

Capítulo 1

Método de los volúmenes finitos

1.1. 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

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \vec{v}\phi \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} c\phi d\Omega = \int_{\Gamma} \nabla\phi \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} Q d\Omega. \quad (1.1)$$

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 el quinto la fuente. Reordenando los términos podemos ver que

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega = \int_{\Gamma} [\nabla\phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma}, \quad (1.2)$$

de donde se ve que el desbalance de ϕ en el interior de Ω es simplemente lo que atraviesa la frontera Γ .

Dividiremos ahora el dominio Ω en m elementos cuyos volúmenes no se solapan, tal como en la Figura (1.1).

Reescribiendo (1.2) como suma parcial de los volúmenes que constituyen a Ω se tiene

$$\sum_{j=1}^m \int_{\Omega_j} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega - \int_{\Gamma_j} [\nabla\phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma} = 0. \quad (1.3)$$

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 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 (1.3) se reduce a (1.2).

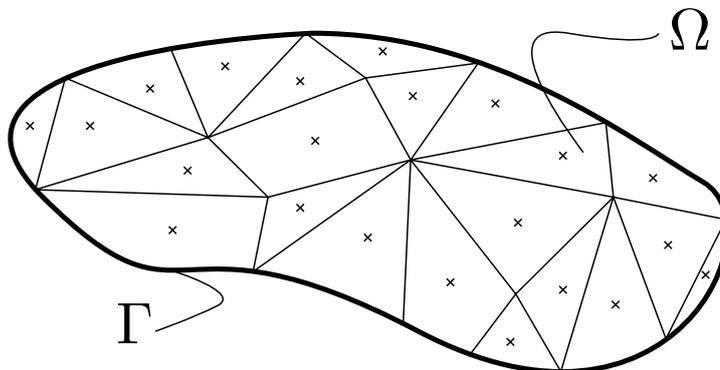


Figura 1.1: Dominio discretizado.

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 (1.3) puede reescribirse como

$$\sum_{j=1}^m \int_{\Omega_j} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega - \left\{ \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma_i} [\nabla \phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma}_i \right\}_j = 0. \quad (1.4)$$

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

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_j} \phi \, d\Omega_j &= \bar{\phi} V_j \\ \int_{\Gamma_i} \phi \, d\vec{\Gamma}_i &= \bar{\phi} \vec{S}_{f_i} \end{aligned} \quad (1.5)$$

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

$$\sum_{j=1}^m \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t} + c\phi_j - Q \right) V_j - \left\{ \sum_{i=1}^n (\nabla \phi - \vec{v}\phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j = 0, \quad (1.6)$$

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

1.2. Aplicaciones del método de volúmenes finitos

1.2.1. 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 (1.2),

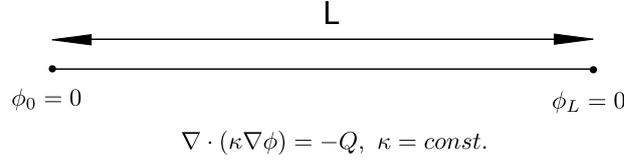


Figura 1.2: Problema de difusión estacionaria.

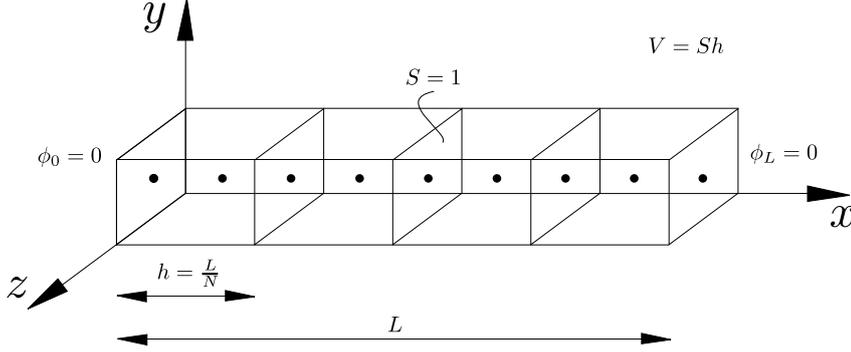


Figura 1.3: Discretización para el problema de la Figura (1.2).

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 (1.3).

Aplicando (1.6) al dominio de la Figura (1.3) y, en particular, a un volumen j , se tiene que

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (\nabla \phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j = -Q_j V_j, \quad (1.7)$$

la cual suele escribirse en forma abreviada como

$$\left\{ \sum_f (\nabla \phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_j = -Q V_j. \quad (1.8)$$

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 (1.4). 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 (1.5).

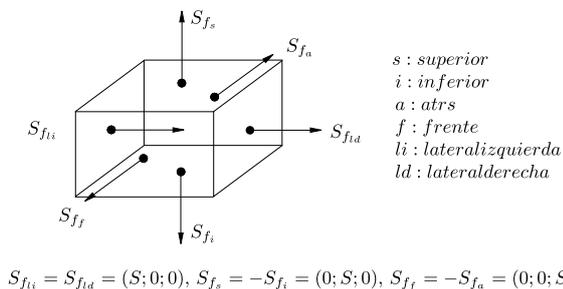


Figura 1.4: Vectores normales a las caras del segundo volumen del dominio.

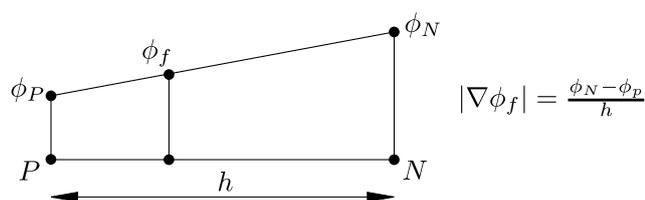


Figura 1.5: Vectores normales a las caras del segundo volumen del dominio.

Si se considera la dirección del gradiente se tendrá entonces

$$(\nabla \phi)_f = \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{h}; 0; 0 \right). \quad (1.9)$$

Dado que (1.8) 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

$$\left\{ \kappa \sum_{f=li,ld} (\nabla \phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_j = -QV_j, \quad (1.10)$$

que expandiendo resulta

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{h} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_j = -QV_j, \quad (1.11)$$

y, finalmente

$$\kappa \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h} \right) = -QV_j. \quad (1.12)$$

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

$$\kappa \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h^2} \right) = -Q. \quad (1.13)$$

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 (1.3) 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

$$(\nabla\phi)_{f_{1i}} = \frac{\phi_o - \phi_1}{h/2}, \quad (1.14)$$

con lo cual aplicando (1.8) a la celda 1 se tendrá

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_0 - \phi_1}{h/2} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_j = -QV_1, \quad (1.15)$$

y de esta forma

$$\kappa \left(\frac{-2\phi_0 - 3\phi_1 + \phi_2}{h} \right) = -QV_1. \quad (1.16)$$

Para el caso de la celda 4 se tendrá que

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_3 - \phi_4}{h/2} \right) (-\hat{i}) \cdot (-1; 0; 0) + \left(\frac{\phi_L - \phi_4}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (1; 0; 0) \right]_j = -QV_4, \quad (1.17)$$

y así

$$\kappa \left(\frac{\phi_3 - 3\phi_4 + 2\phi_L}{h} \right) = -QV_4. \quad (1.18)$$

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

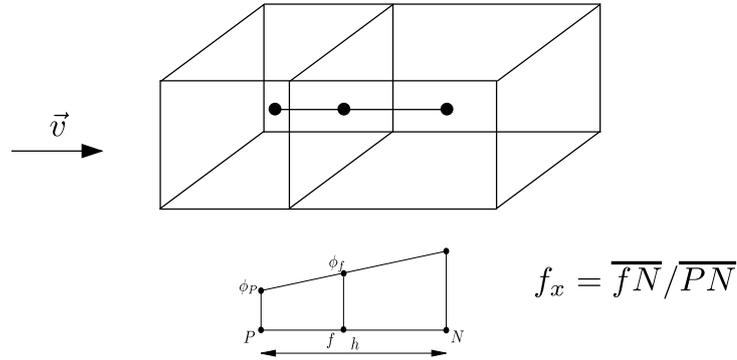
$$\begin{cases} \frac{\kappa}{h} (-3\phi_1 + \phi_2) = -QV_1 - \frac{2\kappa}{h} \phi_0 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3) = -QV_2 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4) = -QV_3 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_3 - 3\phi_4) = -QV_4 - \frac{2\kappa}{h} \phi_L \end{cases}, \quad (1.19)$$

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 (1.6). Resolviendo el sistema es posible hallar los valores de ϕ para cada centro de celda de la discretización.

1.2.2. Términos advectivos

En los términos advectivos es necesario evaluar

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (\nabla\phi - \vec{v}\phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j = 0, \quad (1.20)$$

Figura 1.6: Aproximación para ϕ_f .

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 (1.6).

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.

1.2.3. 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

$$\phi_{borde} = (\nabla \phi)_{borde} \cdot \vec{d} + \phi_P, \quad (1.21)$$

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