

①

Método de Volúmenes Finitos

* 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, podemos escribir una ecuación de conservación de esta cantidad en forma integral como:

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

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

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

De aquí se ve que el desbalance de ϕ en el interior de Ω es simplemente lo que atraviesa las fronteras Γ .

Dividimos ahora el dominio Ω en m elementos cuyos volúmenes no se solapan, tal como en la Figura 1.

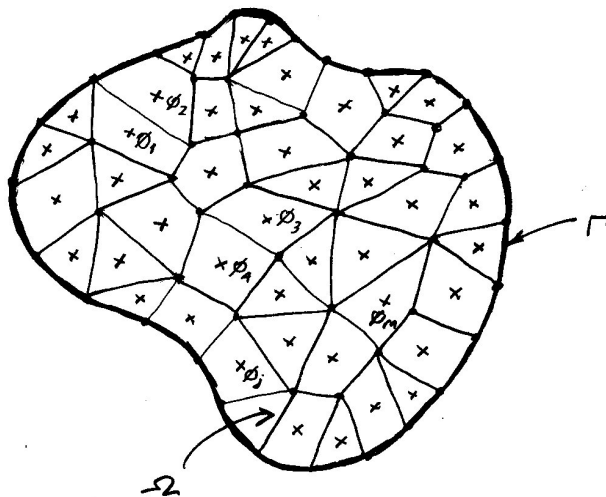


Figura 1. Dominio discretizado.

Reescribiendo (2), aplicandola a cada elemento de Ω y sumando se tiene

$$\sum_{j=1}^m \int_{\Omega_j} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega - \int_{\Gamma_j} [\vec{\nabla} \phi - \vec{\nabla} \phi] \cdot d\vec{\Gamma} = 0 \quad (3)$$

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 elementos que no coinciden con la frontera del dominio son incluidas en las integrales de los elementos a un lado y otro de la cara. Así pues los flujos en estas caras se anulan. Finalmente (3) termina reduciéndose a (2).

Podemos avanzar en el análisis si consideramos que los volúmenes interiores correspondientes a los elementos de la discretización son poliedros, es decir volúmenes facetados con una cantidad finita de caras n . Tenemos entonces que (3) llega a ser:

$$\sum_{j=1}^m \int_{\Omega_j} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega - \left\{ \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma_i} [\vec{\nabla} \phi - \vec{\nabla} \phi] \cdot d\vec{\Gamma}_i \right\}_j = 0 \quad (4)$$

Si consideramos los valores de ϕ constantes por celda (elemento) y por cara podemos aproximar:

$$\int_{\Omega_j} \phi d\Omega = \bar{\phi} V_j \quad (5)$$

$$\int_{\Gamma_i} \phi d\Gamma = \bar{\phi} S_{f_i} \quad (6)$$

Entonces nos queda (sin utilizar la barra superior):

$$\sum_{j=1}^m \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t} + c\phi_j - Q \right) V_j - \left\{ \sum_{i=1}^n (\vec{\nabla} \phi - \vec{\nabla} \phi)_{f_i} \cdot S_{f_i} \right\}_j = 0 \quad (7)$$

② Siendo esta la expresión discretizada, espacialmente, de las ecuaciones 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 las celdas, los cuales son las verdaderas incógnitas

* Aplicaciones del Método de Volúmenes Finitos.

- Difusión estacionaria en 1D.

Sea un problema de difusión estacionaria 1D con condiciones de borde Dirichlet nulas en ambos extremos, tal como se indica en la Figura 2.

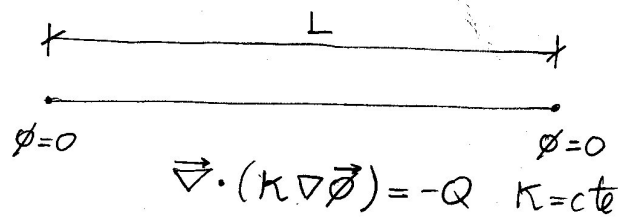


Figura 2. Problema de difusión estacionaria

Dividimos el problema en N segmentos y representamos el dominio como si fuera tridimensional con área transversal unitaria, tal como en la Figura 3.

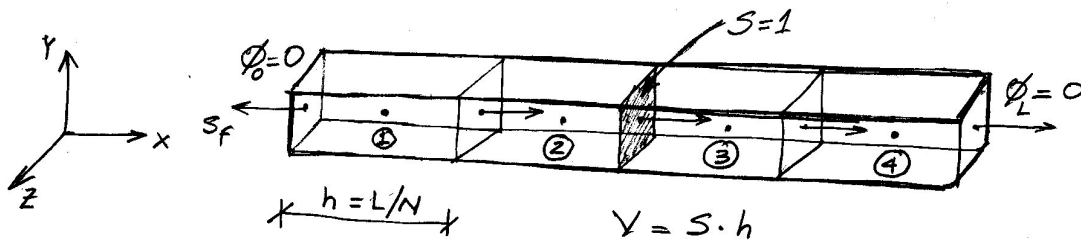


Figura 3. Discretización para el problema de la Figura 2.

Apliquemos ahora el esquema propuesto en (7) al dominio dado en la Figura 3. Para una celda j se tendrá.

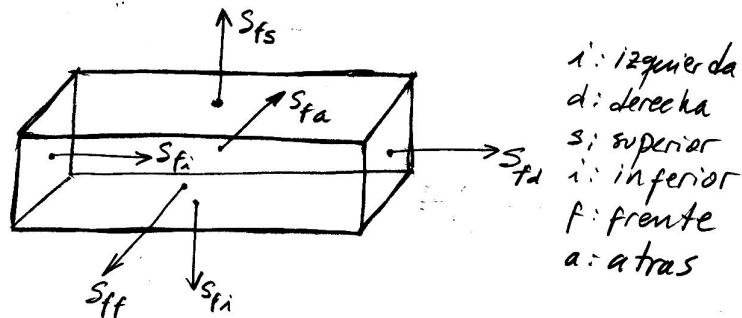
$$\left\{ k \sum_{f=1}^n (\vec{\nabla} \phi)_{f_i} \cdot \vec{s}_{f_i} \right\}_j = -Q_j V_j \quad (8)$$

Lo cual puede escribirse en forma abreviada como

$$\left\{ k \sum_f (\vec{\nabla} \phi)_f \cdot \vec{s}_f \right\}_j = -Q \cdot V_j \quad (9)$$

Sea ahora la celda 2 la que se desea analizar, se hace necesario pues definir los vectores \vec{S}_f , los cuales normales a las caras y de magnitud igual a su área. Como convención se suele considerar que cada celda es propietaria de una cierta cantidad de las caras que la conforman. Es así que, entonces, para una dada cara, de un lado se encuentra su celda propietaria y del otro su vecina (owner cell and neighbour cell). Las normales apuntarán entonces siempre desde la celda propietaria hacia la vecina.

Así pues aislando la celda 2 tendremos lo indicado en la Figura 4.



$$S_{fi} = S_{fd} = (s; 0; 0), S_{fi} = (0; 0; s) = -S_{fa}, S_{ps} = (0; s; 0) = -S_{pi}$$

Figura 4. Vectores normales a las caras. Celda 2.

Recordando la convención que hemos tomado se ve que la celda 2 es propietaria de todas sus caras excepto la izquierda. Para calcular el gradiente utilizamos una aproximación centrada, considerando que la variación de ϕ es lineal entre dos centros (centrodes) de celda (véase Figura 5.)

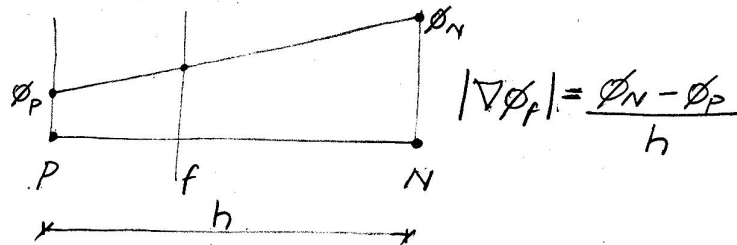


Figura 5. Aproximación para $|\nabla \phi_f|$

Si tenemos en cuenta la dirección del gradiente tendremos entonces

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

③ Dado que (9) requiere el producto escalar $(\vec{\nabla}\phi)_f \cdot \vec{S}_f$ podemos que este solamente será no nulo para las caras no ortogonales a $(1;0;0) = \vec{i}$, es decir la izquierda y la derecha. Tenemos entonces:

$$\left\{ K \sum_{f \in \text{ad}} (\vec{\nabla}\phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_j = -Q V_j \quad (11)$$

Expandiendo

$$K \left[\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{h} \right) (-\vec{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{h} \right) \vec{i} \cdot (1, 0, 0) \right] = -Q V_2 \quad (12)$$

$$K \left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{h} + \frac{\phi_3 - \phi_2}{h} \right) = -Q V_2 \quad (13)$$

$$K \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h} \right) = -Q V_2 \quad (14)$$

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. $(\phi_N - \phi_P)$. La expresión obtenida en (14) puede reducirse a un stencil de Diferencias Finitas ya que $V_j = h \cdot S = h \cdot 1 = h$. Entonces:

$$K \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h^2} \right) = -Q \quad (15)$$

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

Una nota especial requiere el tratamiento de las condiciones de borde. Como surge de la Figura 3. éstas están impuestas en las caras de las celdas y no en los centros, con lo cual se hace necesario algún tipo de reconstrucción o interpolación.

Esto se debe a que se ha adoptado un esquema de Volúmenes Finitos centrado en la celda (cell based) en lugar de centrado en los nodos (node based), cada uno de los cuales tiene sus ventajas y desventajas. Utilizaremos entonces para la cara izquierda de la celda 1 una aproximación decentrada del gradiente con lo cual:

$$(\nabla\phi)_{fi} = \frac{\phi_0 - \phi_1}{h/2} \quad (16)$$

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

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

$$K \cdot \left\{ \left(\frac{\phi_0 - \phi_1}{h/2} \right) (-i) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{h} \right) i \cdot (1; 0; 0) \right\} = -Q V_1 \quad (17)$$

$$\frac{\phi_0 - \phi_1}{h/2} + \frac{\phi_2 - \phi_1}{h}$$

$$\frac{2\phi_0 - 2\phi_1 + \phi_2 - \phi_1}{h} = \frac{2\phi_0 - 3\phi_1 + \phi_2}{h}$$

$$K \left(\frac{-2\phi_0 - 3\phi_1 + \phi_2}{h} \right) = -Q V_1 \quad (18)$$

en el caso de la celda 4 será:

$$K \left\{ \left(\frac{\phi_3 - \phi_4}{h} \right) (-i) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_L - \phi_4}{h/2} \right) i \cdot (1; 0; 0) \right\} = -Q V_4 \quad (19)$$

$$K \left(\frac{\phi_3 - 3\phi_4 + 2\phi_L}{h} \right) = -Q V_4 \quad (20)$$

Teniendo en cuenta que las normales de caras pertenecientes a otra celda tienen dirección opuesta. Finalmente, para todas las celdas se obtiene:

$$\begin{cases} \frac{K}{h} (-3\phi_1 + \phi_2) = -Q V_1 + \frac{K}{h} 2\phi_0 \\ \frac{K}{h} (\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3) = -Q V_2 \\ \frac{K}{h} (\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4) = -Q V_3 \\ \frac{K}{h} (\phi_3 - 3\phi_4) = -Q V_4 - \frac{2K}{h} \phi_L \end{cases} \quad (21)$$

⊕ lo cual puede ser escrito como $\bar{A} \cdot \bar{\phi} = \bar{b}$ o bien $\sum_{j=1}^m a_{ij} \phi_j = b_i$ siendo esta última similar a (7). Resolviendo el sistema es posible hallar los valores de ϕ para cada centro de celda de la discretización.

- Términos advectivos

En los términos advectivos es necesario evaluar:

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (\vec{V} \phi)_f \cdot S_{fi} \right\}_j = 0 \quad (22)$$

es decir se requiere conocer la expresión de los valores ϕ en las caras. Estos valores se obtienen a partir de los valores en los centros de celdas. Las dos aproximaciones más sencillas corresponden al valor aguas arriba y a la interpolación lineal. Considerando la Figura 5

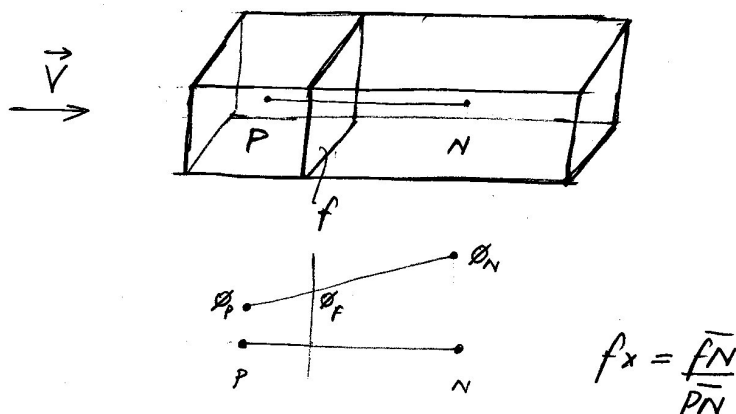


Figura 6. Aproximación para ϕ_f

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 las condiciones de valor fijo se aplican directamente como $\phi_f = \phi_0$, siendo ϕ_0 el valor dado en la frontera, a menos que se utilice el esquema upwind.

- Imposición de condiciones de borde Neumann.

Estas condiciones de borde resultan naturales para el término difu-

Siro tomando directamente $(\nabla\phi)_f = (\nabla\phi)_b$. Para los terminos advectivos sera.

$$\phi_b = (\vec{\nabla}\phi)_b \cdot \vec{d} + \phi_p \quad (23)$$

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