

Chapter 1

Método de los volúmenes finitos

1.1 Planificación

UNIDAD TEMÁTICA VIII: Método de volúmenes finitos. Planteo teórico. Esquemas centrados en los vértices y centrado en las celdas. Implementación numérica a problemas escalares en una y varias dimensiones. Extensión al caso de campos vectoriales.

1.2 Bibliografía y material a emplear

- NOTAS DEL CURSO CAPITULO 7 (<http://www.cimec.org.ar/cursos>)
- Marquez Damian, S. *An Extended Mixture Model for the Simultaneous Treatment of Short and Long Scale Interfaces*, Ph.D Thesis, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, 2013.
- Jasak, H. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*, Ph.D Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 1996.
- LIBROS :
 - Versteeg, H.K.; Malalasekera, W. *An introduction to Computational Fluid Dynamics*, 1st. edition.
 - Ferziger, J.H.; Peric, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 1995
 - Hirsch, C. *Numerical Computation of internal and external flows*, 1991.
 - Leveque, R. *Finite Volume Methods For Hyperbolic Problems*,
- SOFTWARE
 - rutinas en Octave
 - OpenFOAM

1.3 PLANTEO TEORICO

1.3.1 Planteamiento del problema

Sea $\phi(x, y, z)$ 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

$$\underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega}_{temporal} + \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{f}^{adv} d\Omega}_{convectivo} + \underbrace{\int_{\Omega} c\phi d\Omega}_{reactivo} = \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{f}^{dif} d\Omega}_{difusivo} + \underbrace{\int_{\Omega} q d\Omega}_{fuente}. \quad (1.1)$$

- 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

A modo de ejemplo, discutir en clase el mecanismo de enfriamiento de un microprocesador de una PC.

- Que sucede si se descompone el ventilador que lo refrigera?
- Que término de los anteriores representa el ventilador ?
- Cual es físicamente la fuente ?
- Explique cual es el mecanismo de difusión ?

COMO SURGE EL METODO DE LOS VOLUMENES FINITOS ?

- planteamiento intuitivo

vision macroscopica global del problema

$$\underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega}_{\text{ACUMULACION}} = \underbrace{\int_{\Gamma} \vec{f}^{dif} \cdot d\vec{\Gamma} - \int_{\Gamma} \vec{f}^{adv} \cdot d\vec{\Gamma}}_{\text{FLUJOS POR LAS FRONTERAS}} - \underbrace{\int_{\Omega} c\phi d\Omega + \int_{\Omega} q d\Omega}_{\text{FUENTES}}$$

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \int_{\Gamma} \left(\vec{f}^{adv} - \vec{f}^{dif} \right) \cdot d\vec{\Gamma} = 0 \quad (1.2)$$

Todo lo que se acumula o se pierde de la cantidad intensiva ϕ descontado las fuentes o sumideros de esa cantidad presentes en el dominio de calculo debe estar en correspondencia con los flujos que atraviesan el contorno del dominio de calculo

discretización de las variables independientes - Generación de la malla - Celda o Volumen de Control (CV)

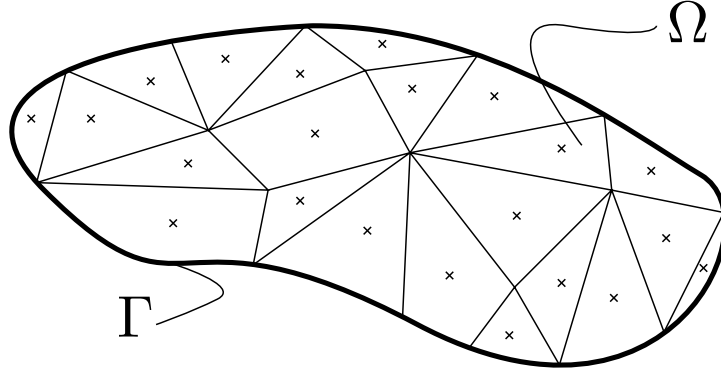


Figure 1.1: Dominio discretizado.

vision macroscopica local

el balance se satisface tanto para Ω como para una parte de Ω , en particular para Ω_j

Por lo tanto planteamos el mismo problema para la celda Ω_j

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \vec{f}^{adv} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega_j} c\phi d\Omega = \int_{\Gamma_j} \vec{f}^{dif} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega_j} q d\Omega. \quad (1.3)$$

del balance local al global

Recuperamos el balance global planteando la suma sobre todas las celdas asumiendo que $\Omega = \sum_{j=1}^m \Omega_j$

$$\sum_{j=1}^m \left[\int_{\Omega_j} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \vec{f}^{adv} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega_j} c\phi d\Omega = \int_{\Gamma_j} \vec{f}^{dif} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega_j} q d\Omega \right] \quad (1.4)$$

- mediante el método de los residuos ponderados

Por otro lado, si tomamos el metodo de los residuos ponderados

$$\int_{\Omega} w \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} w \nabla \cdot \vec{f}^{adv} d\Omega + \int_{\Omega} w c \phi d\Omega = \int_{\Omega} w \nabla \cdot \vec{f}^{dif} d\Omega + \int_{\Omega} w q d\Omega. \quad (1.5)$$

$$\sum_{j=1}^m \left[\int_{\Omega_j} w \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \int_{\Omega_j} w \left(\nabla \cdot \vec{f}^{adv} - \nabla \cdot \vec{f}^{dif} \right) d\Omega = 0 \right] \quad (1.6)$$

y usando como funcion de ponderacion una funcion caracteristica (colocación por subdominios), definida por:

$$\begin{aligned} w_j(\vec{x}) &= 1 & \vec{x} &\in \Omega_j \\ w_j(\vec{x}) &= 0 & \vec{x} &\notin \Omega_j \end{aligned} \quad (1.7)$$

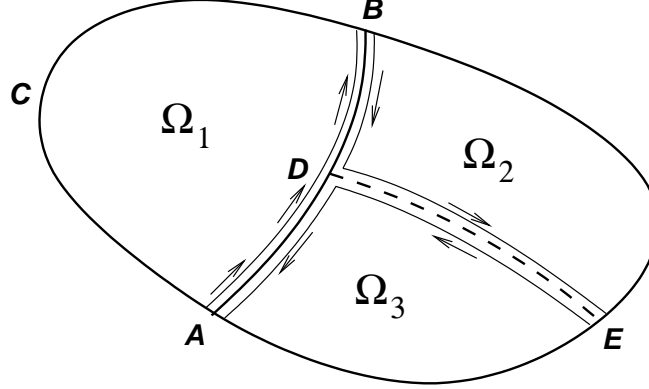
que aplicada a 1.6 nos da:

$$\int_{\Omega_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \int_{\Omega_j} \nabla \cdot \left(\vec{f}^{adv} - \vec{f}^{dif} \right) d\Omega = 0 \quad (1.8)$$

y en su versión original (aplicando el teorema de Gauss-Green) nos da:

$$\int_{\Omega_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \int_{\Gamma_j} \left(\vec{f}^{adv} - \vec{f}^{dif} \right) \cdot d\vec{\Gamma} = 0 \quad (1.9)$$

CONSERVATIVIDAD DEL ESQUEMA DISCRETO

Figure 1.2: Leyes de conservación para subdominios del dominio Ω

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega_1} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \oint_{ABCA} \vec{f} \cdot d\vec{\Gamma} &= 0 \\
 \int_{\Omega_2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \oint_{DEBD} \vec{f} \cdot d\vec{\Gamma} &= 0 \\
 \int_{\Omega_3} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \oint_{AEDA} \vec{f} \cdot d\vec{\Gamma} &= 0
 \end{aligned} \tag{1.10}$$

con $\vec{f} = \vec{f}^{adv} - \vec{f}^{dif}$, el flujo total y que sumados producen el mismo resultado que si lo hubiéramos aplicado a todo el dominio, es decir:

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega_1 + \Omega_2 + \Omega_3} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \oint_{ABCA + DEBD + AEDA} \vec{f} \cdot d\vec{\Gamma} &= 0 \\
 \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \oint_{\Gamma} \vec{f} \cdot d\vec{\Gamma} &= 0
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

Esto se explica ya que dos subdominios vecinos por una cara o arista comparten los términos de flujo, con la diferencia que debido a la orientación de la normal exterior a cada uno, los mismos se deben balancear, por ejemplo:

$$\int_{ED} \vec{f} \cdot d\vec{\Gamma} = - \int_{DE} \vec{f} \cdot d\vec{\Gamma} \tag{1.12}$$

Esta propiedad debe ser satisfecha si se requiere que el esquema sea *conservativo*, caso contrario pueden aparecer contribuciones internas produciendo esquemas no conservativos.

FORMAS DISCRETAS CONSERVATIVAS Y NO CONSERVATIVAS

Como para ilustrar la diferencia entre un esquema conservativo y otro que no lo es planteamos el caso de una ley de conservación en un dominio unidimensional que solo cuenta con un término de flujo convectivo y una fuente independiente de la incógnita,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = q \quad (1.13)$$

En la figura 1.3 se muestra la discretización espacial adoptada.

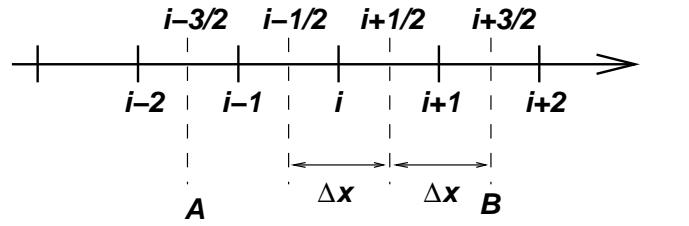


Figure 1.3: Grilla unidimensional

Si tomamos la ecuación correspondiente a la celda i , vemos los dos términos definidos en 1.11, primero el volumétrico que en 1D depende simplemente de la longitud de cada celda y el segundo término que es el de contorno que en 1D equivale a evaluar el integrando (los flujos) en ambos extremos del dominio.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial t} - q_i \right) \Delta x + f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}} &= 0 \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} &= q_i \end{aligned} \quad (1.14)$$

Si aplicamos (1.15) para los nodos $i+1$ e $i-1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_{i-1}}{\partial t} + \frac{f_{i-\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{3}{2}}}{\Delta x} &= q_{i-1} \\ \frac{\partial \phi_{i+1}}{\partial t} + \frac{f_{i+\frac{3}{2}} - f_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta x} &= q_{i+1} \end{aligned} \quad (1.15)$$

y sumamos, dividiendo por 3 debido a la cantidad de celdas que se sumaron, llegamos a:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{(\phi_i + \phi_{i+1} + \phi_{i-1})}{3} + \frac{f_{i+\frac{3}{2}} - f_{i-\frac{3}{2}}}{3\Delta x} = \frac{1}{3}(q_{i+1} + q_i + q_{i-1}) \quad (1.16)$$

lo cual representa cómo el valor promedio de la incógnita tomado en 3 celdas cambia en el tiempo de acuerdo al valor promedio de las fuentes o sumideros aplicados en ella y a los flujos que entran y salen de un dominio de cálculo que ahora reúne 3 celdas. Esto fue posible ya que los flujos en los contornos intermedios entre celdas se van cancelando por una propiedad denominada *telescópica*. Si repetimos el proceso involucrando mas celdas vecinas hasta llegar al contorno

recuperamos la ecuación de balance macroscópica global (1.2). Este esquema se dice ser *conservativo*.

Conclusión: El esquema es conservativo.

UN CASO NO CONSERVATIVO

Veamos un caso de un esquema *no conservativo*. Supongamos que el flujo $f = f(\phi)$ es una función de la propia incógnita como sucede en el caso del término convectivo de las ecuaciones de Navier-Stokes, entonces:

Supongamos que el flujo $f = f(\phi)$, de la siguiente forma:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right) \frac{\partial \phi}{\partial x} = a(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (1.17)$$

donde $a(\phi)$ es conocido como el jacobiano del flujo convectivo. Por análisis dimensional a es una velocidad denominado el jacobiano del flujo convectivo. La forma cuasilineal de la ecuación original es:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial x} = q \quad (1.18)$$

Mediante un análisis dimensional

$$\frac{[\phi]}{[T]} = [a] \frac{[\phi]}{[L]} \quad (1.19)$$

surge que a es una velocidad.

Aplicado a una versión simplificada de las ecuaciones de Navier-Stokes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a(u) \frac{\partial u}{\partial x} &= q \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} &= q \end{aligned} \quad (1.20)$$

Discretizando la (1.20)

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + a_i \frac{u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} &= q_i \\ a_i &= \frac{a_{i+\frac{1}{2}} + a_{i-\frac{1}{2}}}{2} \end{aligned} \quad (1.21)$$

Obteniendo similares expresiones para los nodos $i-1$ e $i+1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{i-1}}{\partial t} + a_{i-1} \frac{u_{i-\frac{1}{2}} - u_{i-3/2}}{\Delta x} &= q_{i-1} \\ a_{i-1} &= \frac{a_{i-\frac{1}{2}} + a_{i-3/2}}{2} \\ \frac{\partial u_{i+1}}{\partial t} + a_{i+1} \frac{u_{i+3/2} - u_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta x} &= q_{i+1} \\ a_{i+1} &= \frac{a_{i+3/2} + a_{i+\frac{1}{2}}}{2} \end{aligned} \quad (1.22)$$

y sumando llegamos a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \frac{(u_i + u_{i+1} + u_{i-1})}{3} + \frac{(a_{i+3/2} + a_{i-3/2})}{2} \frac{u_{i+3/2} - u_{i-3/2}}{3\Delta x} - \frac{1}{3}(q_{i+1} + q_i + q_{i-1}) = \\ - (a_{i+1/2} - a_{i-3/2}) \frac{u_{i+3/2} - u_{i-1/2}}{6\Delta x} + (a_{i+3/2} - a_{i-1/2}) \frac{u_{i+1/2} - u_{i-3/2}}{6\Delta x} \neq 0 \end{aligned} \quad (1.23)$$

Si hubiéramos discretizado (1.20) sobre un solo subdominio AB como se muestra en la figura en lugar de agregar las contribuciones de 3 subdominios equivalentes hubiéramos obtenido solo el miembro izquierdo de (1.23), con lo cual el miembro derecho equivale a una fuente interna numérica que no representa la física del problema. Haciendo un análisis numérico sobre el esquema no conservativo mediante expansión en series de Taylor se puede ver que la importancia de estas fuentes internas es similar al error de truncamiento con lo cual en principio parecería ser despreciable. No obstante, lo anterior no es válido en el caso de existir fuertes gradientes en la solución tal el caso de flujo transónico con ondas de choque, bastante citado en la bibliografía.

La expresión formal de una discretización conservativa a (1.13) puede escribirse como:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{f_{i+\frac{1}{2}}^* - f_{i-\frac{1}{2}}^*}{\Delta x} = q_i \quad (1.24)$$

donde f^* es llamado el *flujo numérico* y es una función de los valores de ϕ en los puntos vecinos,

$$f_{i+\frac{1}{2}}^* = f^*(\phi_{i+k}, \dots, \phi_{i-k+1}) \quad (1.25)$$

En el caso anterior si hubiéramos definido $f_{i\pm\frac{1}{2}}^* = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{\pm 1})^2$ el esquema hubiera sido conservativo.

La consistencia de (1.24) requiere que cuando la solución ϕ es constante el flujo numérico sea igual al del continuo,

$$f^*(\phi, \dots, \phi) = f(\phi) \quad (1.26)$$

Una consecuencia interesante de lo anterior la establece el siguiente teorema:

Teorema de Lax y Wendroff (1960) *Si la solución ϕ_i de (1.24) converge acotadamente en casi todo punto a alguna función $\phi(x, t)$ cuando $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$, luego $\phi(x, t)$ es una solución débil de (1.13).*

MALLAS ESTRUCTURADAS Y NO ESTRUCTURADAS, CONCEPTO DE POLIEDROS GENERALES

- discretización espacial o generación de mallas, produce vértices y elementos.
 - mallas estructuradas
 - mallas estructuradas por bloques
 - mallas no estructuradas
 - mallas híbridas
- discretización temporal, produce una partición del eje de tiempo en rodajas o *slabs*, como si fuera una dimensión mas pero no vinculadas con las coordenadas espaciales

Mallas estructuradas

- Ventajas:
 - son mallas de buena calidad
 - se puede controlar la ortogonalidad
 - tienen un patrón o estructura uniforme,
 - hay una transformación posible entre posición e índices topológicos
 - cada celda puede identificar facilmente a sus vecinas
- Desventajas:
 - propaga el refinamiento en forma no controlada
 - solo posible para geometrías muy simples

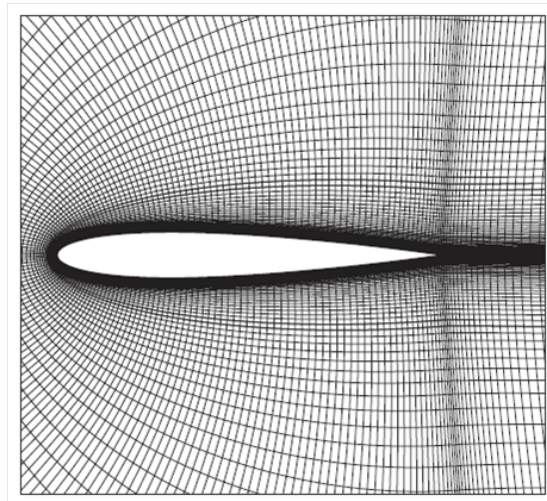


Figure 1.4: Ejemplo de malla estructurada. Perfil alar

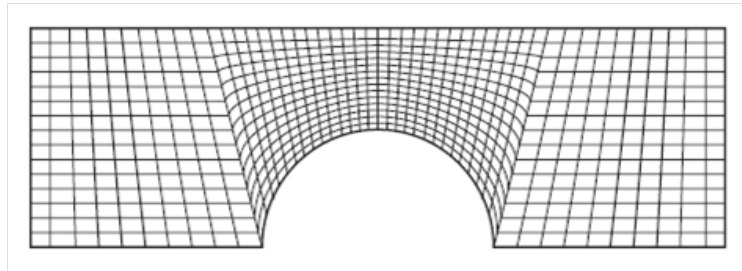


Figure 1.5: Ejemplo de malla estructurada. Un cilindro

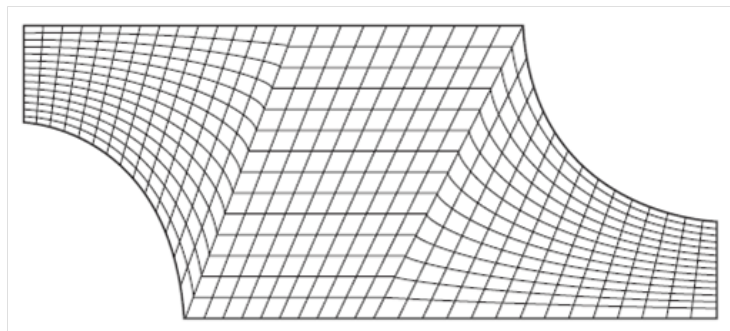


Figure 1.6: Ejemplo de malla estructurada. Zona entre 2 cilindros

MALLAS ESTRUCTURADAS POR BLOQUES

Similar al caso estructurado solo que permite hacer una partición gruesa en bloques que puede ser no estructurada dándole un poco mas de aplicabilidad. Aquí vemos su uso para KIVA III, un código para resolver flujo en el interior de cilindros de motores de combustion interna.

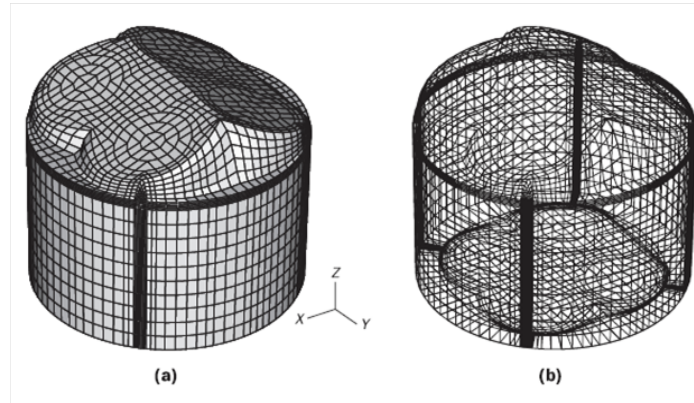


Figure 1.7: Ejemplo de malla estructurada por bloques. Cilindro de un motor de combustión interna

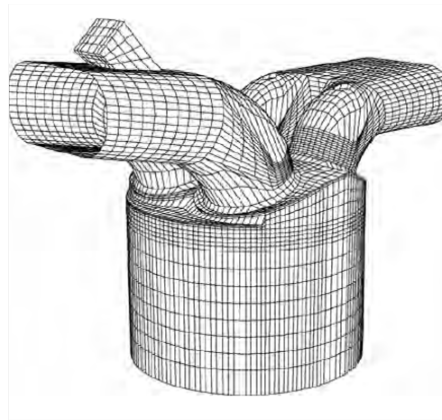


Figure 1.8: Ejemplo de malla estructurada por bloques. Cilindro de un motor de combustión interna

MALLAS NO ESTRUCTURADAS

Se pierde control sobre la calidad de la malla a expensas de robustez y aplicabilidad a situaciones complejas en 3D con una menor participación del usuario ahorrando muchas horas de trabajo necesarias muchas veces para generar mallas con algún grado de estructura.

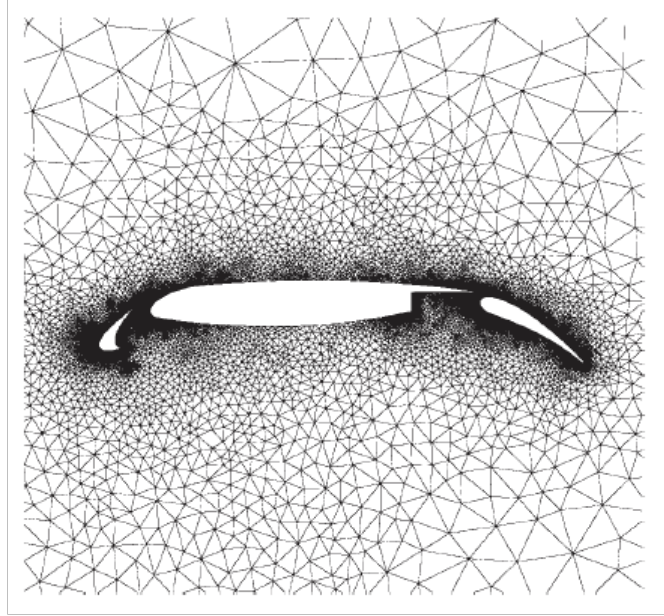


Figure 1.9: Ejemplo de malla no estructurada. Un perfil aeronáutico compuesto

MALLAS HÍBRIDAS

- una mezcla de mallas estructuradas con no estructuradas
- porción estructurada en las zonas donde la geometría lo permite y se requiere calidad
- el resto con mallas no estructuradas para facilitar la tarea de completar el mallado

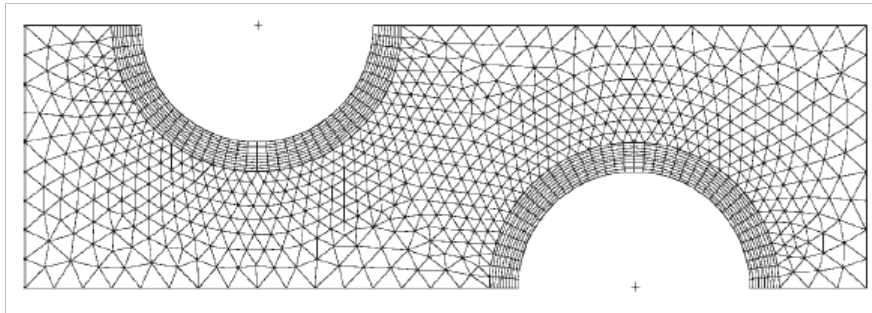


Figure 1.10: Ejemplo de malla híbrida. Un cilindro refinado cerca de su pared

Como se ve en la figura cerca del cuerpo sólido inmerso en el seno del fluido la malla es estructurada lo cual permite garantizar la ortogonalidad de la misma creando elementos con buena relación de aspecto y por tal motivo de mejor calidad (ortogonalidad y skewness).

- OpenFOAM incorpora la técnica *snappyHexMesh*, apta para situaciones complejas donde el objetivo es que la malla sea dominada por elementos hexaédricos (hexa-dominant) y solo en las cercanías del cuerpo se agreguen elementos de forma tal de poder ajustar la forma que posea la superficie del objetivo inmerso. De esta manera la malla tiene una calidad muy elevada salvo en las zonas cercanas al objeto donde el ajuste puede introducir elementos poliédricos con una calidad no garantizada. De todas formas aumentando el número de niveles de refinamiento es posible mejorar la calidad a expensas de un mayor costo. La estrategia *snappyHexMesh* lee como input un archivo en formato *STL* que contiene la información de la superficie del o de los objetos inmersos en el flujo. Luego para generar la malla de volumen procede a realizar 3 etapas:
 - **cascatlatt step:** consiste en dividir aquellas celdas cuyo centroide se halla fuera de la STL en forma recursiva tantas veces como el número de niveles de refinamiento indique el usuario. Esta etapa es similar a la técnica denominada *immersed boundary*.
 - **snap step :** consiste en terminar de definir aquellas celdas apoyadas sobre la STL en forma poliédrica.
 - **layer step:** agrega layers como un offset sobre los objetos con el fin de incluir una capa de elementos prismáticos de forma de garantizar cierta calidad en la zona cercana al objeto, zona que suele ser crítica al flujo.

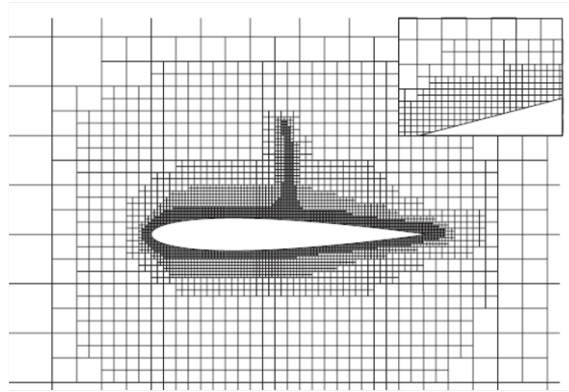


Figure 1.11: Ejemplo de malla híbrida. Perfil alar

En el caso de los volúmenes finitos podemos emplear cualquiera de estas formas de mallar. Siendo el caso no estructurado el mas general, a modo de simplificar el análisis presentaremos en una próxima sección la técnica en este caso.

1.3.2 MÉTODO CENTRADO EN LOS VÉRTICES O CENTRADO EN LAS CELDAS

Las grillas no estructuradas son la forma mas general de arreglo de grillas para tratar la mayoría de las geometrías complejas que suelen presentarse en la tarea profesional y científica. Aquí se presenta una breve introducción a las técnicas de discretización sobre grillas no estructuradas con celdas de forma completamente arbitraria (un poliedro general) , acotadas por un número arbitrario de superficies (un polígono general).

Hay dos formas de definir un volumen de control sobre mallas no estructuradas:

- (i) volúmenes de control centrados en las celdas (*cell-centred control volumes*) y
- (ii) volúmenes de control centrados en los vértices (*vertex-centred control volumes*)

Estas dos variantes son ilustradas en la figura 1.12 para un problema en 2D.

En el método centrado en las celdas los nodos (según esta nomenclatura los nodos se definen como los puntos donde se establece el vector solución del problema) se ubican en los centroides de los volúmenes de control, como se muestra en la parte (a) de la figura 1.12.

En el método centrado en los vértices los nodos o puntos de cálculo se establecen sobre los vértices de la grilla. En esta metodología una partición denominada *median-dual tessellation* se debe efectuar, donde se generan sub-volumenes uniendo los centroides de los elementos de la grilla con los puntos medios de las aristas de la grilla como se ilustra en la parte (b) de la figura 1.12

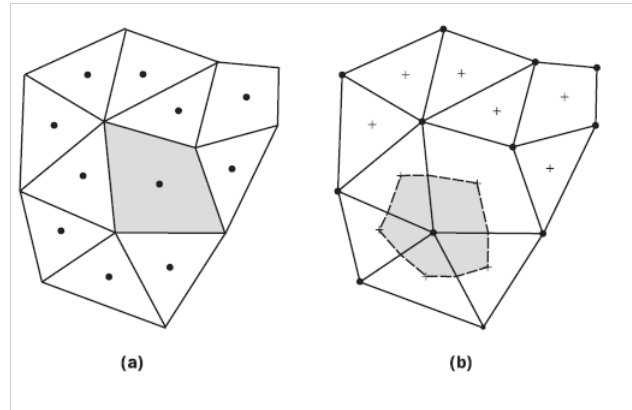


Figure 1.12: Construcción de volúmenes de control en 2D sobre mallas no estructuradas: (a) cell-centred control volumes; (b) vertex-based control volumes

Los sub-volumenes que rodean un nodo de cálculo forman el volumen de control para la discretización. Ambas metodologías, la cell-centred como la vertex-centred son frecuentemente empleadas en la práctica-

En lo que sigue nosotros nos concentraremos sobre las ideas de discretización sobre mallas no estructuradas en torno al metodo centrado en las celdas ya que es mas simple de entender, requiere un poco menos de almacenamiento que el método centrado en el vértice y fundamentalmente porque el software que emplearemos en la parte práctica, OpeFOAM, está basado en esta metodología.

DISCRETIZACIÓN ESPACIAL

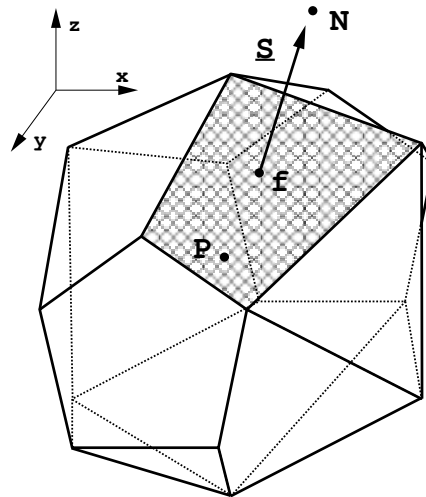


Figure 1.13: Control volume

Un volumen de control (del inglés Control Volume o CV) típico se muestra en la figura 1.13. El punto computacional P se ubica en el centroide del volumen de control

$$V_P \mathbf{x}_P = \int_{V_P} \mathbf{x} dV$$

de manera que agrupando el miembro derecho

$$0 = \int_{V_P} \mathbf{x} dV - \mathbf{x}_P \int_{V_P} dV$$

y debido a que \mathbf{x}_P es constante

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{V_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV \\ \int_{V_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV &= 0 \end{aligned} \tag{1.27}$$

El CV esta acotado por un conjunto de caras planas y cada cara es compartida con no más de un CV vecino. La topología del CV no es importante – es un poliedro general

Por lo tanto las características de un volumen de control (CV) son:

- su centroide en la celda P
- su vecino por una de sus caras N
- es un poliedro general
- sus caras son poligonales.
- Las caras se agrupan en :
 - **internas:** aquellas que son compartidas por 2 celdas
 - **de contorno:** aquellas que representan el contorno y solo tienen 1 celda
- A su vez las caras participan de dos listas denominadas:
 - **owner:** a cada cara le corresponde una celda que es la que define el sentido de la normal a la cara \mathbf{S}_f .
 - **neighbor:** a cada cara interna le corresponde una celda que es la vecina a la celda owner por la cara en cuestión. Solo para las caras interiores.
- El tamaño de la lista owner coincide con la cantidad total de caras en el dominio, mientras que el tamaño de la lista neighbor corresponde a la cantidad de caras interiores (sin contar las de contorno).
- normal apuntando hacia afuera de la cara owner
- Por el tipo polédrico que tienen las celdas hay mayor facilidad en la generación de la malla
- Al mismo tiempo mayor facilidad para el refinamiento del grilla.

DISCRETIZACIÓN DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE

La forma standard de la ecuación de transporte para una propiedad escalar, en general pasiva, ϕ es:

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}}_{\text{temporal derivative}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi)}_{\text{convection term}} - \underbrace{\nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi)}_{\text{diffusion term}} = \underbrace{S_\phi(\phi)}_{\text{source term}} \quad (1.28)$$

- acotación o *boundedness* tanto espacial como temporal (estabilidad)
- orden de precisión

Para obtener una precisión de segundo orden, esta variación debe ser lineal, tanto en el espacio como en el tiempo, *i.e.* se asume que:

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi_P + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla \phi)_P \quad (1.29)$$

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta t \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^t \quad (1.30)$$

donde

$$\phi_P = \phi(\mathbf{x}_P) \quad (1.31)$$

$$\phi^t = \phi(t) \quad (1.32)$$

Asumiendo variación lineal de las variables tanto en las coordenadas espaciales como temporales garantiza segundo orden, es decir $O(\Delta x^2, \Delta t^2)$

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho \phi dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV - \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_{V_P} (S_u + S_p \phi) dV \right) dt \quad (1.33) \end{aligned}$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho \phi dV - \int_{V_P} (S_u + S_p \phi) dV}_{(1)} + \underbrace{\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV - \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV}_{(2)} \right] dt = 0 \quad (1.34)$$

La discretización de la Eqn. (2.2) será a continuación examinada término a término.

DISCRETIZACION DE LOS TÉRMINOS ESPACIALES

- **Integrales del grupo (1)** Para las integrales de volúmen que dependen de ϕ pero no de ninguna derivada espacial $\nabla\phi$, se puede concluir que:

$$\begin{aligned}
 \int_{V_P} \phi(\mathbf{x}) dV &= \int_{V_P} [\phi_P + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla\phi)_P] dV \\
 &= \phi_P \int_{V_P} dV + \left[\int_{V_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV \right] \cdot (\nabla\phi)_P \\
 &= \phi_P V_P
 \end{aligned} \tag{1.35}$$

- **integrales del grupo (2)**

Algunas integrales de volúmenes se expresan como integrales de superficie via el teorema de Gauss y Stokes:

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \oint_{\partial V} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} \tag{1.36}$$

$$\int_V \nabla \phi dV = \oint_{\partial V} \phi d\mathbf{S} \tag{1.37}$$

$$\int_V \nabla \mathbf{a} dV = \oint_{\partial V} \mathbf{a} \otimes d\mathbf{S} \tag{1.38}$$

Entonces las integrales de superficie se expresan como sumas sobre caras:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \oint_{\partial V_P} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} = \sum_f \left(\int_f \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} \right) \tag{1.39}$$

Teniendo en cuenta que $\mathbf{a} = \mathbf{a}_f + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) : (\nabla \mathbf{a})_f$, entonces:

$$\begin{aligned}
 \int_f \mathbf{a} d\mathbf{S} &= \left(\int_f d\mathbf{S} \right) \cdot \mathbf{a}_f + \left[\int_f (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) d\mathbf{S} \right] : (\nabla \mathbf{a})_f = \mathbf{S} \cdot \mathbf{a}_f \\
 (\nabla \cdot \mathbf{a}) V_P &= \sum_f \mathbf{S} \cdot \mathbf{a}_f
 \end{aligned} \tag{1.40}$$

Por razones de eficiencia informática la suma sobre caras se realiza de la siguiente forma:

$$\sum_f \mathbf{S} \cdot \mathbf{a}_f = \sum_{\text{owner}} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{a}_f - \sum_{\text{neighbour}} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{a}_f \tag{1.41}$$

TERMINOS DE CONVECCION

$$\begin{aligned}
\int_{V_P} \nabla \cdot \left(\underbrace{\rho \mathbf{U} \phi}_{\mathbf{a}} \right) dV &= \sum_f \mathbf{S} \cdot \left(\underbrace{\rho \mathbf{U} \phi}_{\mathbf{a}} \right)_f \\
&= \sum_f \mathbf{S} \cdot (\rho \mathbf{U})_f \phi_f \\
&= \sum_f F \phi_f
\end{aligned} \tag{1.42}$$

donde F en Eqn. (1.42) representa el flujo de masa que atravieza una cara:

$$F = \mathbf{S} \cdot (\rho \mathbf{U})_f \tag{1.43}$$

- Cómo calcular el valor de ϕ_f a partir de los valores de ϕ_P y ϕ_N
- Propiedades físicas de la convección: acotación de ϕ . Preservación de las formas y de los valores extremos.

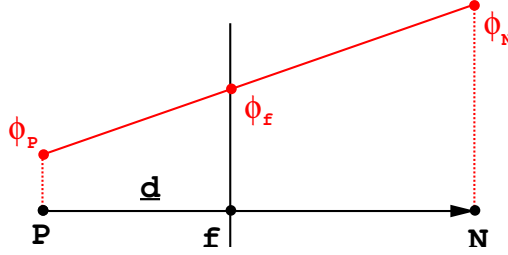


Figure 1.14: Face interpolation

ESQUEMA DE DIFERENCIACION DE LA CONVECCION Asumiendo una variación lineal de ϕ entre P y N , Fig. 1.14, el valor en la cara se calcula de acuerdo con:

$$\phi_f = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N \tag{1.44}$$

el factor de interpolación f_x se define como la relación de distancias \overline{fN} y \overline{PN} :

$$f_x = \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}} \tag{1.45}$$

- **Central Differencing (CD)**
- segundo orden
- no es acotado para el operador de convección

Un esquema de discretización alternativo que garantiza esta acotación es conocido como **Upwind Differencing** (UD). El valor de ϕ en las caras se determina de acuerdo con la dirección del flujo:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P & \text{for } F \geq 0 \\ \phi_N & \text{for } F < 0 \end{cases} \quad (1.46)$$

- **Upwind Differencing** (UD)
- primer orden
- es acotado para el operador de convección

Blended Differencing (BD) ([ver [5] ref. 109]) representa una propuesta de preservar ambas características, acotación y precisión en la solución. Es una combinación lineal de un esquema UD, Eqn. (1.44) con uno CD, Eqn. (1.44):

$$\phi_f = (1 - \gamma) (\phi_f)_{UD} + \gamma (\phi_f)_{CD} \quad (1.47)$$

o

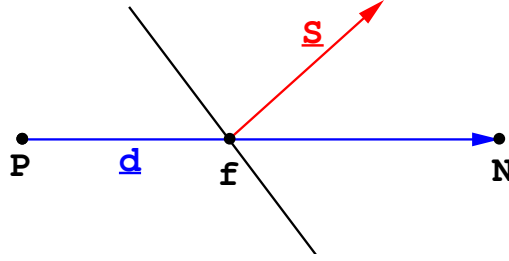
$$\begin{aligned} \phi_f = & [(1 - \gamma) \max(\operatorname{sgn}(F), 0) + \gamma f_x] \phi_P \\ & + [(1 - \gamma) \min(\operatorname{sgn}(F), 0) + \gamma (1 - f_x)] \phi_N \end{aligned} \quad (1.48)$$

El factor de blending γ , $0 \leq \gamma \leq 1$, determina cuanta difusión numérica será introducida.

TERMINO DE DIFUSION

El término de difusión será discretizado en una forma similar. Usando la hipótesis de variación lineal de ϕ y la Eqn. 1.40), tenemos:

$$\begin{aligned} \int_{V_P} \nabla \cdot \left(\underbrace{\rho \Gamma_\phi \nabla \phi}_{\mathbf{a}} \right) dV &= \sum_f \mathbf{S} \cdot \left(\underbrace{\rho \Gamma_\phi \nabla \phi}_{\mathbf{a}} \right)_f \\ &= \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f \end{aligned} \quad (1.49)$$

Figure 1.15: Vector \mathbf{d} and \mathbf{S} on a non-orthogonal mesh

Si la malla es ortogonal, i.e. los vectores \mathbf{d} y \mathbf{S} en la Fig. 1.15 son paralelos, es posible usar la siguiente expresión:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = |\mathbf{S}| \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (1.50)$$

Usando la Eqn. (1.50), el gradiente de ϕ en la cara se puede calcular a partir de los dos valores alrededor de la cara. Una alternativa sería calcular el gradiente pero centrado en la celda para las dos celdas que comparten la cara como¹:

$$(\nabla \phi)_P = \frac{1}{V_P} \sum_f \mathbf{S} \phi_f \quad (1.51)$$

interpolandolo sobre la cara:

$$(\nabla \phi)_f = f_x (\nabla \phi)_P + (1 - f_x) (\nabla \phi)_N \quad (1.52)$$

y luego multiplicandolo escalarmente con \mathbf{S} para ser aplicado en 1.49

¹Por el teorema de Gauss

$$\begin{aligned} \int_{V_P} \nabla \phi dV &= \oint_{\partial V} \phi d\mathbf{S} \\ \nabla \phi V_P &= \sum_f \mathbf{S} \phi \\ \nabla \phi &= \frac{1}{V_P} \sum_f \mathbf{S} \phi \end{aligned}$$

- ambos métodos son de segundo orden, aunque el primero es ligeramente mas preciso
- el segundo requiere involucrar mayor número de celdas haciendo crecer el stencil o molécula computacional
- al primero así como está definido no puede emplearse en mallas no ortogonales

Desafortunadamente la ortogonalidad de la malla es mas una excepción que una regla. Para poder aprovechar la mayor precisión de Eqn. (1.50), el producto $\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f$ se lo divide en dos partes:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = \underbrace{\Delta \cdot (\nabla \phi)_f}_{\text{orthogonal contribution}} + \underbrace{\mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f}_{\text{non-orthogonal correction}} \quad (1.53)$$

Los dos vectores introducidos en Eqn. (1.53), Δ and \mathbf{k} , satisfacen la siguiente condición:

$$\mathbf{S} = \Delta + \mathbf{k} \quad (1.54)$$

El vector Δ se elije paralelo con \mathbf{d} . Esto nos permite usar Eqn. (1.50) sobre la contribución orthogonal, limitando el método en cuanto a su menor precisión solo a la parte no orthogonal que no puede ser tratada de otra forma.

Existen muchas posibles descomposiciones, aqui examinamos las siguientes tres de ellas:

- **Minimum correction approach.** La descomposición de \mathbf{S} , Fig. 1.16, se hace de forma tal de mantener la corrección no orthogonal en Eqn. (1.53) tan pequeña como sea posible, haciendo que Δ y \mathbf{k} sean ortogonales:

$$\Delta = \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}} \mathbf{d} \quad (1.55)$$

con \mathbf{k} calculado a partir de Eqn. (1.54). A medida que la no ortogonalidad crece, la contribución desde ϕ_P y ϕ_N decrece.

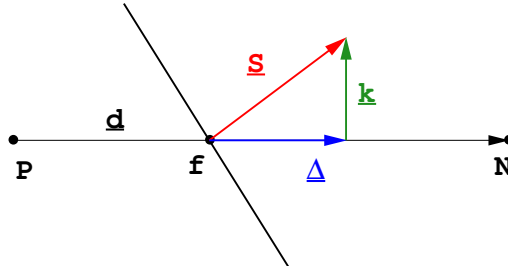


Figure 1.16: Non-orthogonality treatment in the 'minimum correction' approach

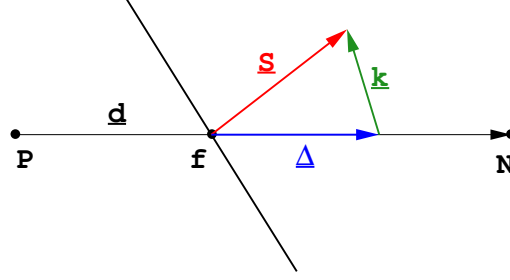


Figure 1.17: Non-orthogonality treatment in the 'orthogonal correction' approach

- **Orthogonal correction approach.** (Fig. 1.17) Esta aproximación mantiene la misma contribución de ϕ_P y ϕ_N que aquella de la parte ortogonal independientemente de la no ortogonalidad.

$$\Delta = \frac{d}{|d|} |S| \quad (1.56)$$

- **Over-relaxed approach** (Fig 1.18). En esta aproximación la importancia del término en ϕ_P y ϕ_N aumenta con el incremento de la no ortogonalidad:

$$\Delta = \frac{d}{d \cdot S} |S|^2 \quad (1.57)$$

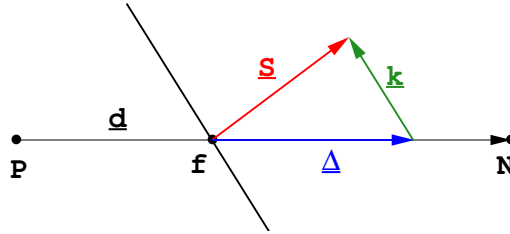


Figure 1.18: Non-orthogonality treatment in the 'over-relaxed' approach

- El término difusivo exhibe un comportamiento acotado.
- La corrección no ortogonal compromete potencialmente la acotación.
- la *Over-relaxed approach* es la que exhibe las mejores propiedades de estabilidad y precisión.

Finalmente resumiendo tenemos:

$$\Delta \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \frac{\phi_N - \phi_P}{|d|} \quad (1.58)$$

$$S \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \frac{\phi_N - \phi_P}{|d|} + k \cdot (\nabla \phi)_f \quad (1.59)$$

TÉRMINOS FUENTES

Version linealizada:

$$S_\phi(\phi) = Su + Sp\phi \quad (1.60)$$

donde Su es la parte constante de la fuente y Sp es la parte que depende linealmente de ϕ . Siguiendo Eqn. (3.12), la integral de volumen se calcula como:

$$\int_{V_P} S_\phi(\phi) dV = Su V_P + Sp V_P \phi_P \quad (1.61)$$

La importancia de la linealización se vuelve clara en cálculos implícitos. Es aconsejable tratar el término fuente de la forma mas implícita posible. Esto será posteriormente explicado cuando abordemos las estrategias de solución de la técnica ??.

DISCRETIZACION TEMPORAL

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho \phi dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV - \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_{V_P} S_\phi(\phi) dV \right) dt \end{aligned}$$

Usando Eqs. (1.42, 1.59 y 1.61), y asumiendo que los volúmenes de control no cambian en el tiempo, la Eqn. (2.2) puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right)_P V_P + \sum_f F \phi_f - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} (Su V_P + Sp V_P \phi_P) dt \quad (1.62) \end{aligned}$$

La expresión anterior es normalmente llamada la forma 'semi-discretizada' de la ecuación de transporte ([6]).

Teniendo en mente la variación prescrita de la función en el tiempo, Eqn. (1.30), las integrales temporales y las derivadas temporales se pueden calcular directamente como:

$$\left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right)_P = \frac{\rho_P^n \phi_P^n - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \quad (1.63)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi(t) dt = \frac{1}{2} (\phi^0 + \phi^n) \Delta t \quad (1.64)$$

donde

$$\begin{aligned} \phi^n &= \phi(t + \Delta t) \\ \phi^0 &= \phi(t) \end{aligned} \quad (1.65)$$

Asumiendo que la densidad y la difusividad no cambian en el tiempo, Eqs. (1.62, 1.63 y 1.64) dan:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_P \phi_P^n - \rho_P \phi_P^0}{\Delta t} V_P + \frac{1}{2} \sum_f F \phi_f^n - \frac{1}{2} (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^n \\ + \frac{1}{2} \sum_f F \phi_f^0 - \frac{1}{2} (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^0 \\ = Su V_P + \frac{1}{2} Sp V_P \phi_P^n + \frac{1}{2} Sp V_P \phi_P^0 \end{aligned} \quad (1.66)$$

Esta forma de discretización temporal es conocido como el método de **Crank-Nicholson**.

- es de segundo orden en el tiempo
- método de discretización temporal de Crank-Nicholson es incondicionalmente estable
- no garantiza acotación

Quedando el stencil computacional de la siguiente forma:

$$a_P \phi_P^n + \sum_N a_N \phi_N^n = R_P \quad (1.67)$$

Tenemos una ecuación de esta forma para todos los volúmenes de control. El valor de ϕ_P^n depende sobre los valores en las celdas vecinas, creando de esta forma un sistema de ecuaciones:

$$[A] [\phi] = [R] \quad (1.68)$$

donde $[A]$ es una matriz rala (*sparse matrix*), con coeficientes a_P sobre la diagonal y a_N fuera de la diagonal, $[\phi]$ son los vectores de ϕ -s para todos los volúmenes de control y $[R]$ es el vector de términos fuente.

Esquemas de primer orden

$$\begin{aligned} \frac{\rho_P \phi_P^n - \rho_P \phi_P^0}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_f - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f \\ = Su V_P + Sp V_P \phi_P \end{aligned} \quad (1.69)$$

En la **discretización explícita**, los valores sobre las caras de ϕ y $\nabla \phi$ se determinan exclusivamente a partir del paso de tiempo anterior:

$$\phi_f = f_x \phi_P^0 + (1 - f_x) \phi_N^0 \quad (1.70)$$

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \frac{\phi_N^0 - \phi_P^0}{|d|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f^0 \quad (1.71)$$

La parte lineal del término fuente se evalúa también usando el valor en el paso de tiempo anterior. Eqn. (1.69) puede escribirse en la forma:

$$\phi_P^n = \phi_P^0 + \frac{\Delta t}{\rho_P V_P} \left[\sum_f F \phi_f^0 - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi^0)_f + Su V_P + Sp V_P \phi_P^0 \right] \quad (1.72)$$

- no requiere resolver ningun sistema de ecuaciones, reducido costo computacional
- es de primer orden
- limitación en el paso de tiempo, falta de acotación temporal si el paso de tiempo es excesivo.
- Si el número de Courant es mayor que la unidad, el sistema explícito se vuelve inestable.

$$Co = \frac{U_f \cdot \mathbf{d}}{\Delta t} \quad (1.73)$$

- Esta es una severa limitación, especialmente si esta tratando de resolver un problema en estado estacionario.

El método de Euler o **discretización implícita** expresa los valores a calcular sobre las caras empleando aquellos sobre las celdas que corresponden al paso de tiempo nuevo:

$$\phi_f = f_x \phi_P^n + (1 - f_x) \phi_N^n \quad (1.74)$$

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \frac{\phi_N^n - \phi_P^n}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f \quad (1.75)$$

- requiere resolver un sistema de ecuaciones,
- es de primer orden
- no tiene limitación en el paso de tiempo en el caso lineal
- Es apto para resolver un problema en estado estacionario.

Hay muchas otras propuestas para discretizar la variable tiempo. En OpenFOAM existe una denominada **Backward Differencing in time** que es de segundo orden de precisión en el tiempo.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\frac{3}{2} \phi^n - 2 \phi^0 + \frac{1}{2} \phi^{00}}{\Delta t} \quad (1.76)$$

$$\begin{aligned} \frac{\frac{3}{2} \rho_P \phi^n - 2 \rho_P \phi^0 + \frac{1}{2} \rho_P \phi^{00}}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_f^n - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^n \\ = Su V_P + Sp V_P \phi_P^n \end{aligned} \quad (1.77)$$

Esto produce un sistema de ecuaciones algebraico que debe resolverse para ϕ_n^P .

Problemas estacionarios son bastante comunes en la mecánica computacional. Su característica es que la solución no depende del tiempo, *i.e.* la ecuación de transporte se reduce a:

$$\nabla \cdot (\rho \nabla \phi) - \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) = Su + Sp \phi \quad (1.78)$$

IMPLEMENTACIÓN DE LAS CONDICIONES DE CONTORNO

- condiciones de contorno numéricas
- condiciones de contorno físicas

Condiciones de contorno numéricas

- condiciones de contorno Dirichlet o fixed value
- condiciones de contorno von Neumann o fixed Gradient

Entre las otras condiciones de contorno, las de naturaleza física, podemos citar:

- para problemas de la mecánica de fluidos,
 - planos de simetría ,
 - paredes sólidas impenetrables y no deslizantes,
 - paredes sólidas impenetrables pero deslizantes,
 - entradas and
 - salidas
- para problemas de transferencia de calor,
 - adiabáticas o
 - temperatura impuesta.
 - radiación
- para problemas de elasticidad lineal,
 - tracción impuesta
 - desplazamiento impuesto.

CONDICIONES DE CONTORNO NUMÉRICAS

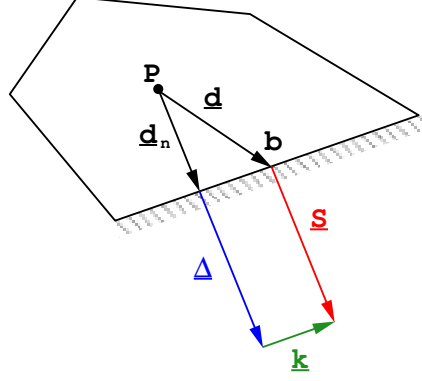


Figure 1.19: Control volume with a boundary face

$$\mathbf{d}_n = \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{d}}{|\mathbf{S}|} \frac{\mathbf{S}}{|\mathbf{S}|} \quad (1.79)$$

y en ese caso el vector de corrección \mathbf{k} no se usa degradando la precisión a primer orden. Se puede obtener segundo orden pero eso lo dejamos como lectura avanzada.

- **Condición de contorno tipo Dirichlet o Fixed Value**

Esta condición de contorno prescribe el valor de ϕ sobre la cara b a ser ϕ_b . Esto debe tenerse en cuenta a la hora de discretizar los términos de convección y difusión sobre las caras del borde.

Término de convección. Acorde a la Eqn. (1.42), el término de convección se discretiza como:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV = \sum_f F \phi_f \quad (1.80)$$

Sabiendo que el valor de ϕ sobre la cara del contorno es ϕ_b . Entonces, el término a incluir en la sumatoria sobre las caras cuando esta sumatoria visite una cara del contorno es:

$$F_b \phi_b \quad (1.81)$$

donde F_b es el flujo másico sobre la cara.

Término de difusión. El término de difusión se discretiza acorde a la Eqn.(1.49).

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV = \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f \quad (1.82)$$

El gradiente en la cara en b se calcula a partir de los valores conocidos en la cara como en el centroide de la celda:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_b = |\mathbf{S}| \frac{\phi_b - \phi_P}{|\mathbf{d}_n|} \quad (1.83)$$

ya que \mathbf{S} y \mathbf{d}_n son paralelos.

- **Condición de contorno Von Neumann o Fixed Gradient**

En el caso de una condición de contorno expresada en función del gradiente, el producto escalar del gradientes y la normal al contorno apuntando hacia afuera del mismo se prescribe como:

$$\left(\frac{\mathbf{S}}{|\mathbf{S}|} \cdot \nabla \phi \right)_b = g_b \quad (1.84)$$

Término de convección. Ahora el valor de ϕ en la cara debe calcularse a partir del valor en el centro de la celda propietaria de la cara de contorno y del gradiente prescripto:

$$\begin{aligned} \phi_b &= \phi_P + \mathbf{d}_n \cdot (\nabla \phi) \\ &= \phi_P + |\mathbf{d}_n| g_b \end{aligned} \quad (1.85)$$

Término difusión. El producto interno entre el vector area de la cara y $(\nabla \phi)_b$ es conocido y vale

$$|\mathbf{S}| g_b \quad (1.86)$$

y entonces el término resultante es

$$(\rho \Gamma_\phi)_b |\mathbf{S}| g_b \quad (1.87)$$

Como el vector \mathbf{d}_n no apunta al centroide de la cara de borde, las integrales de la cara en esta condición de contorno donde se prescribe el gradiente se calculan solo a primer orden de precisión. Esto puede ser mejorado agregando una corrección basada en el vector \mathbf{k} (Fig. 1.19) y la componente del gradiente paralelo a la cara en la primer celda próxima al contorno. [...]².

²ver la tesis de Jasak, Section 3.6

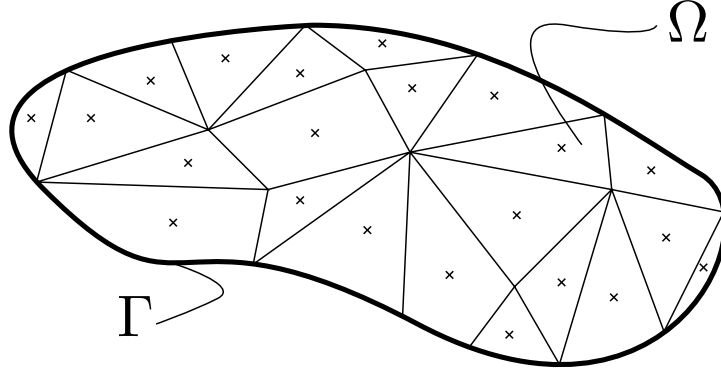


Figure 1.20: Dominio discretizado.

1.4 IMPLEMENTACION EN 1D

1.5 Forma discreta de las ecuaciones de conservación escalar

Sea $\phi(x, y, z)$ una magnitud escalar, Ω un dominio en \mathbb{R}^3 y Γ su frontera \mathbb{R}^2 , podemos escribir una ecuación de conservación de esta cantidad en forma integral como:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \vec{v} \phi \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} c \phi d\Omega = \int_{\Gamma} \nabla \phi \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} Q d\Omega. \quad (1.88)$$

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 la producción o destrucción de ϕ debido a reacciones, el cuarto el flujo debido a la difusión y finalmente el quinto la fuente. Reordenando los términos podemos ver que

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c \phi - Q \right] d\Omega = \int_{\Gamma} [\nabla \phi - \vec{v} \phi] \cdot d\vec{\Gamma}, \quad (1.89)$$

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 (1.20).

Reescribiendo (1.89) como suma parcial de los volúmenes que constituyen a Ω se tiene

$$\sum_{j=1}^m \int_{\Omega_j} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c \phi - Q \right] d\Omega - \int_{\Gamma_j} [\nabla \phi - \vec{v} \phi] \cdot d\vec{\Gamma} = 0. \quad (1.90)$$

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. Finalmente (1.90) se reduce a (1.89).

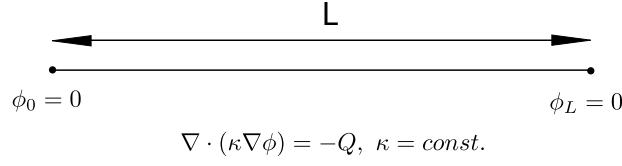


Figure 1.21: Problema de difusión estacionaria.

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 (1.90) puede reescribirse como

$$\sum_{j=1}^m \int_{\Omega_j} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega - \left\{ \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma_i} [\nabla \phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma}_i \right\}_j = 0. \quad (1.91)$$

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

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_j} \phi d\Omega_j &= \bar{\phi} V_j \\ \int_{\Gamma_i} \phi d\vec{\Gamma}_i &= \bar{\phi}_{f_i} \vec{S}_{f_i} \end{aligned} \quad (1.92)$$

con lo cual (eliminando las barras en aras de claridad de la exposición) se tiene que

$$\sum_{j=1}^m \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t} + c\phi_j - Q \right) V_j - \left\{ \sum_{i=1}^n (\nabla \phi - \vec{v}\phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j = 0, \quad (1.93)$$

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.

1.6 Aplicaciones del método de volúmenes finitos

1.6.1 Difusión estacionaria en 1D

Sea un problema de difusión estacionaria 1D con condiciones de borde Dirichlet homogéneas en ambos extremos, tal como se ilustra en la Figura (1.21), dividimos el problema en N segmentos y representamos el dominio como si fuera tridimensional pero cuya área transversal resulta unitaria. Esto se muestra en la Figura (1.22).

Aplicando (1.93) al dominio de la Figura (1.22) y, en particular, a un volumen j , se tiene que

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (\nabla \phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j = -Q_j V_j, \quad (1.94)$$

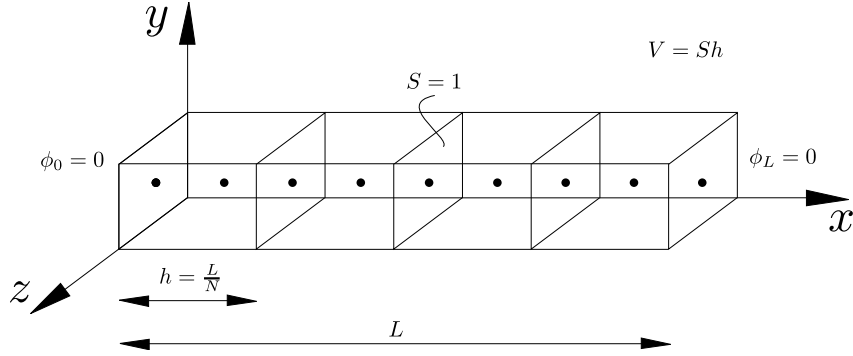


Figure 1.22: Discretización para el problema de la Figura (1.21).

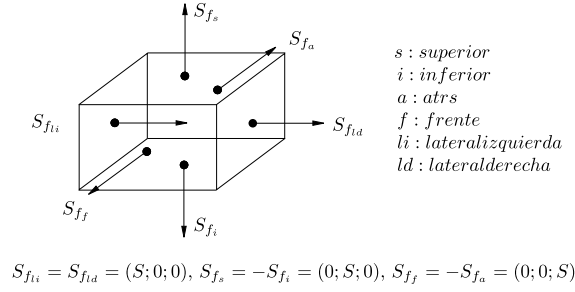


Figure 1.23: Vectores normales a las caras del segundo volumen del dominio.

la cual suele escribirse en forma abreviada como

$$\left\{ \sum_f (\nabla \phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_j = -QV_j. \quad (1.95)$$

Sea ahora el volumen el 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 se suele considerar que cada celda es propietaria de una cierta cantidad de caras que lo conforman. Es así como, entonces, 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 (1.23). Recordando la definición adoptada se ve cada volumen es propietario de todas sus caras a excepción de la izquierda.

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 (1.24).

Si se considera la dirección del gradiente se tendrá entonces

$$\begin{aligned} (\nabla \phi)_f &= \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{x_N - x_P}; 0; 0 \right) \\ (\nabla \phi)_f &= \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{h}; 0; 0 \right) \end{aligned} \quad (1.96)$$

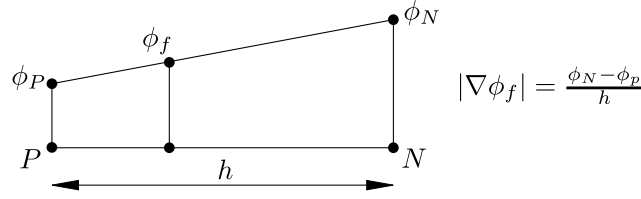


Figure 1.24: Vectores normales a las caras del segundo volumen del dominio.

donde en este caso particular siendo la discretización espacial homogénea $h = x_N - x_P$, hecho que no siempre es válido cuando el h es variable.

Dado que (1.95) requiere el producto escalar $(\nabla \phi) \cdot \vec{S}_f$ 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

$$\left\{ \kappa \sum_{f=li,ld} (\nabla \phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_j = -QV_j, \quad (1.97)$$

que expandiendo resulta

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{h} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_j = -QV_j, \quad (1.98)$$

y, finalmente

$$\kappa \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h} \right) = -QV_j. \quad (1.99)$$

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 (1.99) puede reducirse a un stencil de Diferencias Finitas ya que $V_j = Sh = h$, con lo cual

$$\kappa \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h^2} \right) = -Q. \quad (1.100)$$

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 (1.22) 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 primer celda una aproximación descentrada del gradiente, y de esta forma

$$(\nabla \phi)_{fi} = \frac{\phi_o - \phi_1}{h/2}, \quad (1.101)$$

con lo cual aplicando (1.95) a la celda 1 se tendrá

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_0 - \phi_1}{h/2} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_j = -QV_1, \quad (1.102)$$

y de esta forma

$$\kappa \left(\frac{2\phi_0 - 3\phi_1 + \phi_2}{h} \right) = -QV_1. \quad (1.103)$$

Para el caso de la celda 4 se tendrá que

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_3 - \phi_4}{h} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_L - \phi_4}{h/2} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_j = -QV_4, \quad (1.104)$$

y así

$$\kappa \left(\frac{\phi_3 - 3\phi_4 + 2\phi_L}{h} \right) = -QV_4. \quad (1.105)$$

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

$$\begin{cases} \frac{\kappa}{h} (-3\phi_1 + \phi_2) = -QV_1 - \frac{2\kappa}{h} \phi_0 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3) = -QV_2 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4) = -QV_3 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_3 - 3\phi_4) = -QV_4 - \frac{2\kappa}{h} \phi_L \end{cases}, \quad (1.106)$$

que puede ser escrito matricialmente como $\mathbf{A}\mathbf{b} = \mathbf{x}$, o bien $\sum_{j=1}^m a_{ij}\phi_j = b_i$, siendo esta última similar a (1.93). Resolviendo el sistema es posible hallar los valores de ϕ para cada centro de celda de la discretización.

1.6.2 Términos advectivos

En los términos advectivos es necesario evaluar

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (-\vec{v}\phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j = 0, \quad (1.107)$$

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 y a la interpolación lineal. Considere entonces el esquema presentado en la Figura (1.25).

Tomar el valor aguas arriba (upwind) 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 $\nabla\phi$ dando lugar a los esquemas de alto orden.

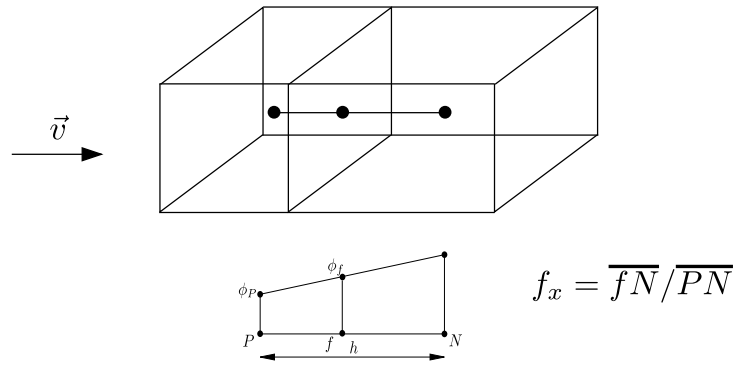
En cuanto a las condiciones de borde, aquellas de valor fijo se aplican directamente como $\phi_f = \phi_{borde}$, a menos que se utilice el esquema upwind.

1.6.3 Imposición de condiciones de borde Neumann

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

$$\phi_{borde} = (\nabla\phi)_{borde} \cdot \vec{d} + \phi_P, \quad (1.108)$$

lo cual es una reconstrucción del valor en el borde a partir del correspondiente al del centroide propietario de la cara y del gradiente impuesto sobre el borde proyectado en la dirección que va desde el centroide a la cara.

Figure 1.25: Aproximación para ϕ_f .

1.6.4 Ejercicio

Resolver el problema planteado en 1D para el caso de contar con una advección representada por el número de Peclet ($Pe = \frac{|v|h}{\kappa}$) con condiciones Dirichlet en ambos extremos fijadas a $\phi(x=0) = \phi_0$ y $\phi(x=L) = \phi_L$

Bibliography

- [1] <http://en.wikipedia.org/wiki/OpenFOAM><http://en.wikipedia.org/wiki/OpenFOAM>
- [2] <http://www.openfoam.org><http://www.openfoam.org>
- [3] Ferziger, J.H.; Peric, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 1995
- [4] Versteeg, H.K.; Malalasekera, W. *An introduction to Computational Fluid Dynamics*, 1st. edition.
- [5] Jasak, H. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*, Ph.D Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 1996.
- [6] Hirsch, C. *Numerical Computation of internal and external flows*, 1991.
- [7] Patankar, S.V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1981.
- [8] Karrholm, F.P. *Rhie-Chow interpolation in OpenFOAM*, 2006.
- [9] Jasak, H. *Numerical Solution Algorithms for Compressible Flows*, Lecture Notes for University of Zagreb.
- [10] Hirt, C.W.; Nichols B.D. *Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries*, Journal of Computational Physics, Vol. 39, 1, p. 201-225
- [11] Ubbink, O. *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*, Ph.D Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 1997.
- [12] Ubbink, H. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*, Ph.D Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 2002.
- [13] Berberovic, E.; Van Hinsberg, N.P.; Jakirlic, S.; Roisman, I.V; Tropea, C. *Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution*, Physical Review E, 79, 2009.
- [14] OpenCFD, Technical Report No. TR/HGW/02, 2005 (unpublished).
- [15] *A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques*, Computers in Physics, Vol. 12, 6, p. 620-631, 1998
- [16] OpenCFD Ltd. *OpenFOAM, The Open Source CFD Toolbox, User Guide*, 2009.
- [17] OpenCFD Ltd. *OpenFOAM, The Open Source CFD Toolbox, Programmer's Guide*, 2009.
- [18] <http://openfoamwiki.net/index.php/IcoFoam><http://openfoamwiki.net/index.php/IcoFoam>

- [19] Prosperetti, A *Motion of Two Superposed Viscous Fluids*, Physics of Fluids, 24(7):1217-1223, 1981.