Capítulo: Método de Volúmenes Finitos

Ingeniería en Informática

Norberto Nigro [1,2]

[1]Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Universidad Nacional del Litoral

[2]Centro de Investigación en Métodos Computacionales (CIMEC)
UNL/CONICET, Predio Conicet Litoral Centro, Santa Fe, Argentina

Contenidos

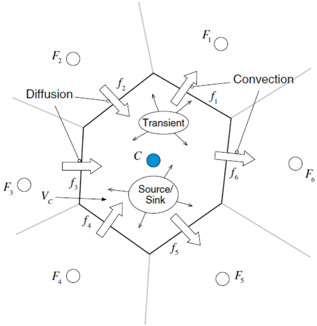
Contenidos

Contenidos

Método de Volúmenes Finitos

- Partimos del Método de los Residuos Ponderados (MRP)
- aplicado a una ecuación de conservación general que consta de 3 términos
  - término de acumulación (derivada temporal)
  - término que tiene en cuenta los flujos de las cantidades a conservar
    - ★ flujos convectivos: promovidos por la velocidad
    - ★ flujos difusivos o conductivos: promovidos por la difusión tanto molecular como por turbulencia
  - términos fuentes

$$\underbrace{\int_\Omega \mathbf{W}\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}d\Omega}_{ACUMULACION} + \underbrace{\int_\Omega \mathbf{W}\nabla\cdot\mathbf{F}d\Omega}_{FLUJOS} = \underbrace{\int_\Omega \mathbf{W}\mathbf{Q}}_{FUENTES} \quad (1)$$



Método de Volúmenes Finitos

- Selección de la función de peso **W**
- Colocación por subdominios
- los subdominios coinciden con las celdas o volúmenes de control

$$\begin{aligned} W_j(\mathbf{x}) &= 0 \qquad \mathbf{x} \notin \Omega_j \\ W_j(\mathbf{x}) &= 1 \qquad \mathbf{x} \in \Omega_j \end{aligned} \tag{2}$$

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega_j} \nabla \cdot \mathbf{F} d\Omega = \int_{\Omega_j} \mathbf{Q} d\Omega \tag{3}$$

- via el teorema de Gauss-Green o de la divergencia es posible transformar integrales de volúmen en integrales de superficie

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \oint_{\Gamma_j} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\Omega_j} \mathbf{Q} d\Omega \tag{4}$$

Método de Volúmenes Finitos

- La variable $\mathbf{U}$ puede ser:
  - un escalar: temperatura T
  - un vector:
    - desplazamiento $\mathbf{d} = [d_x, d_y]$ Elasticidad o mecánica de sólidos
    - velocidad $\mathbf{v} = [v_x, v_y]$ Mecánica de fluidos
- los flujos vistos $\mathbf{F}$ pueden ser:
  - caso escalar: $\mathbf{F} = \mathbf{q} = -\kappa\nabla T$ flujo de calor por conducción
  - caso vectorial: $\mathbf{F} = \boldsymbol{\sigma} =$ el tensor de tensiones
- Además se agregarán los flujos por transporte convectivo
  - caso escalar térmico: $\mathbf{F} = \rho C_p \mathbf{v} T$
  - caso vectorial de la mecánica de los fluidos: $\mathbf{F} = \rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} =$ un tensor de convección

Contenidos

Método de Volúmenes Finitos

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \oint_{\Gamma_j} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\Omega_j} \mathbf{Q} d\Omega \qquad (5)$$

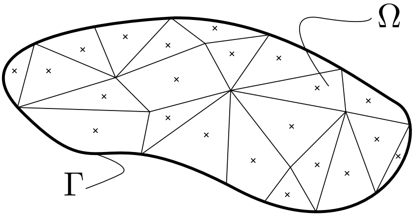


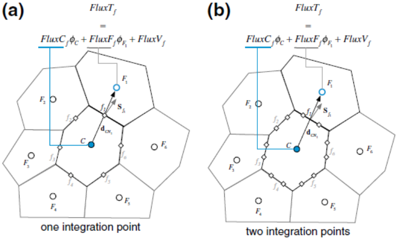
Figure : Dominio discretizado.

- versión semidiscreta, discretizamos solo la dependencia espacial
- integración espacial mediante cuadratura de Gauss

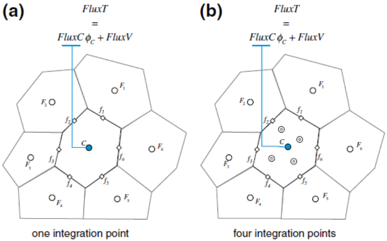
$$\underbrace{\sum_{PG} \frac{\partial \mathbf{U}_j}{\partial t}\bigg|_{PG} \omega_{PG} \Omega_j}_{\text{Volumen}} + \underbrace{\sum_{f \in \Gamma_j} \sum_{PG} (\mathbf{F}_f \bigg|_{PG} \cdot \mathbf{S}_f) \omega_{PG}}_{\text{Superficie}} = \underbrace{\sum_{PG} \mathbf{Q}_j \bigg|_{PG} \omega_{PG} \Omega_j}_{\text{Volumen}} \qquad (6)$$

Método de Volúmenes Finitos

Integración sobre la superficie



Integración sobre el volumen



- en el caso de asumir variaciones lineales de los integrandos con 1 solo punto de Gauss basta, entonces:

$$\frac{\partial \mathbf{U}_j}{\partial t}\Omega_j + \sum_{f \in \Gamma_j} (\mathbf{F}_f \cdot \mathbf{S}_f) = \mathbf{Q}_j \Omega_j \tag{7}$$

Contenidos

Caso escalar térmico

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

$$\underbrace{\int_\Omega \frac{\partial \phi}{\partial t}\, d\Omega}_{temporal} + \underbrace{\int_\Omega \nabla \cdot \vec{f}^{adv} d\Omega}_{convectivo} + \underbrace{\int_\Omega c\phi\, d\Omega}_{reactivo} = \underbrace{\int_\Omega \nabla \cdot \vec{f}^{dif} d\Omega}_{difusivo} + \underbrace{\int_\Omega q\, d\Omega}_{fuente}. \tag{8}$$

- ecuación en general lineal
- no estacionaria
- término convectivo dependiente del movimiento del medio material
- término reactivo, proveniente de la ley de Arrhenius, $k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$
- término difusivo, mecanismo de transporte a escala molecular
- término fuente

Caso escalar térmico

$$\int_{\Omega} W\Big(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}\phi) - \nabla \cdot (\Gamma^{\phi}\nabla\phi) - Q^{\phi}\Big)\, d\Omega = 0 \tag{9}$$

$$Q^{\phi} = q - c\phi \ \text{ fuente generalizada}$$

- colocación por subdominios $W = \chi\Big|_{\Omega_j}$

$$\int_{\Omega_j} \Big(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}\phi) - \nabla \cdot (\Gamma^{\phi}\nabla\phi) - Q^{\phi}\Big)\, d\Omega = 0 \tag{10}$$

$$\int_{\Omega_j} \Big(\frac{\partial \phi}{\partial t} - Q^{\phi}\Big)\, d\Omega + \int_{\Gamma_j} \Big((\rho \mathbf{v}\phi) - (\Gamma^{\phi}\nabla\phi)\Big) \cdot d\Gamma_j = 0 \tag{11}$$

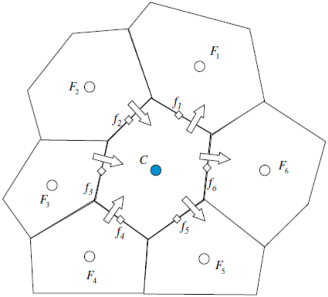
Conducción térmica estacionaria con fuente

$$\int_{\Omega_j} Q^{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \Gamma^{\phi} \nabla\phi \cdot d\Gamma_j = 0 \tag{12}$$

integrando usando un punto de Gauss (asumiendo variación lineal)

$$\underbrace{Q_C^{\phi}|\Omega_C|}_{volumen} + \sum_{f \in \Gamma_C} (\underbrace{\Gamma_f^{\phi}(\nabla\phi)_f}_{\mathbf{J}_f^{\phi}} \cdot \mathbf{S}_f) = 0 \tag{13}$$

Aporte de los flujos



Linealización del flujo

para cada cara del poliedro centrado en C tenemos:

$$\mathbf{J}_f^{\phi} \cdot \mathbf{S}_f = \mathcal{F}_f^T = \mathcal{F}_f^C \phi_C + \mathcal{F}_f^F \phi_F + \mathcal{V}_f \tag{14}$$

sumando sobre todas las caras

$$\sum_{f \in \Gamma_C} \mathbf{J}_f^{\phi} \cdot \mathbf{S}_f = \sum_{f \in \Gamma_C} \mathcal{F}_f^T = \sum_{f \in \Gamma_C} \left(\mathcal{F}_f^C \phi_C + \mathcal{F}_f^F \phi_F + \mathcal{V}_f \right) \tag{15}$$

El aporte del término fuente (volumen) es:

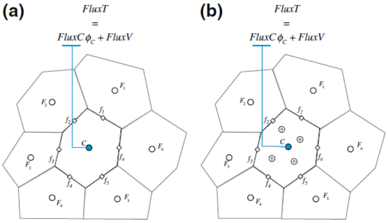
$$\begin{aligned} & \mathcal{F}_{\Omega_C}^C \phi_C + \mathcal{V}_{\Omega_C} \\ & \mathcal{F}_{\Omega_C}^C = 0 \qquad \text{no hay dependencia con la variable propia de la celda} \\ & \mathcal{V}_{\Omega_C} = Q_C^{\phi} |\Omega_C| \end{aligned} \tag{16}$$

Ecuación de la celda C

En resumen

$$\underbrace{Q_C^{\phi}|\Omega_C|}_{\mathcal{F}^C_{\Omega_C}\phi_C+\mathcal{V}_{\Omega_C}} + \sum_{f\in\Gamma_C}\Big(\underbrace{\mathbf{J}_f^{\phi}\cdot\mathbf{S}_f}_{\mathcal{F}_f^T=\mathcal{F}_f^C\phi_C+\mathcal{F}_f^F\phi_F+\mathcal{V}_f}\Big) = 0 \qquad (17)$$

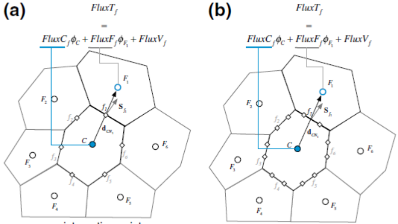
Integración sobre el volumen



one integration point

four integration points

Integración sobre la superficie



one integration point

two integration points

Ecuación de la celda C

La ecuación de la celda C surge de:

$$\underbrace{Q_C^{\phi}|\Omega_C|}_{\mathcal{F}_{\Omega_C}^{C}\phi_C+\mathcal{V}_{\Omega_C}} + \sum_{\mathrm{f}\in\Gamma_C}(\underbrace{\mathbf{J}_f^{\phi}\cdot\mathbf{S}_f}_{\mathcal{F}_f^T=\mathcal{F}_f^C\phi_C+\mathcal{F}_f^F\phi_F+\mathcal{V}_f}) = 0 \tag{18}$$

que montada en la matriz global del sistema queda como:

$$\begin{aligned} a_C\phi_C + \sum_{F\in\mathrm{NB}_C} a_F\phi_F &= b_C \\ a_C &= \sum_{f\in\Gamma_C}\mathcal{F}_f^C + \mathcal{F}_{\Omega_C}^C \\ a_F &= \sum_{f\in\Gamma_C}\mathcal{F}_f^F \\ b_C &= \sum_{f\in\Gamma_C}\mathcal{V}_f + \mathcal{V}_{\Omega_C} \end{aligned} \tag{19}$$

Tratamiento del término no estacionario

$$\int_t^{t+\Delta t}\Big[\int_{\Omega_j}\rho\frac{\partial\phi}{\partial t}d\Omega+\int_{\Gamma_j}\rho\phi\mathbf{v}\cdot d\Gamma_j+\int_{\Omega_j}c\phi d\Omega-$$

$$\int_{\Gamma_j}\Gamma^{\phi}\nabla\phi\cdot d\Gamma_j-\int_{\Omega_j}Q^{\phi}d\Omega\Big]dt$$

$$\int_t^{t+\Delta t}\Big[\underbrace{\rho\frac{\partial\phi_C}{\partial t}|\Omega_C|+c\phi_C|\Omega_C|-Q_C^{\phi}|\Omega_C|}_{\text{Volumen}} \tag{20}$$

$$\underbrace{\sum_f((\rho\mathbf{v}\phi)_f-(\Gamma^{\phi}\nabla\phi)_f)\cdot\mathbf{S}_f\Big]}_{\text{Superficie}}dt$$

Tratamiento del término no estacionario

$$
\begin{aligned}
&\text{Temporal:} \quad \int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi_C}{\partial t} |\Omega_C|\right] dt \approx \rho |\Omega_C| \left[\frac{\partial \phi_C}{\partial t}\right]^{n+\theta} \Delta t \\
&\text{Reactivo:} \quad \int_t^{t+\Delta t} \left[c \phi_C |\Omega_C|\right] dt \approx c |\Omega_C| \left[\phi_C\right]^{n+\theta} \Delta t \\
&\text{Fuente:} \quad \int_t^{t+\Delta t} \left[Q_C^{\phi} |\Omega_C|\right] dt \approx \left[Q_C^{\phi}\right]^{n+\theta} \Delta t \\
&\text{Flujos:} \quad \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^{\phi} \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f\right] dt \approx \\
&\qquad \approx \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^{\phi} \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f\right]^{n+\theta} \Delta t
\end{aligned}
\tag{21}
$$

Tratamiento del término no estacionario

- Método explícito Forward Euler ($\theta = 0$)

$$
\begin{aligned}
\text{Temporal: } & \int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi_C}{\partial t} |\Omega_C| \right] dt \approx \rho |\Omega_C| \left[\frac{\partial \phi_C}{\partial t}\right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = \rho |\Omega_C| \left[\frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t}\right] \Delta t \\
\text{Reactivo: } & \int_t^{t+\Delta t} \left[c \phi_C |\Omega_C| \right] dt \approx c |\Omega_C| \left[\phi_C\right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = c |\Omega_C| \left[\phi_C^n\right] \Delta t \\
\text{Fuente: } & \int_t^{t+\Delta t} \left[Q_C^\phi |\Omega_C| \right] dt \approx |\Omega_C| \left[Q_C^\phi\right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = |\Omega_C| \left[Q_C^{\phi,n}\right] \Delta t
\end{aligned}
\tag{22}
$$

Tratamiento del término no estacionario

$$\text{Flujos:}\quad \int_t^{t+\Delta t}\left[\sum_f((\rho\mathbf{v}\phi)_f-(\Gamma^\phi\nabla\phi)_f)\cdot\mathbf{S}_f\right]dt\approx$$

$$\approx\left[\sum_f((\rho\mathbf{v}\phi)_f-(\Gamma^\phi\nabla\phi)_f)\cdot\mathbf{S}_f\right]^{n+\theta}\Delta t \tag{23}$$

$$=\sum_f(\rho\mathbf{v}\phi_f^n-\Gamma^\phi\nabla\phi_f^n)\cdot\mathbf{S}_f\Big]\Delta t$$

$$\phi_f^n=f(\phi_C^n,\phi_F^n)$$

Tratamiento del término no estacionario

- Método implícito Backward Euler ($\theta = 1$)

$$
\begin{aligned}
\text{Temporal:} \quad & \int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi_C}{\partial t} |\Omega_C| \right] dt \approx \rho |\Omega_C| \left[\frac{\partial \phi_C}{\partial t} \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = \rho |\Omega_C| \left[\frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t} \right] \Delta t \\
\text{Reactivo:} \quad & \int_t^{t+\Delta t} \left[c \phi_C |\Omega_C| \right] dt \approx c |\Omega_C| \left[\phi_C \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = c |\Omega_C| \left[\phi_C^{n+1} \right] \Delta t \\
\text{Fuente:} \quad & \int_t^{t+\Delta t} \left[Q_C^{\phi} |\Omega_C| \right] dt \approx |\Omega_C| \left[Q_C^{\phi} \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = |\Omega_C| \left[Q_C^{\phi, n+1} \right] \Delta t
\end{aligned}
\tag{24}
$$

Tratamiento del término no estacionario

$$\text{Flujos:} \quad \int_t^{t+\Delta t}\left[\sum_f((\rho\mathbf{v}\phi)_f - (\Gamma^\phi\nabla\phi)_f)\cdot\mathbf{S}_f\right]dt \approx$$
$$\approx \left[\sum_f((\rho\mathbf{v}\phi)_f - (\Gamma^\phi\nabla\phi)_f)\cdot\mathbf{S}_f\right]^{n+\theta}\Delta t \tag{25}$$
$$= \sum_f(\rho\mathbf{v}\phi_f^{n+1} - \Gamma^\phi\nabla\phi_f^{n+1})\cdot\mathbf{S}_f\Big]\Delta t$$

$$\phi_f^{n+1} = f(\phi_C^{n+1}, \phi_F^{n+1})$$

Tratamiento del término no estacionario

- Método semi-implícito Crank-Nicholson ($\theta = 1/2$)

$$
\begin{aligned}
\text{Temporal:} \quad & \int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi_C}{\partial t} |\Omega_C|\right] dt \approx \rho |\Omega_C| \left[\frac{\partial \phi_C}{\partial t}\right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = \rho |\Omega_C| \left[\frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t}\right] \Delta t \\
\text{Reactivo:} \quad & \int_t^{t+\Delta t} \left[c \phi_C |\Omega_C|\right] dt \approx c |\Omega_C| \left[\phi_C\right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = c |\Omega_C| \left[\phi_C^{n+1/2}\right] \Delta t \\
\text{Fuente:} \quad & \int_t^{t+\Delta t} \left[Q_C^{\phi} |\Omega_C|\right] dt \approx |\Omega_C| \left[Q_C^{\phi}\right]^{n+\theta} \Delta t = \\
& = |\Omega_C| \left[Q_C^{\phi, n+1/2}\right] \Delta t
\end{aligned} \tag{26}
$$

Tratamiento del término no estacionario

$$
\begin{aligned}
\text{Flujos:} \quad \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right] dt &\approx \\
\approx \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right]^{n+\theta} \Delta t & \\
= \sum_f (\rho \mathbf{v} \phi_f^{n+1/2} - \Gamma^\phi \nabla \phi_f^{n+1/2}) \cdot \mathbf{S}_f \Big] \Delta t &
\end{aligned} \tag{27}
$$

$$\phi_f^{n+1/2} = f(\phi_C^{n+1/2}, \phi_F^{n+1/2})$$

$$\phi_C^{n+1/2} = 1/2 \phi_C^n + 1/2 \phi_C^{n+1}$$

- LIMITES DE ESTABILIDAD TEMPORAL

$$
\begin{aligned}
\text{Courant number :} \quad Co &= \frac{\Delta t |\mathbf{v}|}{h} \\
\text{Fourier number :} \quad Fo &= \frac{\Delta t \alpha}{h^2}
\end{aligned} \tag{28}
$$

Tratamiento del término convectivo

$$\sum_f (\rho \mathbf{v} \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \underbrace{(\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{S}_f)}_{\text{Flujo másico [kg/seg]}} \phi_f \tag{29}$$

$$\phi_f = f(\phi_C, \phi_F)$$

- **LIMITES DE ESTABILIDAD ESPACIAL PECLET**

$$\textbf{Peclet number:} Pe^h = \frac{h|\mathbf{v}|}{\alpha} \tag{30}$$

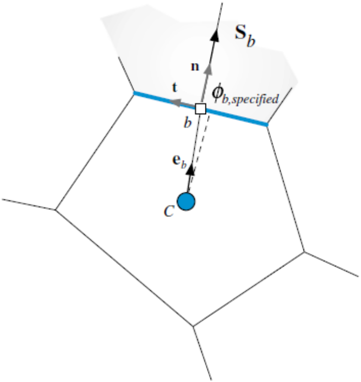
$$\textbf{Difusión cinemática } [m^2/sec] : \alpha = \Gamma^\phi$$

Condiciones de contorno

- Las condiciones de contorno no general una ecuación adicional al sistema de ecuaciones
- sirven para calcular los flujos sobre aquellas caras pertenecientes al contorno
- las caras en general se dividen en 2 grupos:
  - caras internas, poseen 2 celdas que la contienen (owner & neighbour)
  - caras de contorno, poseen solo 1 celda (owner)
- las condiciones de contorno hay de distintos tipos: podriamos separarlas en matemáticas y físicas
- las físicas se derivan de las matemáticas pero actuando en forma combinada sobre todos los campos, ej: entradas/salidas, paredes desllizantes y no dslizantes, simetría , etc
- las matemáticas son:
  - Dirichlet
  - Neumann
  - mixtas o Robin

Condición de contorno Dirichlet

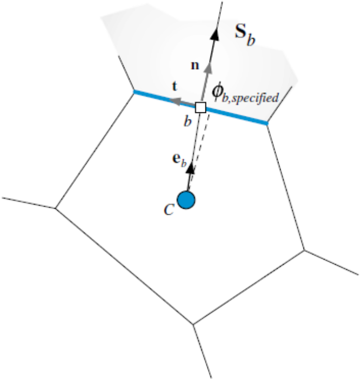
$$
\begin{aligned}
&\phi_b = \phi_{b,specified} \\
&\text{caso convectivo} \\
&\mathbf{J}_b^{C,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = (\rho \mathbf{v} \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b = \\
&= \dot{m}_f \phi_{b,specified} \\
&\text{caso difusivo} \\
&\mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = (\Gamma^\phi \nabla \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b \approx \\
&\approx \Gamma_b^\phi \frac{(\phi_{b,specified} - \phi_C)}{|\mathbf{d}_{Cb} \cdot \mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b|^2
\end{aligned}
\tag{31}
$$



Condición de contorno Dirichlet

$\phi_b = \phi_{b,specified}$
$\mathcal{F}^F_{f=b} = 0$ (no hay vecino por una cara de borde a la celda C.

$$
\begin{aligned}
&\textcolor{red}{\text{caso convectivo}} \\
&\mathcal{F}^C_{f=b} = 0 \\
&\mathcal{V}_{f=b} = \dot{m}_f \phi_{b,specified} \\
&\textcolor{red}{\text{caso difusivo}} \\
&\Psi = \Gamma^\phi_b \frac{1}{|\mathbf{d}_{Cb} \cdot \mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b|^2 \\
&\mathcal{F}^C_{f=b} = -\Psi \\
&\mathcal{V}_{f=b} = \Psi \phi_{b,specified}
\end{aligned}
\tag{32}
$$

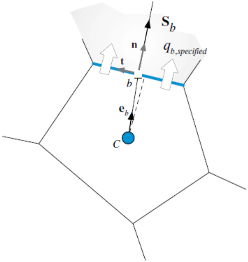


Condición de contorno Neumann

$$(\Gamma\nabla\phi)_b \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} = q_{b,specified}$$

caso difusivo

$$\mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = \mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|}|\mathbf{S}_b| = q_{b,specified}|\mathbf{S}_b|$$



caso convectivo

a partir de una expansión en Taylor

$$\phi_C = \phi_b + (\nabla\phi)_b \cdot (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_C) + O(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_C)^2$$

$$\phi_b = \phi_C - (\nabla\phi)_b \cdot (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_C) \approx \phi_C - (\nabla\phi)_b \cdot \mathbf{d}_n$$

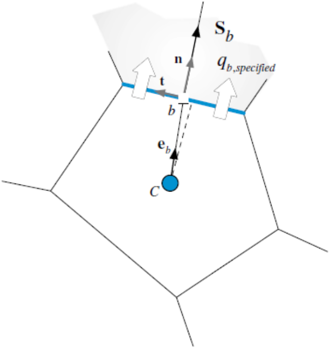
$$\mathbf{J}_b^{C,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = (\rho\mathbf{v}\phi)_b \cdot \mathbf{S}_b \approx \dot{m}_f(\phi_C - (\nabla\phi)_b \cdot \mathbf{d}_n) = \dot{m}_f(\phi_C - \frac{q_{b,specified}}{\Gamma_b}|\mathbf{d}_n|) \tag{33}$$

Condición de contorno Neumann

$(\Gamma\nabla\phi)_b \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} = q_{b,specified}$

$\mathcal{F}^F_{f=b} = 0$ (no hay vecino por una cara de borde a la celda C.

$$
\begin{aligned}
&\text{caso difusivo}\\
&\mathcal{F}^C_{f=b} = 0\\
&\mathcal{V}_{f=b} = q_{b,specified}|\mathbf{S}_b|\\
&\text{caso convectivo}\\
&\mathcal{F}^C_{f=b} = \dot{m}_f\\
&\mathcal{V}_{f=b} = -\dot{m}_f \frac{q_{b,specified}}{\Gamma_b}|\mathbf{d}_n|
\end{aligned}
\tag{34}
$$



Contenidos

Contenidos

Conducción del calor con fuente en 1D

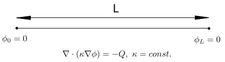


Figure : Difusión estacionaria.

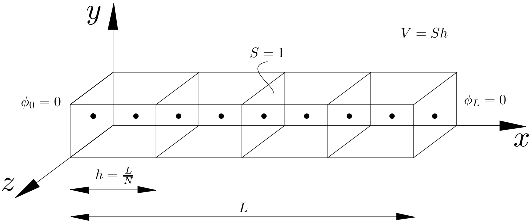
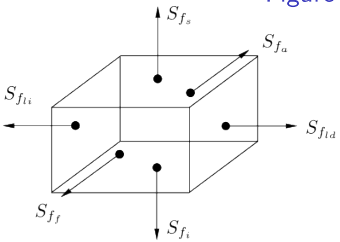


Figure : Discretización cuasi 1D



$s : superior$
$i : inferior$
$a : atrs$
$f : frente$
$li : lateralizquierda$
$ld : lateralderecha$

$$-S_{f_{li}} = S_{f_{ld}} = (S;0;0),\ S_{f_s} = -S_{f_i} = (0;S;0),\ S_{f_f} = -S_{f_a} = (0;0;S)$$

Conducción del calor con fuente en 1D

$$Q_C^{\phi} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{f \in \Gamma_C} (\underbrace{\Gamma_f^{\phi} (\nabla \phi)_f}_{\mathbf{J}_f^{\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f)}_{\pm S\mathbf{i}} = 0 \tag{35}$$

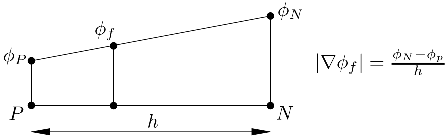


Figure : Interpolación de los gradientes en 1D sobre las caras. $P = C$

$$(\nabla \phi)_f = \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{h}; 0; 0 \right). \tag{36}$$

Conducción del calor con fuente en 1D

sobre $f = ld \rightarrow N = E$ y $f = li \rightarrow N = W$

$$
\begin{aligned}
Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{\text{f}=li,ld} (\underbrace{\Gamma_f^\phi (\nabla\phi)_f}_{\mathbf{J}_f^\phi} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f}_{\pm S\mathbf{i}}) &= 0 \\
Q_C^\phi \; S \; h + \Gamma_{ld}^\phi (\nabla\phi)_{ld} \cdot \mathbf{i} S + \Gamma_{li}^\phi (\nabla\phi)_{li} \cdot (-\mathbf{i}) S &= 0 \\
Q_C^\phi \; S \; h + \Gamma_{ld}^\phi \frac{\phi_E - \phi_C}{h} S - \Gamma_{li}^\phi \frac{\phi_C - \phi_W}{h} S &= 0
\end{aligned}
\tag{37}
$$

Celdas interiores $C = 2$ y $C = 3$

$$
\begin{aligned}
Q_2^\phi \; S \; h + \Gamma_+^\phi S \frac{\phi_3 - \phi_2}{h} - \Gamma_-^\phi S \frac{\phi_2 - \phi_1}{h} &= 0 \\
Q_3^\phi \; S \; h + \Gamma_+^\phi S \frac{\phi_4 - \phi_3}{h} - \Gamma_-^\phi S \frac{\phi_3 - \phi_2}{h} &= 0
\end{aligned}
\tag{38}
$$

Conducción del calor con fuente en 1D

Celdas del contorno $C = 1$ y $C = 4$

$$
\begin{aligned}
Q_1^{\phi}\ S\ h + \Gamma_+^{\phi} S \frac{\phi_2 - \phi_1}{h} - \Gamma_-^{\phi} \frac{\phi_1 - \phi_0}{h/2} S &= 0 \\
Q_4^{\phi}\ S\ h + \Gamma_+^{\phi} S \frac{\phi_L - \phi_4}{h/2} - \Gamma_-^{\phi} S \frac{\phi_4 - \phi_3}{h} &= 0
\end{aligned}
\tag{39}
$$

Asumiendo $\Gamma_+^{\phi} = \Gamma_-^{\phi} = \kappa \ \ \forall f \in \Gamma_C$

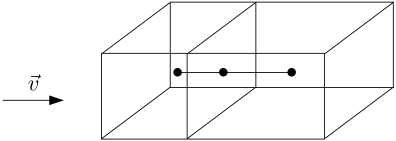
$$
\begin{cases}
\frac{\kappa}{h}(-3\phi_1 + \phi_2) = -Qh - \frac{2\kappa}{h}\phi_0 \\
\frac{\kappa}{h}(\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3) = -Qh \\
\frac{\kappa}{h}(\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4) = -Qh \\
\frac{\kappa}{h}(\phi_3 - 3\phi_4) = -Qh - \frac{2\kappa}{h}\phi_L
\end{cases}
, \tag{40}
$$

Contenidos

$$
\begin{aligned}
&Q_C^{\phi}\underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{f=li,ld}\big(\underbrace{(\Gamma_f^{\phi}\nabla\phi - \mathbf{v}\phi)_f}_{\mathbf{J}_f^{\phi}=\mathbf{J}_f^{D,\phi}+\mathbf{J}^{C,\phi_f}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f}_{\pm S\mathbf{i}}\big) = 0 \\
&Q_C^{\phi}\ S\ h + (\Gamma^{\phi}\nabla\phi - v\mathbf{i}\phi)_{ld}\cdot\mathbf{i}S + (\Gamma^{\phi}\nabla\phi - v\mathbf{i}\phi)_{li}\cdot(-\mathbf{i})S = 0 \\
&Q_C^{\phi}\ S\ h + \Gamma_{ld}^{\phi}\frac{\phi_E - \phi_C}{h}S - \Gamma_{li}^{\phi}\frac{\phi_C - \phi_W}{h}S - v(\phi_{ld} - \phi_{li}) = 0
\end{aligned}
\tag{41}
$$

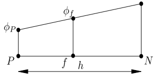
- Central Difference (CD)

$$\phi_f = f_x\phi_C + (1 - f_x)\phi_N \tag{42}$$



- Upwind Difference (UD)

$$\phi_f = \max(v,0)\phi_C + max(-v,0)\phi_N \tag{43}$$



$$f_x = \overline{fN}/\overline{PN}$$

Figure : Aproximación para ϕ_f.

Contenidos

Problemas no estacionarios en 1D

- (a) modelos semidiscretizados: solo discretizamos las derivadas espaciales quedando un sistema de ODEs a resolver
- (b) modelos de discretización total: también se discretiza las derivadas temporales por alguna técnica.

$$\int_{\Omega_j} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \rho\phi \mathbf{v} \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} c\phi d\Omega = \int_{\Gamma_j} \Gamma^\phi \nabla\phi \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} Q^\phi d\Omega$$

(a) $\rho \frac{\mathrm{d}\phi_C}{\mathrm{d}t} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} = \mathrm{RHS}(t, \phi_C, \phi_F, \dots)$ ODE solvers

$$\mathrm{RHS} = \sum_{\mathrm{f}=li,ld} (\underbrace{((\Gamma^\phi \nabla\phi)_f^{n+\theta}}_{\mathbf{J}_f^{D,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f)}_{\pm S\mathbf{i}} + Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} - \sum_{\mathrm{f}=li,ld} (\underbrace{(\rho\mathbf{v}\phi)_f^{n+\theta}}_{\mathbf{J}_f^{C,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f)}_{\pm S\mathbf{i}} - c\phi_C^{n+\theta} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} \tag{44}$$

Problemas no estacionarios en 1D

$$\text{(b)} \qquad \rho \frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{\mathrm{f}=li,ld} \big(\underbrace{(\rho \mathbf{v} \phi)_f^{n+\theta}}_{\mathbf{J}_f^{C,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f)}_{\pm S\mathbf{i}} + c\phi_C^{n+\theta} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} =$$

$$\sum_{\mathrm{f}=li,ld} \big(\underbrace{(\Gamma^\phi \nabla \phi)_f^{n+\theta}}_{\mathbf{J}_f^{D,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f)}_{\pm S\mathbf{i}} + Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} \qquad (45)$$

$$\phi^{n+\theta} = \theta \phi^{n+1} + (1-\theta)\phi^n$$

$\theta = 0$ método explícito

$\theta = 1$ método implícito

$\theta = 1/2$ método Crank Nicholson

Contenidos

Contenidos

Qué es OpenFOAM®

- OpenFOAM® significa Open Source Field Operation and Manipulation.
- OpenFOAM® es una librería en C++ usada para resolver PDEs y ODEs
- Provee varios ready-to-use métodos numéricos y utilidades para pre-processing y post-processing.
- Tiene licencia GNU General Public License (GPL). Lo cual lo hace de libre disponibilidad y provisto de código fuente.
- Tiene extensivas capacidades en multiphysics, a saber:
  - computational fluid dynamics (CFD),
  - conjugate heat transfer (CHT),
  - mass transfer,
  - stress analysis,
  - fluid-structure interaction,
  - chemical reactions, combustion,
  - acoustics,
  - electromagnetics,
  - rigid body motion, etc

Qué es OpenFOAM®

> **OpenFOAM® is an excellent piece of C++ and software engineering. Decent piece of CFD code.**
>
> **H. Jasak**

- Tiene capacidades de ejecución en paralelo sobre computadoras de memoria compartida como distribuida.
- Gratis.
- Esta bajo activo y constante desarrollo y sus capacidades emulan otros paquetes CFD comerciales
- Cuenta con una amplia comunidad de usuarios en el mundo tanto en la industria como en la academia y en R&D

Qué es OpenFOAM®
Discretización e implementación

- Solver basado en Finite Volume Method (FVM).
- Emplea mallas no estructuradas (en general) poliédricas y las variable están colocadas en las celdas.
- Basado sobre aproximaciones de segundo orden en el espacio y en el tiempo con muchos esquemas de discretización disponibles.
- Acoplamiento Pressure-velocity via segregated methods (SIMPLE and PISO).
- Lagragian particle tracking.
- Dynamic mesh handling.
- Adaptive mesh refinement.
- Massive parallelism through domain decomposition.
- Todos sus componentes implementados en una librería facil de re-utilizar

Qué es OpenFOAM®
Estructura básica de los solvers

Los solvers están basados en el concepto de **Equation mimicking** Es una sintaxis obtenida mediante el uso de **object oriented programming (OOP)** tal como **herencia, clases templatizadas, funciones virtuales y sobrecarga de operadores** que le permite a los usuarios crear solvers personalizados con gran facilidad para ser reutilizados. Por ejemplo:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \phi \mathbf{U} - \nabla \cdot \mu \nabla \mathbf{U} = -\nabla p \tag{46}$$

```
  fvm::ddt(rho, U)
+ fvm::div(phi, U)
- fvm::laplacian(mu, U)
   ==
- fvc::grad(p)
```

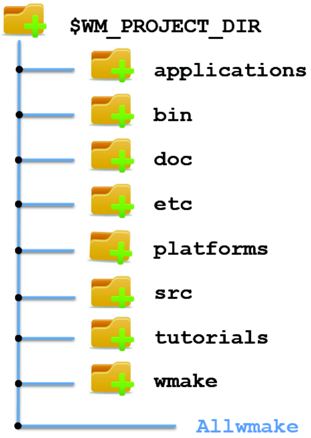
HAY UNA CORRESPONDENCIA CLARA ENTRE EL MODELO MATEMATICO Y LA IMPLEMENTACION

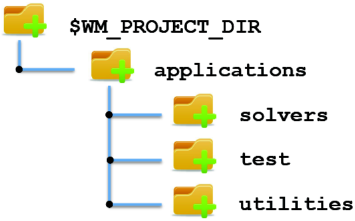
Qué es OpenFOAM®
Estructura básica

- El diseño apunta hacia la re-utilización del código
- OpenFOAM®está ensamblado a partir de componentes:
  - Librerías fundamentales conteniendo vectores, tensores, álgebra de campos, manipuleo de mallas, esquemas de discretización, aplicación de boundary conditions, solvers lineales, etc.
  - Libreria de modelos físicos: thermo-physical models (liquids and gases), viscosity models, chemical reactions interface.
  - Utilidades: importar mallas, manipulear mallas, procesamiento en paralelo, post-processing y manipuleo de resultados.
  - Solvers escritos de forma tal de garantizar optimización y eficiencia.
  - Reducida cantidad de lineas de código de forma de darle legilibilildad apuntando al trabajo corporativo.
- Posibilidad de vincularlo con extensiones planteadas por los usuarios por fuera y un análisis al vuelo de datos.
- Model-to-Model interaction a través de interfaces comunes.

Contenidos

Qué es OpenFOAM®
Estructura de directorios para desarrollo





Qué es OpenFOAM®
Estructura de directorios para desarrollo

- finiteVolume. Esta libreria provee todas las clases necesarias para la discretización en FVM, such as the fvMesh class, finite volume discretization operadores como (divergence, laplacian, gradient, fvc/fvm y otros), y las boundary conditions (fields/fvPatchFields). En el subdirectorio *lnInclude* se encuentra el archivo *fvCFD.H*, muy incluido en varias aplicaciones.
- OpenFOAM. Esta librería incluye definiciones de los contenedores usados por las operaciones, las definiciones de los campos, la declaración de la malla y sus *zones and sets.*
- turbulenceModels, contiene los modelos de turbulencia.

Qué es OpenFOAM®
Estructura de directorios para desarrollo

- visite todas las restantes subcarpetas que cuelgan del directorio, como la bin, doc, etc, y especialmente la de tutoriales como luego veremos.
- El directorio *doc* contiene la documentación de OpenFOAM®,
  - user guide, $WM_PROJECT_DIR/doc/Guides-a4/UserGuide.pdf
  - programmer's guide $WM_PROJECT_DIR/doc/Guides-a4/ProgrammersGuide.pdf
  - Doxygen en html format. firefox file:// $WM_PROJECT_DIR/doc/Doxygen/html/index.html
    - ★ para obtener el documento Doxygen compile tipenado *Allwmake doc* en el directorio $WM_PROJECT_DIR.
    - ★ o acceda al Doxygen desde internet. `http://www.openfoam.org/docs/cpp/`

Contenidos

Dónde encontrar los solvers y las utilidades ?

In $FOAM_SOLVERS (usar el alias *sol* para ir a ese directorio)

- `basic`
- `combustion`
- `compressible`
- `discreteMethods`
- `DNS`
- `electromagnetics`
- `financial`
- `heatTransfer`
- `incompressible`
- `lagrangian`
- `multiphase`
- `stressAnalysis`

Solvers básicos

El subdirectorio *basic* contiene los siguientes solvers:

- laplacianFoam,
  - editar el archivo >> *gedit basic/laplacianFoam/laplacianFoam.C*
  - Description: Solves a simple Laplace equation, e.g. for thermal diffusion in a solid.
- potentialFoam
  - editar el archivo >> *gedit basic/potentialFoam/potentialFoam.C*
  - Description: Simple potential flow solver which can be used to generate starting fields for full Navier-Stokes codes.
- scalarTransportFoam
  - editar el archivo >> *gedit basic/scalarTransportFoam/scalarTransportFoam.C*
  - Description: Solves a transport equation for a passive scalar

Solvers para flujo de fluidos

El subdirectorio *incompressible* contiene varios solvers entre los cuales destacamos aquí a los siguiente:

- icoFoam,
  - editar el archivo >> *gedit incompressible/icoFoam/icoFoam.C:*
  - Description: Transient solver for incompressible, laminar flow of Newtonian fluids.
- simpleFoam
  - editar el archivo >> *gedit incompressible/simpleFoam/simpleFoam.C:*
  - Description: Steady-state solver for incompressible, turbulent flow.
- pimpleFoam
  - editar el archivo >> *gedit incompressible/pimpleFoam/pimpleFoam.C:*
  - Description: Large time-step transient solver for incompressible flow using PIMPLE (PISO+SIMPLE) algorithm.Sub-models include:
    - ⋆ turbulence modelling, i.e. laminar, RAS or LES
    - ⋆ run-time selectable finite volume options, e.g. MRF, explicit porosity

Utilidades

En $FOAM_UTILITIES (use el alias *util*) podrá encontrar el código fuente de las utilidades disponibles en la instalación de OpenFOAM®.

- mesh
- miscellaneous
- parallelProcessing
- postProcessing
- preProcessing
- surface
- thermophysical

Utilidades para MESH

A modo de ejemplo veamos que posibles utilidades asociadas con el manejo de mallas (mesh) tenemos:

- conversion
- advanced
- manipulation
- generation, con subdirectorios:
  - blockMesh
  - extrude
  - extrude2DMesh
  - foamyHexMesh
  - foamyQuadMesh
  - snappyHexMesh

Como siempre, tambien dentro de los subdirectorios que cuelgan de utilities encontrará archivos *.C que muestran el código fuente de la utilidad, asi como una breve descripción de su funcionalidad.
Por ejemplo para snappyHexMesh/snappyHexMesh.C:
Description: Automatic split hex mesher. Refines and snaps to surface.

Utilidades para POSTPROCESSING

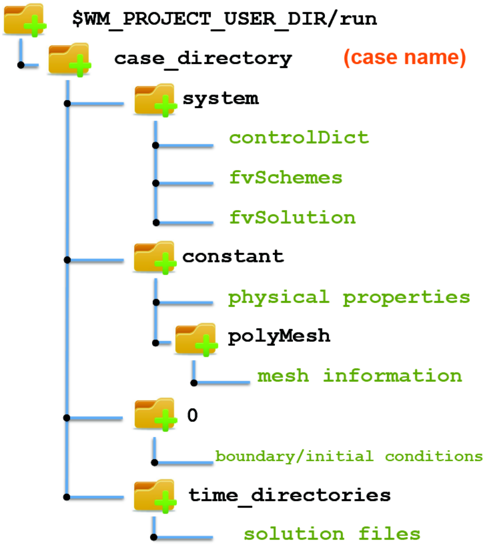
A modo de ejemplo veamos que posibles utilidades asociadas con el postproceso de campos, en este caso la velocidad, (postProcessing/velocityField) tenemos:

- Co
- enstrophy
- flowType
- Lambda2
- Mach
- Pe
- Q
- streamFunction
- uprime
- vorticity

Por ejemplo para Q/Q.C:
Calculates and writes the second invariant of the velocity gradient tensor.
$Q = 0.5 * [\mathrm{sqr}(\mathrm{tr}(\mathrm{grad}U)) - \mathrm{tr}((\mathrm{grad}U)\&(\mathrm{grad}U))][1/s^2]$

Contenidos

Como están organizadas las simulaciones



`case_directory`: path to the case, often located in `$WM_PROJECT_USER_DIR/run`

`system`: contains run-time control and solver numerics.

`constant`: contains physical properties and turbulence modeling properties and so on.

`constant/polyMesh`: contains the polyhedral mesh information.

`0`: contains boundary conditions and initial conditions.

`time_directories`: contains the solution and derived fields.

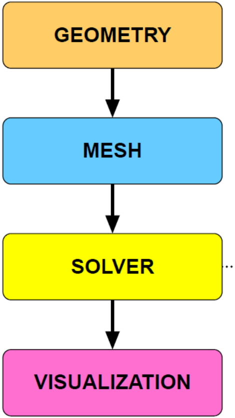
Fuerte Recomendación

REMEMBER

You always run the solvers and utilities in the the **top level** of the case directory (**the directory with the case name**).

Not in the directory `system`**, not in the directory** `constant`**, not in the directory** `0`**.**

Flujo de trabajo



- Geometry: a partir de un CAD, una STL, o de datos crudos procesables por algun mallador
- Mesh: a partir de
  - generador externo, ANSA, GID, GAMBITT, Tgrid, etc
  - generador como utilidad de OpenFOAM®, blockMesh, snappyHexMesh, otros
- Solver: seleccionable entre los posibles o adaptado a nuestras necesidades
- Visualization: postproceso seleccionado de las utilidades de OpenFOAM® + paraview

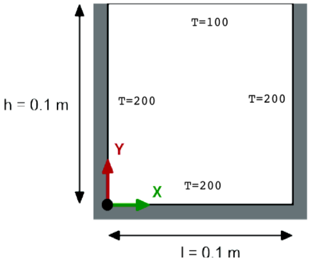
Para comenzar tomamos

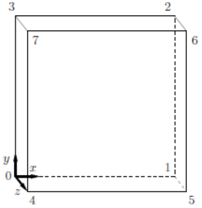
- Geometry & Mesh : blockMesh & utilities
- Solver : laplacianFoam, potentialFoam, scalarTransportFoam
- Visualization : utilities & paraFoam & paraview

Contenidos

Ejemplo 1: Conducción del calor en una cavidad

Creamos ./run/scalarTransport/cavity






```
    format      ascii;
    class       dictionary;
    object      blockMeshDict;
}
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * *

convertToMeters 0.1;

vertices
(
    (0 0 0)
    (1 0 0)
    (1 1 0)
    (0 1 0)
    (0 0 0.1)
    (1 0 0.1)
    (1 1 0.1)
    (0 1 0.1)
);

blocks
(
    hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (20 20 1) simpleGrading (1 1 1)
);

edges
(
);

boundary
(
    movingWall
    {
        type wall;
        faces
        (
            (3 7 6 2)
        );
    }
    fixedWalls
    {
        type wall;
        faces
        (
            (0 4 7 3)
            (2 6 5 1)
            (1 5 4 0)
        );
    }
    frontAndBack
    {
        type empty;
        faces
        (
```

Ejemplo 1: Conducción del calor en una cavidad

- Mesh en ./constant/polyMesh/blockMeshDict
- Propiedades físicas en ./constant/transportProperties
- Esquemas de discretización empleados en ./system/fvSchemes
- Selección de solvers para sistemas lineales en ./system/fvSolution
- Selección de parámetros de control en ./system/controlDict

Ejemplo 1: Conducción del calor en una cavidad

Típico archivo con condiciones de contorno e iniciales (ver ./0/T)

```
/*---------------------------------*- C++ -*----------------------------------*\
| =========                 |                                                 |
| \\      /  F ield         | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox           |
|  \\    /   O peration     | Version:  2.3.1                                 |
|   \\  /    A nd           | Web:      www.OpenFOAM.org                      |
|    \\/     M anipulation  |                                                 |
\*---------------------------------------------------------------------------*/
FoamFile
{
    version     2.0;
    format      ascii;
    class       volScalarField;
    object      T;
}
// * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * * //

dimensions      [0 0 0 1 0 0 0];

internalField   uniform 0;

boundaryField
{
    movingWall
    {
        type            fixedValue;
        value           100
    }

    fixedWalls
    {
        type            fixedValue;
        value           200
    }

    frontAndBack
    {
        type            empty;
    }
}

// ************************************************************************* //
```

Tabla de dimensiones

No.	Property	SI unit		USCS unit
1	Mass	kilogram (kg)		pound-mass (lbm)
2	Length	metre (m)		foot (ft)
3	Time	— — — —	second (s)	— — — —
4	Temperature	Kelvin (K)		degree Rankine (°R)
5	Quantity	kilogram-mole (kgmol)		pound-mole (lbmol)
6	Current	— — — —	ampere (A)	— — — —
7	Luminous intensity	— — — —	candela (cd)	— — — —

Table 4.2: Base units for SI and USCS

El campo de velocidades por el momento puesto fijo en $\mathbf{v} = 0$ (ver archivo en ./0/U)

Ejemplo 1: Running

- foamCleanTutorials :If you want to erase the mesh and the solution in the current case folder, you can type in the terminal
- foamClearPolyMesh : If you are looking to only erase the mesh, you can type in the terminal,
- foamListTimes -noZero | xargs rm -rf : If you are only interested in erasing the saved solutions, in the terminal typ

Secuencia de comandos

- blockMesh : Genera la geometría y la malla
- checkMesh : controla la calidad de la malla, verificamos ortogonalidad, skewness, aspect ratio entre otras cosas
- scalarTransportFoam > run.log : aplicamos el solver y redireccionamos la salida a un archivo
- pyFoamPlotRunner.py [options] <foamApplication> (use -help para ver opciones)
- paraFoam : visualizamos los resultados

Ejemplo 1: Running

Controlando y refinando la solución

- controlDict : Archivo que permite controlar la corrida.
- runTimeModifiable : permite cambiar algunos parámetros en tiempos de corrida (run time)
- stopAt writeNow : permite parar la corrida en cualquier momento y grabar el estado actual o no grabar con stopAt noWriteNow
- banana : permite averiguar las distintas opciones que hay para un dado comando o variable del diccionario
- Modificando el blockMeshDict : para usar un degradee en la malla (cavityGrade)

Ejemplo 1: fvOptions (sources)

OpenFOAM® agrega términos fuentes a los modelos a través de una clase llamada fvOptions(). Buscar entre tutoriales archivo de nombre *fvOptions* en directorio *system* e incluir:

```
energySource1
{
    type            scalarSemiImplicitSource;
    active          true;
    timeStart       0.2;
    duration        2.0;
    selectionMode   points;
    points
    (
        (2.75 0.5 0)
    );

    scalarSemiImplicitSourceCoeffs
    {
        volumeMode      absolute;
        injectionRateSuSp
        {
            h           (10 0);
        }
    }
}
```

- *selectionMode cellZone* eld *points*
- *cellZone filter* eld *points*
- ver `http://www.cfd-online.com/Forums/openfoam-solving/119794-doubt-scalartransportfoam.html`
- `https://github.com/OpenFOAM/OpenFOAM-2.2.x/blob/a9d0f048e1a387af342531d50c79a2d11tutorials/lagrangian/reactingParcelFoam/filter/system/fvOptions`
- `http://www.openfoam.org/version2.2.0/fvOptions.php`

Contenidos

TP Nro 1 - Manipuleo de datos geometricos para Método de Volúmenes Finitos

Consigna:
Dada una malla en formato nodos (xnod) y conectividades (icone) en 3D (hexas y tetras al menos)
Generar:
un código que calcule los arreglos de OpenFOAM®

- faces
- points
- owner
- neighbor

y las propiedades geometricas

- volumen de celda
- vector area normal
- centroide de celda
- centroide de cara

TP Nro 2 -
Ej 1 : Difusión con fuente en 1D

- Usando Octave genere un codigo que resuelva el problema:

$$
\begin{aligned}
&\int_{\Omega_j} Q^{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \Gamma^{\phi} \nabla\phi \cdot d\Gamma_j = 0 \\
&Q_C^{\phi} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{\text{f}=li,ld} \big(\underbrace{(\Gamma_f^{\phi} \nabla\phi}_{\mathbf{J}_f^{\phi}=\mathbf{J}_f^{D,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f)}_{\pm S\mathbf{i}} = 0 \\
&Q_C^{\phi}\ S\ h + \Gamma_{ld}^{\phi} \frac{\phi_E - \phi_C}{h} S - \Gamma_{li}^{\phi} \frac{\phi_C - \phi_W}{h} S = 0
\end{aligned}
\tag{47}
$$

- Una forma sencilla seria generar un vector por celda con:
  - las fuentes Q_C^{ϕ}
  - los tamaños de las celdas h
  - las conductividades $\Gamma_C^{\phi} \rightarrow \Gamma_f^{\phi} = \Gamma_C^{\phi} \times (1 - g_f) + \Gamma_E^{\phi} \times g_f$
  - $g_f = \frac{d_{Cf}}{d_{Cf} + d_{fE}}$

TP - Ej 1: Difusión con fuente en 1D

- Loop sobre todas las celdas for cell=1:Ncell
  - calcular las contribuciones sobre las caras for face=1:Nface
    - ★ si la cara es interior

$$\text{Eq}_C \mathrel{+}= \Gamma_f^\phi \frac{\phi_F - \phi_C}{d_{Cf} + d_{fF}} S \tag{48}$$

    - ★ si la cara es de contorno Dirichlet $\phi_b = \phi_{b,specified}$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = (\Gamma^\phi \nabla \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b \approx \Gamma_b^\phi \frac{(\phi_{b,specified} - \phi_C)}{|\mathbf{d}_{Cb} \cdot \mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b|^2 \\ \text{Eq}_C \mathrel{+}= \Gamma_b^\phi \frac{(\phi_{b,specified} - \phi_C)}{d_{Cb}} \end{aligned} \tag{49}$$

    - ★ si la cara es de contorno Neumann $(\Gamma \nabla \phi)_b \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} = q_{b,specified}$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = \mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b| = q_{b,specified} |\mathbf{S}_b| \\ \text{Eq}_C \mathrel{+}= q_{b,specified} \end{aligned} \tag{50}$$

TP - Ej 1: Difusión con fuente en 1D

- - ★ si la cara es de contorno mixtas $(\Gamma\nabla\phi)_b \cdot \mathbf{S}_b + h_\infty(\phi_b - \phi_\infty)$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b &= -(\Gamma\nabla\phi)_b \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} = h_\infty(\phi_b - \phi_\infty) \\ \mathrm{Eq}_C \mathrel{+}= & \; -\left[\frac{h_\infty(\Gamma_b^\phi/d_{Cb})}{h_\infty + (\Gamma_b^\phi/d_{Cb})}|\mathbf{S}_b|\right](\phi_\infty - \phi_C) \end{aligned} \tag{51}$$

  - calcular las contribuciones de la fuente sobre el volumen

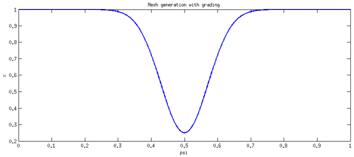
$$\mathrm{Eq}_C \mathrel{+}= \; Q_C^\phi \; S \; h \tag{52}$$

  - ensamblar la ecuación en el sistema global
- Resolver el sistema de ecuaciones
- Visualizar la solución
- Calcular los flujos de calor por celda.

TP - Ej 1: Difusión con fuente en 1D

- $0 \leq x \leq L$
- Caso 1: $L = 1$, $\Gamma_C^{\phi} = 1$ $\phi(x = 0) = 0$ $\phi(x = 1) = 1$ $Q_C^{\phi} = 10$
  - Resolver para $h = 0.2, 0.1, 0.05, 0.025$
- Caso 2: idem Caso 1 pero con $\Gamma_C^{\phi} \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}(x = 1) = 1$
- Caso 3: Resolver el caso 1 con:
  - Malla: $\xi = (0 : 0.001 : 1)$; $h = 1 - 0.75 e^{-\frac{(\xi - 0.5).^2}{0.01}}$
  - 100 celdas en total
  - Fuente:

$$Q_C^{\phi} = \begin{cases} 10 & 0.25 \leq x \leq 0.75 \\ 0 & \text{fuera} \end{cases} \tag{53}$$



TP - Ej 1: Difusión con fuente en 1D

- Caso 4:
  - Agregamos a la ecuación original un término fuente proporcional a la temperatura.
  - ese termino genera una contribución al volumen del tipo $c\phi_C|\Omega_C|$
  - resuelva un caso como el 1 con $Q_C^{\phi} = 0.1$ y $c = 10$
- Caso 5: Resolver el caso 1 con una condición mixta en $x = 1$ usando $h_\infty = 10$ y $\phi_\infty = 2$

TP Nro 2 -
Ej 2 : Adveccion-Difusión con fuente en 1D transiente

- Usando Octave genere un codigo que resuelva el problema:

$$\int_{\Omega_j} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \rho\phi \mathbf{v} \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} c\phi d\Omega = \int_{\Gamma_j} \Gamma^{\phi} \nabla \phi \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} Q^{\phi} d\Omega$$

$$\rho \frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^{n}}{\Delta t} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{\text{f}=li,ld} (\underbrace{(\rho \mathbf{v} \phi)_f^{n+\theta}}_{\mathbf{J}_f^{C,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f)}_{\pm S\mathbf{i}} + c\phi_C^{n+\theta} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} =$$

$$\sum_{\text{f}=li,ld} (\underbrace{(\Gamma^{\phi} \nabla \phi)_f^{n+\theta}}_{\mathbf{J}_f^{D,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f)}_{\pm S\mathbf{i}} + Q_C^{\phi} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh}$$

$$\rho \frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^{n}}{\Delta t} \; h + c\phi_C^{n+\theta} \; h + \rho v (\phi_{ld}^{n+\theta} - \phi_{li}^{n+\theta}) =$$

$$\Gamma_{ld}^{\phi} \frac{\phi_E^{n+\theta} - \phi_C^{n+\theta}}{h} - \Gamma_{li}^{\phi} \frac{\phi_C^{n+\theta} - \phi_W^{n+\theta}}{h} + Q_C^{\phi} \; h$$

(54)

TP Nro 2 -
Ej 2 : Adveccion-Difusión con fuente en 1D transiente

- Esquema de discretización temporal, método θ
  $\phi^{n+\theta} = \theta\phi^{n+1} + (1-\theta)\phi^n$
- Esquema de discretización para la divergencia, aproximación de ϕ_f
  - CD : $\phi_f = g_f\phi_C + (1-g_f)\phi_F$
  - UD : $\phi_f = \max(v,0)\phi_C + max(-v,0)\phi_N$
  - γ method : $\phi_f = \gamma(\phi_f)_{UD} + (1-\gamma)(\phi_f)_{CD}$

TP Nro 2 - Ej 2 : Adveccion-Difusión con fuente en 1D transiente

- Caso 1) Resolver en estado estacionario en un dominio 1D dado por $0 \leq x \leq L$ con $L = 1$, para $\Gamma^\phi = 1$, $v = 1$, $c = 0$, $\rho = 1$, $\phi(x = 0) = 0$ $\phi(x = 1) = 1$ $Q^\phi = 0$, lo siguiente:
  - calcular la solución analítica
  - la solución numérica con UD y CD para una malla de 5,10 y 20 celdas uniformes
  - grafique el error en función de h y concluya acerca del orden de precisión de cada aproximación
- Caso 2) Resolver el mismo problema anterior pero ahora con $\Gamma^\phi = 0.1$ y luego con $\Gamma^\phi = 0.01$

TP Nro 2 -
Ej 2 : Adveccion-Difusión con fuente en 1D transiente

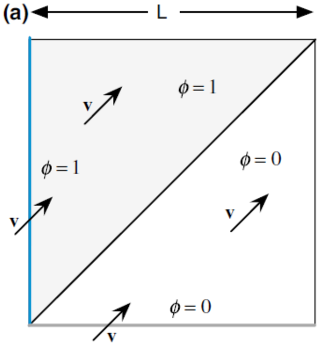
- Caso 3) Resolver con UD un problema no estacionario con los mismos datos anteriores (Caso 1) salvo $\Gamma^{\phi} = 0.01$ y una condición inicial como $\phi(x, t = 0) = 1$ durante 1 segundo. Grafique la evolución de la solución usando una malla de 20 celdas.
  - usando un método explícito, con un paso de tiempo que lo haga estable
  - usando un método implícito, con un paso de tiempo tal que el Courant sea el mismo que en el caso explícito y luego con un paso del doble del anterior.
  - usando un método semi-implícito con un paso de tiempo tal que el Courant sea el mismo que en el caso explícito y luego con un paso del doble del anterior.

TP Nro 3 - Ej 1 : Difusión con fuente en 1D estacionaria OpenFOAM®

- **(a)** Genere una malla en OpenFOAM®simil 1D en el intervalo $0 \leq x \leq L$ con $L = 1$, con un tamaño de malla uniforme y resuelva el problema del caso 2) del TP Nro 2 usando el solver *scalarTransportFoam* con CD y UD. Verifique el orden del error.
- **(b)** refine la malla usando la funcionalidad denominada *grading* de blockMesh para hacer que la malla se refine hacia el extremo $x = L$. Resuelva nuevamente usando UD y CD y verifique el orden del error.

TP Nro 3 -
Ej 2 : Adveccion-Difusión en 2D transiente con OpenFOAM®con velocidad constante

- Genere un dominio cuadrado alineado con los ejes como el que se muestra en la figura. Genere una malla de $N \times N$ con N variable igual a $10, 20, 40$ usando blockMesh. Utilice una velocidad $\mathbf{v} = [1, 1]$ y una difusion $\Gamma^{\phi} = 0.01$ y una longitud $L = 1$



- Resuelva usando *scalarTransportFoam* y grafique:
  - un corte de la solución en $x = L/2$
  - un corte de la solución en $y = L$
  - un snapshot con la función ϕ en todo el dominio.
  - distintas isotermas

TP Nro 3 - Ej 3 : Adveccion-Difusión en 2D transiente con OpenFOAM®con velocidad variable en el espacio

- **(a)** Resuelva el tutorial de la cavidad cuadrada con icoFoam denominado *cavity*. Modifique la viscosidad de forma de que el número de Reynolds ($Re = \frac{|\mathbf{v}|L}{\nu}$) sea 400, donde $\nu = \mu/\rho$ es la viscosidad cinemática, $\mathbf{v}$ es la velocidad impuesta en la tapa superior de la cavidad y L es la longitud del lado del cuadrado. Obtenga un campo de velocidades una vez que la solucion se encuentra convergida.
- **(b)** arme un caso para la misma cavidad que resuelva el transporte de la temperatura usando ese campo de velocidad recién hallado. Considere que las paredes laterales tienen temperaturas impuestas igual a $T = 100C$ (left) y $T = 200C$ (right). La pared del fondo es adiabática y en la superior se inyecta un flujo igual a $q = 100W/m2$ siendo que la conductividad térmica $\Gamma = 1W/m/C$