ecuación de presión para p^i , para lo cual es necesario calcular $\vec{H} [a_N(\Phi^n), \vec{v}_N^{n+1}]$.
3. Corregir los flujos para Φ_f^i .
4. Corregir las velocidades en centro de celda para $\vec{v}^{n+1,i}$.
5. Volver al paso 2 nIntIt - 1 veces.
6. Volver al paso 1 nExtIt - 1 veces.

Este proceso se cumple en cada paso de tiempo. Como se ve, en el algoritmo existen dos bucles, uno externo que se cumple nExtIt veces e involucra todos los pasos y otro, interno, que se cumple nIntIt veces que involucra todos los pasos menos el cálculo del Predictor de Momento. El algoritmo PISO clásico considera nExtIt = 1 es decir el Predictor de Momento se calcula solamente una vez mientras que el cálculo de la Ecuación de Presión y las correcciones se realizan por lo general dos o más veces.

¹¹Rhie, C. M.; Chow, W. L. (1983). Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 21(11), 1525-1532.

El algoritmo descrito permite satisfacer en cada iteración interna (o iteración de PISO) la ecuación de presión. Esta expresión se obtuvo a partir de suponer que se cumple la ecuación de continuidad en forma integral (o *débil*), Ec. (35); por lo tanto al resolverla se satisface la restricción de incompresibilidad y se obtiene un conjunto de flujos que cumple la continuidad de los flujos en las caras. Este es un aspecto fundamental del método, son los flujos en las caras los que satisfacen la ecuación de continuidad *y no las velocidades en los centros de las celdas*. Así es que cuando es necesario adveccionar un campo escalar luego de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes deben utilizarse directamente esos flujos en caras al discretizar el operador de divergencia. De igual forma al discretizar las ecuaciones de momento en el próximo paso de tiempo.

Cada vez que se resuelve la ecuación de presión se resuelve un sistema de ecuaciones lineales ralo (*sparse*). Para asegurar el correcto cierre de continuidad es necesario resolver este sistema con precisión suficiente, para lo cual se debe fijar un residuo relativamente bajo. Este es el residuo del problema lineal de presión. A su vez, cada vez que se ensambla el sistema de ecuaciones a resolver es posible calcular un residuo inicial que da una idea del desbalance de continuidad que posee el sistema en ese momento (desbalance de masa). Este residuo inicial es el residuo del problema no-lineal de acoplamiento presión-velocidad. En la medida que aplicamos más iteraciones PISO este residuo debería bajar. Como regla del arte se busca que el residuo inicial de la ecuación de presión decrezca tres órdenes de magnitud a lo largo de las iteraciones PISO. Para el caso de OpenFOAM(R) y Simscale es posible en algunas de sus herramientas fijar el grado de convergencia del acoplamiento presión velocidad solamente mediante iteraciones de PISO o bien a través de la opción *Residual controls* para p . En este caso el sistema aplica tantas iteraciones PISO como sean necesarias para llevar el residuo inicial por debajo de determinado valor. Esta última técnica nos libera de determinar la cantidad de iteraciones PISO necesarias, al mismo tiempo puede llevar a la aplicación de una cantidad de iteraciones excesiva si la pendiente de la curva de residuos es pequeña luego de decrecer fuertemente. Lo estudiado en este párrafo aplica generalmente para casos donde el número de Courant, $Co = \frac{|\vec{v}| \Delta t}{\Delta x} \sim 1$. Estrictamente la condición es $|\frac{\partial v}{\partial t}| \sim 0$, con lo cual la linealización planteada es válida, sin embargo este valor es difícil de evaluar y se prefiere la primera condición ya que da buenos resultados en la práctica.

En el caso que se desee volver a resolver la ecuación de momento, es decir el Predictor de Momento puede definirse, $nExtIt > 1$. Este esquema se denomina PIMPLE (según la nomenclatura de OpenFOAM(R)) y permite trabajar con $Co > 1$ a expensas de mayor cómputo. El usuario deberá evaluar si el ahorro en pasos de tiempo compensa el aumento de cómputo por cada paso.

Método SIMPLE

El método SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) de Suhas Patankar y Brian Spalding, desarrollado durante la década de los setenta y presentado por Patankar en el libro *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*¹² es una de las bases de la Mecánica de Fluidos Computacional; si bien fue desarrollado antes que el método PISO podemos verlo como un caso particular de este.

En el caso de tener un problema estacionario no se cuenta con una ecuación evolutiva para \vec{v} por lo tanto el esquema iterativo simplemente partirá de una condición inicial hasta llegar a la solución estacionaria; los estados intermedios no tienen sentido físico. En este caso el algoritmo presentado se ejecuta con $nExtIt \gg 1$ y $nIntIt = 1$, es decir se resuelve el Predictor de Momento y la Ecuación de Presión una vez por cada iteración así como las

¹²Patankar, S. V. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. Taylor & Francis.

correcciones correspondientes. Para evitar que el esquema diverja se aplica relajación tanto para \vec{v} como para p . En el caso de \vec{v} se aplica un esquema de relación implícita¹³,

$$\frac{a_P(\Phi^n) u_P^{n+1}}{\omega_v} + \sum_N a_N(\Phi^n) u_N^{n+1} = \frac{1 - \omega_v}{\omega_v} a_P(\Phi^n) u_P^n + b_P - \frac{\partial p}{\partial x} V_P$$

Como se ve cuando $\omega_v = 1$ el sistema de ecuaciones que se resuelve es el original para el caso estacionario. Si $\omega_v \rightarrow 0$ los términos relajados toman preponderancia sobre los demás resultando un sistema diagonal con lo que $u_P^{n+1} \rightarrow u_P^n$ y la solución no avanza a través de las iteraciones. Para p se utiliza un esquema de relajación explícita como el ya estudiado para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales,

$$p^{n+1} = \omega_p p^i + (1 - \omega_p) p^n$$

siendo p^i la presión obtenida en la resolución de la ecuación de presión en cada iteración SIMPLE. En este caso el subíndice n no representa pasos de tiempo *sino iteraciones no lineales* del problema estacionario o pseudo-pasos de tiempo. Los valores usuales son $\omega_v = 0,7$ y $\omega_p = 0,3$.

¹³Jasak, H. *Numerical Solution Algorithms for Compressible Flows. Lecture Notes*. Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture. University of Zagreb.

Ejercicios. Utilizando las definiciones de los métodos presentadas en el texto resolver las siguientes consignas

1. Escribir un script que resuelva la ecuación de difusión estacionaria unidimensional con fuente constante, bajo las condiciones indicadas como sigue (*problema modelo de difusión unidimensional*),

$$\begin{cases} -\vec{\nabla} \cdot (v \vec{\nabla} \phi) = S \\ \phi(0) = 0 \quad \phi(L) = 0 \end{cases}$$

dados los parámetros físicos v , S y L (longitud del dominio), y los parámetros numéricos, n (numero de celdas) y S_f (área transversal). Comparar contra la solución analítica.

2. Partiendo de $n = 10$ y duplicando la cantidad de celdas sucesivamente hasta 1280 encontrar el orden de convergencia del error en norma 2 respecto de la solución exacta, es decir encontrar p tal que $\|e\| \propto (L/n)^p$. Mostrar adicionalmente como es la evolución del número de condición para la matriz del problema a medida que aumenta el número de elementos de la malla.
3. Incorporar condiciones de borde Neumann al resolutor para difusión estacionaria y resolver un caso similar al primer ejercicio pero fijando un gradiente en uno de los extremos. ¿Qué representa este problema en la práctica? De ejemplos.
4. Utilizar condiciones de borde Neumann en ambos extremos ¿Que observa? ¿Cual es el número de condición de la matriz del problema?.
5. Resolver el problema modelo de difusión unidimensional para el caso transiente, partiendo de la condición inicial $\phi(x, 0) = 0$ y utilizando los métodos Forward Euler y Backward Euler para números de Fourier mayores y menores que uno. ¿A que solución debería evolucionar en el tiempo?
6. Replicar el ejercicio 3 del apunte de la “Ecuación general de advección-difusión no estacionaria con fuente en forma integral” para el caso de condición inicial $\phi(x, 0) = 100$, comparando la solución analítica allí calculada con la obtenida mediante el código del ejercicio anterior utilizando el método de Backward Euler. Explicitar los valores de v , L , n y Δt utilizados. Presentar las soluciones para tres instantes de tiempo tales que las soluciones estén gráficamente bien diferenciadas.
7. Dado el problema modelo de advección-difusión unidimensional estacionario sin fuente (*problema modelo de advección-difusión unidimensional*),

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \phi) = \vec{\nabla} \cdot (v \vec{\nabla} \phi) \\ \phi(0) = 0 \quad \phi(L) = 1 \end{cases}$$

para $Pe_L = \frac{vL}{2\nu} = 10$, utilizando $N = 40$ celdas,

- Calcular el número de Peclet de la malla.
- Obtener la solución numérica con el método de discretización del término advectivo de “diferencias centradas” (*central differences*)
- Obtener la solución numérica con el método de discretización del término advectivo de “diferencias descentradas aguas arriba”.

- Comparar gráficamente ambas soluciones contra la solución analítica del problema (graficada con $N = 200$ celdas) y obtener conclusiones.
- 8. Repetir el ejercicio anterior utilizando $N = 8$ celdas. Obtener conclusiones.
- 9. Resolver mediante el código de advección-difusión desarrollado un problema de advección-difusión no estacionaria tomando como condición inicial $\phi(x, 0) = 1$ si $1 \leq x \leq 2$ y cero en el resto del dominio. Considerar $v = 1$ y seleccionar e informar una difusividad ν adecuada para la observación del fenómeno. Obtener conclusiones sobre la solución obtenida.
- 10. Resolver el problema del ítem anterior mediante un solver de blending TVD utilizando los esquemas Minmod, Superbee y van Leer.