

INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

Responsable: Dr. Ing. Pablo Gamazo (Centro Universitario Regional Litoral Norte, Universidad de la República. Uruguay)

Asistente: Ing. Lucas Bessone (Universidad Tecnológica Nacional, Regional Concordia)

Volúmenes finitos

- El método de los volúmenes finitos (al igual que otros métodos) transforma ecuaciones en derivadas parciales en un conjunto de ecuaciones algebraicas
- El método implica 2 pasos
 - 1ro las ecuaciones en derivadas parciales son integradas y se transforman en ecuaciones de balance sobre elementos
 - 2do se seleccionan métodos para aproximar las variaciones de las variables en los elementos y relacionarlas con los valores de las variables en las caras y en otros elementos

Ecuación semi discretizada

La ecuación de una variable escalar ϕ tiene la forma:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_{\text{transient term}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi)}_{\text{convective term}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi)}_{\text{diffusion term}} + \underbrace{Q^\phi}_{\text{source term}}$$

La versión estacionaria de la misma ecuación es:

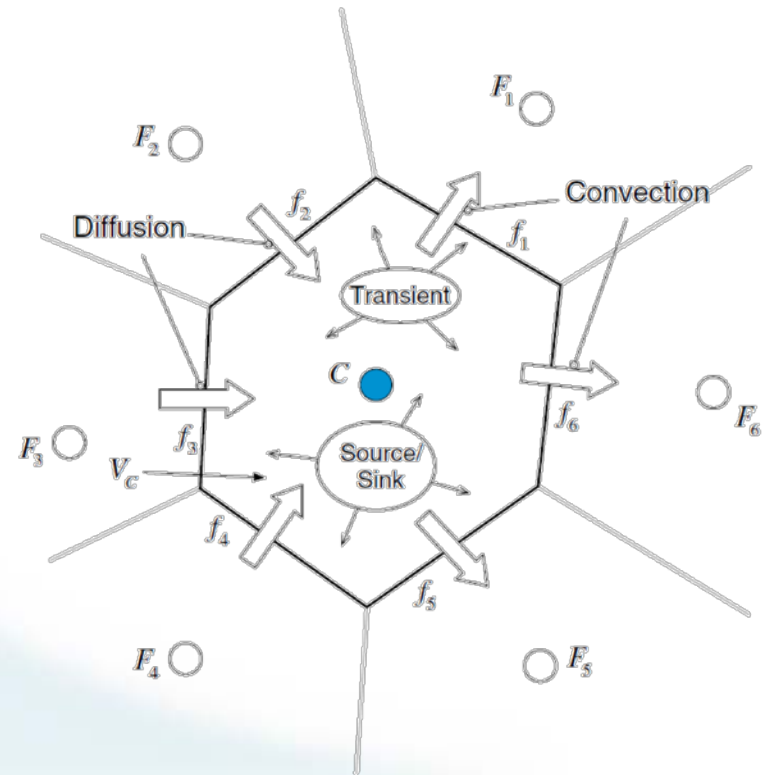
$$\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) + Q^\phi$$

Integrando la ecuación anterior en el dominio C se obtiene:

$$\int_{V_C} \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) dV = \int_{V_C} \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) dV + \int_{V_C} Q^\phi dV$$

Transformando las integrales de volumen en integrales de superficie mediante el teorema de la divergencia se obtiene:

$$\oint_{\partial V_C} (\rho\mathbf{v}\phi) \cdot d\mathbf{S} = \oint_{\partial V_C} (\Gamma^\phi \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} + \int_{V_C} Q^\phi dV$$



Integración de los flujos en las caras de los elementos

Denotando los flujos advectivos y difusivos como:

$$\mathbf{J}^{\phi,C} = \rho \mathbf{v} \phi$$

$$\mathbf{J}^{\phi,D} = -\Gamma \phi \nabla \phi$$

podemos referirnos al flujo total como :

$$\mathbf{J}^{\phi} = \mathbf{J}^{\phi,C} + \mathbf{J}^{\phi,D}$$

Los flujos en las caras de un elemento tendrán la siguiente expresión:

De esta forma los términos advectivos y difusivos son evaluados solamente en las caras de los elementos

$$\oint_{\partial V_C} \mathbf{J}^{\phi,C} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{f \sim \text{faces}(V_C)} \left(\int_f (\rho \mathbf{v} \phi) \cdot d\mathbf{S} \right)$$

$$\oint_{\partial V_C} \mathbf{J}^{\phi,D} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{f \sim \text{faces}(V_C)} \left(\int_f (\Gamma \phi \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} \right)$$

$$\oint_{\partial V_C} \mathbf{J}^{\phi} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{f \sim \text{faces}(V_C)} \left(\int_f \mathbf{J}_f^{\phi} \cdot d\mathbf{S} \right)$$

Integración de los flujos en las caras de los elementos

Las integrales en la caras son evaluadas usando cuadraturas de Gauss :

$$\int_f \mathbf{J}^\phi \cdot d\mathbf{S} = \int_f (\mathbf{J}^\phi \cdot \mathbf{n}) dS = \sum_{ip \sim ip(f)} (\mathbf{J}^\phi \cdot \mathbf{n})_{ip} \omega_{ip} S_f$$

Cuadratura de Gauss

Es una técnica que se utiliza para aproximar la integral de una función en un dominio mediante la evaluación de la función en ciertos puntos y multiplicándola por unos pesos.

Cuanto más puntos se consideren, menor error tendrá la aproximación.

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i),$$

Para límites genéricos en la integración:

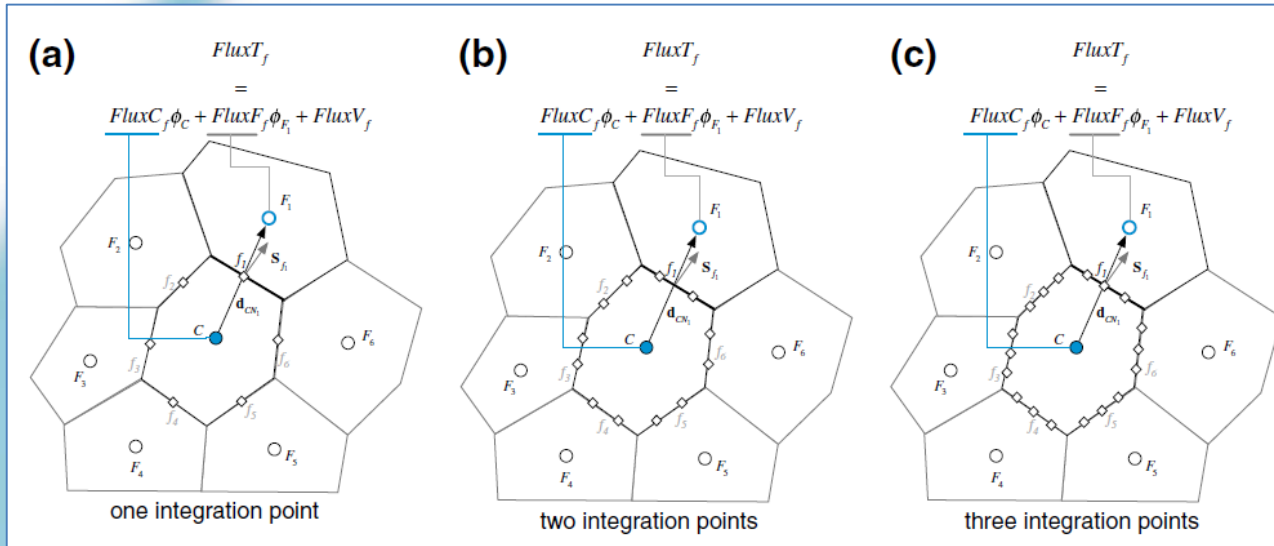
$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right) dx.$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right).$$

Number of points, n	Points, x_i	Approximately, x_i	Weights, w_i	Approximately, w_i
1	0	0	2	2
2	$\pm \frac{1}{\sqrt{3}}$	± 0.57735	1	1
3	0	0	$\frac{8}{9}$	0.888889
	$\pm \sqrt{\frac{3}{5}}$	± 0.774597	$\frac{5}{9}$	0.555556
4	$\pm \sqrt{\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	± 0.339981	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$	0.652145
	$\pm \sqrt{\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	± 0.861136	$\frac{18-\sqrt{30}}{36}$	0.347855
5	0	0	$\frac{128}{225}$	0.568889
	$\pm \frac{1}{3}\sqrt{5 - 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	± 0.538469	$\frac{322+13\sqrt{70}}{900}$	0.478629
	$\pm \frac{1}{3}\sqrt{5 + 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	± 0.90618	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900}$	0.236927

Integración de los flujos en las caras de los elementos

$$\int_f \mathbf{J}^\phi \cdot d\mathbf{S} = \int_f (\mathbf{J}^\phi \cdot \mathbf{n}) dS = \sum_{ip \sim ip(f)} (\mathbf{J}^\phi \cdot \mathbf{n})_{ip} \omega_{ip} S_f$$



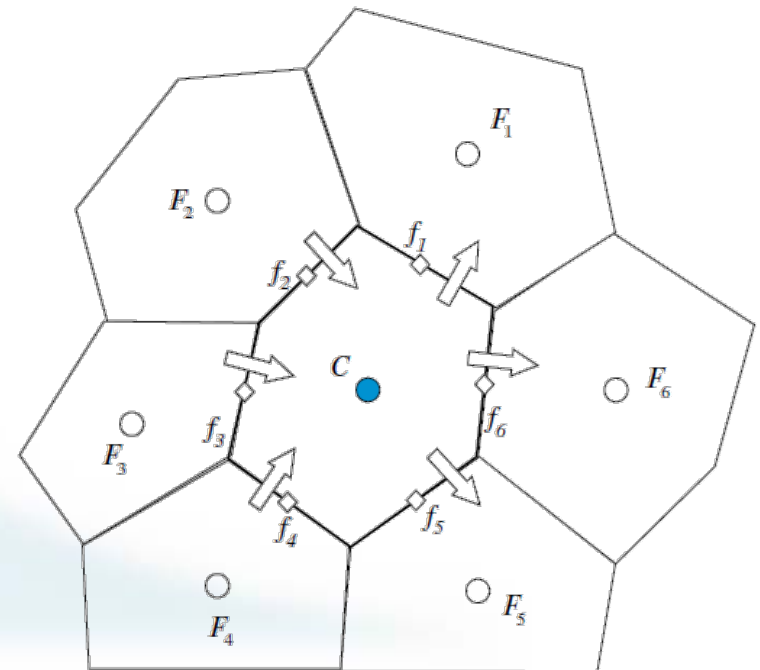
$$\oint_{\partial V_C} (\rho \mathbf{v} \phi) \cdot d\mathbf{S} = \sum_{f \sim faces(V)} \sum_{ip \sim ip(f)} (\omega_{ip} (\rho \mathbf{v} \phi)_{ip} \cdot \mathbf{S}_f)$$

$$\oint_{\partial V_C} (-\Gamma \phi \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} = \sum_{f \sim faces(V)} \sum_{ip \sim ip(f)} (\omega_{ip} (-\Gamma \phi \nabla \phi)_{ip} \cdot \mathbf{S}_f)$$

La ecuación de conservación discreta para un punto de integración

- El método de los volúmenes finitos se suele aplicar considerando solo un punto de integración.
- Con un punto de integración se obtiene precisiones de segundo orden (se puede demostrar) y por lo tanto se consigue un buen equilibrio entre precisión y flexibilidad

$$\sum_{f \sim nb(C)} (\rho \mathbf{v} \phi - \Gamma \nabla \phi) \cdot \mathbf{S}_f = Q_C^\phi V_C$$

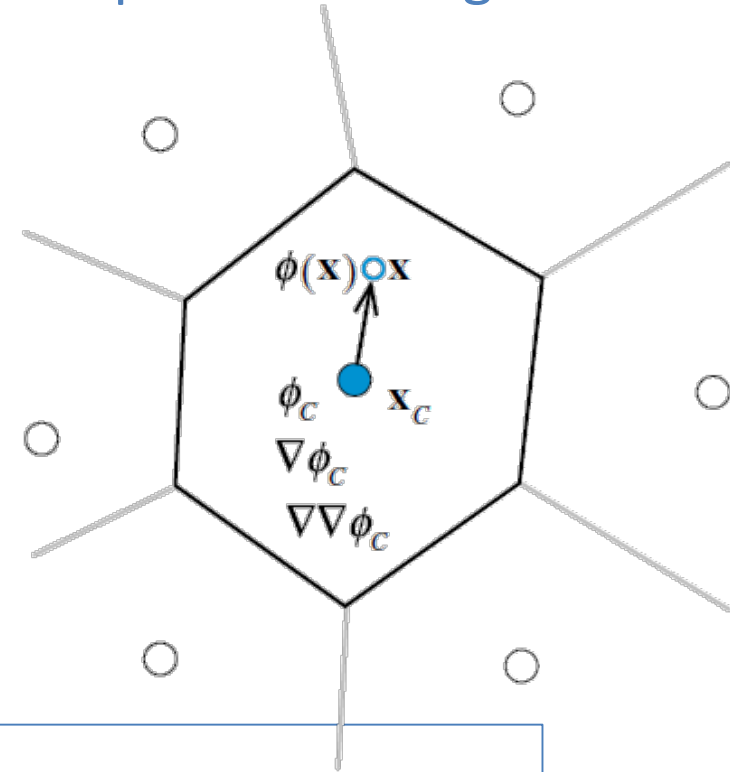


La ecuación de conservación discreta para un punto de integración

Orden de la solución

- Aproximación por Taylor

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}) &= \phi_C + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_C) \cdot (\nabla\phi)_C + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_C)^2 : (\nabla\nabla\phi)_C \\ &+ \frac{1}{3!}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_C)^3 :: (\nabla\nabla\nabla\phi)_C + \dots \\ &+ \frac{1}{n!}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_C)^n \underbrace{:: \dots ::}_{(n-1)\text{ times}} \left(\underbrace{\nabla\nabla\dots\nabla\phi}_{n\text{ times}} \right)_C + \dots \end{aligned}$$



- Aproximación por el valor medio en el elemento

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_C &= \frac{1}{V_C} \int_{V_C} \phi dV \\ &= \frac{1}{V_C} \int_{V_C} \left[\phi_C + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_C) \cdot (\nabla\phi)_C + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_C|^2) \right] dV \\ &= \frac{\phi_C}{V_C} \int_{V_C} dV + \frac{1}{V_C} \int_{V_C} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_C) \cdot (\nabla\phi)_C dV + \frac{1}{V_C} \int_{V_C} O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_C|^2) dV \\ &= \phi_C + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_C|^2) \end{aligned}$$

La ecuación de conservación discreta para un punto de integración

Orden de la solución

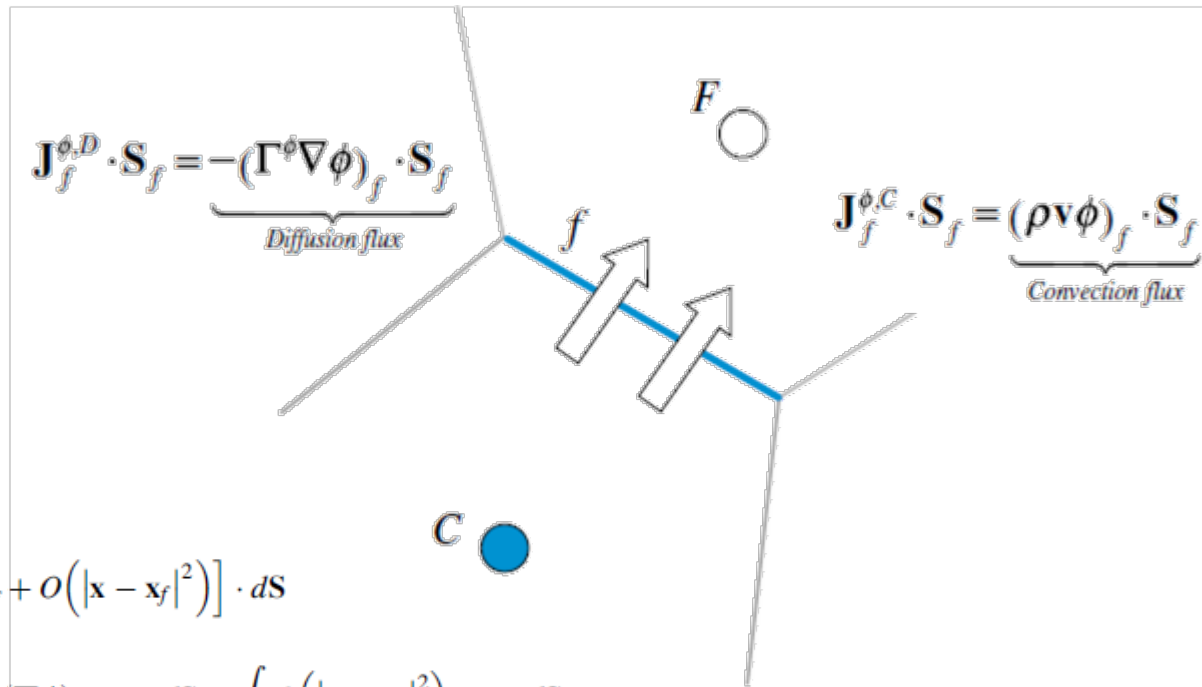
- Aproximación por el valor medio en la cara

Flujo advectivo

$$\begin{aligned}
 \overline{(\rho_f \mathbf{v}_f \cdot \mathbf{S}_f) \phi_f} &= \int_f (\rho \mathbf{v} \phi) \cdot d\mathbf{S} \\
 &= \int_f \rho_f \mathbf{v}_f \left[\phi_f + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \cdot (\nabla \phi)_f + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_f|^2) \right] \cdot d\mathbf{S} \\
 &= \rho_f \mathbf{v}_f \phi_f \cdot \int_f d\mathbf{S} + \int_f (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \cdot (\nabla \phi)_f \rho_f \mathbf{v}_f \cdot d\mathbf{S} + \int_f O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_f|^2) \rho_f \mathbf{v}_f \cdot d\mathbf{S} \\
 &= (\rho_f \mathbf{v}_f \cdot \mathbf{S}_f) \left[\phi_f + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_f|^2) \right]
 \end{aligned}$$

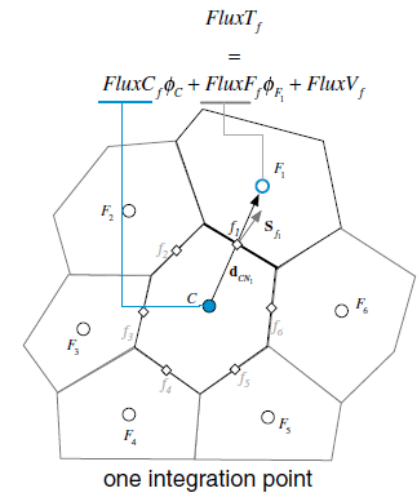
Flujo difusivo

$$\begin{aligned}
 \int_f (\Gamma^\phi \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} &= \int_f \left[(\Gamma^\phi \nabla \phi)_f + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \cdot (\nabla (\Gamma^\phi \nabla \phi))_f + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_f|^2) \right] \cdot d\mathbf{S} \\
 &= (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f \cdot \int_f d\mathbf{S} + \left[\int_f (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) d\mathbf{S} \right] \cdot (\nabla (\Gamma^\phi \nabla \phi))_f + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_f|^2) \\
 &= (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_f|^2)
 \end{aligned}$$



Linealización de flujos

Los flujos en las caras pueden dividirse en una parte lineal, función de los valores de la variable en la celda, ϕ_C , y en las celdas vecinas, ϕ_F , y en la parte que no puede expresarse como una función lineal de las variables ϕ_C y ϕ_F .



$$\mathbf{J}_f^\phi \cdot \mathbf{S}_f = \underbrace{FluxT_f}_{\text{total flux for face } f} = \underbrace{FluxC_f}_{\text{flux linearization coefficient for } C} \phi_C + \underbrace{FluxF_f}_{\text{flux linearization coefficient for } F} \phi_F + \underbrace{FluxV_f}_{\text{non-linearized part}}$$

La linealización de los flujos en los contornos adopta entonces la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \sum_{f \sim nb(C)} (\mathbf{J}_f^\phi \cdot \mathbf{S}_f) &= \sum_{f \sim nb(C)} (FluxT_f) \\ &= \sum_{f \sim nb(C)} (FluxC_f \phi_C + FluxF_f \phi_F + FluxV_f) \end{aligned}$$

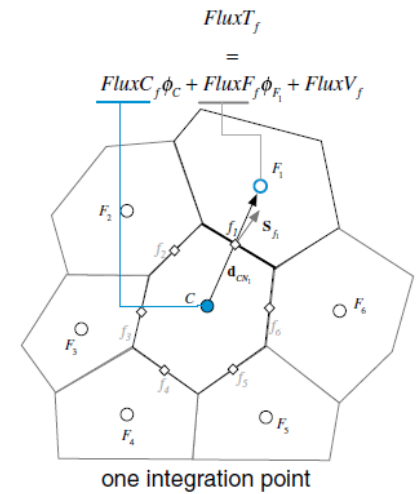
Linealización de flujos

La linealización de los flujos en el volumen también se expresa como una función lineal de la variable en la celda ϕ_C

$$\begin{aligned} Q_C^\phi V_C &= FluxT \\ &= FluxC \phi_C + FluxV \end{aligned}$$

Cuando existe una fuente de valor constante:

$$\begin{aligned} FluxC &= 0 \\ FluxV &= Q_C^\phi V_C \end{aligned}$$



Linealización de flujos

$$\sum_{f \sim nb(C)} (\mathbf{J}_f^\phi \cdot \mathbf{S}_f) = Q_C^\phi V_C$$

$$Q_C^\phi V_C = FluxC \phi_C + FluxV$$

$$\sum_{f \sim nb(C)} (\mathbf{J}_f^\phi \cdot \mathbf{S}_f) = \sum_{f \sim nb(C)} (FluxC_f \phi_C + FluxF_f \phi_F + FluxV_f)$$

Substituyendo las expresiones de flujos linealizados en la ecuación anterior se obtiene:

$$a_C \phi_C + \sum_{F \sim NB(C)} (a_F \phi_F) = b_C$$

donde:

$$a_C = \sum_{f \sim nb(C)} FluxC_f - FluxC$$

$$a_F = FluxF_f$$

$$b_C = - \sum_{f \sim nb(C)} FluxV_f + FluxV$$

Condiciones de contorno

Dirichlet: valor de variable impuesto

El valor de la variable ϕ es conocido en una cara

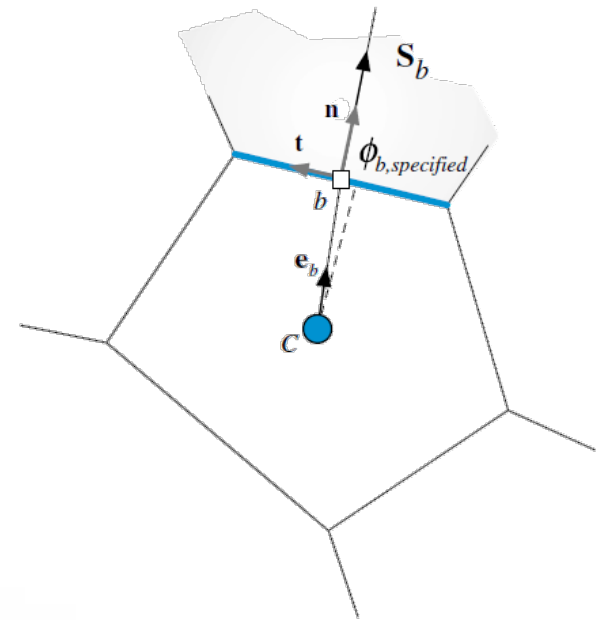
$$\phi_b = \phi_{b,specified}$$

El valor del flujo de la cara es entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_b^\phi \cdot \mathbf{S}_b &= \mathbf{J}_b^{\phi,C} \cdot \mathbf{S}_b \\ &= (\rho \mathbf{v} \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b \\ &= FluxC_b \phi_C + FluxV_b \\ &= (\rho_b \mathbf{v}_b \cdot \mathbf{S}_b) \phi_b = \dot{m}_f \phi_{b,specified} \end{aligned}$$

$$FluxC_b = 0$$

$$FluxV_b = \dot{m}_f \phi_{b,specified}$$



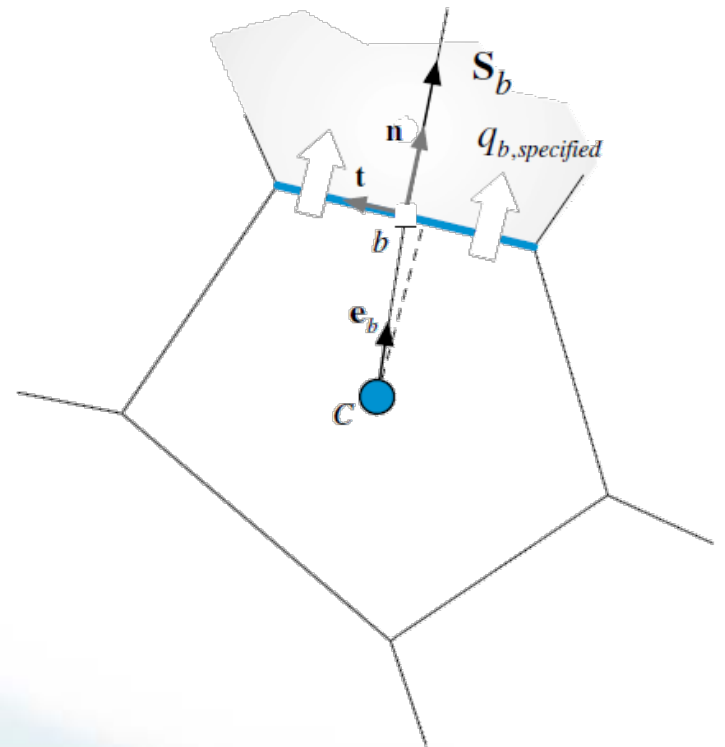
Condiciones de contorno

Newman: valor de flujo impuesto

El valor del flujo es conocido en la cara b q_b

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_b^\phi \cdot \mathbf{S}_b &= \underbrace{\mathbf{J}_b^\phi \cdot \mathbf{n}_b}_{\text{specified flux}} S_b \\ &= q_{b,\text{specified}} S_b \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Flux}C_b &= 0 \\ \text{Flux}V_b &= q_{b,\text{specified}} S_b \end{aligned}$$



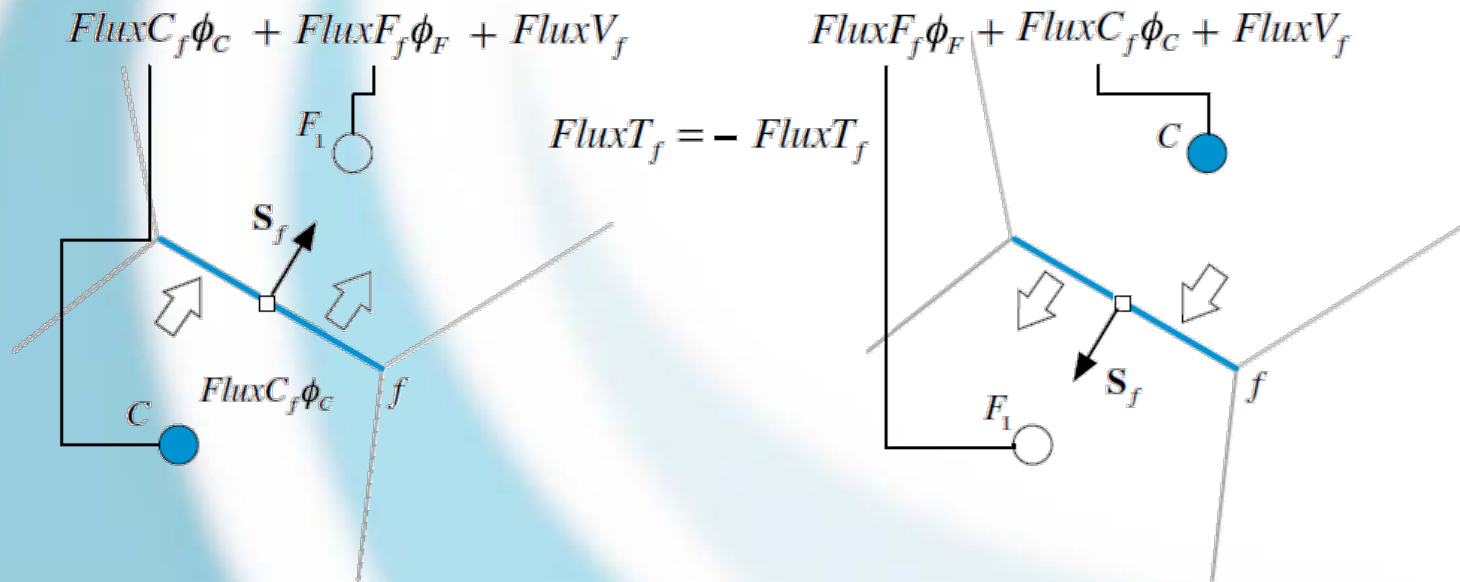
Propiedades de las ecuaciones discretizadas

Cuando el tamaño de los elementos tiende a cero, la solución numérica tenderá a la solución exacta de la ecuación independientemente de los perfiles de interpolación considerados para la evaluación de los valores de ϕ en los elementos.

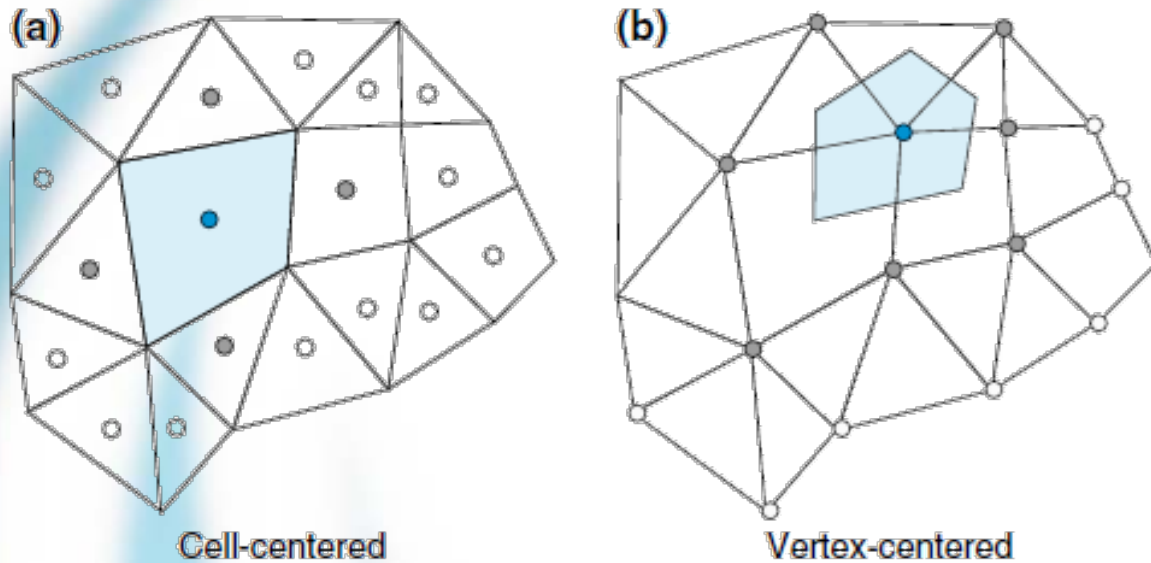
Sin embargo, como se consideran volúmenes finitos, es importante que la solución cumpla ciertas propiedades para garantizar su significancia.

Conservación

Desde un punto de vista físico es importante que las variables que se transportan, normalmente conservativas, se conserven en el dominio discreto también. El método de los volúmenes finitos es conservativo porque el cálculo del flujo que atraviesan la cara de un elemento se calculan usando los valores de los dos elementos que comparten la cara. El valor del flujo en una cara es igual para los dos elementos que la comparten.



Volúmenes finitos centrados en la celda o en el nodo



El enfoque más utilizado es el de los volúmenes centrados en las celdas, pero también existe el enfoque centrado en los nodos

Volúmenes finitos centrados en la celda

VENTAJAS

- Las variables y otros valores relacionados se almacenan en los baricentros de las celdas o elementos
- Los elementos son los mismo que los de la malla y en general el método tiene precisión de segundo orden
- Permite el uso de elementos poligonales generales como celdas sin necesidades de funciones forma

DESVENTAJAS:

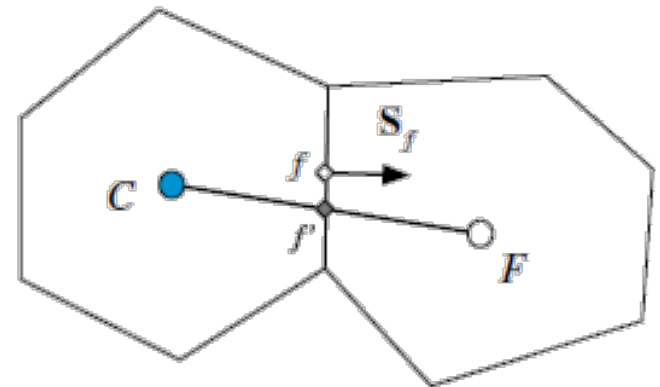
- El tratamiento de elementos no conjuncionales
- la manera en que el término de difusión se discretiza en celdas no ortogonales

Volúmenes finitos centrados en la celda

Desventaja: El tratamiento de elementos no conjuncionales

Afecta la precisión del método, depende de la calidad de la malla

Considerando las dos celdas de la figura, está claro que cualquier promedio de un valor definido en C y F se definirá en f' en lugar de f , el baricentro de la cara. Por lo tanto, cualquier procedimiento de discretización que utilice este valor interpolado no tendrá una precisión de segundo orden

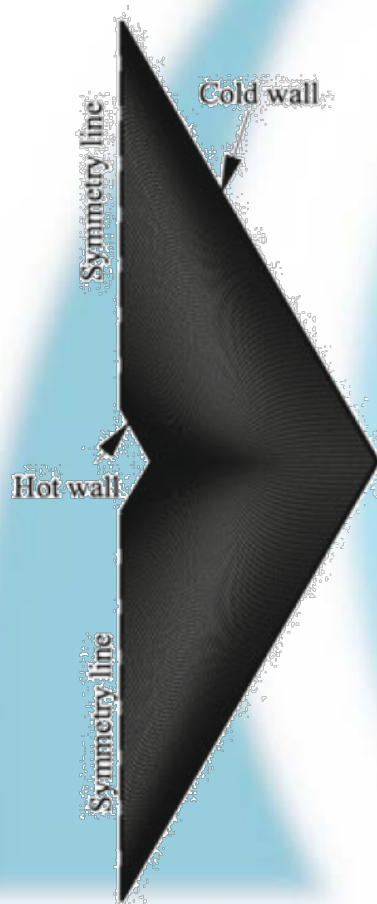


Volúmenes finitos centrados en la celda

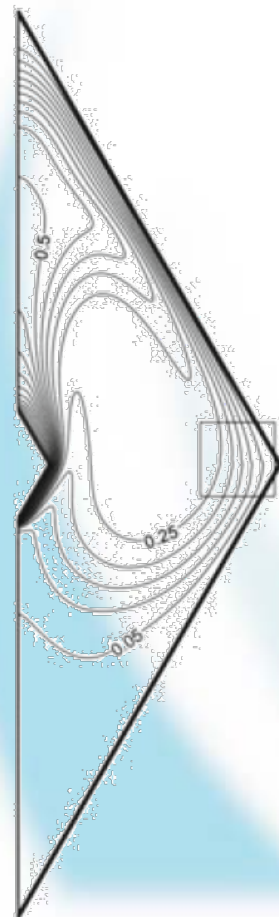
Desventaja: El tratamiento de elementos no conjuncionales

Ejemplo:

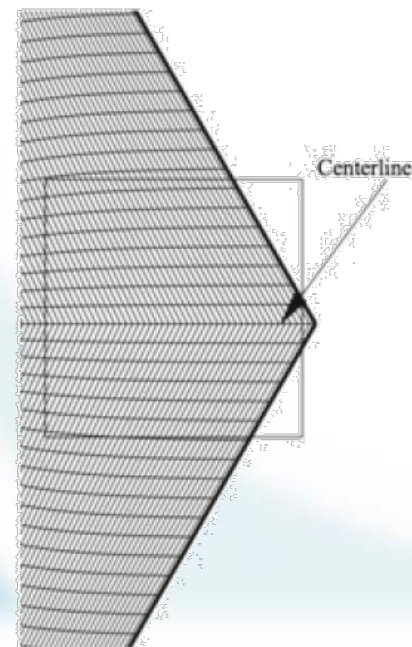
(a)



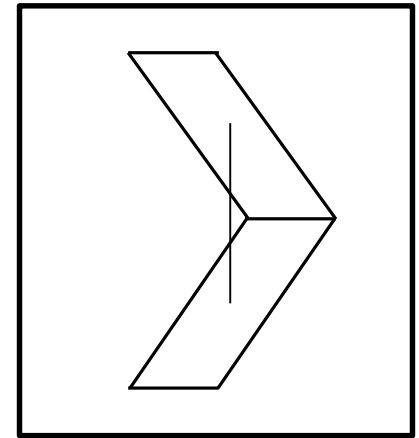
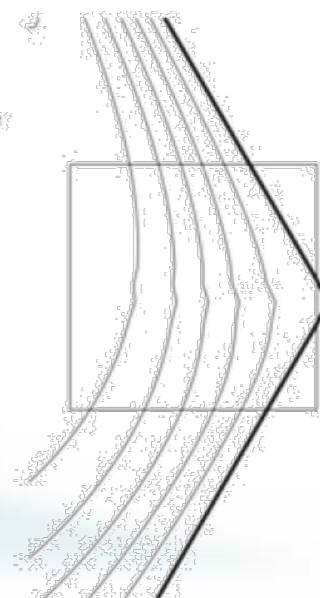
(b)



(c)



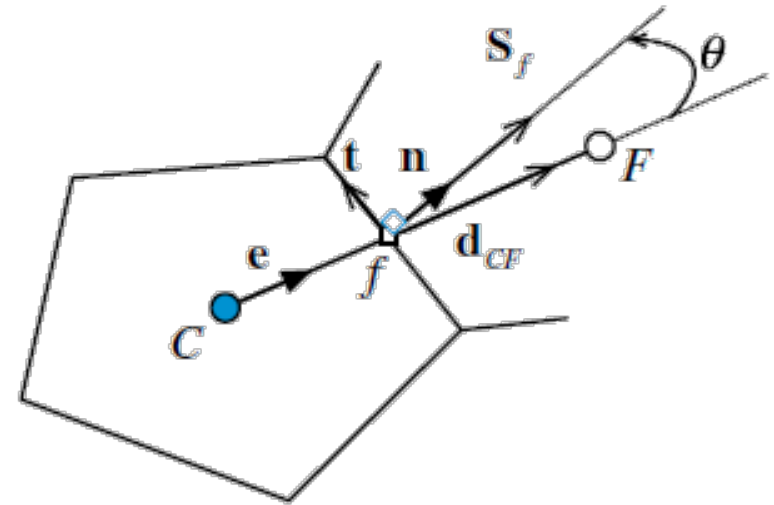
(d)



Volúmenes finitos centrados en la celda

Desventaja: La manera en que el término de difusión se discretiza en celdas no ortogonales

En la discretización del término de difusión, el valor del ángulo θ , que se extiende entre el vector unitario \mathbf{e} (que está en la dirección de la línea que une los centroides de los elementos C y F) y el vector unitario \mathbf{n} (que es normal que la cara compartida por los elementos C y F) puede volver el problema más o menos implícito, afectando la solidez del método aplicado en la discretización del término de difusión.

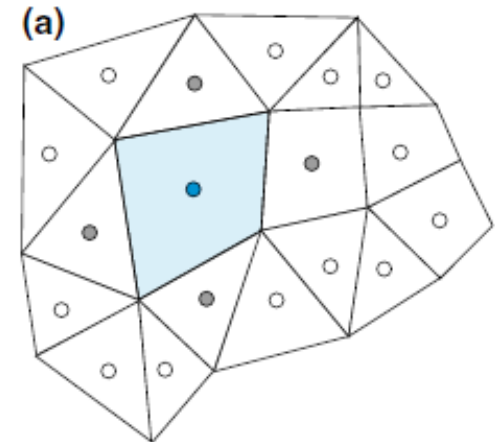


$$\nabla\phi \cdot \mathbf{S} = \underbrace{\nabla\phi \cdot \mathbf{E}}_{\text{Implicit orthogonal-like contribution}} + \underbrace{\nabla\phi \cdot \mathbf{T}}_{\text{Explicit non-orthogonal like contribution}}$$

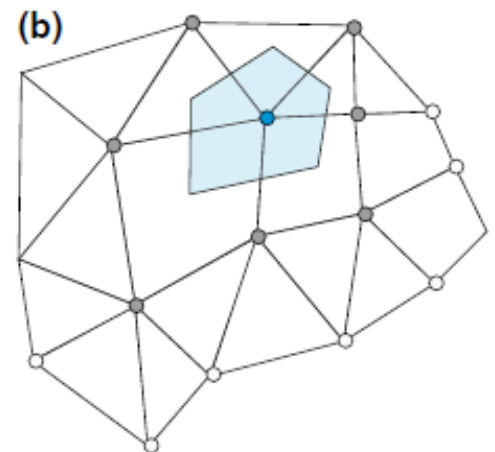
Cuanto mayor sea el ángulo θ , mayor será el término explícito y menos robusto será el método de discretización.

Volúmenes finitos centrados en la celda o en el nodo

- Para resumir, el esquema centrado en vértices con elementos duales y el esquema centrado en celdas, son numéricamente muy similares en el interior de un dominio para cálculos en estado estacionario.
- La única situación en la que el rendimiento del esquema centrado en vértices es superior al del esquema centrado en celdas es sobre una malla distorsionada.
- En todas las demás situaciones, es más ventajoso utilizar el esquema centrado en celdas, ya que conduce a una implementación más sencilla en un código de computadora.



Cell-centered



Vertex-centered



Difusión 2D en malla regular

Difusión 2D en una malla regular

Consideremos una malla regular uniforme para resolver la ecuación de difusión en estado estacionario

$$-\nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) = Q^\phi$$

Donde ϕ es la variable, Γ^ϕ es el coeficiente de difusión y Q^ϕ es una fuente por unidad de área

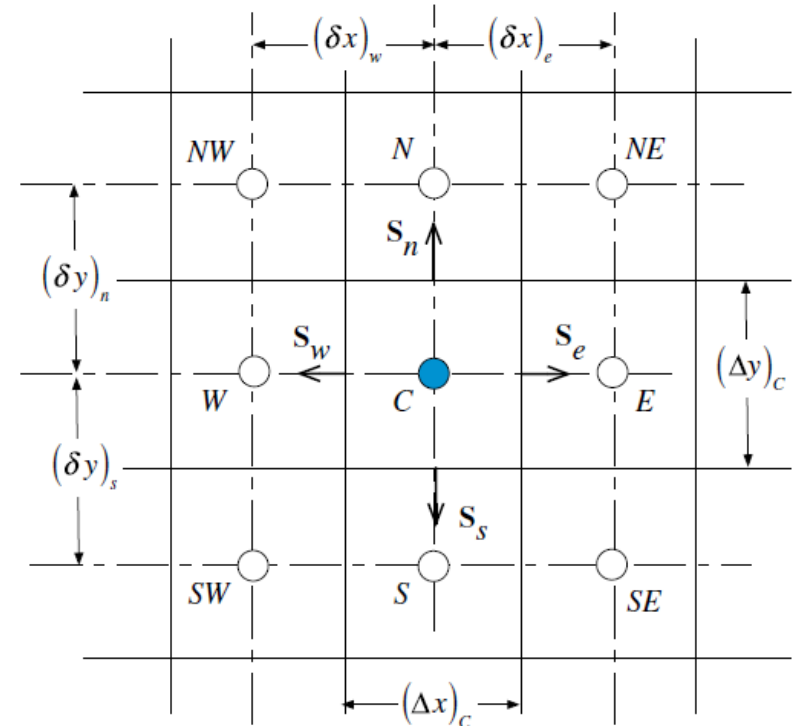
Definiendo:

$$\mathbf{J}^{\phi,D} = -\Gamma^\phi \nabla \phi$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}^{\phi,D} = Q^\phi$$

$$\sum_{f \sim nb(C)} (-\Gamma^\phi \nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f = Q_C^\phi V_C$$

Discretizando



Difusión 2D en una malla regular

$$\sum_{f \sim nb(C)} (-\Gamma^\phi \nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f = Q_C^\phi V_C$$

Expandiendo la anterior expresión se obtiene:

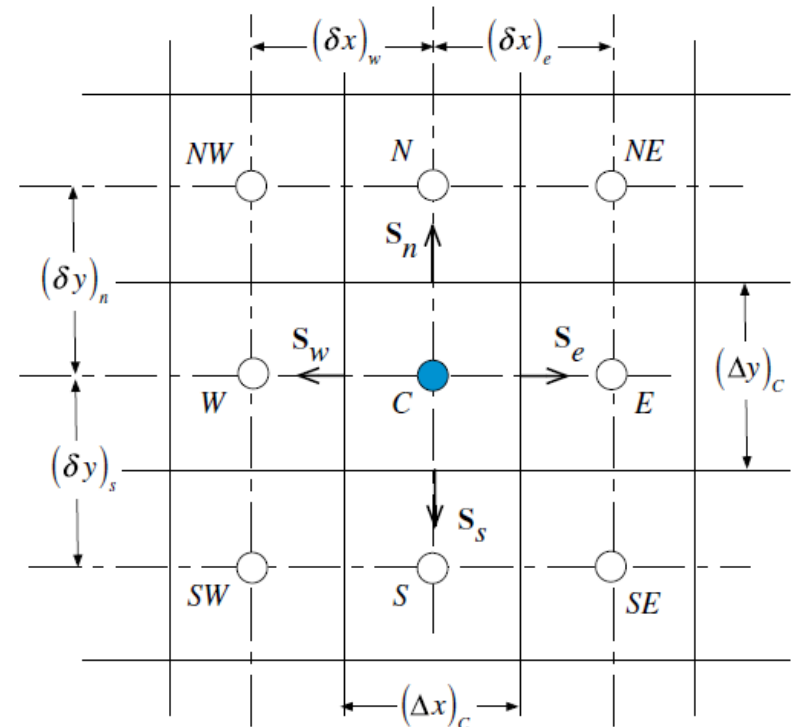
$$(-\Gamma^\phi \nabla \phi)_e \cdot \mathbf{S}_e + (-\Gamma^\phi \nabla \phi)_w \cdot \mathbf{S}_w + (-\Gamma^\phi \nabla \phi)_n \cdot \mathbf{S}_n + (-\Gamma^\phi \nabla \phi)_s \cdot \mathbf{S}_s = Q_C^\phi V_C$$

En una malla regular uniforme los vectores de superficie normales a las caras son:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_e &= +(\Delta y)_e \mathbf{i} = \|\mathbf{S}_e\| \mathbf{i} = S_e \mathbf{i} & \mathbf{S}_w &= -(\Delta y)_w \mathbf{i} = -\|\mathbf{S}_w\| \mathbf{i} = -S_w \mathbf{i} \\ \mathbf{S}_n &= +(\Delta x)_n \mathbf{j} = \|\mathbf{S}_n\| \mathbf{j} = S_n \mathbf{j} & \mathbf{S}_s &= -(\Delta x)_s \mathbf{j} = -\|\mathbf{S}_s\| \mathbf{j} = -S_s \mathbf{j} \end{aligned}$$

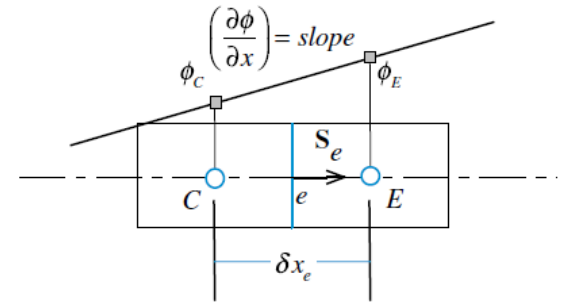
El flujo difusivo para la cara este es:

$$\begin{aligned} J_e^{\phi,D} &= -(\Gamma^\phi \nabla \phi)_e \cdot \mathbf{S}_e \\ &= -\Gamma_e^\phi S_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \mathbf{j} \right)_e \cdot \mathbf{i} \\ &= -\Gamma_e^\phi (\Delta y)_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \end{aligned}$$



Difusión 2D en una malla regular

$$J_e^{\phi,D} = -\Gamma_e^{\phi} (\Delta y)_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e$$



Asumiendo que ϕ varía linealmente entre los baricentros de las celdas el gradiente puede escribirse como:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \frac{\phi_E - \phi_C}{(\delta x)_e}$$

Substituyendo en la expresión de flujo anterior se obtiene:

$$\begin{aligned} FluxT_e &= -\Gamma_e^{\phi} (\Delta y)_e \frac{(\phi_E - \phi_C)}{\delta x_e} \\ &= \Gamma_e^{\phi} \frac{(\Delta y)_e}{\delta x_e} (\phi_C - \phi_E) \\ &= FluxC_e \phi_C + FluxF_e \phi_E + FluxV_e \end{aligned}$$

Definiendo:

$$gDiff_e = \frac{(\Delta y)_e}{\delta x_e} = \frac{\|\mathbf{S}_e\|}{\|\mathbf{d}_{CE}\|} = \frac{S_e}{d_{CE}}$$

donde d_{CE} es la distancia de los baricentros entre C y E

$$FluxC_e = \Gamma_e^{\phi} gDiff_e$$

$$FluxF_e = -\Gamma_e^{\phi} gDiff_e$$

$$FluxV_e = 0$$

Difusión 2D en una malla regular

Realizando un procedimiento análogo para las otras caras y substituyendo en la siguiente ecuación

$$(-\Gamma^\phi \nabla \phi)_e \cdot \mathbf{S}_e + (-\Gamma^\phi \nabla \phi)_w \cdot \mathbf{S}_w + (-\Gamma^\phi \nabla \phi)_n \cdot \mathbf{S}_n + (-\Gamma^\phi \nabla \phi)_s \cdot \mathbf{S}_s = Q_C^\phi V_C$$

Se obtiene:

$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S = b_C$$

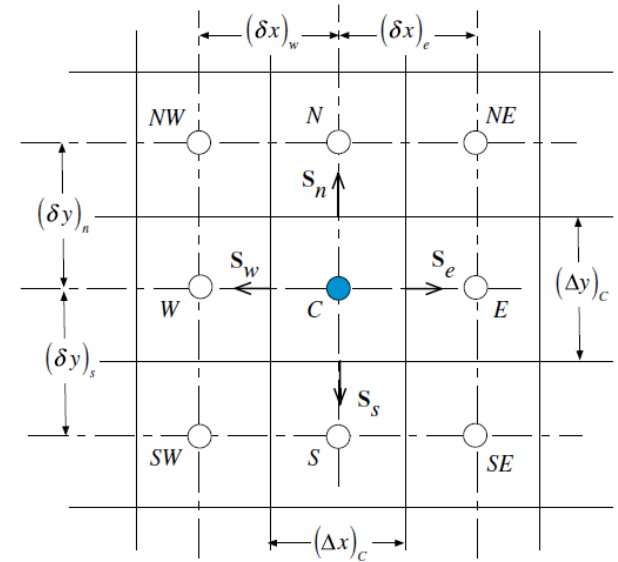
$$\begin{aligned} a_E &= FluxF_e = -\Gamma_e^\phi g Diff_e \\ a_W &= FluxF_w = -\Gamma_w^\phi g Diff_w \\ a_N &= FluxF_n = -\Gamma_n^\phi g Diff_n \\ a_S &= FluxF_s = -\Gamma_s^\phi g Diff_s \\ a_C &= FluxC_e + FluxC_w + FluxC_n + FluxC_s \\ &= -(a_E + a_W + a_N + a_S) \\ b_C &= Q_C^\phi V_C \end{aligned}$$

O de forma compacta:

$$a_C \phi_C + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F = b_C$$

Difusión 2D en una malla regular

Si consideramos una malla regular homogénea con $\Delta x = \Delta y = \Delta l$ y un único valor de difusión para todo el dominio Γ^ϕ :



$$a_C \phi_C + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F = b_C$$



$$4\Gamma^\phi \phi_C - \Gamma^\phi \phi_E - \Gamma^\phi \phi_W - \Gamma^\phi \phi_N - \Gamma^\phi \phi_S = Q_C^\phi (\Delta l)^2$$

$$\begin{aligned} a_E &= Flux F_e = -\Gamma_e^\phi g Diff_e \\ a_W &= Flux F_w = -\Gamma_w^\phi g Diff_w \\ a_N &= Flux F_n = -\Gamma_n^\phi g Diff_n \\ a_S &= Flux F_s = -\Gamma_s^\phi g Diff_s \\ a_C &= Flux C_e + Flux C_w + Flux C_n + Flux C_s \\ &= -(a_E + a_W + a_N + a_S) \\ b_C &= Q_C^\phi V_C \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} a_E &= -\Gamma^\phi \\ a_W &= -\Gamma^\phi \\ a_N &= -\Gamma^\phi \\ a_S &= -\Gamma^\phi \\ a_C &= 4\Gamma^\phi \\ b_C &= Q_C^\phi (\Delta l)^2 \end{aligned}$$



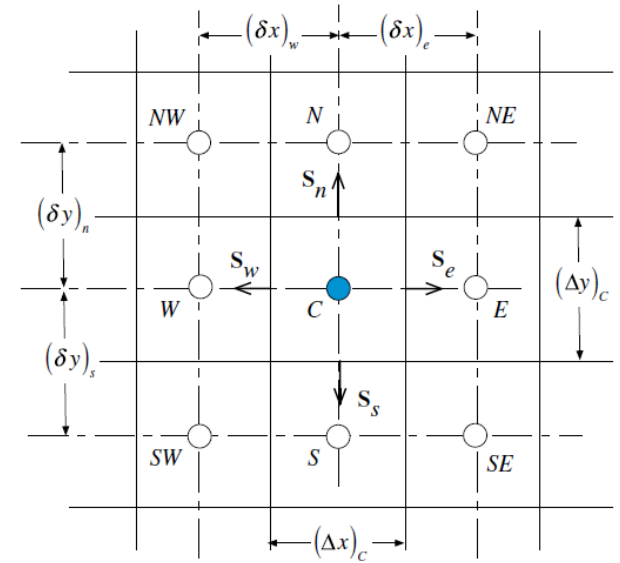
Difusión 2D en una malla regular

$$4\Gamma^{\phi}\phi_C - \Gamma^{\phi}\phi_E - \Gamma^{\phi}\phi_W - \Gamma^{\phi}\phi_N - \Gamma^{\phi}\phi_S = Q^{\phi}(\Delta l)^2$$

Para resolver problema sustituimos C, E, W, N y S por el numero de cada celda

$$4\Gamma^{\phi}\phi_{i,j} - \Gamma^{\phi}\phi_{i+1,j} - \Gamma^{\phi}\phi_{i-1,j} - \Gamma^{\phi}\phi_{i,j+1} - \Gamma^{\phi}\phi_{i,j-1} = Q^{\phi}(\Delta l)^2$$

Y por cada elemento obtenemos una ecuación con 5 incógnitas



Difusión 2D en una malla regular

Un método de discretización adecuado debe dar como resultado una ecuación algebraica discretizada que refleje las características de la ecuación de conservación original. A continuación se presentan dos reglas adicionales que los coeficientes de la ecuación discretizada deben satisfacer.

La regla de la suma cero

Consideremos un caso 1D sin término fuente:

$$-\nabla \cdot (\Gamma \phi \nabla \phi) = 0$$

En su forma discretizada:

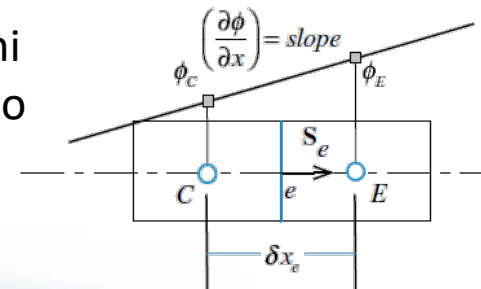
$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W = 0$$

$$a_E = -\Gamma_e^\phi g \text{Diff}_e$$

$$a_W = -\Gamma_w^\phi g \text{Diff}_w$$

$$a_C = -(a_E + a_W)$$

El fenómeno físico que representa la ecuación es la difusión. Entonces los valores entre los baricentros de celdas no deben ser ni mayores ni menores que el de los baricentros. Esto está garantizado con una interpolación lineal. Una interpolación de orden 2 podría no garantizar esto produciendo resultados sin sentido físico.



Difusión 2D en una malla regular

La regla de la suma cero

De acuerdo a la ecuación si le sumamos una constante a una solución, obtenemos otra solución

$$-\nabla \cdot (\Gamma \phi \nabla \phi) = 0$$

Esta propiedad también debería cumplirla la solución de la ecuación discretizada

$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W = 0$$

$$\left. \begin{aligned} a_C \phi_C + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F &= 0 \\ a_C (\phi_C + \text{constant}) + \sum_{F \sim NB(C)} a_F (\phi_F + \text{constant}) &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow a_C + \sum_{F \sim NB(C)} a_F = 0$$

$$a_C = - \sum_{F \sim NB(C)} a_F$$

$$\sum_{F \sim NB(C)} \frac{a_F}{a_C} = -1$$

Entonces ϕ_C puede verse como un promedio de los valores vecinos

$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W = 0$$

$$(-a_E - a_W) \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W = 0$$

$$\phi_C = (a_E \phi_E + a_W \phi_W) / (a_E + a_W)$$

Difusión 2D en una malla regular

La regla de los signos opuestos

$$a_C = - \sum_{F \sim NB(C)} a_F$$

Las derivaciones anteriores demostraron que los coeficientes a_C y a_F son de signos opuestos. Esto es de importancia física, ya que implica que a medida que los valores de ϕ_F aumentan o disminuyen, se espera que el valor de ϕ_C aumente o disminuya.

Esto está relacionado con la acotabilidad de la solución y sugiere que una condición suficiente para que se satisfaga, es que los coeficientes vecinos y el principal sean de signos opuestos. Si no, entonces la propiedad de acotabilidad no puede imponerse.

Condición de contorno de Dirichlet

El valor de ϕ es impuesto en un contorno ϕ_b

El flujo en la cara es:

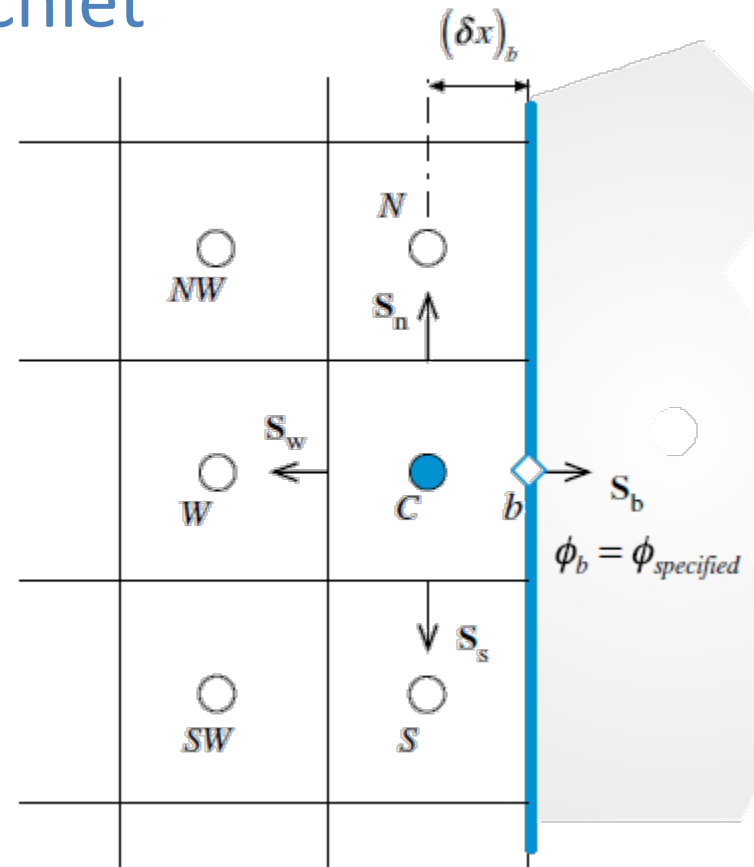
$$\begin{aligned} FluxT_b &= -\Gamma_b^\phi (\nabla \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b \\ &= -\Gamma_b^\phi \frac{\|\mathbf{S}_b\|}{\|\mathbf{d}_{Cb}\|} (\phi_b - \phi_C) \\ &= FluxC_b \phi_C + FluxV_b \end{aligned}$$

Para nuestro caso:

$$FluxT_b = -\Gamma^\phi \frac{\Delta y}{\Delta x/2} (\phi_b - \phi_C) = -2\Gamma^\phi (\phi_b - \phi_C)$$

Substituyendo en la ecuación :

$$5\Gamma^\phi \phi_C - \Gamma^\phi \phi_W - \Gamma^\phi \phi_N - \Gamma^\phi \phi_S = Q^\phi (\Delta l)^2 + 2\Gamma^\phi \phi_b$$



Condición de contorno de Newman

El valor del flujo es impuesto en un contorno ϕ_b

El flujo en la cara es:

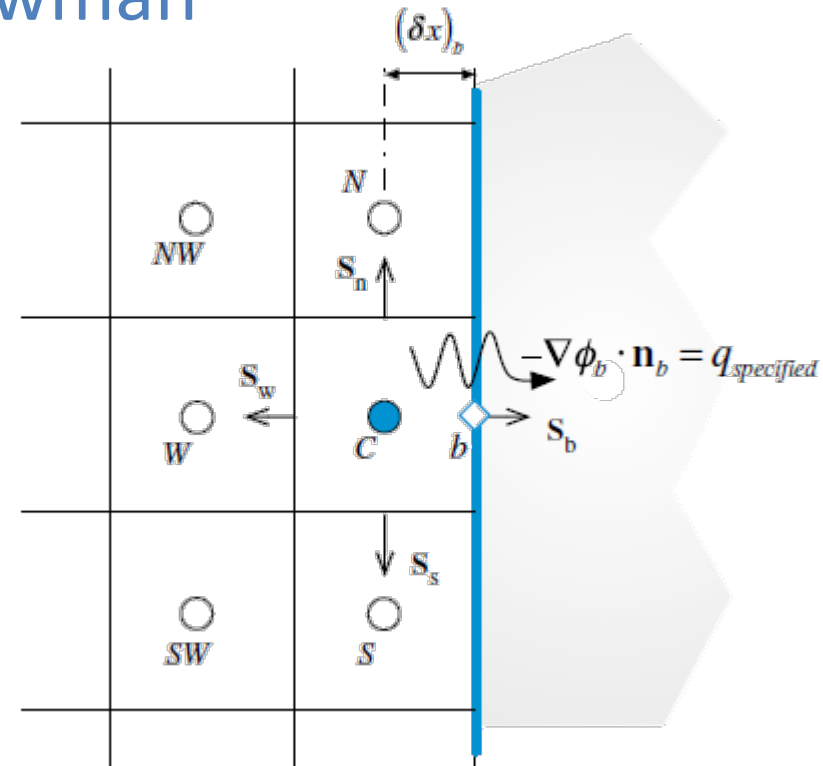
$$-(\Gamma^\phi \nabla \phi)_b \cdot \mathbf{i} = q_b$$

Para nuestro caso:

$$\text{Flux} T_b = q_b \Delta l$$

Substituyendo en la ecuación :

$$3\Gamma^\phi \phi_C - \Gamma^\phi \phi_W - \Gamma^\phi \phi_N - \Gamma^\phi \phi_S = Q^\phi (\Delta l)^2 - q_b \Delta l$$





Advección en 1D

Advección en 1D

Solución Analítica

Ecuación de transporte con advección y difusión para estado estacionario:

$$\frac{d(\rho u \phi)}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \right) = 0$$

Considerando la ecuación de continuidad para un problema 1D de sección constante:

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0$$



$$\rho u = cte$$

La ecuación de transporte se puede expresar como:

$$\rho u \phi - \Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} = c_1$$



reagrupando

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{\rho u}{\Gamma \phi} \phi - \frac{c_1}{\Gamma \phi}$$



cambio de variable

$$\Phi = \frac{\rho u}{\Gamma \phi} \phi - \frac{c_1}{\Gamma \phi}$$

$$\frac{d\Phi}{dx} = \frac{\rho u}{\Gamma \phi} \Phi$$



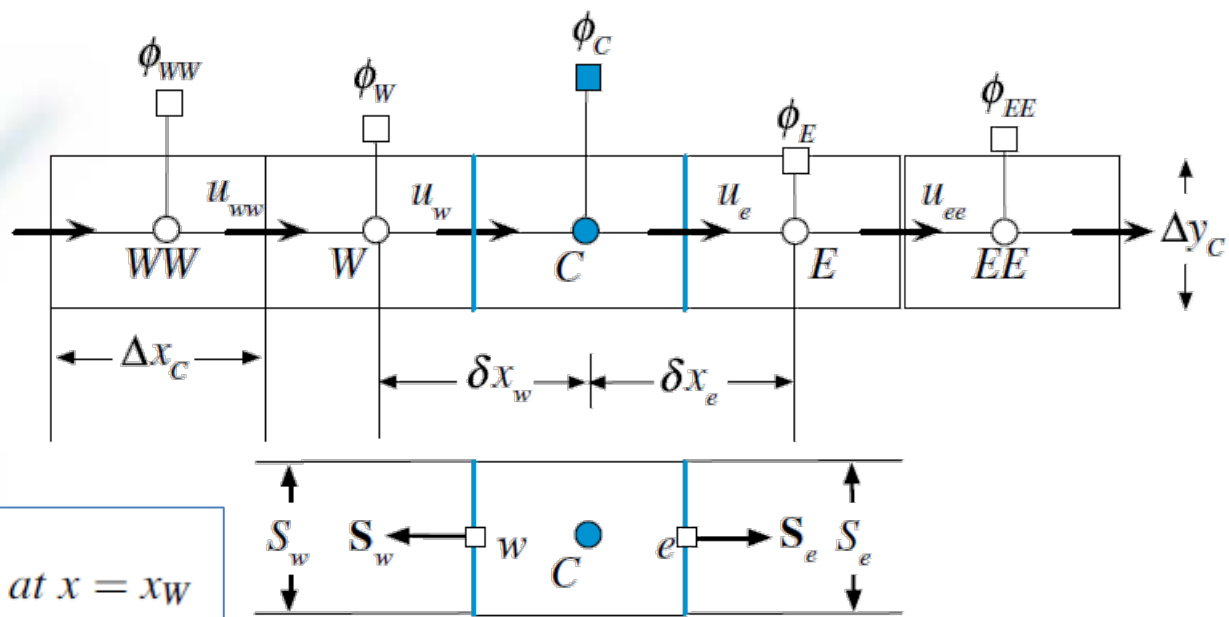
$$\frac{d\Phi}{\Phi} = \frac{\rho u}{\Gamma \phi} dx \Rightarrow \ln(\Phi) = \frac{\rho u}{\Gamma \phi} x + c_3 \Rightarrow \Phi = c_2 e^{\frac{\rho u}{\Gamma \phi} x}$$



$$\phi = \frac{c_2 \Gamma \phi e^{\frac{\rho u}{\Gamma \phi} x} + c_1}{\rho u}$$

Advección en 1D

$$\phi = \frac{c_2 \Gamma \phi e^{\frac{\rho u}{\Gamma \phi} x} + c_1}{\rho u}$$



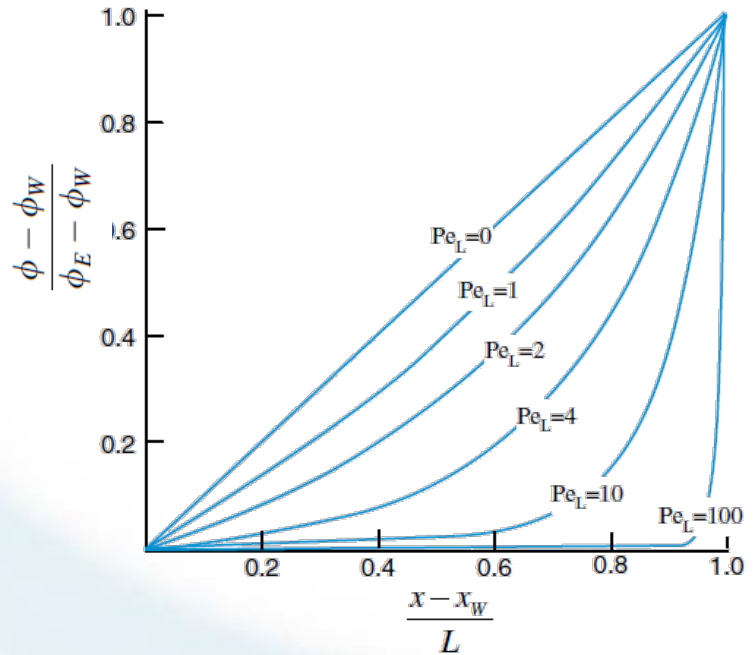
Aplicando la solución entre dos puntos W y E:

$$\begin{cases} \phi = \phi_W \text{ at } x = x_W \\ \phi = \phi_E \text{ at } x = x_E \end{cases}$$

$$\frac{\phi - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{e^{Pe_L \frac{x-x_W}{L}} - 1}{e^{Pe_L} - 1}$$

$$Pe_L = \frac{\rho u L}{\Gamma \phi}$$

$$L = x_E - x_W.$$



Advección en 1D

Solución por el método de los volúmenes finitos

La ecuación de transporte integrada en un volumen para estado estacionario tiene la siguiente expresión:

$$\int_{V_c} [\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) - \nabla \cdot (\Gamma \phi \nabla \phi)] dV = 0$$

$$\mathbf{J}^{\phi,C} = \rho \mathbf{v} \phi$$

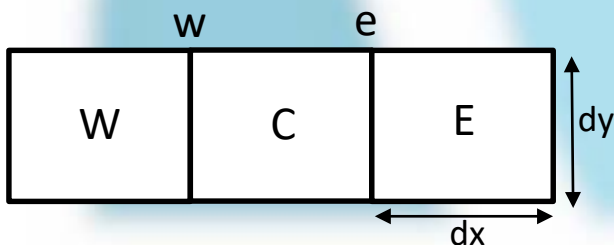
$$\mathbf{J}^{\phi,D} = -\Gamma \phi \nabla \phi.$$

Aplicando el teorema de la divergencia:

$$\int_{V_c} [\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) - \nabla \cdot (\Gamma \phi \nabla \phi)] dV = \int_{\partial V_c} \left[\rho u \phi \mathbf{i} - \Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \mathbf{i} \right] \cdot d\mathbf{S} = 0.$$

Remplazando las integrales por la sumatoria de flujos en las caras:

$$\sum_{f \sim nb(C)} \left(\rho u \phi \mathbf{i} - \Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \mathbf{i} \right)_f \cdot \mathbf{S}_f = 0.$$



$$\left[(\rho u \Delta y \phi)_e - \left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e \right] - \left[(\rho u \Delta y \phi)_w - \left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right] = 0$$

Advección en 1D

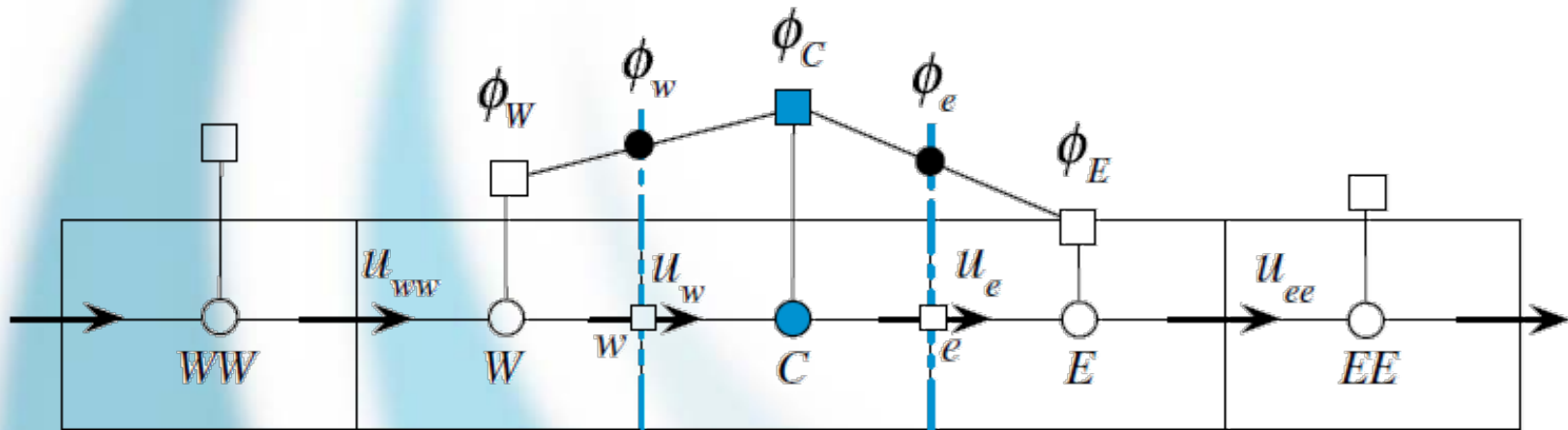
Derivación preliminar: esquema de diferencias centradas

Se considerará una interpolación lineal, como la considerada para la difusión, para ϕ

$$\phi(x) = k_0 + k_1(x - x_C)$$

El valor de ϕ en la cara e:

$$\phi_e = \phi_C + \frac{(\phi_E - \phi_C)}{(x_E - x_C)}(x_e - x_C).$$



Es una aproximación de segundo orden y para mallas uniformes implica:

$$\phi_e = \frac{\phi_C + \phi_E}{2}$$

Advección en 1D

Derivación preliminar: esquema de diferencias centradas

$$\left[(\rho u \Delta y \phi)_e - \left(\Gamma^\phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e \right] - \left[(\rho u \Delta y \phi)_w - \left(\Gamma^\phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right] = 0$$

Considerando una interpolación lineal para ϕ , el primer término de la ecuación anterior resulta en:

$$\begin{aligned} (\rho u \Delta y \phi)_e - \left(\Gamma^\phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e &= (\rho u \Delta y)_e \frac{(\phi_E + \phi_C)}{2} - \left(\Gamma^\phi \frac{\Delta y}{\delta x} \right)_e (\phi_E - \phi_C) \\ &= FluxC_e \phi_C + FluxF_e \phi_E + FluxV_e \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} FluxC_e &= \Gamma_e^\phi \frac{\Delta y_e}{\delta x_e} + \frac{(\rho u \Delta y)_e}{2} \\ FluxF_e &= -\Gamma_e^\phi \frac{\Delta y_e}{\delta x_e} + \frac{(\rho u \Delta y)_e}{2} \\ FluxV_e &= 0 \end{aligned}$$

Análogamente para el segundo término:

$$\begin{aligned} - \left[(\rho u \Delta y \phi)_w - \left(\Gamma^\phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right] &= - \left[(\rho u \Delta y)_w \frac{(\phi_W + \phi_C)}{2} - \left(\Gamma^\phi \frac{\Delta y}{\delta x} \right)_w (\phi_C - \phi_W) \right] \\ &= FluxC_w \phi_C + FluxF_w \phi_W + FluxV_w \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} FluxC_w &= \Gamma_w^\phi \frac{\Delta y_w}{\delta x_w} - \frac{(\rho u \Delta y)_w}{2} \\ FluxF_w &= -\Gamma_w^\phi \frac{\Delta y_w}{\delta x_w} - \frac{(\rho u \Delta y)_w}{2} \\ FluxV_w &= 0 \end{aligned}$$

Advección en 1D

$$\left[(\rho u \Delta y \phi)_e - \left(\Gamma^\phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e \right] - \left[(\rho u \Delta y \phi)_w - \left(\Gamma^\phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right] = 0$$

Substituyendo las expresiones anteriores en la ecuación se obtiene:

$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W = 0$$

Con:

$$a_E = Flux F_e = -\Gamma_e^\phi \frac{\Delta y_e}{\delta x_e} + \frac{(\rho u \Delta y)_e}{2}$$

$$a_W = Flux F_w = -\Gamma_w^\phi \frac{\Delta y_w}{\delta x_w} - \frac{(\rho u \Delta y)_w}{2}$$

$$a_C = Flux C_e + Flux C_w = \left(\frac{(\rho u \Delta y)_e}{2} + \Gamma_e^\phi \frac{\Delta y_e}{\delta x_e} \right) + \left(-\frac{(\rho u \Delta y)_w}{2} + \Gamma_w^\phi \frac{\Delta y_w}{\delta x_w} \right)$$

Considerando $\Delta y_e = \Delta y_w = \Delta y$ y continuidad $(\rho u \Delta y)_e - (\rho u \Delta y)_w = 0$ y Γ^ϕ uniforme

$$a_E = -\frac{\Gamma^\phi}{x_E - x_C} + \frac{(\rho u)_e}{2}$$

$$a_W = -\frac{\Gamma^\phi}{x_C - x_W} - \frac{(\rho u)_w}{2}$$

$$a_C = -(a_E + a_W)$$

$$\frac{\phi_C - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{a_E}{a_E + a_W}$$

$$\frac{\phi_C - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{Pe_L}{2} \right)$$

Con $L = x_E - x_W$

Advección en 1D

Comparando la solución analítica con el esquema de diferencias centradas

Analítica evaluada en C:

$$\frac{\phi - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{e^{Pe_L \frac{x-x_W}{L}} - 1}{e^{Pe_L} - 1}$$

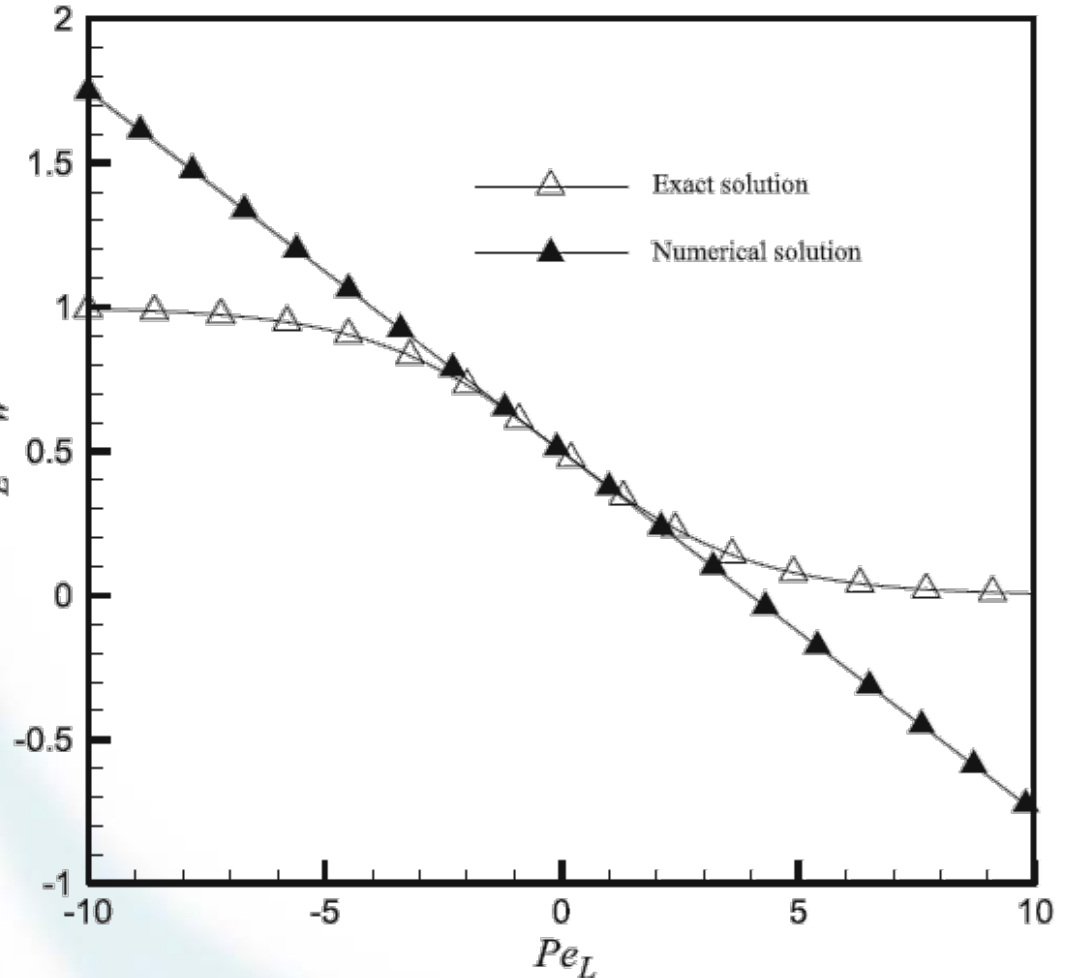
$$\frac{\phi_C - \phi_W}{\phi_E - \phi_W}$$

Diferencias centradas:

$$\frac{\phi_C - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{Pe_L}{2} \right)$$

$$L = x_E - x_W.$$

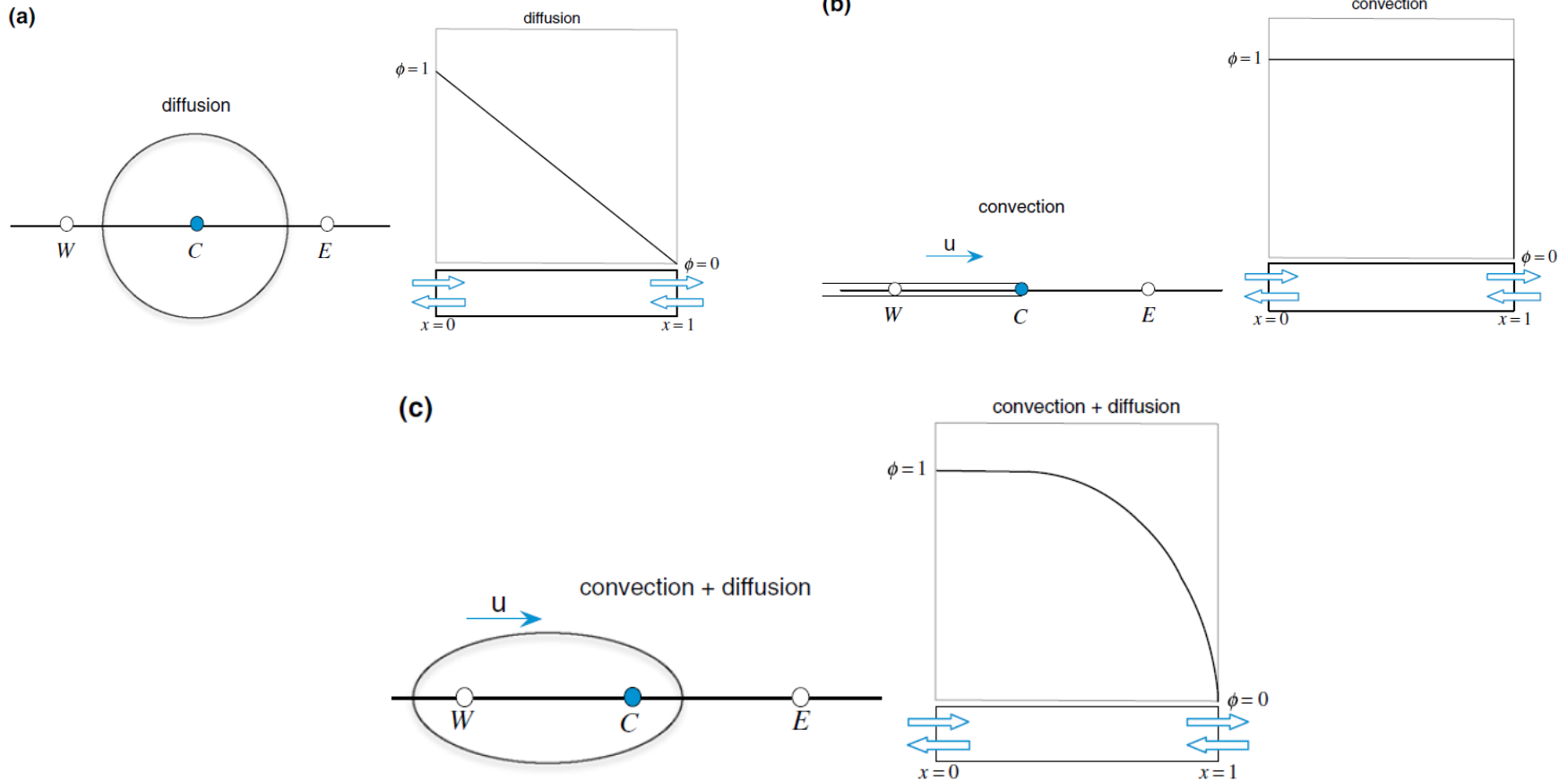
$$Pe_L = \frac{\rho u L}{\Gamma \phi}$$



La solución numérica no está acotada, tiende a $\pm\infty$ cuando Pe tiende a $\pm\infty$, la analítica tiende a 0 y a 1

Advección en 1D

¿Por que el esquema centrado no es adecuado cuando Pe es grande (la advección es grande)?



Advección en 1D

¿Para que valores de Pe puede usarse el esquema de diferencias centradas para la advección?

$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W = 0$$

$$a_E = FluxF_e = -\Gamma_e^\phi \frac{\Delta y_e}{\delta x_e} + \frac{(\rho u \Delta y)_e}{2}$$

$$a_W = FluxF_w = -\Gamma_w^\phi \frac{\Delta y_w}{\delta x_w} - \frac{(\rho u \Delta y)_w}{2}$$

$$a_C = FluxC_e + FluxC_w = \left(\frac{(\rho u \Delta y)_e}{2} + \Gamma_e^\phi \frac{\Delta y_e}{\delta x_e} \right) + \left(-\frac{(\rho u \Delta y)_w}{2} + \Gamma_w^\phi \frac{\Delta y_w}{\delta x_w} \right)$$

Si a_W toma valores positivos la solución daría lugar a soluciones sin sentido físico

$$-\Gamma_e^\phi \frac{\Delta y_e}{\delta x_e} + \frac{(\rho u \Delta y)_e}{2} > 0 \Rightarrow \frac{(\rho u)_e \delta x_e}{\Gamma_e^\phi} > 2.$$

$$Pe = \frac{\rho u \delta x}{\Gamma^\phi}.$$

$$Pe > 2.$$

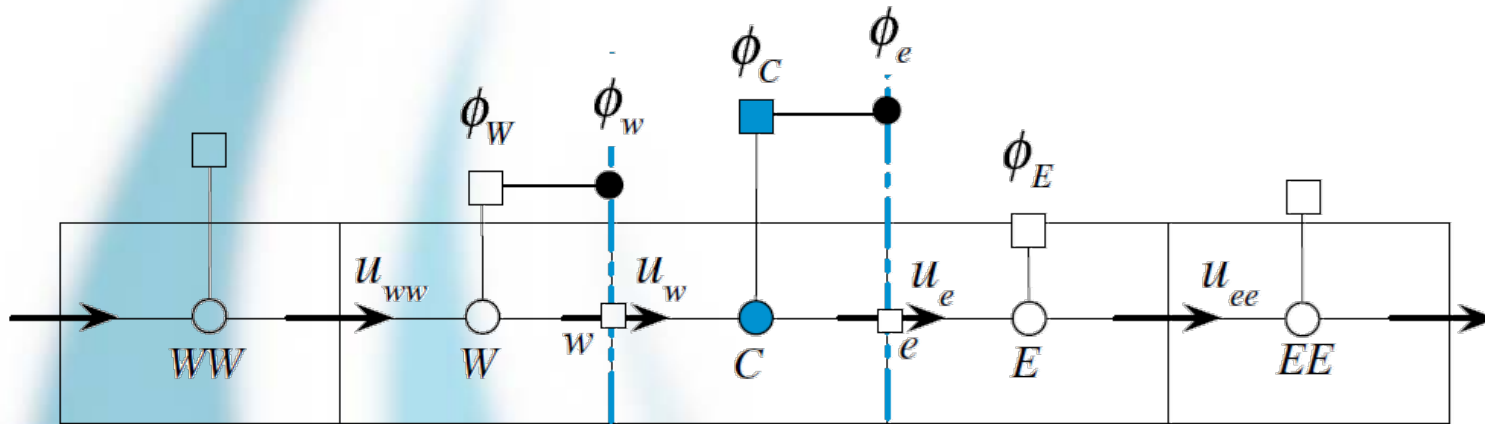
Para $Pe > 2$ un incremento en ϕ_E produciría una reducción en ϕ_C

Un $Pe > 2$ no cumple con la regla del signo opuesto

Advección en 1D

Esquema Upwind

El esquema Upwind básicamente imita la física básica de la advección en el sentido de que el valor de la cara de la celda depende del valor nodal “flujo arriba”, es decir, depende de la dirección del flujo.



$$\phi_e = \begin{cases} \phi_C & \text{if } \dot{m}_e > 0 \\ \phi_E & \text{if } \dot{m}_e < 0 \end{cases}$$

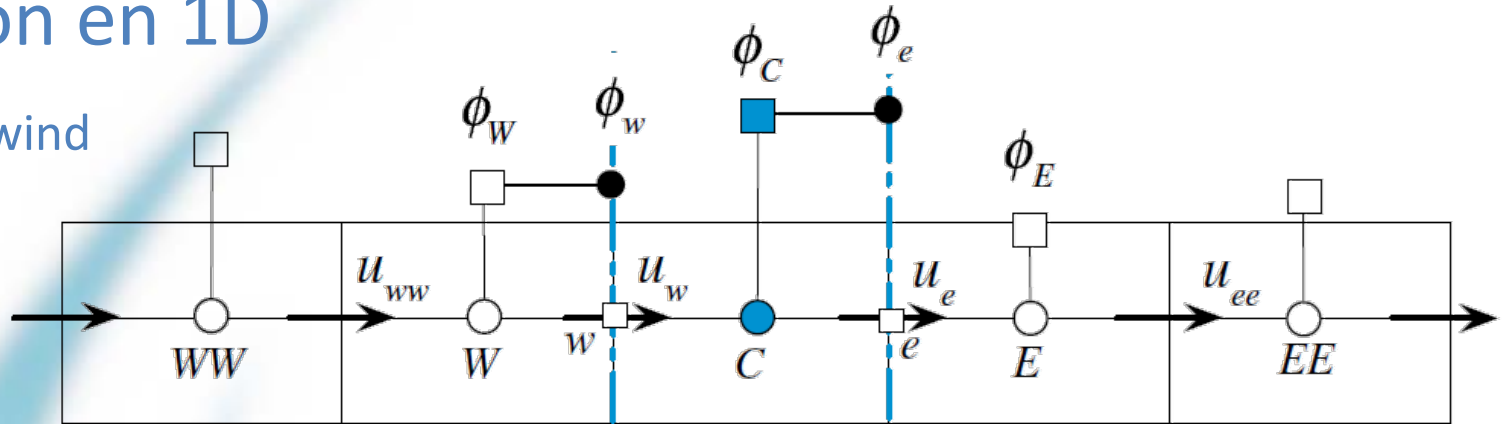
donde \dot{m}_e y \dot{m}_w son los flujos de soluto en las caras e y w respectivamente

$$\phi_w = \begin{cases} \phi_C & \text{if } \dot{m}_w > 0 \\ \phi_W & \text{if } \dot{m}_w < 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \dot{m}_e &= (\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{S})_e = (\rho u S)_e = (\rho u \Delta y)_e \\ \dot{m}_w &= (\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{S})_w = -(\rho u S)_w = -(\rho u \Delta y)_w \end{aligned}$$

Advección en 1D

Esquema Upwind



Entonces la advección en las caras puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \dot{m}_e \phi_e &= \|\dot{m}_e, 0\| \phi_C - \|\dot{m}_e, 0\| \phi_E \\ &= FluxC_e^{Conv} \phi_C + FluxF_e^{Conv} \phi_E + FluxV_e^{Conv} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} FluxC_e^{Conv} &= \|\dot{m}_e, 0\| \\ FluxF_e^{Conv} &= -\|\dot{m}_e, 0\| \\ FluxV_e^{Conv} &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{m}_w \phi_w &= \|\dot{m}_w, 0\| \phi_C - \|\dot{m}_w, 0\| \phi_W \\ &= FluxC_w^{Conv} \phi_C + FluxF_w^{Conv} \phi_W + FluxV_w^{Conv} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} FluxC_w^{Conv} &= \|\dot{m}_w, 0\| \\ FluxF_w^{Conv} &= -\|\dot{m}_w, 0\| \\ FluxV_w^{Conv} &= 0 \end{aligned}$$

$\|a, b\|$ representa el máximo de a y b

Advección en 1D

Esquema Upwind

La ecuación de transporte integrada en un volumen mantiene la forma para este esquema:

$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W = 0$$

Re agrupando la expresión se obtiene:

$$\frac{\phi_C - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{2 + \|\dot{m}_L, 0\|}{4 + |\text{Pe}_L|}$$

Cambia el cálculo de los coeficientes:

$$\begin{aligned} a_E &= \text{Flux}F_e^{\text{Conv}} + \text{Flux}F_e^{\text{Diff}} \\ &= - \|\dot{m}_e, 0\| - \Gamma_e^\phi \frac{S_e}{\delta x_e} \\ a_W &= \text{Flux}F_w^{\text{Conv}} + \text{Flux}F_w^{\text{Diff}} \\ &= - \|\dot{m}_w, 0\| - \Gamma_w^\phi \frac{S_w}{\delta x_w} \\ a_C &= \sum_f \left(\text{Flux}C_f^{\text{Conv}} + \text{Flux}C_f^{\text{Diff}} \right) \\ &= \|\dot{m}_e, 0\| + \|\dot{m}_w, 0\| + \Gamma_e^\phi \frac{S_e}{\delta x_e} + \Gamma_w^\phi \frac{S_w}{\delta x_w} \\ &= - (a_E + a_W) + \underbrace{(\dot{m}_e + \dot{m}_w)}_{=0} \end{aligned}$$

Advección en 1D

Comparando la solución analítica con los diferentes esquemas

Analítica evaluada en C:

$$\frac{\phi - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{e^{Pe_L \frac{x-x_W}{L}} - 1}{e^{Pe_L} - 1}$$

Diferencias centradas:

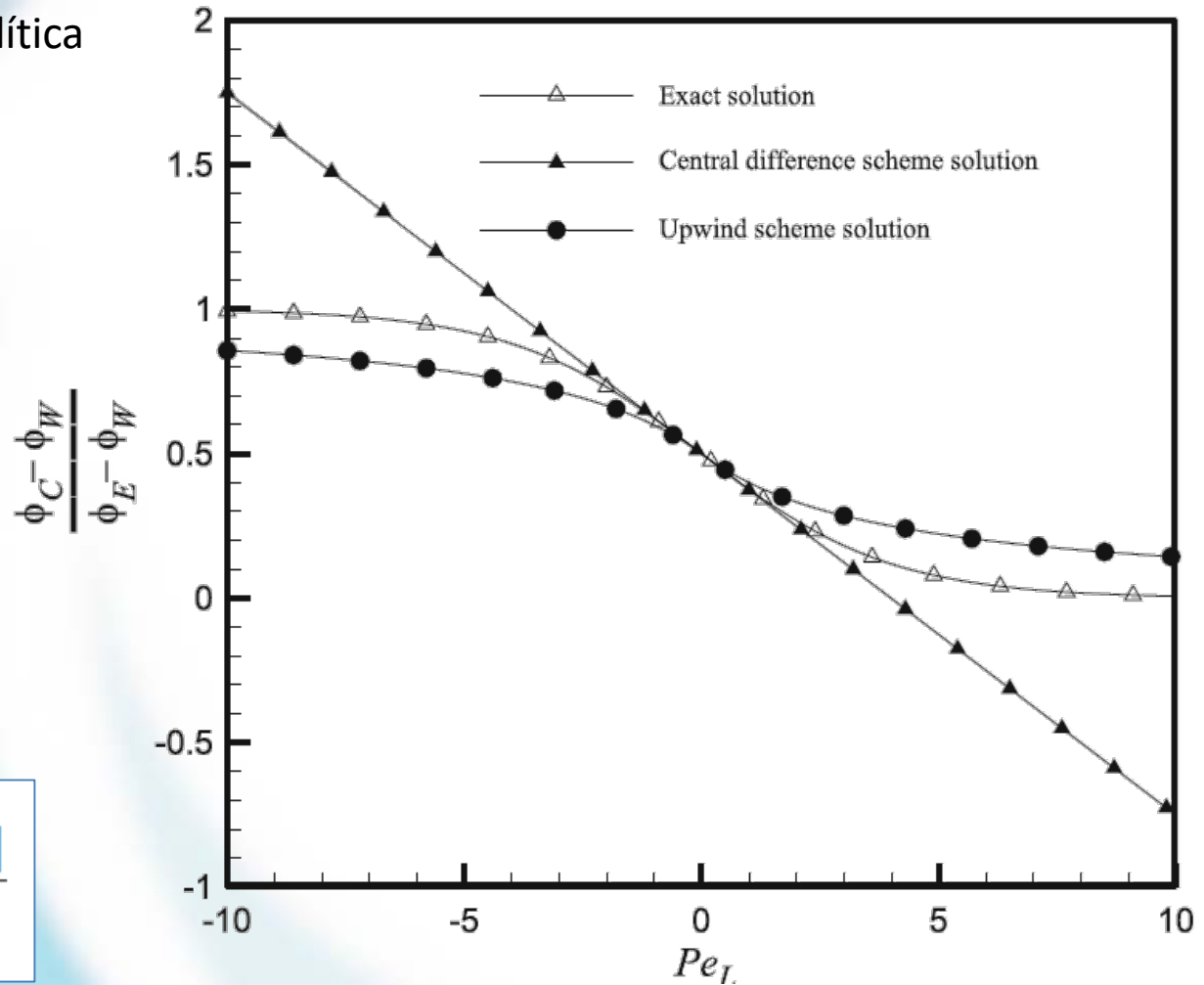
$$\frac{\phi_C - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{Pe_L}{2} \right)$$

Upwind:

$$\frac{\phi_C - \phi_W}{\phi_E - \phi_W} = \frac{2 + ||-Pe_L, 0||}{4 + |Pe_L|}$$

$$L = x_E - x_W.$$

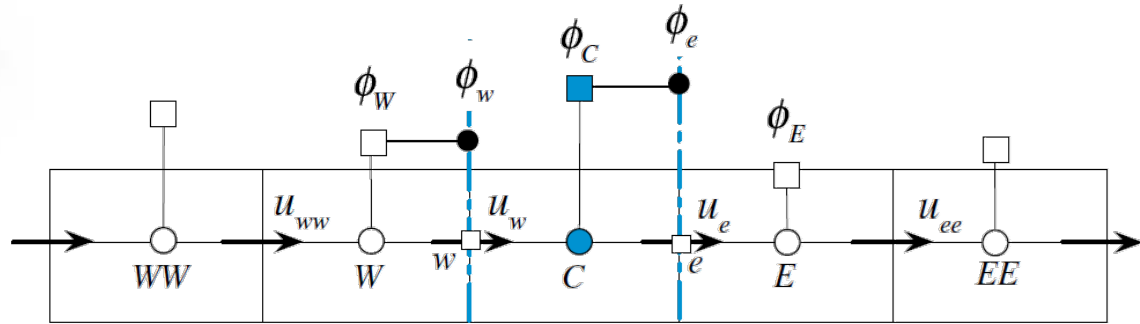
$$Pe_L = \frac{\rho u L}{\Gamma \phi}$$



La solución numérica del esquema Upwind está acotada respecto a Pe , aunque para Pe bajos es menos precisa que diferencias centradas

Advección en 1D

Esquema Upwind



El esquema Upwind produce una “difusión numérica” que aumenta el valor de la difusión efectiva en el problema

La ecuación de transporte discretizada considerando un esquema Upwind tiene la siguiente forma:

$$(\rho u \Delta y)_e \phi_C - (\rho u \Delta y)_w \phi_W - \left[\left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e - \left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right] = 0.$$

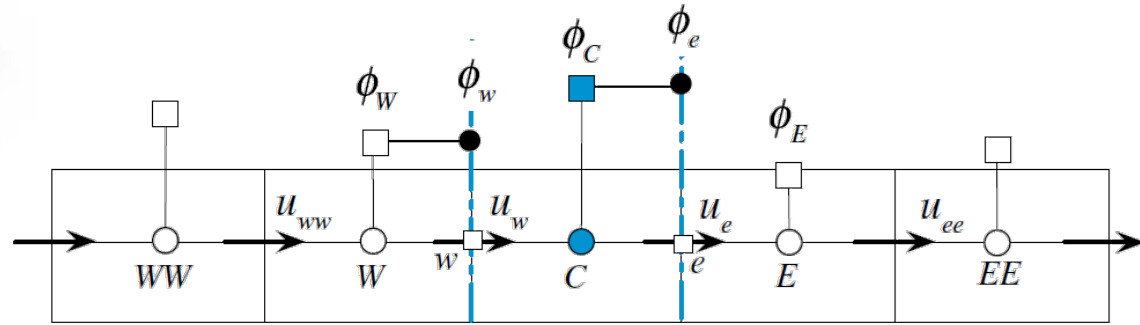
Mediante series de Taylor es posible expresar el valor de ϕ en el baricentro de la celda en función de su valor en la cara

$$\phi_C = \phi_e - \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_e \frac{(\delta x)_e}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_e \left(\frac{(\delta x)_e}{2} \right)^2 \dots$$

$$\phi_W = \phi_w - \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_w \frac{(\delta x)_w}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_w \left(\frac{(\delta x)_w}{2} \right)^2 \dots$$

Advección en 1D

Esquema Upwind



Truncando la serie de Taylor en los términos de segundo orden y substituyendo en la ecuación se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & (\rho u \Delta y)_e \phi_C - (\rho u \Delta y)_w \phi_W - \left[\left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e - \left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right] \\
 &= (\rho u \Delta y)_e \left[\phi_e - \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_e \frac{\delta x_e}{2} \right] - (\rho u \Delta y)_w \left[\phi_w - \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_w \frac{\delta x_w}{2} \right] \\
 & - \left[\left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e - \left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right]
 \end{aligned}$$

Re ordenando la expresión:

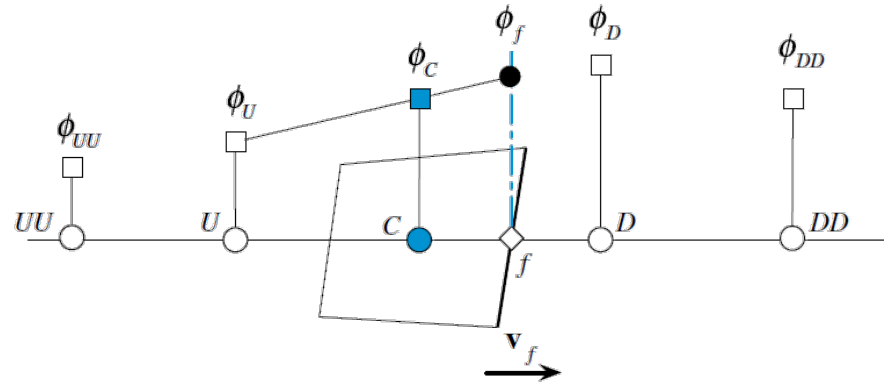
El esquema Upwind es equivalente a evaluar ϕ en las caras y aumentar la dispersión en $\rho u \frac{\delta x}{2}$

$$\begin{aligned}
 & (\rho u \Delta y)_e \phi_C - (\rho u \Delta y)_w \phi_W - \left[\left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e - \left(\Gamma \phi \frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right] \\
 &= (\rho u \Delta y)_e \phi_e - (\rho u \Delta y)_w \phi_w \\
 & - \left[\left(\Gamma \phi + \rho u \frac{\delta x}{2} \right)_e \left(\frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_e - \left(\Gamma \phi + \rho u \frac{\delta x}{2} \right)_w \left(\frac{d\phi}{dx} \Delta y \right)_w \right]
 \end{aligned}$$

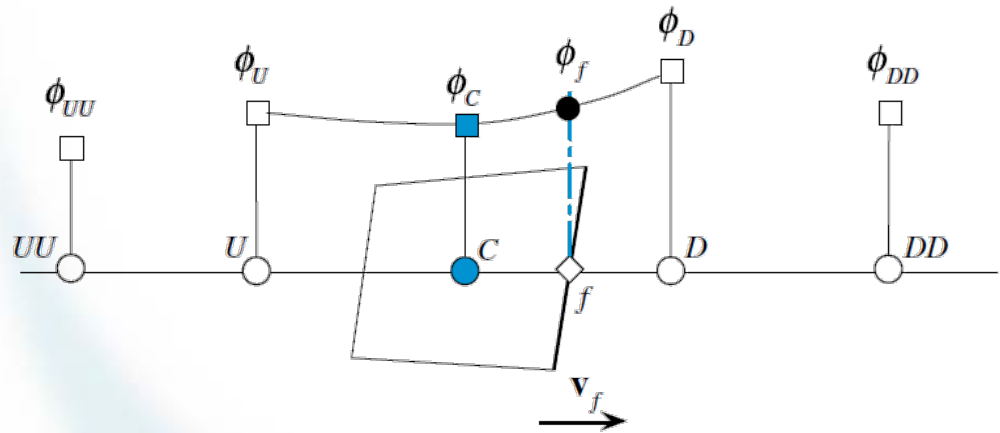
Advección en 1D

Existen otros esquemas de mayor orden que el Upwind

Upwind de alto orden



Quick



$$a_C \phi_C + a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_{EE} \phi_{EE} + a_{WW} \phi_{WW} = 0$$



Discretización temporal: el termino transitorio

Discretización temporal

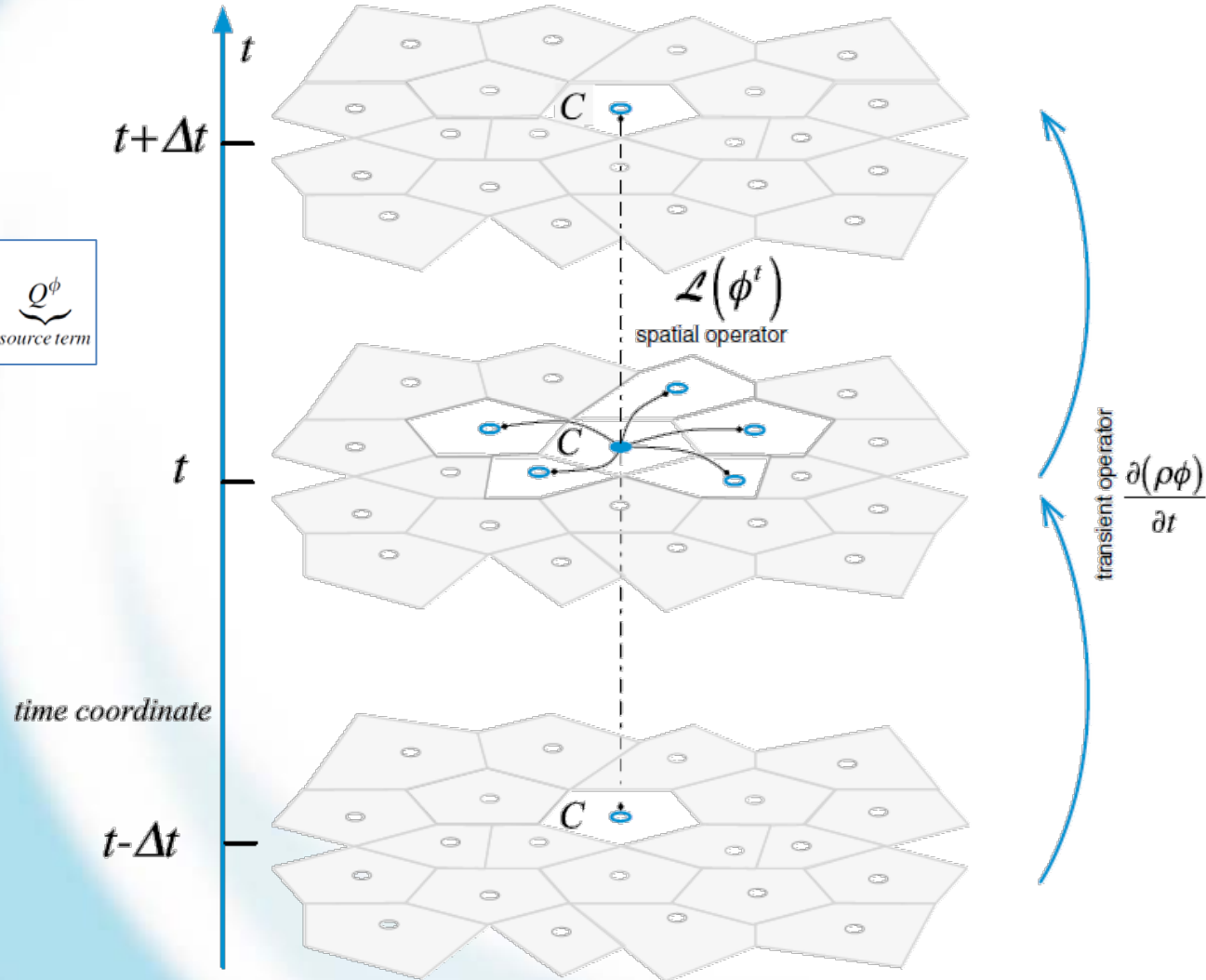
La ecuación de transporte

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_{\text{transient term}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi)}_{\text{convective term}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma\phi\nabla\phi)}_{\text{diffusion term}} + \underbrace{Q^\phi}_{\text{source term}}$$

se expresa como:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \mathcal{L}(\phi) = 0$$

El transitorio es
equivalente al
estacionario
cuando $t \rightarrow \infty$ o
cuando $\phi^{t+1} = \phi^t$



Discretización temporal

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \mathcal{L}(\phi) = 0$$

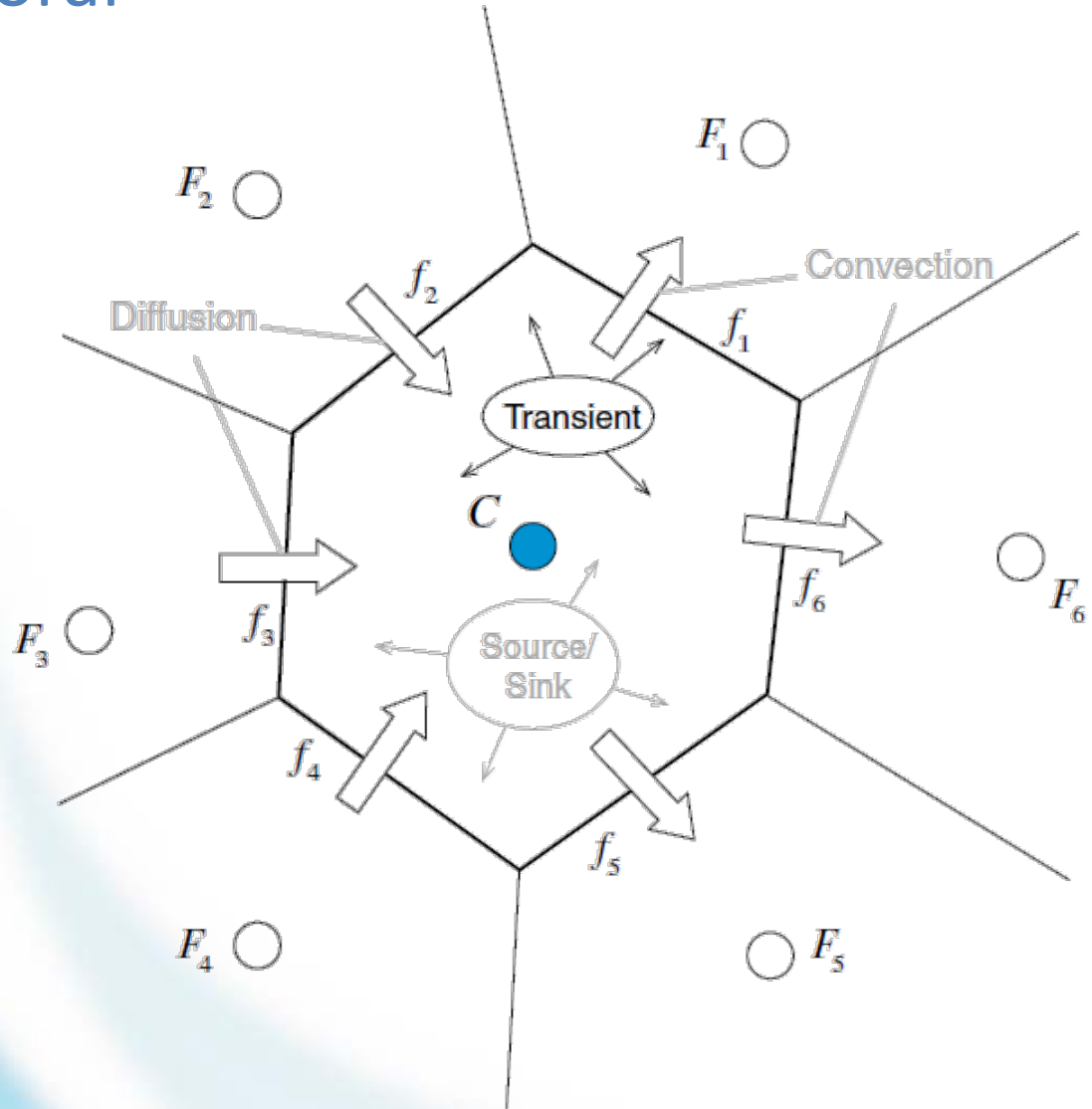
Integrando:

$$\int_{V_c} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{V_c} \mathcal{L}(\phi) dV = 0$$

discretizándola:

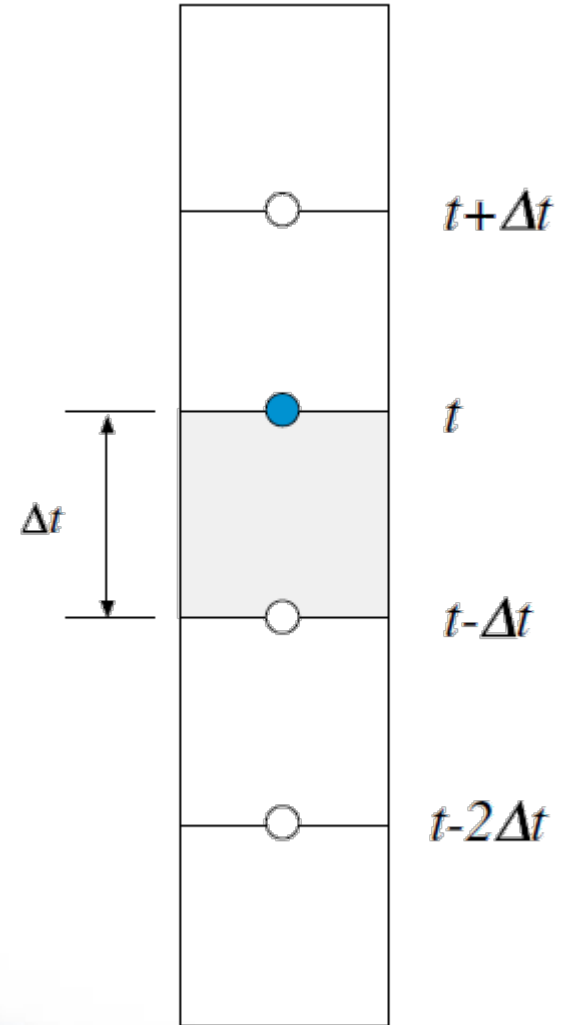
$$\frac{\partial(\rho_c\phi_c)}{\partial t} V_c + L(\phi_c^t) = 0$$

$$L(\phi_c^t) = a_c\phi_c^t + \sum_{F \sim NB(C)} a_F\phi_F^t - b_c$$



Discretización temporal, diferencias finitas

El espacio temporal es estructurado y por lo tanto es común discretizarlo usando el método de las diferencias finitas



Método explícito (Forward Euler)

Una función T en el tiempo $t+\Delta t$ se puede expresar mediante una serie de Taylor:

$$T(t + \Delta t) = T(t) + \frac{\partial T(t)}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \dots$$

Truncando la serie en los términos de segundo orden:

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = \frac{T(t + \Delta t) - T(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

Sustituyendo en la ecuación discretizada:

$$\frac{\partial(\rho_C \phi_C)}{\partial t} V_C + L(\phi_C^t) = 0$$

$$\frac{(\rho_C \phi_C)^{t+\Delta t} - (\rho_C \phi_C)^t}{\Delta t} V_C + L(\phi_C^t) = 0.$$

Método explícito (Forward Euler)

$$\frac{(\rho_C \phi_C)^{t+\Delta t} - (\rho_C \phi_C)^t}{\Delta t} V_C + L(\phi_C^t) = 0.$$

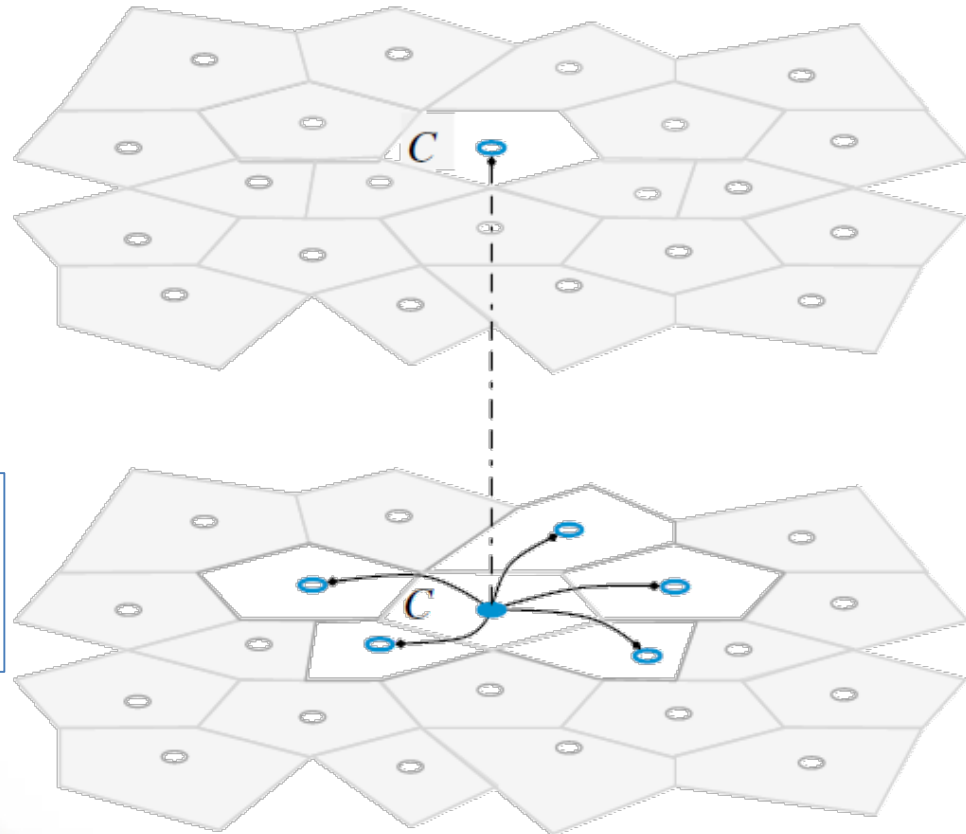


$$a_C^{t+\Delta t} \phi_C^{t+\Delta t} + a_C^t \phi_C^t = b_C - \left(a_C \phi_C^t + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F^t \right)$$

Con:

$$a_C^{t+\Delta t} = \frac{\rho_C^{t+\Delta t} V_C}{\Delta t}$$

$$a_C^t = -\frac{\rho_C^t V_C}{\Delta t}$$



Método explícito (Forward Euler)

$$a_C^{t+\Delta t} \phi_C^{t+\Delta t} + a_C^t \phi_C^t = b_C - \left(a_C \phi_C^t + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F^t \right)$$

Para simplificar la notación las variables evaluadas en el paso de tiempo anterior se denotarán con el super índice \circ y las variables evaluadas en el paso actual \bullet

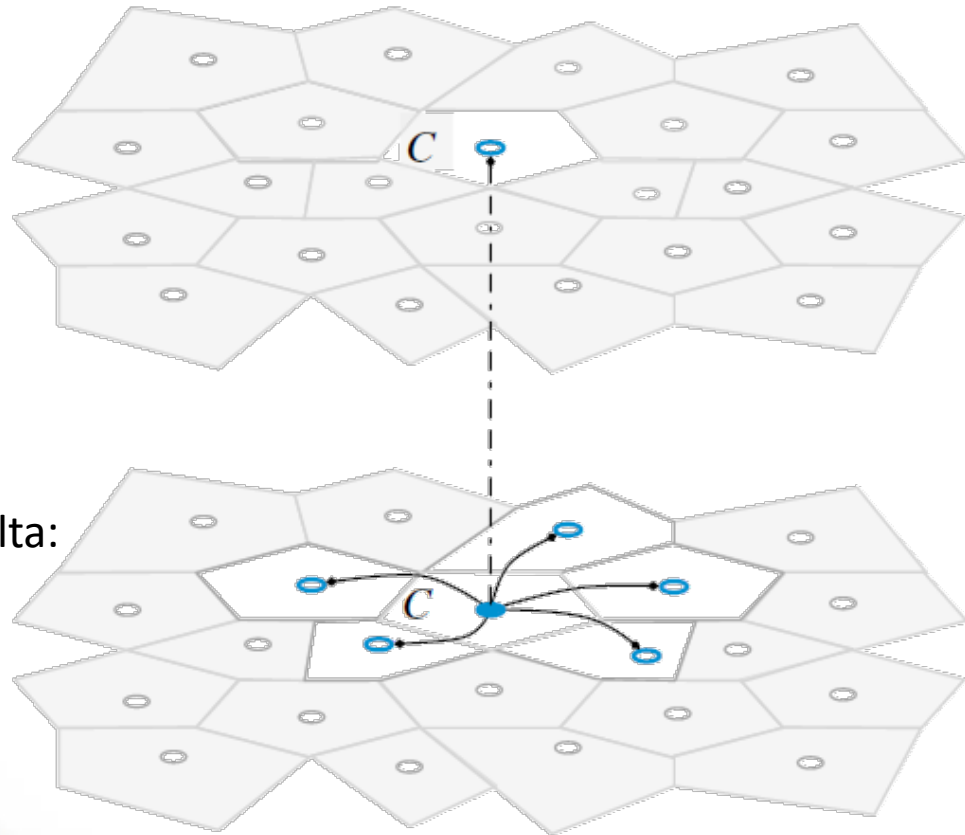
La ecuación de transporte discretizada resulta:

$$a_C^\bullet \phi_C^\bullet + a_C^\circ \phi_C^\circ = b_C - \left(a_C \phi_C^\circ + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F^\circ \right)$$

$$a_C^\bullet = \frac{\rho_C V_C}{\Delta t}$$

$$a_C^\circ = - \frac{\rho_C^\circ V_C}{\Delta t}$$

$$\phi_C^\bullet = \frac{b_C - \left((a_C + a_C^\circ) \phi_C^\circ + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F^\circ \right)}{a_C^\bullet}$$



Método explícito (Forward Euler)

Estabilidad del método

La convergencia y estabilidad de los esquemas numéricos fue estudiada inicialmente por Courant, Friedrichs y Lewy.

Ellos mostraron que para que la solución de una ecuación en diferencias converja a la solución de la ecuación en derivadas parcial, el esquema numérico debe utilizar toda la información contenida en los datos iniciales que influyen en la solución.

Este requisito se conoce como la condición CFL.

En realidad, la condición CFL se puede interpretar simplemente como una de las reglas básicas que deben cumplir los coeficientes, es decir, la regla de los signos opuestos extendida para incluir los coeficientes transitorios.

Método explícito (Forward Euler)

Estabilidad del método

Por lo tanto, al igual que ϕ_F se considera un vecino "espacial" de ϕ_C , ϕ_C^o es un vecino "temporal" de ϕ_C , y la regla de los signos opuestos se debería aplicar igualmente a ambos.

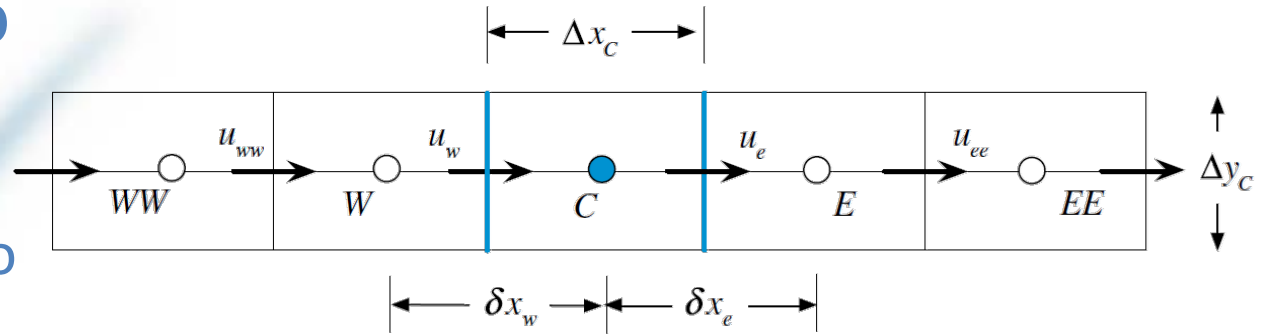
Observando que el coeficiente diagonal ahora es una a_C^\bullet y el coeficiente de su vecino "temporal" es $(a_C + a_C^o)$, el requisito de signos opuestos se convierte en:

$$a_C^\bullet = \frac{\rho_C V_C}{\Delta t}$$

$$(a_C + a_C^o) \leq 0$$

Método explícito (Forward Euler)

Estabilidad de un caso advectivo transitorio



Para un caso advectivo, considerando el esquema Upwind, los coeficientes resultantes son:

$$a_C = \dot{m}_e^{\circ} = \rho_C^{\circ} u_C^{\circ} \Delta y_C$$

$$a_C^{\circ} = -\frac{\rho_C^{\circ} V_C}{\Delta t} = -\frac{\rho_C^{\circ} \Delta x_C \Delta y_C}{\Delta t}$$

Condición CFL:

$$a_C + a_C^{\circ} \leq 0$$



$$\rho_C^{\circ} u_C^{\circ} \Delta y_C - \frac{\rho_C^{\circ} \Delta x_C \Delta y_C}{\Delta t} \leq 0$$



$$\Delta t \leq \frac{\Delta x_C}{u_C^{\circ}}$$

Para problemas advectivos se define el numero CFL como:

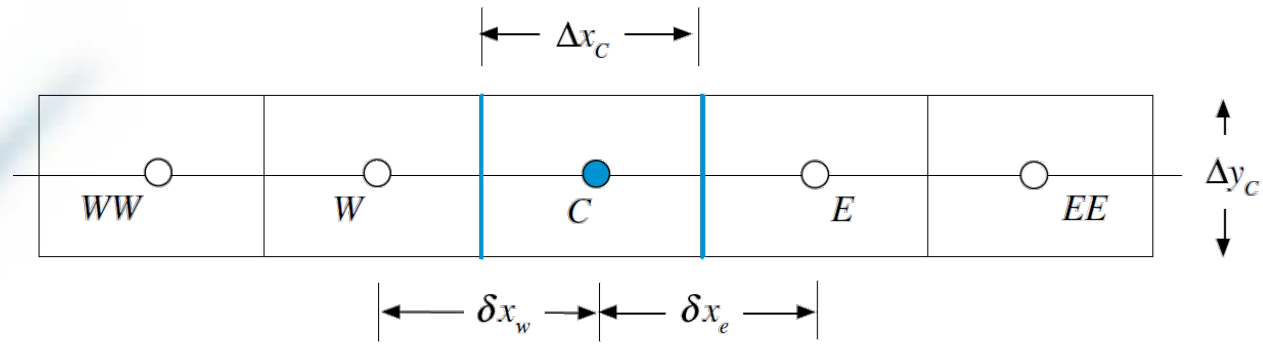
$$CFL^{conv} = \frac{|\mathbf{v}_C^{\circ}| \Delta t}{\Delta x_C}$$

Y debe cumplir la condición:

$$CFL^{conv} \leq 1.$$

$$Co = \frac{VT}{L}$$

Método explícito (Forward Euler)



Estabilidad de un caso advectivo transitorio

Para un caso difusivo los
coeficientes resultantes son:

$$a_C = \frac{\Gamma_e^\phi \Delta y_C}{\delta x_e} + \frac{\Gamma_w^\phi \Delta y_C}{\delta x_w}$$

$$a_C^\circ = -\frac{\rho_C^\circ V_C}{\Delta t} = -\frac{\rho_C^\circ \Delta x_C \Delta y_C}{\Delta t}$$

Condición CFL:

$$a_C + a_C^\circ \leq 0$$



$$\frac{\Gamma_e^\phi \Delta y_C}{\delta x_e} + \frac{\Gamma_w^\phi \Delta y_C}{\delta x_w} - \frac{\rho_C^\circ \Delta x_C \Delta y_C}{\Delta t} \leq 0$$



$$\Delta t \leq \frac{\rho_C^\circ \Delta x_C}{\frac{\Gamma_e^\phi}{\delta x_e} + \frac{\Gamma_w^\phi}{\delta x_w}}$$

Si la malla es
uniforme y el
coeficiente de
difusión
constante

$$\Delta t \leq \frac{\rho_C^\circ (\Delta x_C)^2}{2\Gamma_C^\phi}$$

Para problemas
difusivos se define el
numero CFL como:

$$CFL^{diff} = \frac{\Gamma_C^\phi \Delta t}{\rho_C^\circ (\Delta x_C)^2}$$

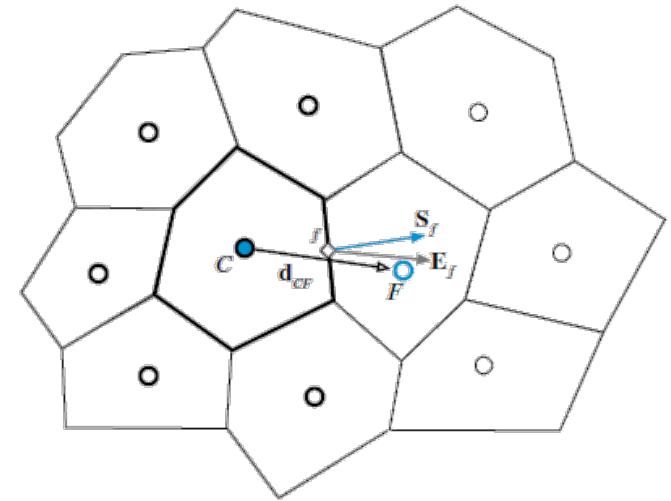
$$Fo = \frac{DT}{L^2}$$

Y debe cumplir
la condición:

$$CFL^{diff} \leq \frac{1}{2}$$

Método explícito (Forward Euler)

Estabilidad de un caso
advectivo difusivo transitorio



Para un caso advectivo difusivo
los coeficientes resultantes son:

$$a_C^\circ = -\frac{\rho_C^\circ V_C}{\Delta t}$$

$$a_C = \sum_{f \sim nb(C)} \left(\Gamma_f^\phi \frac{E_f}{d_{CF}} + \left\| \dot{m}_f^\circ, 0 \right\| \right)$$

Condición CFL:

$$a_C + a_C^\circ \leq 0$$



$$\sum_{f \sim nb(C)} \left(\Gamma_f^\phi \frac{E_f}{d_{CF}} + \left\| \dot{m}_f^\circ, 0 \right\| \right) - \frac{\rho_C^\circ V_C}{\Delta t} \leq 0$$

Condición a
cumplir:

$$\Delta t \leq \frac{\rho_C^\circ V_C}{\sum_{f \sim nb(C)} \left(\Gamma_f^\phi \frac{E_f}{d_{CF}} + \left\| \dot{m}_f^\circ, 0 \right\| \right)}.$$

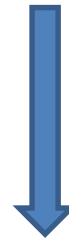
Método implícito (Backward Euler)

Una función T en el tiempo $t+\Delta t$ se puede expresar mediante una serie de Taylor:

$$T(t - \Delta t) = T(t) - \frac{\partial T(t)}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \dots$$

Truncando la serie en los términos de segundo orden:

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = \frac{T(t) - T(t - \Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$



Sustituyendo en la ecuación discretizada:

$$\frac{\partial(\rho_C \phi_C)}{\partial t} V_C + L(\phi_C^t) = 0$$



$$\frac{(\rho_C \phi_C)^t - (\rho_C \phi_C)^{t-\Delta t}}{\Delta t} V_C + L(\phi_C^t) = 0.$$

Método implícito (Backward Euler)

$$\frac{(\rho_C \phi_C)^t - (\rho_C \phi_C)^{t-\Delta t}}{\Delta t} V_C + L(\phi_C^t) = 0.$$



$$(a_C^\bullet + a_C) \phi_C + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F = b_C + a_C^\circ \phi_C^\circ$$

Con:

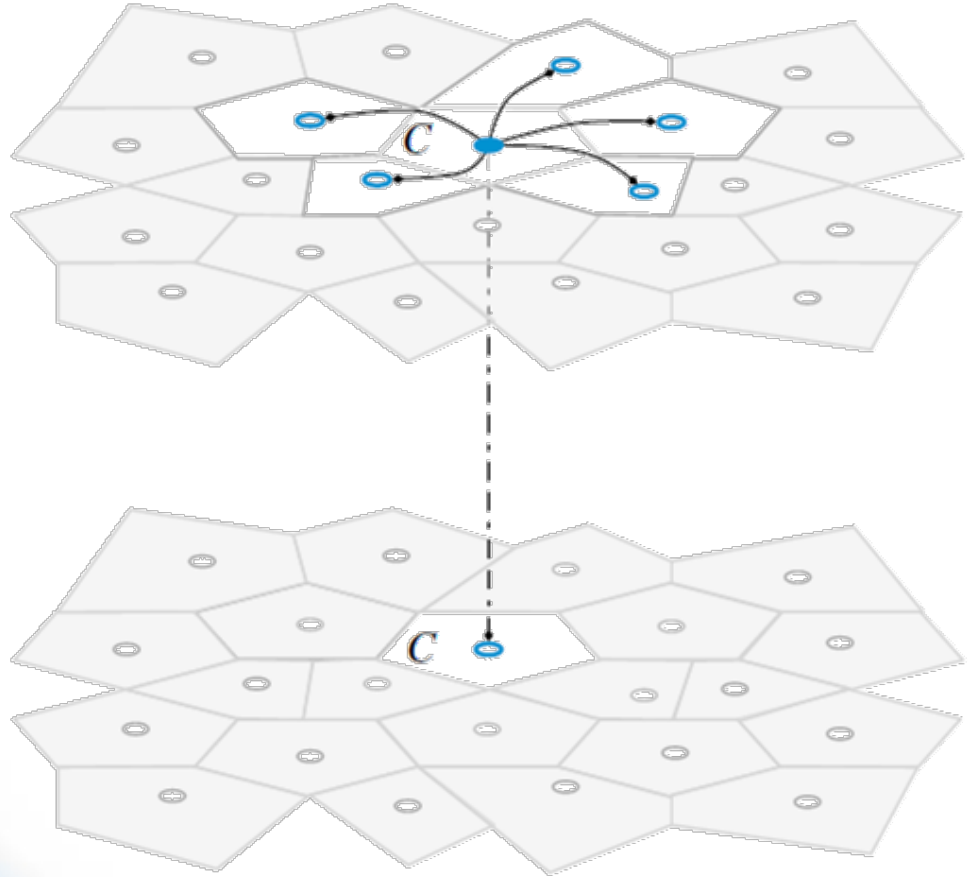
$$a_C^\bullet = \frac{\rho_C V_C}{\Delta t}$$

$$a_C^\circ = -\frac{\rho_C^\circ V_C}{\Delta t}$$

Cumple la regla del signo opuesto para cualquier Δt



Es incondicionalmente estable, pero el error aumenta con Δt



Método Crank-Nicolson

Expresando la derivada T en el tiempo $t+\Delta t$ y $t-\Delta t$ mediante una serie de Taylor:

$$T(t + \Delta t) = T(t) + \frac{\partial T(t)}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \frac{\partial^3 T(t)}{\partial t^3} \frac{\Delta t^3}{3!} + \dots$$

$$T(t - \Delta t) = T(t) - \frac{\partial T(t)}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} - \frac{\partial^3 T(t)}{\partial t^3} \frac{\Delta t^3}{3!} + \dots$$

Restando y despejando:

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = \frac{T(t + \Delta t) - T(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2)$$



Sustituyendo en la ecuación discretizada:

$$\frac{\partial(\rho_C \phi_C)}{\partial t} V_C + L(\phi_C^t) = 0$$



$$\frac{(\rho_C \phi_C)^{t+\Delta t} - (\rho_C \phi_C)^{t-\Delta t}}{2\Delta t} V_C + L(\phi_C^t) = 0$$

Con este esquema la aproximación de la derivada temporal es de segundo orden, los esquemas anteriores eran de primer orden.

Método Crank-Nicolson

$$\frac{(\rho_C \phi_C)^{t+\Delta t} - (\rho_C \phi_C)^{t-\Delta t}}{2\Delta t} V_C + L(\phi_C^t) = 0$$

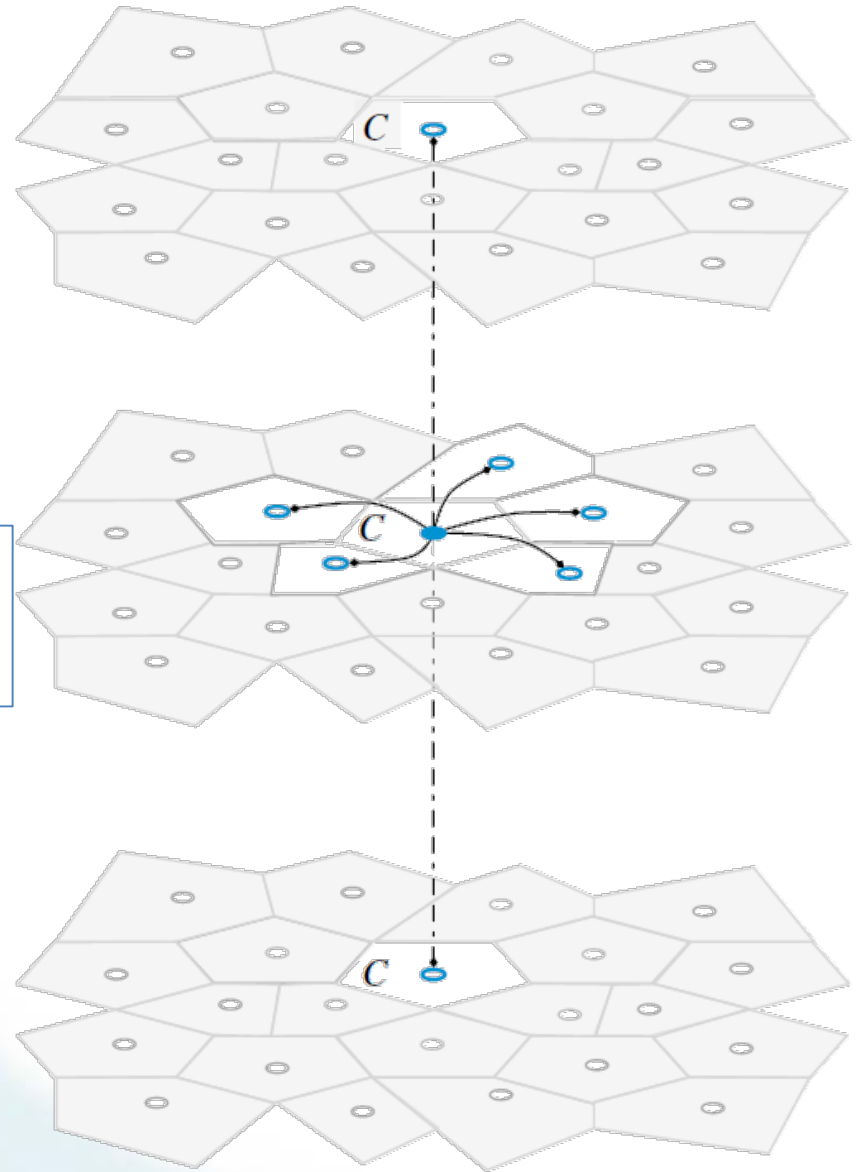


$$a_C^\bullet \phi_C = b_C - \left(a_C \phi_C^\circ + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F^\circ \right) - a_C^{\circ\circ} \phi_C^{\circ\circ}$$

$$a_C^\bullet = \frac{\rho_C V}{2\Delta t}$$

$$a_C^{\circ\circ} = -\frac{\rho_C^{\circ\circ} V}{2\Delta t}$$

Es un método explícito que necesita 2 pasos de tiempo anteriores



Método Crank-Nicolson

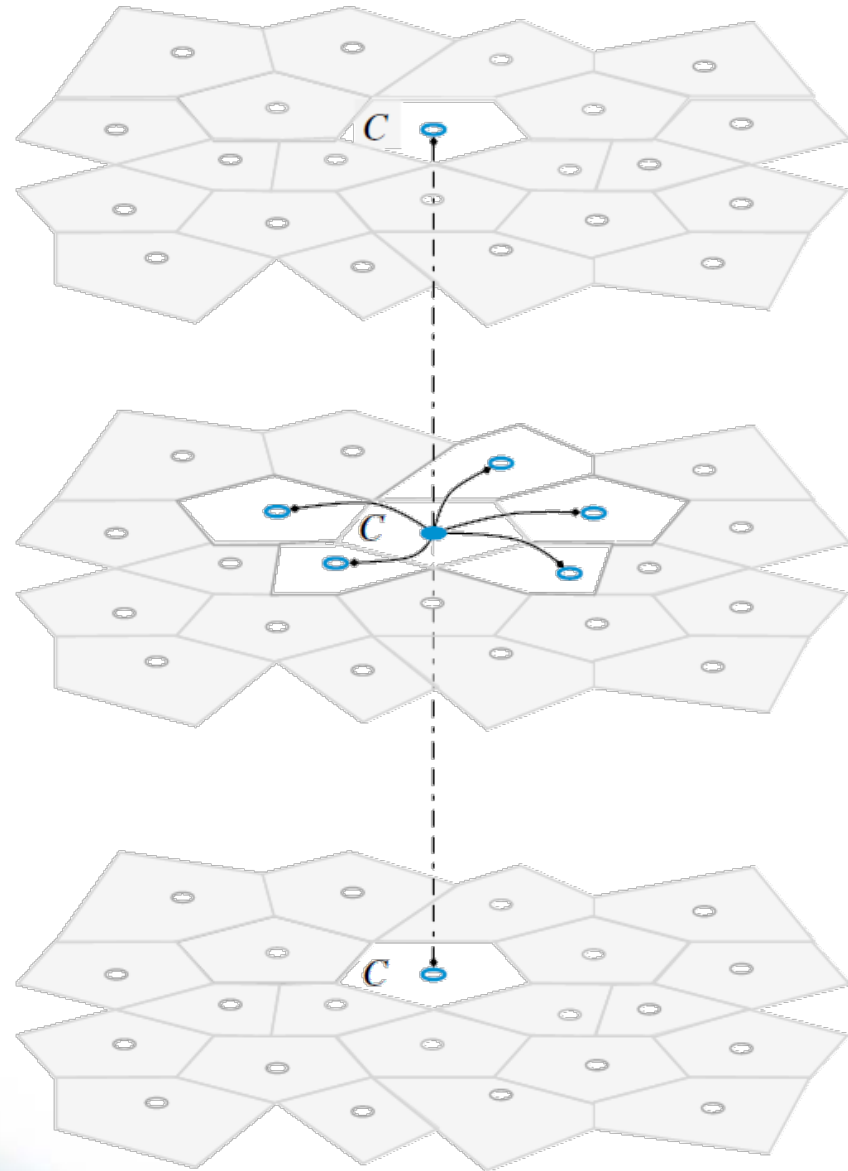
$$a_C^\bullet \phi_C = b_C - \left(a_C \phi_C^\circ + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F^\circ \right) - a_C^{\circ\circ} \phi_C^{\circ\circ}$$

Normalmente se hace la siguiente aproximación

$$\phi^\circ \approx \frac{\phi + \phi^{\circ\circ}}{2}$$

$$a_C^\bullet \phi_C + 0.5 \left(a_C \phi_C + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F \right) =$$

$$= b_C - 0.5 \left((a_C + 2a_C^{\circ\circ}) \phi_C^{\circ\circ} + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F^{\circ\circ} \right)$$



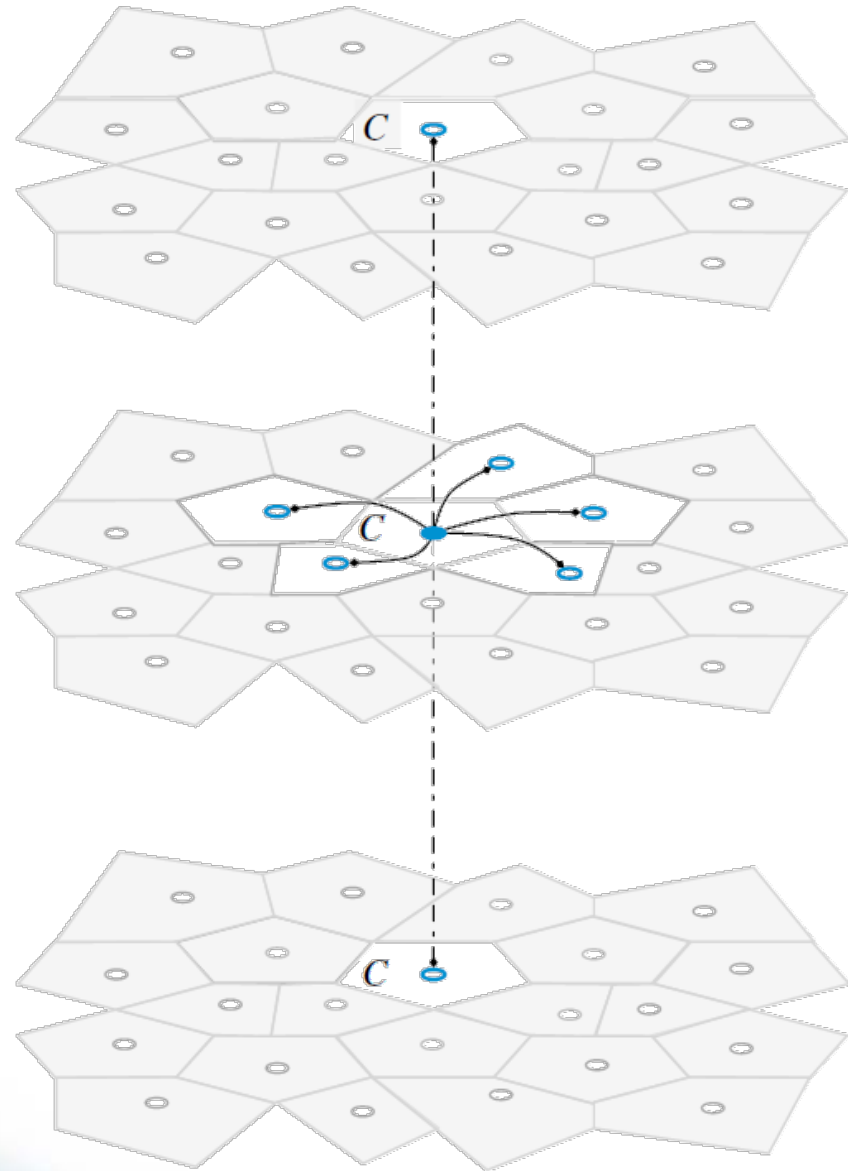
Método Crank-Nicolson

$$a_C \phi_C + 0.5 \left(a_C \phi_C + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F \right) =$$

$$= b_C - 0.5 \left((a_C + 2a_C^{oo}) \phi_C^{oo} + \sum_{F \sim NB(C)} a_F \phi_F^{oo} \right)$$

La condición de estabilidad es

$$a_C + 2a_C^{oo} \leq 0.$$



Método Crank-Nicolson

$$\frac{(\rho_C \phi_C)^{t+\Delta t} - (\rho_C \phi_C)^{t-\Delta t}}{2\Delta t} V_C + L(\phi_C^t) = 0$$

Normalmente se expresa la ecuación anterior como:

$$\frac{(\rho_C \phi_C)^{t+\Delta t} - (\rho_C \phi_C)^t}{\Delta t} V_C + 0.5L(\phi_C^{t+\Delta t}) + 0.5L(\phi_C^t) = 0$$

