

SEMINARIO DE INVESTIGACION EN DINÁMICA DE FLUIDOS
COMPUTACIONAL

ANIBAL ALEJANDRO BELEÑO MIER
ARMANDO GARCIA CASTAÑEDA
OSCAR MAURICIO SANTOS MARTINEZ
KLEYVER URBINA MINDIOLA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERIAS FISICO-MECANICAS
ESCUELA DE INGENIERIA MECANICA
BUCARAMANGA

2009

SEMINARIO DE INVESTIGACION EN DINÁMICA DE FLUIDOS
COMPUTACIONAL

ANIBAL ALEJANDRO BELEÑO MIER
ARMANDO GARCIA CASTAÑEDA
OSCAR MAURICIO SANTOS MARTINEZ
KLEYVER URBINA MINDIOLA

Trabajo de grado para optar al título de
Ingeniero Mecánico

Director

Dr. DAVID ALFREDO FUENTES DIAZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERIAS FISICO-MECANICAS
ESCUELA DE INGENIERIA MECANICA
BUCARAMANGA

2009

Dedico éste triunfo primeramente a Dios por la salvación por medio

de su hijo Jesús y al su Espíritu Santo quien me acompaña.

A Don Aníbal, mi padre, por su empeño para que sus hijos sean profesionales.

A la Guello, mi madre, por sus oraciones, lagrimas

y acompañar a mi padre en esa visión.

A mis hermanos

German por la inspiración

Vladimir por la finaciar éste sueño, y

Odacyr mi compañero de batallas.

Alejandro

Primeramente le doy gracias a Dios, por estar conmigo en todos los momentos de mi vida

sobre todo en aquellos momentos difíciles, en donde me brindó la fortaleza y el entusiasmo necesario para llevar a cabo todos y cada uno de los objetivos propuestos

a lo largo de mi carrera universitaria y principalmente de mi vida.

A la razón de mi existencia “mi madre” ANA ALCIRA MINDIOLA VEGA, la que con todo el sacrificio del mundo y a pesar de encontrarse lejos de mi, ha sabido brindarme la confianza

y la sabiduría necesaria para enfrentar todos los obstáculos que se han presentado.

A la mujer más linda y hermosa de este planeta “mi abuela” ALCIRA VEGA,

la que con sus regaños y consejos me ha impulsado a seguir adelante a pesar de todos los tropiezos que he encontrado en el transcurso de la vida.

A mis familiares y amigos quienes con su apoyo incondicional siempre creyeron en mí y me impulsaron a llevar a cabo la realización de este gran proyecto de vida.

A esa personita que Dios me puso en el camino para que con su apoyo y dedicación me brindara el aliento necesario para seguir adelante y conseguir así la realización de todos mis sueños. “mi novia” CARMEN MENDOZA.

KLEYVER

A Dios por ser la luz que ilumina mi camino

A mi madre por su perseverancia, paciencia y

esfuerzo en pro de la superación de sus hijos.

A mis hermanos Juan David, Fabio y Sandra quienes

siempre creyeron en mí y me apoyaron.

A Bibiana por su comprensión y apoyo incondicional,

tiene un lugar especial en mi corazón.

A mis amigos y compañeros con los

que compartí esta etapa de mi vida.

A todas aquellas personas que de una u otra forma

contribuyeron con mi formación profesional

OSCAR

Dedicado a mis Padres y hermano por su apoyo

incondicional para poder alcanzar mis metas.

Armando

Agradecimientos

A la Universidad Industrial de Santander por posibilitar nuestro crecimiento profesional.

A la escuela de Ingeniería mecánica y su cuerpo docente por brindarnos las herramientas necesarias para nuestra formación.

A David Alfredo Fuentes Díaz, ingeniero mecánico, director del proyecto por su dedicación, apoyo, asesoría y orientación lo cual permitió el desarrollo y la culminación exitosa de este proyecto de grado.

A nuestros compañeros y familiares que siempre nos apoyaron.

CONTENIDO

I SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN	3
1. GENERALIDADES DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN	4
1.1. QUE ES EL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN	4
1.2. OBJETIVO DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN	5
1.3. VENTAJAS DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN	5
1.4. CARACTERÍSTICAS	6
1.5. ORGANIZACIÓN DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN	7
1.6. TEMA DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN	8
1.6.1. Etapas de simulación en CFD	8
1.6.1.1. Generación del Modelo	8
1.6.1.2. Mallado del dominio	9
1.6.1.3. Solución de las ecuaciones	9
1.6.1.4. Análisis de resultados	10
1.6.2. Aplicaciones de la CFD	10
1.6.3. Ventajas y desventajas de la CFD	11
1.7. DIRECCIÓN DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN EN DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL	11
1.8. METODOLOGÍA	12
2. PLANEACIÓN	13
2.1. DESCRIPCIÓN DE LOS SUBTEMAS	21

3. EJECUCIÓN	24
3.1. ACTA	28
II Finalización	33
4. PRESENTACIONES, DOCUMENTO Y CÓDIGOS	34
4.1. PRESENTACIONES	34
4.1.1. Características	34
4.2. DOCUMENTO	36
4.3. CÓDIGOS	38
4.3.1. Plataforma de realización de los códigos	42
4.3.2. Conducción (Ecuación de Poisson)	44
4.3.3. Convección-Difusión	46
4.3.4. Campo de flujo	47
4.3.5. Resultados para conducción de calor.	51
4.3.6. Resultados para convección-difusión	57
5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	60
6. BIBLIOGRAFIA	62
III Anexo	65
A. ECUACIONES DIFERENCIALES QUE DETERMINAN EL MOVIMIENTO DEL FLUIDO Y CONDICIONES DE FRONTERA	67
A.1. INTRODUCCIÓN	67
A.2. MODELOS DE FLUJO	68
A.2.0.1. Volumen de control finito	68
A.2.0.2. Elemento de fluido infinitesimal	69
A.3. ECUACIONES DE CONSERVACIÓN	69
A.3.1. Ecuación de continuidad	70

A.3.1.1.	Elemento infinitesimal fijo en el espacio	70
A.3.1.2.	Elemento infinitesimal moviendose con el flujo	72
A.3.1.3.	Volumen de control finito fijo en el espacio	77
A.3.1.4.	Volumen de control finito moviendose con el flujo	78
A.3.2.	Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento	78
A.3.3.	Ecuación de conservación de la energía	81
A.3.4.	Resumen de las ecuaciones del movimiento para la dinámica de fluidos	89
A.3.4.1.	ECUACIONES PARA FLUJOS VISCOSOS (ECUACIONES DE NAVIER-STOKES)	89
A.3.4.2.	ECUACIÓN DE CONTINUIDAD	89
A.3.4.3.	ECUACIÓN DE LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO	89
A.3.4.4.	ECUACIÓN DE LA ENERGÍA	90
A.3.4.5.	FLUJO NO VISCOSO (ECUACIONES DE EULER)	90
A.3.4.6.	ECUACIÓN DE CONTINUIDAD	90
A.3.4.7.	ECUACIÓN DE CANTIDAD DE MOVIMIENTO	91
A.3.4.8.	ECUACIÓN DE LA ENERGÍA	91
A.4.	CONDICIONES DE FRONTERA	91
A.5.	ECUACIONES PARA CFD	94
A.5.1.	Ecuación diferencial general	99
A.6.	COORDENADAS	100
A.6.1.	Variables independientes	100
A.6.2.	Elección de coordenadas	101
 B. CLASIFICACIÓN MATEMÁTICA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES		102
B.1.	REGLA DE CRAMER	103
B.2.	MÉTODO DE LOS VALORES PROPIOS	108
B.3.	COMPORTAMIENTO GENERAL DE LAS DIFERENTES CLASES DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES	110
B.3.1.	Ecuaciones hiperbólicas	110

B.3.2. Ecuaciones parabólicas	111
B.3.3. Ecuaciones elípticas	115
B.4. COORDENADAS EN UNA Y DOS VÍAS	117
C. DISCRETIZACIÓN	120
C.1. MÉTODO DE LAS DIFERENCIAS FINITAS	121
C.2. SISTEMAS DE ECUACIONES	130
C.3. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS	132
C.3.1. Descripción general de el método de volúmenes finitos.	132
C.3.2. Método de volúmenes finitos para difusión en estado estable unidimensional	133
C.4. APROXIMACIÓN EXPLÍCITA E IMPLÍCITA	140
C.5. ERRORES Y ANÁLISIS DE ESTABILIDAD	146
C.6. PROPIEDADES NUMÉRICAS DE LOS MÉTODOS DE SOLUCIÓN	150
C.6.1. Consistencia	150
C.6.2. Estabilidad	151
C.6.3. Convergencia	151
C.6.4. Conservación	151
C.6.5. Solución acotada	151
C.6.6. Posibilidad de llevarlo a cabo	152
C.6.7. Exactitud	152
D. SOLUCIÓN DE LA ECUACIONES DISCRETIZADAS	153
D.1. MÉTODOS DIRECTOS	153
D.1.1. Eliminación de gauss	153
D.1.2. Descomposición LU	155
D.2. ALGORITMO PARA MATRIZ TRI DIAGONAL	158
D.2.1. Aplicación de TDMA(Tri Diagonal Matrix Algorithm) en prob- lemas bidimensionales	160
D.2.2. Aplicación de TDMA a problemas en tres dimensiones	161
D.3. MÉTODOS ITERATIVOS	162

D.3.1.	Exactitud y convergencia de los métodos iterativos	163
D.3.2.	Método iterativo de Jacobi	165
D.3.3.	Método iterativo de Gauss-Seidel	166
D.3.4.	Método de sobre-relajación sucesiva	168
D.3.5.	Método de los gradientes conjugados	169
D.3.6.	Gradiente Biconjugado	171
D.4.	SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES	173
D.4.1.	Método de Newton-Raphson	173
D.4.2.	Otras técnicas	176
D.5.	SISTEMAS DE ECUACIONES ACOPLADAS Y SU SOLUCIÓN . . .	177
D.5.1.	Solución Simultánea	177
D.5.2.	Solución Secuencial	177
D.5.3.	Sub-relajación	178
D.6.	DISIPACIÓN Y DISPERSIÓN NUMÉRICA: VISCOSIDAD ARTIFICIAL	179

E. IMPLEMENTACIÓN DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA **184**

E.1.	INTRODUCCIÓN	184
E.2.	CONDICIONES DE FRONTERA DE ENTRADA	187
E.2.1.	CORRECCIÓN DE PRESIÓN	189
E.2.2.	ESTIMACIÓN DE k y ε EN LA FRONTERA	189
E.2.3.	CONDICIONES DE FRONTERA PERPENDICULARES A LA DIRECCIÓN y	190
E.3.	CONDICIONES DE FRONTERA A LA SALIDA	190
E.4.	CONDICIONES DE FRONTERA EN LA PARED	191
E.4.1.	Pared rugosa	193
E.4.2.	Pared en movimiento	193
E.5.	CONDICIÓN DE FRONTERA DE PRESIÓN CONSTANTE	194
E.6.	CONDICIÓN DE FRONTERA DE SIMETRÍA	196
E.7.	CONDICIÓN DE FRONTERA CÍCLICA O PERIÓDICA	196
E.8.	DIFICULTADES POTENCIALES Y COMENTARIOS FINALES . . .	197

E.8.1.	Posicionando fronteras de salida	198
E.8.2.	Malla cerca a la pared	199
E.8.3.	Aplicación de las condiciones de simetría	200
F.	DIFUSIÓN EN ESTADO ESTABLE	201
F.1.	DIFUSIÓN UNIDIMENSIONAL EN ESTADO ESTABLE	201
F.1.1.	Ejemplo 1: conducción libre en una barra aislada	201
F.1.2.	Ejemplo 2: Generación de calor	207
F.1.3.	Ejemplo 3: Conducción en una aleta	212
F.1.4.	Comparación con la solución analítica	215
F.2.	CONDUCTIVIDAD TÉRMICA EN LA INTERFACE DE LA CELDA	216
F.3.	DIFUSIÓN BIDIMENSIONAL EN ESTADO ESTABLE	220
F.3.1.	Ejemplo de Conducción de calor bidimensional	222
F.4.	DIFUSIÓN TRIDIMENSIONAL EN ESTADO ESTABLE	224
F.5.	RESUMEN PARA PROBLEMAS DE DIFUSIÓN	228
G.	CONVECCIÓN DIFUSIÓN EN ESTADO ESTABLE	229
G.1.	CONVECCIÓN-DIFUSIÓN ESTABLE UNIDIMENSIONAL	230
G.2.	ESQUEMA DE DIFERENCIA CENTRADA	231
G.2.1.	Ejemplo: Convección-difusión unidimensional	232
G.2.2.	Comparación con la solución analítica	235
G.3.	PROPIEDADES DE LOS ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN	237
G.4.	ESQUEMA UPWIND	241
G.4.1.	Valoración del esquema UPWIND	246
G.5.	ESQUEMA DE DIFERENCIACIÓN HÍBRIDO	248
G.5.1.	Valoración del esquema híbrido	251
G.5.2.	Esquema de diferenciación híbrido para convección-difusión multidimensional	252
G.6.	ESQUEMA POWER-LAW	253
G.7.	ESQUEMA EXPONENCIAL	254
G.8.	UNA FORMULACIÓN GENERALIZADA	255

G.9. ESQUEMAS DE ALTO ORDEN PARA PROBLEMAS DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN	257
G.9.1. Esquema QUICK	257
G.9.2. Valoración del esquema QUICK	264
H. ALGORITMO PARA EL CÁLCULO DEL CAMPO DE FLUJO	266
H.1. ESQUEMAS APLICADOS CON EL MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS	266
H.1.1. Interpolación y diferenciación	266
H.2. ALGUNAS DIFICULTADES RELACIONADAS	270
H.2.1. Representación del gradiente de presión	270
H.2.2. Representación de la ecuación de continuidad	272
H.3. LA MALLA ALTERNADA	273
H.4. LAS ECUACIONES DE CANTIDAD DE MOVIMIENTO	274
H.5. ALGORITMO SIMPLE	279
H.6. ALGORITMO SIMPLER	284
H.6.1. Secuencia de operaciones para el algoritmo SIMPLER	287
H.7. ALGORITMO SIMPLEC	288
H.8. ALGORITMO PISO	290
I. FLUJOS TRANSITORIOS	294
I.1. CONDUCCIÓN DE CALOR TRANSITORIA UNIDIMENSIONAL	295
I.2. ESQUEMA EXPLÍCITO	297
I.3. ESQUEMA DE CRANK-NICOLSON	298
I.4. ESQUEMA COMPLETAMENTE IMPLÍCITO	299
I.5. ESQUEMAS PARA SOLUCIONES EXPLÍCITAS	299
I.5.1. Método de Lax-Wendroff	299
I.5.2. Técnica de MacCormack	302
I.5.3. Predictor	303
I.5.4. Corrector	303

I.5.5. Flujo viscoso, forma conservativa y avance en el espacio	304
I.6. EJEMPLO: CONDUCCIÓN DE CALOR TRANSITORIA UNIDIMENSIONAL	304
I.7. EJEMPLO: CONDUCCIÓN DE CALOR TRANSITORIA UNIDIMENSIONAL SOLUCIÓN IMPLÍCITA	308
I.8. Solución	308
J. DIFUSIÓN TRANSITORIA EN DOS Y TRES DIMENSIONES	314
J.1. DISCRETIZACIÓN TEMPORAL DE LA ECUACIÓN DE CONVECCIÓN DIFUSIÓN	315
J.2. EJEMPLO: CONVECCIÓN-DIFUSIÓN TRANSITORIA USANDO EL MÉTODO QUICK	317
J.3. Solución analítica	321
J.4. CÁLCULO DEL CAMPO DE FLUJO TRANSITORIO	322
J.4.1. SIMPLE transitorio	322
J.4.2. Algoritmo PISO transitorio	324
J.5. CÁLCULOS DE ESTADO ESTABLE USANDO UNA APROXIMACIÓN PSEUDO TRANSITORIA	325

LISTA DE TABLAS

2.1. Subtemas de investigación	16
3.1. Temas y subtemas con su respectivo relator	24
4.1. Temas con código y pseudo código	48
B.1. Clasificación de las ecuaciones diferenciales parciales.	117
C.1. Diferencia forward, $\mathbf{O}(\Delta x)$	125
C.2. Diferencia backward, $\mathbf{O}(\Delta x)$	126
C.3. Diferencia Centrada, $\mathbf{O}(\Delta x^2)$	126
C.4. Diferencia forward, $\mathbf{O}(\Delta x^2)$	126
C.5. Diferencia backward, $\mathbf{O}(\Delta x^2)$	127
C.6. Diferencia Centrada, $\mathbf{O}(\Delta x^4)$	127
F.1. Valores de los coeficientes de las ecuaciones discretizadas para los nodos 1 a 5.	205
F.2. Coeficientes nodales para el ejemplo 2.	211
F.3. Comparación entre los resultados obtenidos aplicando volúmenes finitos y la solución analítica.	212
F.4. Coeficientes para los nodos interiores.	214
F.5. Coeficientes condición de frontera nodo 1.	215
F.6. Coeficientes condición de frontera nodo 5.	215
F.7. Comparación resultados numéricos y analíticos ejemplo 3.	216

F.8. Comparacion resultados numéricos y analíticos ejemplo 3 con una malla de 10 elementos.	216
F.9. Coeficientes y términos fuente nodales para el ejemplo.	225
F.10.Solución para el ejemplo.	225
F.11.Coefficientes y términos fuentes nodales para el ejemplo.	226
F.12.Solución para el ejemplo.	226
G.1. Coeficientes para la ecuación discretizada.	232
G.2. Coeficientes ejemplo: Convección-difusión unidimensional.	234
G.3. Coeficientes nodales para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 1.	234
G.4. Comparacion de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 1.	235
G.5. Coeficientes nodales para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 2.	236
G.6. Comparacion de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 2.	236
G.7. Coeficientes nodales para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso3.	237
G.8. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo, Caso1.	245
G.9. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo, Caso 2.	246
G.10.Coefficientes nodales para el ejemplo.	250
G.11.Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo.	251
G.12.Coefficientes nodales para el esquema híbrido.	252
G.13.Función $A(Pe)$ para los diversos esquemas.	257
G.14.Coefficientes nodales para la formulación general.	258
G.15.Coefficientes para la ecuación estándar cuando $F_w < 0$ y $F_e < 0$	260
G.16.Coefficientes para la ecuación estándar cuando $F_w > 0$ y $F_e > 0$	260
G.17.Coefficientes para la expresión general del esquema QUICK.	261

G.18. Coeficientes nodales para el ejemplo: Usando el esquema QUICK.	263
G.19. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Usando el esquema QUICK.	264
H.1. Coeficientes involucrados en la ecuación (H.51).	287
H.2. Coeficientes involucrados en la ecuación anterior.	292
I.1. Valores de la integral I_T de acuerdo al valor de θ	297
I.2. Definición de las constantes en la ecuación anterior.	297
I.3. Coeficientes nodales para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional.	306
I.4. Resultado para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimension- al (método explícito).	307
I.5. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional.	308
I.6. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional solución implícita	309
I.7. Coeficientes nodales.	311
I.8. Comparación de los resultados numéricos y analíticos.	313
J.1. Coeficientes en la vecindad de P	315
J.2. Áreas y Volúmenes a usar en cada una de las dimensiones	315
J.4. Valores de los coeficientes nodales	320
J.5. Ecuaciones discretizadas.	320

LISTA DE FIGURAS

3.1. Modelo del acta	29
3.2. Ejemplo acta diligenciada	32
4.1. Formato de presentación	35
4.2. Ejemplo de diapositiva	37
4.3. Interfaz Lyx.	39
4.4. Resultados para el transitorio del problema de conducción	56
4.5. Resultados para el cálculo del problema de convección-difusión	58
4.6. Resultados para el transitorio del problema de convección-difusión	59
A.1. Modelos de flujo.	69
A.2. Volumen Infinitesimal.	70
A.3. Flujo másico a través de las caras del volumen de control.	71
A.4. Elemento de fluido moviendose con el flujo-Ilustración para la derivada substantial.	72
A.5. Volumen de control móvil usado para la interpretación física de la divergencia de la velocidad.	75
A.6. Balance de cantidad de movimiento en dirección x	79
A.7. Forma como actúan el esfuerzo normal y el cortante.	79
A.8. Flujo de Energía asociados a un elemento infinitesimal que se mueve con el fluido. Solamente se muestran los flujos en dirección x	82
B.1. Hoja de ruta para el capítulo 2.	103
B.2. Curva característica.	104

B.3. Dominio y fronteras para la solución de ecuaciones hiperbólicas. Flujo bidimensional en estado estable.	112
B.4. Dominio y fronteras para la solución de ecuaciones parabólicas en dos dimensiones.	113
B.5. Dominio y fronteras para la solución de ecuaciones elípticas en dos dimensiones.	116
C.1. Puntos Discretos en una malla	121
C.2. Hoja de ruta para el capítulo 3.	122
C.3. Definición de las derivadas y sus aproximaciones.	124
C.4. Expresiones en diferencias finitas	125
C.5. Puntos de la malla en la frontera	129
C.6. Malla para discretizar la ecuación(C.12).	130
C.7. Estructura de una matriz para una molécula computacional de 5x5. . .	132
C.8. Volumen de control Unidimensional.	134
C.9. Convención de la división del volumen de control.	134
C.10.Aproximación Lineal.	137
C.11.Volumen de control Practica A.	139
C.12.Volumen de control Practica B.	139
C.13.Ilustración de problemas de avance en el tiempo.	142
C.14.Molécula computacional en diferencias finitas para el esquema explícito. .	143
C.15.Molécula computacional en diferencias finitas para el esquema de Crank-Nicolson.	144
D.1. Malla Bidimensional.	160
D.2. Problema tridimensional.	161
D.3. Tangente a la Curva.	174
D.4. Método de la Secante.	176
D.5. Efecto de la disipación numérica. (a) Onda inicial en $t=0$. (b) Forma de la onda en un tiempo $t > 0$ donde la solución numérica está afectada por la disipación numérica.	181

D.6. Efecto de la dispersión numérica. (a) Onda inicial en $t = 0$. (b) Forma de la onda en un tiempo $t > 0$ donde la solución numérica está afectada por la dispersión numérica.	182
E.1. Disposición de la malla en la frontera.	185
E.2. Celda de velocidad u en la condición de frontera de entrada.	187
E.3. Celda de velocidad v en la condición de frontera de entrada.	188
E.4. Celda de corrección de presión p' en la condición de frontera de entrada.	188
E.5. Celda escalar φ en la condición de frontera de entrada.	189
E.6. Celda de velocidad u en la condición de frontera a la salida.	190
E.7. Celda de velocidad u en la condición de frontera en la pared.	191
E.8. Celda de velocidad v en la condición de frontera en la pared para $j=2$	191
E.9. Celda de velocidad v en la condición de frontera en la pared para $j=NJ$	192
E.10. Perfil de velocidad u en la pared.	193
E.11. Celda de presión p' en la frontera de entrada.	194
E.12. Celda de presión p' en una frontera de salida.	195
E.13. Frontera cíclica.	197
E.14. Desarrollo del flujo en una tubería.	199
E.15. Entrada de flujo lateral.	200
F.1. Barra aislada con extremos a temperatura constante.	202
F.2. Malla usada para la solución.	202
F.3. Comparación de los resultados numéricos con los resultados analíticos.	206
F.4. Volumen de control para nodos de frontera.	207
F.5. Placa de espesor 2cm con generación de calor.	208
F.6. Malla usada para la solución del ejemplo 2.	209
F.7. Comparación de los resultados analíticos para el ejemplo 2.	213
F.8. Aleta sección circular aislada en el extremo.	213
F.9. Malla usada para la solución del ejemplo 3.	214
F.10. comparación de los resultados numéricos con los analíticos para el ejemplo 3	217
F.11. Distancias asociadas con la interface	218

F.12. Parte de una malla bidimensional.	220
F.13. Placa y condiciones de frontera para el ejemplo de conducción de calor bidimensional.	223
F.14. Volumen de control tridimensional con los nodos vecinos.	228
G.1. Volumen de control alrededor del punto P.	230
G.2. Representación del ejemplo: Convección-difusión unidimensional.	232
G.3. Malla usada en la discretización del ejemplo: Convección-difusión unidimensional.	233
G.4. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 1.	235
G.5. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 2.	237
G.6. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 3.	238
G.7. Transportividad.	239
G.8. Valor nodal usado cuando el flujo va en dirección positiva.	241
G.9. Valor nodal usado cuando el flujo va en dirección negativa.	242
G.10. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo, Caso 1.	245
G.11. Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo, Caso 2.	247
G.12. Comparación de los resultados numéricos para el ejemplo.	251
G.13. Interpolación cuadrática QUICK.	259
G.14. Tratamiento de nodo espejo en la frontera para esquema QUICK.	262
H.1. Comportamiento físicamente correcto e incorrecto	271
H.2. Sector de una malla de tres puntos típico.	271
H.3. Campo de presión en zigzag.	272
H.4. Campo de velocidad.	272
H.5. Localización alternadas para u y v , $\uparrow = v$, $\bullet =$ otras variables.	273
H.6. Malla alternada.	275

H.7. Volúmen de Control u y sus componentes de velocidad vecinos.	276
H.8. Volúmen de control v y sus componentes de velocidad vecinos.	278
H.9. Volúmen de Control Escalar (Ecuación de Continuidad).	282
H.10. Diagrama de flujo del Algoritmo SIMPLE.	285
H.11. Secuencia de operaciones para el algoritmo SIMPLER.	289
H.12. Algoritmo PISO.	293
I.1. Malla para un problema unidimensional.	295
I.2. Malla para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional. .	306
I.3. Comparación de los resultados numéricos y analíticos a diferentes tiempos.	311
I.4. Comparación de los resultados numéricos y analíticos a diferentes pasos de tiempo.	312
J.1. Distribución del término fuente.	317
J.2. Diagrama de flujo para el algoritmo SIMPLE transitorio y sus variantes.	323

TITULO¹: SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN EN DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL.

AUTORES²: ANIBAL ALEJANDRO BELEÑO MIER
ARMANDO GARCÍA CASTAÑEDA
OSCAR MAURICIO SANTOS MARTINEZ
KLEYVER URBINA MINDIOLA

PALABRAS CLAVES: Dinámica de Fluidos Computacional, Discretización, Difusión, Convección-Difusión, Campo de Flujo y Flujos Transitorios.

DESCRIPCIÓN

La Dinámica de Fluidos Computacional es una tecnología creciente. Incluso aunque haya todavía una cantidad sustancial de desarrollo teórico necesaria antes de que se haga un instrumento común de la ingeniería, puede ser descrita como el empleo de procesadores para producir la información sobre los caminos en los cuales los fluidos fluyen en situaciones dadas. CFD abarca una variedad de tecnologías en las que se encuentran las matemáticas, informática, ingeniería y la física, disciplinas que tienen que ser acopladas para proporcionar el medio para modelar flujos de fluidos. Tal modelismo es usado en muchos campos de la ciencia e ingeniería, resultados que son una simulación realista de un fluido en movimiento. Actualmente CFD depende del problema a ser simulado, el software que se utiliza y la habilidad del usuario. Hasta hace poco el usuario de CFD ha sido un especialista, probablemente se ha entrenado al nivel doctoral, que trabaja en un departamento de investigación y desarrollo. Ahora, sin embargo, la tecnología está más extensamente disponible tanto en la industria como en la academia y entonces CFD es usado para proporcionar ideas en muchos aspectos de movimiento del fluido. A demás, hay varios textos técnicos que describen las matemáticas necesarias para el proceso de modelización, pero estos son a menudo demasiado técnicos para el usuario del software.

Por medio de este trabajo a través de la metodología de seminario de investigación, busca llevar tal conocimiento de un nivel doctoral a un nivel académico de pregrado aprovechando la disponibilidad que se cuenta de CFD ahora en los textos técnicos, dando las bases necesarias para continuar con la investigación en esta área en la escuela de Ingeniería Mecánica.

¹Trabajo de grado.

²Universidad Industrial de Santander, Facultad de Ingenierías Físico-Mecánicas, Escuela de Ingeniería Mecánica, Director: Ing. Mecánico, Dr. David Alfredo Fuentes Díaz

TITLE³: COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS RESEARCH SEMINAR.

AUTHORS⁴: ANIBAL ALEJANDRO BELEÑO MIER

ARMANDO GARCÍA CASTAÑEDA

OSCAR MAURICIO SANTOS MARTINEZ

KLEYVER URBINA MINDIOLA

KEYWORDS: Computational uid Dynamics, Discretised, Difussion, Convection- Difussion, Flow Field and Transient Flow.

DESCRIPTION

Computational fluid dynamics is a growing technology. Even though there is still a substantial amount of theoretical development necessary before it becomes an consistent engineering tool, can be described as the use of computers to produce information about the ways in which fluids flow in given situations. CFD embraces a variety of technologies including mathematics, computer science, engineering and physics, and these disciplines have to be brought together to provide the means of modelling fluid flows. Such modelling is used in many fields of science and engineering but, if it is to be useful, the results that it yields must be a realistic simulation of a uid in motion. At present this depends on the problem being simulated, the software being used and the skill of the user.

Until recently the user of CFD has been a specialist, probably trained to doctoral level, working in a research and development department. Now, however, the technology is more widely available both in industry and academia and so it is being used to provide insights into many aspects of fluid motion. Also, there are several technical texts that describe the detailed mathematics of the modelling process, but these are often far too technical for the user of the software.

By means of this work across the methodology of research seminar, it seeks to take such a knowledge of a doctoral level to an undergraduate academic level of taking advantage of the availability that is counted of CFD now in the technical texts, giving the necessary bases to continue with the research in this area in the school of Mechanical Engineering.

³Thesis Project.

⁴Universidad Industrial de Santander, Facultad de Ingenierias Físico-Mecánicas, Escuela de Ingenieria Mecánica, Director: Ing. Mecánico, Dr. David Alfredo Fuentes Díaz

INTRODUCCIÓN

La escuela de Ingeniería Mecánica en su misión contempla la construcción, aplicación y divulgación del conocimiento científico. Para cumplir con dicha misión es necesario implementar herramientas que faciliten el desarrollo del conocimiento científico y el mejoramiento de los procesos de investigación. Una forma de contribuir al logro de la misión es investigar en las áreas de los métodos numéricos aplicados a la solución de problemas en los temas de mecánica de fluidos y de transferencia de calor. En este caso, se desea estudiar los aspectos teóricos y su aplicabilidad a fenómenos que involucren el transporte de fluidos con la transferencia de calor en forma simultánea.

El seminario de investigación en dinámica de fluidos computacional es un proceso reflexivo, sistemático y crítico que tiene como propósito fortalecer en el estudiante las habilidades requeridas en el manejo de la información y la comunicación para desarrollar la investigación científica valiéndose de las ventajas dadas por el trabajo personal, en equipo y original iniciando el estudio de nuevos objetos de investigación de interés para la escuela de Ingeniería Mecánica mediante una dinámica que comprende actividades de relatoría, correlatoría, discusión y elaboración de un documento síntesis, en éste se incluyen el estudio de los referentes contextuales de la Dinámica de Fluidos Computacional, desarrollando así todo el tema de manera compacta y coherente entre los subtemas que conforman el seminario. Adicionalmente se genera continuidad y profundización en la técnica de CFD (Computational Fluid Dynamic, siglas en inglés).

Con esta labor se desea elevar la escuela de Ingeniería Mecánica a una posición de vanguardia en el estudio de la técnica de CFD en el ámbito regional y nacional, pues la simulación numérica de flujo hoy en día juega un papel más activo en muchas aplicaciones técnicas. Durante los últimos 15 años la simulación numérica ha ido reemplazando paulatinamente los métodos experimentales usados y probados durante mucho tiempo en áreas como en la ingeniería aeroespacial. Actualmente el CFD se aplica a prácticamente cualquier área de la ingeniería ya sea mecánica, química, de

procesos o en tecnología médica.

El CFD permite la realización de cálculos detallados de cualquier sistema en el que intervengan fluidos, mediante la resolución de las ecuaciones fundamentales de conservación de materia, energía y cantidad de movimiento para la geometría en particular de cada sistema considerado. Los resultados obtenidos consisten en los valores de todas las variables que caracterizan el sistema (velocidad, presión, temperatura, composición, etc.) en cada uno de los puntos del mismo.

En muchos problemas la dinámica del flujo involucrado es decisiva en la optimización de una tecnología (por ejemplo la reducción de la resistencia aerodinámica de un coche o la mejora de eficiencia en un compresor). A partir de estas simulaciones es posible estudiar aspectos relacionados con el flujo tridimensional como la transferencia de calor y mezcla junto a radiación, combustión o dispersión de emisiones. Las simulaciones permiten una nueva perspectiva del problema que no es posible mediante los métodos tradicionales analíticos.

Si se tiene en cuenta lo anterior, el presente informe ejecutivo (un informe detallado tendría una extensión excesiva) es una descripción de cómo se cumplieron los objetivos planteados para la realización del seminario de investigación en Dinámica de Fluidos Computacional:

- Documento (recopilación de los subtemas).
- Presentaciones de los subtemas en Power Point.
- Códigos en C++ para los ejemplos de aplicación.

En la primera parte se abordan temas que aclaran y dan una perspectiva del seminario de investigación y cómo el CFD es el tema de investigación.

En la segunda parte se explican los resultados obtenidos por medio del seminario, cumpliendo así con los objetivos.

Parte I

SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN

Capítulo 1

GENERALIDADES DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN

1.1. QUE ES EL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN¹

El Seminario de Investigación, también conocido como Seminario Alemán, es una actividad académica cuyo origen se dio a finales del siglo XVIII en la Universidad de GOTTINGEN de Alemania, para renovar las estrategias de estudio y formación de los investigadores, además para demostrar que la docencia y la investigación se pueden unir y complementar para obtener mejores resultados.

Consiste en estudiar, discutir e intercambiar experiencias acerca de un tema en particular, en un grupo, en el cual sus participantes se intercomunican exponiendo dicho tema (la Relatoría) complementándolo, evaluándolo (Correlatoría), aportando entre todos (la Discusión), sacando conclusiones y planteando nuevos interrogantes lo que permite que todo ello quede en la memoria escrita (el protocolo).

El Seminario de Investigación se programa por subtemas, estos son seleccionados con la orientación del director del seminario, quien con su experiencia y conocimiento del tema central, guía la selección con la debida pertinencia, actualidad y ubicación en el contexto. Los temas son desarrollados en sesiones planificadas, en las cuales los miembros del grupo deben asumir diferentes roles de acuerdo con la descripción anterior y mantener

¹Universidad Industrial de Santander. Lineamientos para el seminario de investigación como modalidad para el desarrollo del trabajo de grado. Vicerrectoría académica. Septiembre de 2007

una relación de interés y compromiso con el conocimiento sin jerarquías en un clima de colaboración y participación activa.

1.2. OBJETIVO DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN

El objetivo es formar a los participantes en la investigación científica mediante el desarrollo de habilidades específicas aplicadas al asumir los diferentes roles dentro del seminario. Dichas habilidades están orientadas a desarrollar la capacidad de lector crítico de resultados de investigación en cualquiera de las áreas del conocimiento, a fortalecer la capacidad de observar e identificar los problemas presentes en temas bajo análisis, a buscar respuestas a preguntas clave y sustentarlas teórica y metodológicamente en forma verbal y por escrito; y a identificar las relaciones del problema objeto de estudio con el contexto económico, político o social a fin de enriquecer, con una mirada de integralidad, el conocimiento para el grupo de estudiantes. Para ello se programan y ejecutan ejercicios estructurados que permiten a los estudiantes desarrollar competencias iniciales de investigador, avanzar en el conocimiento y aportar buenas revisiones y análisis sobre temas que pueden facilitar el desarrollo de la investigación.

Para alcanzar dicho objetivo es preciso que haya una formación desde el trabajo personal hacia el trabajo en equipo; para esto, cada participante debe reconocer sus intereses, estilos de aprendizaje, capacidades para aprender en interacción con pares; además debe apropiarse de la metodología y los instrumentos con los cuales trabajará con el fin de lograr, al interactuar con los demás miembros del grupo en las sesiones del seminario, compartir, criticar y corregir las ideas que surjan de él en un ambiente de colaboración mutua.

Los seminarios de investigación no se enfocan hacia la repetición de trabajos ya realizados, sino hacia la búsqueda de respuestas con nuevos argumentos; por tal razón los trabajos que se deriven del cumplimiento del objetivo del Seminario deben caracterizarse por su originalidad y estar acordes al nivel científico de formación de sus participantes.

1.3. VENTAJAS DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN

El seminario de investigación, como herramienta para el desarrollo integral, presenta las siguientes ventajas:

- Permite a los participantes contar con un director (profesor) durante el seminario,

el cual les guía hacia la consecución de los propósitos establecidos y resuelve las dudas e inquietudes, orienta sobre las fuentes de consulta y ayuda a los miembros del grupo en la búsqueda de información para suplir las necesidades que se presenten.

- Fortalece el hábito de documentarse acerca del tema bajo estudio. Para esto los participantes recurren a fuentes bibliográficas, bases de datos y textos de referencia obligada; este ejercicio refuerza el desarrollo de las competencias interpretativas, argumentativas y propositivas; permite apropiarse y aprender de los métodos que emplearon los autores de los artículos y textos, así como también reconocer su valor y aporte a la investigación.
- Permite que los participantes desempeñen diferentes roles dentro del grupo y desarrollen habilidades comunicativas y de relaciones interpersonales complementarias para la formación tanto personal como profesional.
- Fomenta el aprendizaje como una experiencia grupal. Permite experimentar la eficiencia del trabajo en equipo y, si el grupo está conformado por estudiantes de diferentes áreas del conocimiento, la riqueza de la interdisciplinariedad, características todas aplicables y necesarias en el desempeño laboral del mundo de hoy.
- Permite el uso de distintas herramientas didácticas de apoyo al desarrollo de las sesiones, así como un control sobre la planificación establecida de éstas.
- Es una metodología integradora centrada en el estudiante con amplio potencial para fortalecer la habilidad de aprender a aprender, fundamental para tomar el perfil del ciudadano del siglo XXI, quien deberá asumir el compromiso de aprender a lo largo de la vida como la plantea J. Delors².

1.4. CARACTERÍSTICAS

El seminario de investigación consta las siguientes características:

²Jaques Delors et al. La Educación Encierra un Tesoro. Informe a la UNESCO de la Comisión Internacional sobre la educación para el siglo XXI. París, 1996.

- Participación activa de todos los miembros del seminario, puesto que no solo el director (profesor) interviene, sino que también todos los integrantes del grupo realizan su aporte desde el rol que estén desempeñando. En este proceso los discípulos participantes empiezan a recorrer el camino hacia Maestros.
- El Seminario de Investigación está conformado por un grupo reducido, de aprendizaje activo y cooperativo; inducido a investigar, reflexionar, descubrir y concluir información del tema.
- Empleo del dialogo permanente para compartir los conocimientos adquiridos.
- Fomenta un ambiente amable y cooperativo que mejora la participación de los integrantes del grupo.
- Se desarrolla en sesiones que utilizan medios didácticos de apoyo al aprendizaje.
- La estructura, todas las actividades y parámetros para desarrollar el seminario son planificados en la primera sesión.
- El seminario de investigación exige a los participantes una alta responsabilidad para lograr la preparación adecuada que les permita tener bases para llevarlo a cabo.

1.5. ORGANIZACIÓN DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN

El Seminario de Investigación se compone de las siguientes actividades: la Relatoría, la Correlatoría, la Discusión y el Protocolo, las cuales deben girar en torno a un tema, del que se desprenden los subtemas que se tratan durante las sesiones.

Dichas actividades son responsabilidad de los integrantes del grupo, por lo cual a cada uno de ellos es asignado un rol de carácter rotativo; es así como una persona que en una sesión asume el rol de correlator podrá ser el protocolante en la siguiente, es decir, el responsable del protocolo.

La organización del seminario también implica establecer el lugar donde se llevará a cabo, el número de sesiones y las fechas para realizarlo; así como la duración de cada una de las actividades (Relatoría, Correlatoría, Discusión y Protocolo).

El seminario de investigación en Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) está compuesto por:

Director: Ing. David A. Fuentes Díaz

Participantes: Aníbal A. Beleño Mier

Armando García Castañeda

Kleyver Urbina Mindiola

Óscar M. Santos Martínez

A los cuales se les asigna un rol para cada sesión. Las sesiones se llevan a cabo en las instalaciones del grupo de investigación GIEMA en la Escuela de Ingeniería Mecánica. El número de sesiones depende del tema y los subtemas mostrados en la Tabla 1. Las sesiones están programadas para una duración de 2 horas.

1.6. TEMA DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN

El CFD es una de las ramas de la mecánica de fluidos que utiliza métodos numéricos y algoritmos para resolver y analizar los problemas que implican flujos de fluidos. Los procesadores se utilizan para realizar los millones de cálculos necesarios para simular la interacción de fluidos y gases con las complejas superficies utilizadas en la ingeniería. Incluso con las ecuaciones simplificadas de alta velocidad y superordenadores, la aproximación de las soluciones sólo pueden alcanzarse en algunos casos. El estudio del CFD comenzó en los años 60 en la industria aeroespacial y desde entonces ha madurado; a partir de los años 80 se ha convertido en una herramienta vital en muchas industrias para las que la predicción del flujo de fluidos es importante. En los últimos años se ha expandido de forma significativa a distintas aplicaciones y procesos industriales en los que intervienen: transferencia de calor, reacciones químicas (como combustión), flujos bifásicos, cambios de fase, transferencia de masa y esfuerzos al interactuar con sólidos, entre otros.

1.6.1. Etapas de simulación en CFD

1.6.1.1. Generación del Modelo

La generación de un modelo y simulación de sistemas físicos es una técnica que nos permite, a través de un análisis matemático, comprender y predecir el comportamiento del sistema en el tiempo.

Esta técnica es exitosa en la optimización y diseño de sistemas físicos y de procesos. Su uso se ha expandido debido a la creación y desarrollo de procesadores de alta velocidad. Además, ofrece ventajas económicas, permite investigar los efectos entre los distintos parámetros involucrados y extrapola resultados a sistemas a escala; lo que facilita la comprensión de los mecanismos y comportamientos del proceso.

Sin embargo, hay que tener presente las limitaciones de la técnica. La falta de datos o conocimientos del proceso o del sistema influye directamente, de forma adversa, sobre los resultados de la simulación. El tipo de ecuaciones que rigen el comportamiento puede ser muy complejo a la hora de realizar cálculos.

1.6.1.2. Mallado del dominio

La discretización del dominio, divide el fluido en pequeñas celdas llamadas elementos o volúmenes finitos, ésta es la segunda etapa. La forma de estos puede ser variada (tetraédrica, hexaédrica, prismáticas, etc.); la división del dominio determina el número de elementos, los que están limitados por la memoria del procesador disponible.

La complejidad de la física involucrada junto al tamaño del dominio define a grandes rasgos el tamaño del problema y la potencia de cálculo necesaria. La densidad de nodos o elementos puede cambiar de unas regiones a otras debiendo acumular un mayor número de ellos en las zonas donde se esperan fuertes variaciones de alguna variable.

Con esta discretización se genera un sistema de ecuaciones algebraicas que representan al modelo físico.

1.6.1.3. Solución de las ecuaciones

Las ecuaciones que gobiernan la transferencia de masa, cantidad de movimiento, energía, especies, etc. se resuelven en cada uno de los elementos de la malla generada en el paso anterior. Puesto que las ecuaciones son derivadas parciales, previamente hay que convertirlas en ecuaciones algebraicas (introduciendo errores numéricos de discretización y truncamiento) utilizando los esquemas numéricos más adecuados. Así se pasa de tener un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales sobre un espacio continuo (x, y, z, t) a un sistema finito de ecuaciones algebraicas con variables independientes discretas $(x[i], y[i], z[i], t[j])$. El número de ecuaciones que se deben resolver puede ser muy elevado, del orden de un millón por paso de tiempo.

En los pasos intermedios de discretización y truncamiento aparecen errores numéricos, además de los de redondeo debido al uso de un número finito de decimales, que deben tender a cero si se quiere que la solución numérica se parezca a la real.

Asociados a la cuantificación de errores se encuentran los conceptos de verificación y validación de los cálculos. Se llama verificación del modelo a la comprobación de la correcta solución de las ecuaciones; dicha comprobación poco tiene que ver con la física y es una cuestión puramente de cálculo numérico. La validación del modelo, por el contrario, consiste en determinar las ecuaciones apropiadas que realmente resuelven la aproximación del modelo matemático del proceso físico.

1.6.1.4. Análisis de resultados

Generalmente al análisis y post proceso de los resultados se les da una menor importancia de la que realmente tienen. Una vez resueltas las ecuaciones se dispone de los valores de las variables que definen el problema en cada uno de los elementos de la malla. Si además el problema es no estacionario se obtiene un conjunto de tales datos por cada paso de tiempo. Como es de esperar se tiene una gran cantidad de datos entre los que hay que extraer información útil. Visualizar el flujo y los aspectos relacionados, incluso en las más complejas geometrías, es la mejor forma de entender un proceso e ir directo a la solución óptima.

1.6.2. Aplicaciones de la CFD

Las posibilidades de aplicación de la CFD a distintos procesos son enormes. Algunos ejemplos son:

- Sistemas de calefacción, ventilación, climatización y refrigeración.
- Aeroespacial/Defensa: perfiles de alas, misiles y estudios de aerodinámica externa.
- Industria agroalimentaria: procesamiento y envase de alimentos, diseño de equipos.
- Industria automotriz: aerodinámica, combustión en motores, componentes.
- Energía: petróleo, gas, nuclear, generación eléctrica, turbo maquinaria, celdas de combustible.
- Industria química: combustión, filtración, mezcla, separadores, reactores.

- Industria electrónica: semiconductores, enfriamiento de elementos.
- Industria biomédica.
- Industria naval.
- Industria deportiva: automovilismo, vela, estadios.

1.6.3. Ventajas y desventajas de la CFD

Las ventajas de la CFD son:

- Predice las propiedades del fluido con gran detalle en el dominio estudiado.
- Ayuda al diseño, al prototipado y a dar soluciones rápidas evitando costosos experimentos.
- Se obtiene una visualización y animación del proceso en términos de las variables del fluido.

Las desventajas de la CFD son:

- Requiere usuarios con una amplia experiencia y formación especializada.
- Consume recursos de hardware y software que requieren inversiones significativas.
- En algunos casos, el costo computacional es elevado.

1.7. DIRECCIÓN DEL SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN EN DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

La dirección del seminario de Investigación en Dinámica de Fluidos Computacional estuvo a cargo del profesor: Ing. David A. Fuentes Díaz que cuenta con la siguiente formación:

Formación
Doctorado en Tecnología Energética Universidad Politécnica de Valencia, UPV, España Título: Estudio y modelado del flujo en tubos capilares adiabáticos en sistemas de refrigeración. Tutor: José Miguel Coberán Salvador Becado de: Universidad Politécnica de Valencia
Pregrado / Universitario en Ingeniería Mecánica Universidad Industrial de Santander, UIS, Colombia Título: Diseño de válvulas de seguridad en sistemas hidráulicos Tutor: Abel Parada Corrales

1.8. METODOLOGÍA

Para llevar a cabo el seminario de Investigación en Dinámica de Fluidos Computacional satisfactoriamente y garantizar la fluidez de las sesiones y cumplimiento de los objetivos planteados, se escogió una metodología reunida en tres grupos: planeación, ejecución y finalización; las cuales se relacionan entre sí dependiendo cada una de la anterior. Grupos que se explicarán en los siguientes capítulos.

Capítulo 2

PLANEACIÓN

En esta etapa se establecen los lineamientos bajo los cuales se desarrolla el seminario, se definen los alcances y resultados que se esperan obtener mediante la selección del tema, el estudio bibliográfico, los subtemas; y la planificación de las sesiones.

Los alcances y objetivos del seminario son:

- Establecer un documento donde se recopile el contenido total del seminario de investigación de acuerdo con los subtemas especificados en la tabla 2.1.
- Realizar presentación en Power Point de los temas estudiados de acuerdo a los lineamientos en la tabla 2.1.
- Generar códigos de programa de los temas estudiados de acuerdo a los lineamientos en la tabla 4.1.

En cuanto a la selección del tema, se escogió uno que fuera de interés para todos los estudiantes participantes. Se hizo un estudio previo del tema, el cual arrojó que la formación de los estudiantes participantes cumple para desarrollar el seminario y el director cuenta con la capacidad de orientación y el perfil para dirigirlo.

Antes de iniciar el seminario se definió la bibliografía para estudiar el tema seleccionado, la cual es:

AMES, William F. Numerical methods for partial differential equations. Segunda edición. Orlando, Florida: Academic Press, 1977. 376 p., esta fuente bibliográfica fue de

gran importancia porque ayudó a la comprensión y utilización de diferentes métodos para las posibles soluciones de todas aquellas ecuaciones diferenciales parciales en problemas concretos de ingeniería.

ANDERSON, Dale A. Computational fluid mechanics and heat transfer. Washington, DC: Taylor & Francis, 1997. 803 p., el enfoque de este libro proporcionó los fundamentos básicos de teoría computacional y métodos computacionales. El libro está dividido en dos partes. La primera cubre el material fundamental al entendimiento y el uso de métodos de diferencia finita. La segunda ilustra el empleo de tales métodos en la solución de los tipos diferentes de problemas complejos encontrados en la mecánica fluida y la transferencia de calor.

ANDERSON, John D. Computational fluid dynamics. The basics with applications. New York: McGraw-Hill, 1995. 547 p. Este libro ofrece una idea completa de las ecuaciones de Navier-Stokes; después explica detenidamente el comportamiento matemático de las diversas corrientes, y permite la comprensión de planteamientos para diferentes regímenes de caudales. La sección sobre técnicas de discretización y solución se centró claramente para obtener soluciones estables.

HOFFMAN, Klaus A. y CHIANG, Steve T. Computational fluid dynamics. Cuarta edición, volúmenes I, II y III. Wichita, Kansas: Engineering Education System, 2000. 486 p. Estos libros muestran la utilización de algunos algoritmos y métodos numéricos para poder solucionar y resolver problemas que implicaron flujos de fluidos y los cálculos necesarios para la simulación de estos en las complejas superficies utilizadas.

COMINI, Gianni. Finite element analysis heat transfer. Basic formulation and linear problems. Washington, DC: Taylor & Francis, 1994. 463 p.. Este libro muestra un análisis de la transferencia de calor como un problema de gran importancia en una amplia gama de aplicaciones industriales. Además presenta el uso del potente método de los elementos finitos en el análisis de la transferencia de calor. También pasa a examinar la solución lineal de conducción de calor en estado estacionario y transitorio y también al análisis no lineal.

DONEA, Jean y HUERTA, Antonio. Finite element methods for flow problems. The

Atrium, Southern Gate: John Wiley & Sons Ltd, 2003. 350 p. Organizado en seis capítulos, este texto combina aspectos teóricos y prácticos y ofrece la cobertura de las últimas investigaciones en varias áreas de dinámica de fluidos computacional, ésta incluye asuntos nuevos y avanzados. Por otra parte indica los problemas clave y ofrece soluciones modernas y prácticas debido al equilibrio entre la explicación concisa de la teoría y la descripción detallada de usos prácticos.

PATANKAR, S.V. Numerical heat transfer and fluid flow. Minnesota: Taylor & Francis, 1980. 197 p. Este libro da una descripción matemática de fenómenos físicos y métodos de discretización. Pone la atención a ecuaciones gobernantes diferenciales, la naturaleza de coordenadas, la naturaleza de métodos numéricos, la conducción estable e inestable unidimensional y bidimensional; y algunas situaciones tridimensionales.

Cada uno de los participantes consultó dicha bibliografía y su información se complementó con el avance de cada etapa en el desarrollo del seminario y, en caso de que esta información no fuera suficiente, el participante recurrió a otras fuentes que aportaron algo nuevo a la investigación del tema.

Una vez realizado el estudio bibliográfico fue notorio observar que cuenta con subtemas comunes, en un mismo orden y profundiza en aspectos relevantes que permiten comprender de manera integral la técnica de CFD. Se tiene en cuenta que ésta técnica está en una etapa introductoria para los participantes del seminario, y en general para la escuela de Ingeniería Mecánica, por tanto se seleccionaron los subtemas de la Tabla 2.1.

El número de sesiones se determinó de acuerdo a los subtemas seleccionados, se asignó a cada participante un subtema para exponer arbitrariamente, de forma que quedaran equilibradas las cargas en los subtemas, a la vez se definieron los roles de cada uno. Al tener definido el número de sesiones se organizaron las respectivas fechas de tal modo que hubiera un lapso de tiempo previo para la preparación de los subtemas. También se deja claro qué participante se escoge como relator en cada sesión. Se escogió el martes para realizar las sesiones por su asequibilidad horaria, tanto para el director como para los participantes, y también por la disponibilidad de herramientas necesarias para el desarrollo de cada sesión como el videobeam y el salón.

Cuadro 2.1: Subtemas de investigación

Todo los subtemas se resume como se muestra en la Tabla2.1

Tabla 2.1
1. Ecuaciones diferenciales que determinan el movimiento del fluido y condiciones de frontera <ul style="list-style-type: none">▪ Introducción▪ Cinemática del flujo▪ Modelo de flujo▪ Ecuación de conservación▪ Condiciones de frontera▪ Ecuaciones para CFD▪ Coordenadas
2. Clasificación matemática de las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) <ul style="list-style-type: none">▪ Regla de Cramer▪ Método de los valores propios▪ Comportamiento general de las diferentes clase de EDP▪ Coordenada en una y dos vías

continúa en la página siguiente

Tabla 2.1

3. Discretización

- Método de las diferencias finitas
- Sistema de ecuaciones
- Método de volúmenes finitos
- Aproximación explícita e implícita
- Errores y análisis de estabilidad
- Propiedades numéricas de los métodos de solución

4. Solución de las ecuaciones discretizadas

- Métodos directos
- Algoritmo para matriz tri-diagonal
- Métodos iterativos
- Sistemas de ecuaciones no lineales
- Sistemas de ecuaciones acopladas y su solución
- Disipación y dispersión numérica: Viscosidad artificial

continúa en la página siguiente

Tabla 2.1

5. Implementación de las condiciones de frontera

- Condiciones de frontera de entrada
- Condiciones de frontera a la salida
- Condiciones de frontera en la pared
- Condiciones de frontera de presión constante
- Condiciones de frontera de simetría
- Condiciones de frontera cíclica o periódica
- Dificultades potenciales y comentarios finales

6. Difusión en estado estable

- Difusión unidimensional en estado estable
- Ejemplo 1: Conducción libre en una barra aislada
- Ejemplo 2: Generación de calor
- Ejemplo 3: Conducción en una aleta
- Conductividad térmica en la interface de la celda
- Difusión bidimensional en estado estable
- Difusión tridimensional en estado estable
- Resumen para problema de difusión

continúa en la página siguiente

Tabla 2.1

7. Convección-difusión estable

- Convección-difusión estable unidimensional
- Esquema de diferencia centrada
- Propiedades de los esquemas de discretización
- Valoración del esquema de diferencia centrada para problemas de convección-difusión
- Esquema UPWIND
- Esquema de diferenciación híbrido
- Esquema POWER-LAW
- Esquema Exponencial
- Formulación generalizada
- Esquema de alto orden para problemas de convección-difusión

continúa en la página siguiente

Tabla 2.1

8. Algoritmo para el cálculo del campo de flujo

- Esquemas aplicados con el método de los volúmenes finitos
- Algunas dificultades relacionadas
- La malla alternada
- Las ecuaciones de cantidad de movimiento
- Algoritmo SIMPLE
- Algoritmo SIMPLER
- Algoritmo SIMPLEC
- Algoritmo PISO

continúa en la página siguiente

Tabla 2.1

9. Flujos transitorios

- Conducción de calor transitoria unidimensional
- Esquema para soluciones explícitas
- Ejemplo: Conducción de calor transitoria unidimensional
- Ejemplo: Conducción de calor unidimensional solución implícita
- Difusión transitoria en dos y tres dimensiones
- Discretización temporal de la ecuación de convección-difusión
- Ejemplo: Convección difusión transitoria usando el método QUICK
- Cálculo del campo de flujo transitorio
- Cálculos de estado estable usando una aproximación pseudo transitoria

2.1. DESCRIPCIÓN DE LOS SUBTEMAS

Ecuaciones que determinan la dinámica de fluidos: el propósito de empezar con el estudio de estas ecuaciones es describir el comportamiento en términos de sus propiedades, tales como velocidad, presión, densidad y temperatura. La descripción se basa en los principios físicos de la conservación de masa, la segunda ley de Newton y la conservación de la energía, lo que da como resultado ecuaciones matemáticas de continuidad, momentum y energía en las formas Lagrangiana (una partícula del fluido se mueve a través del campo de flujo) y Euleriana (las características del flujo se monitorean en un volumen de control fijo) que generan una base matemática diferente de las ecuaciones del movimiento, la forma conservativa y la no conservativa, que reflejan un comportamiento diferente de los campos de flujo.

Es importante entender la significancia y lo principal de cada ecuación para la inter-

pretación de los resultados.

El procedimiento para la solución de las ecuaciones de movimiento, las condiciones iniciales y las condiciones de frontera dependen del tipo de ecuaciones que se clasifican en: hiperbólicas, parabólicas, elípticas y de tipo mixto; clasificación que ayuda en la selección de un método numérico en dicha solución.

Técnicas de discretización: la discretización es un proceso en el que una expresión matemática cerrada, tal como una función, una ecuación diferencial o integral que involucre funciones con valores continuos a través de un dominio, es aproximada por expresiones análogas, pero diferentes, que fijan unos valores en un número finito de puntos discretos o volúmenes del dominio. El objetivo es obtener una representación algebraica de las ecuaciones diferenciales parciales y formar un sistema de ecuaciones.

Dentro de las técnicas de discretización están:

- **Diferencias finitas:** en la cual se utiliza la forma diferencial de las ecuaciones de movimiento y está basada en la serie de Taylor. La técnica se limita a mallas de bloques o estructurada.
- **Los volúmenes finitos:** es una alternativa numérica que permite formular modelos de forma sencilla gracias a su carácter intuitivo, la relación directa entre el algoritmo numérico y el principio de conservación física; en esta técnica se utiliza la forma integral de las ecuaciones de movimiento y es adecuada para cualquier tipo de malla.
- **Elementos finitos:** la idea general es dividir el dominio en un conjunto de elementos interconectados por una serie de puntos llamados nodos. La ecuación que rige el comportamiento del dominio, rige también el elemento; de esta forma se consigue pasar de un sistema continuo (infinitos grados de libertad) que es regido por una ecuación diferencial o un sistema de ecuaciones diferenciales a un sistema con un número de grados de libertad finito cuyo comportamiento se modela por un sistema de ecuaciones lineales o no.

Solución de las ecuaciones discretizadas: hay métodos directos o iterativos. En los directos están: eliminación Gaussiana y la Regla de Cramer, pero la eliminación Gaussiana es la más recomendada por el análisis bibliográfico. En los métodos iterativos

están: Jacobi, Gauss-Seidel, Sobre-relajación sucesiva (SOR) en las ecuaciones lineales y el método de gradientes conjugados y gradientes biconjugados en las ecuaciones no lineales. Además para las ecuaciones no lineales hay métodos no iterativos como el Newton-Raphson y otros métodos globales.

Aplicaciones: una vez adquiridas las bases en cuanto a las ecuaciones que rigen el movimiento, la discretización y la solución de las ecuaciones discretizadas se pueden desarrollar ejemplos prácticos de transferencia de calor y mecánica de fluidos entre los que están la conducción de calor estable y transitorias, convección-difusión en estado estable y el cálculo de campo de flujo en uno, dos y tres dimensiones.

Capítulo 3

EJECUCIÓN

En la Tabla 3.1 se muestra cómo se desarrolló el orden de las actividades. Cada sesión, compuesta por su relator (según Tabla 3.1), correlator y los asistentes según el protocolo. El protocolo consta de los siguientes pasos:

- Levantar un acta en la cual se deja por escrito el número del acta, fecha de la sesión, lugar, roles, tema desarrollado, observaciones y conclusiones.
- Hacer un documento del tema expuesto (anexos).
- Dejar un archivo las presentaciones en Power Point del tema expuesto por el relator.

Tabla 3.1	Relator
Ecuaciones diferenciales que determinan el movimiento del fluido y condiciones de frontera * Introducción * Cinemática del flujo * Modelo de flujo	

continúa en la página siguiente

Cuadro 3.1: Temas y subtemas con su respectivo relator

Tabla 3.1	Relator
<ul style="list-style-type: none"> * Ecuación de conservación * Condiciones de frontera * Ecuaciones para CFD * Coordenadas 	David A. Fuentes
<p>Clasificación matemática de las ecuaciones diferenciales parciales (EDP)</p> <ul style="list-style-type: none"> * Regla de Cramer * Método de los valores propios * Comportamiento general de las diferentes clase de EDP * Coordenada en una y dos vías 	David A. Fuentes
<p>Discretización</p> <ul style="list-style-type: none"> * Método de las diferencias finitas * Sistema de ecuaciones * Método de volúmenes finitos * Aproximación explícita e implícita * Errores y análisis de estabilidad * Propiedades numéricas de los métodos de solución 	David A. Fuentes Oscar M. Santos Anibal A. Beleño Armando García Kleyver Urbina Óscar M. Santos
<p>Solución de las ecuaciones discretizadas</p> <ul style="list-style-type: none"> * Métodos directos * Algoritmo para matriz tri-diagonal * Métodos iterativos * Sistemas de ecuaciones no lineales * Sistemas de ecuaciones acopladas y su solución * Disipación y dispersión numérica: Viscosidad artificial 	Óscar M. Santos Anibal A. Beleño Armando García Kleyver Urbina Kleyver Urbina Armando García

continúa en la página siguiente

Tabla 3.1	Relator
<p>Implementación de las condiciones de frontera</p> <ul style="list-style-type: none"> * Condiciones de frontera de entrada * Condiciones de frontera a la salida * Condiciones de frontera en la pared * Condiciones de frontera de presión constante * Condiciones de frontera de simetría * Condiciones de frontera cíclica o periódica * Dificultades potenciales y comentarios finales 	<p>Aníbal A. Beleño Óscar M. Santos Óscar M. Santos Aníbal A. Beleño Armando García Kleyver Urbina Aníbal A. Beleño</p>
<p>Difusión en estado estable</p> <ul style="list-style-type: none"> * Difusión unidimensional en estado estable * Ejemplo 1: Conducción libre en una barra aislada * Ejemplo 2: Generación de calor * Ejemplo 3: Conducción en una aleta * Conductividad térmica en la interface de la celda * Difusión bidimensional en estado estable * Difusión tridimensional en estado estable * Resumen para problema de difusión 	<p>Armando García David A. Fuentes Kleyver Urbina Óscar M. Santos Aníbal A. Beleño Armando García Kleyver Urbina Óscar M. Santos</p>
<p>Convección-difusión estable</p> <ul style="list-style-type: none"> * Convección-difusión estable unidimensional * Esquema de diferencia centrada * Propiedades de los esquemas de discretización 	<p>David A. Fuentes Óscar M. Santos Aníbal A. Beleño</p>

continúa en la página siguiente

Tabla 3.1	Relator
<ul style="list-style-type: none"> * Valoración del esquema de diferencia centrada para problemas de convección-difusión * Esquema UPWIND * Esquema de diferenciación híbrido * Esquema POWER-LAW * Esquema Exponencial * Formulación generalizada * Esquema de alto orden para problemas de convección-difusión 	<p>Armando García</p> <p>Kleyver Urbina</p> <p>Kleyver Urbina</p> <p>Armando García</p> <p>Aníbal A. Beleño</p> <p>Oscar M. Santos</p> <p>Óscar M. Santos</p>
<p>Algoritmo para el cálculo del campo de flujo</p> <ul style="list-style-type: none"> * Esquemas aplicados con el método de los volúmenes finitos * Las ecuaciones de cantidad de movimiento * Algoritmo SIMPLE * Algoritmo SIMPLER * Algoritmo SIMPLEC * Algoritmo PISO 	<p>David A. Fuentes</p> <p>Aníbal A. Beleño</p> <p>Aníbal A. Beleño</p> <p>Óscar M. Santos</p> <p>Armando García</p> <p>Kleyver Urbina</p>
<p>Flujos transitorios</p> <ul style="list-style-type: none"> * Conducción de calor transitoria unidimensional * Esquema para soluciones explícitas * Ejemplo: Conducción de calor transitoria unidimensional * Ejemplo: Conducción de calor unidimensional solución implícita * Difusión transitoria en dos y tres dimensiones 	<p>Aníbal A. Beleño</p> <p>Óscar M. Santos</p> <p>Armando García</p> <p>Kleyver Urbina</p> <p>Aníbal A. Beleño</p>

continúa en la página siguiente

Tabla 3.1	Relator
*Discretización temporal de la ecuación de convección-difusión	Óscar M. Santos
* Ejemplo: Convección difusión transitoria usando el método QUICK	Kleyver Urbina
* Cálculo del campo de flujo transitorio	David A. Fuentes
* Cálculos de estado estable usando una aproximación pseudo transitoria	David A. Fuentes

3.1. ACTA

El acta es un documento escrito donde se hace constar la relación de los roles de los participantes en cada sesión del seminario de investigación. El documento modelo que se llevó durante todas las sesiones se observa en la figura 3.1:

La estructura del acta está determinada por su contenido, ya que cada apartado se corresponde con cada uno de los aspectos de la reunión. En el acta mostrada en la Figura 3.1 sobresalen los siguientes apartados:

- **Numeración:** Cada acta se llevó con un número consecutivo que le correspondía, en total fueron 59 actas para 65 subtemas expuestos.
- **Fecha:** Incluye la fecha en que se realiza la reunión; se tuvo en cuenta que va primero el día, luego el mes y el año completo.
- **Hora:** Se anota la hora de inicio, el lapso de duración de la reunión es dos horas, así se sabe la hora de finalización, por lo tanto no se anota.
- **Lugar:** Sitio de la reunión, cabe anotar que siempre se hizo en el mismo lugar: la oficina del grupo de investigación del GIEMA en la Escuela de Ingeniería Mecánica.
- **Relator:** Es el expositor del tema correspondiente en la sesión del seminario, siempre tuvo como misión principal enriquecer, como resultado de su investigación y estudio, el saber de los demás, buscar por medio de una argumentación rigurosa

Figura 3.1: Modelo del acta

DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL
ESCUOLA DE INGENIERÍA MECÁNICA, UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER



Acta No. 1

Fecha:

Hora: 4:00 PM

Lugar: Ingeniería Mecánica, Universidad Industrial de Santander

Relator:

Correlator:

Discusión:

Protocolo:

Tema a desarrollar:

Observaciones y conclusiones:

Ing. David Fuentes Díaz

y aportar algo nuevo que permitiera avanzar en el conocimiento sobre el objeto de estudio. Este relator siempre incentivo al grupo a la discusión y despertó interés de participación a todos los demás integrantes a través de explicaciones claras, un argumento riguroso e hizo planteamientos desde su punto de vista. El relator es el que va plasmando lo expuesto al documento informativo y su presentación se da con ayuda del correlator. Esta persona tiene toda la libertad para organizar su material de trabajo, puede escoger la bibliografía a su gusto, preparar la sesión antes y, con la ayuda de herramientas como el vídeobeam, puede desempeñar su rol como debe ser.

- **Correlator:** Es el que complementa y enriquece la relatoría. En este seminario se trabajó de manera que el correlator fuese el que hiciera la presentación de las sesiones para poder tener una idea amplia acerca del subtema, éstas presentaciones eran mostradas al relator con anticipación para la verificación y corrección de posibles errores. El correlator siempre estuvo atento a lo que decía el relator evaluando, de manera paralela, el contenido, la claridad y el manejo de la exposición con el fin de plantear su reflexión personal de manera crítica y motivando a los participantes al debate.
- **Discusión:** Básicamente aquí están nombrados todos los participantes, puesto que la discusión es donde se confrontan las concepciones y apreciaciones sobre el tema. En las actas pasadas, durante el transcurso del seminario, siempre se nombró una persona con el fin de dar claridad la participación de cada estudiante en cada uno de los roles. La discusión fue de una forma oportuna y respetuosa hacia las opiniones de los demás; pues la crítica, es una parte muy importante que permite a los participantes fortalecer procesos cognitivos a partir de la escucha, la reflexión y la toma de notas sobre lo que se desea expresar para luego hablar.
- **Protocolo:** en la sesión se encargó a una persona de escribir la evidencia de cada subtema y un insumo para la elaboración del informe final, éste es el protocolo. El acta se leyó antes de comenzar cada sesión, ya que es un documento de registro de lo ocurrido en la anterior sesión y de los compromisos establecidos. Para la elaboración del protocolo, el protocolante utilizó una redacción clara y concisa, además plasmó las actividades tal y como fueron desarrolladas.
- **Tema desarrollado:** Se redactaron y describieron de manera precisa los diferentes subtemas tratados, estos se expusieron en orden como lo muestra la


Tabla 3.1.

- **Observaciones y conclusiones:** Se anotaron en el acta para cada una de las sesiones.

El protocolo o acta permite en su realización el ejercicio de la concentración para percibir y captar lo fundamental, los momentos más trascendentales de la sesión y plasmarlo por escrito.

Figura 3.2: Ejemplo acta diligenciada

DINAMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL
ESCUELA DE INGENIERIA MECANICA, UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER



Acta N.º 1

Fecha: 15 enero / 2008

Hora: 4:00 PM.

Lugar: Ingeniería Mecánica, Universidad Industrial de Santander.

Relator: David Fuentes Díaz.

Correlator: Alejandro Beledo.

Discusión: Oscar Mauricio Santos.

Protocolo: Armando García Castañeda, Kleyver Urbina Mindola.

Tema a desarrollar:

- Introducción a las ecuaciones diferenciales que determinan el movimiento del fluido.

Observaciones y conclusiones:

- Se analizaron y discutieron las ecuaciones fundamentales que se usan para describir el movimiento de un fluido, adicionalmente se consideró un flujo continuo.
- Para su estudio se describió el comportamiento del fluido en términos de sus propiedades microscópicas, tales como la velocidad, presión, densidad y temperatura, además de sus derivadas espaciales y temporales.

Ing. David Fuentes Díaz

Parte II

Finalización

Capítulo 4

PRESENTACIONES, DOCUMENTO Y CÓDIGOS

4.1. PRESENTACIONES

La presentación de trabajos de investigación en foros académicos en las modalidades oral, póster y resumen son la culminación del esfuerzo realizado por los investigadores. Si no se siguen lineamientos especiales de elaboración de presentaciones, el trabajo de investigación, al momento de su presentación, no podrá ser valorado por el auditorio de forma completa. Es por esto que se estableció una guía precisa para este seminario como se discute a continuación.

Los subtemas expuestos en cada sesión fueron desarrollados por medio de presentaciones en Power Point con el siguiente formato:

4.1.1. Características

La diapositiva es un medio que facilita una exposición, pero para ello es necesario tener en mente los objetivos que se pretenden alcanzar y que básicamente son: 1- Servir como guía al expositor. 2-Evitar o minimizar el uso de apuntes. 3- Dar un orden lógico a la presentación. 4-Favorecer la captación del mensaje por el auditorio. A continuación se exponen las características que ayudan a cumplir estos objetivos:

- La comunicación humana es verbal y corporal. Mientras las palabras envían un mensaje, el cuerpo emite mensajes adicionales que pueden ser complementarios, afirmativos o, incluso, contradictorios del primero. El balance entre ambas formas de comunicación acompañadas con la exposición de imágenes, gráficas y textos favorecen que el mensaje llegue, por alguna de las vías de percepción del ser humano, a la audiencia que nos observa. Es por ello que el formato resulta

Figura 4.1: Formato de presentación



relevante. El color blanco del fondo ayuda a que las personas que están presentes durante la presentación centren su atención en esta y no cansen la vista durante la conferencia, además de dar tono y cuerpo a la exposición.

- Su identificación está siempre presente por lo que incluye el logo del seminario, el cual fue diseñado por los integrantes, también el logo de la universidad y el nombre de la escuela, lo que da sentido de pertenencia y envía un mensaje de unidad grupal.
- El color negro de la letra resalta sobre el fondo blanco haciendo atractivo el mensaje y evita la fatiga del espectador, pues las sesiones son de dos horas y distraer la atención después de la primera hora de conferencia podría ser fácil. Se sigue el lineamiento de fondo claro y texto oscuro para ambientes claros.
- Se establecieron márgenes en las diapositivas que restringen el uso de textos recargados y quien elabora la diapositiva se ve en la tarea de preparar bien su presentación al solo incluir en éstas ideas específicas y cortas.
- Se utilizó un tipo y tamaño de letra adecuado para facilitar la lectura y no dar motivo para confusiones.

- Una distribución simple y abierta para lograr máxima efectividad.
- Las imágenes cumplen una función nemotécnica, son más atractivas y seductoras que las palabras y los números, por lo que son más fácilmente recordadas por quienes las observan. Sirven a la audiencia como elemento “recordable” que, ligado a la comunicación verbal y no verbal, permiten que las personas a las que se dirige el mensaje lo aprehendan y puedan más tarde reproducirlo. El color y tamaño de las imágenes se seleccionaron de tal forma que combinaran con el fondo para dar una apariencia más agradable a la presentación.
- El título del capítulo y el tema están presentes en cada diapositiva para que el auditorio siempre sepa de qué tema se está tratando y no pierda el hilo de la exposición.
- El nombre de los participantes da sentido de pertenencia con el trabajo realizado en cada sesión y se convierte en un compromiso el trabajar en equipo.
- La información se organiza de forma lógica, dividida en ideas sencillas que facilitan su exposición, de acuerdo a la estrategia comunicativa más adecuada para transmitir el mensaje.

Figura 4.2 es una demostración de las diapositivas utilizadas durante las sesiones.

.


La totalidad de las diapositivas resultantes de las sesiones llevadas a cabo en el transcurso del seminario están recopiladas de forma digital; debido al gran número, y anexadas a este informe.

4.2. DOCUMENTO



El documento escrito fue elaborado con todas las normas y técnicas de la metodología científica y éste no consiste en una serie de puntos de vista, de opiniones, de ideas, etc., sino que es producto de la acción de investigar, cuestionar, fundamentar y contribuir realmente al avance del seminario y se desarrolló, afinó, aclaró y enriqueció con los aportes individuales, la discusión de grupo y con la asesoría del director durante el transcurso de las sesiones.

El documento está dividido en nueve (9) capítulos y es una recopilación de todos los subtemas expuestos durante las sesiones contenidas en la Tabla 3.1 siguiendo el mismo

Figura 4.2: Ejemplo de diapositiva



SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN EN DINAMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL
ESCUELA DE INGENIERIA MECANICA, UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER



ECUACIONES DIFERENCIALES QUE DETERMINAN EL MOVIMIENTO DEL FLUIDO Y CONDICIONES DE FRONTERA.

ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

Componentes de velocidad \longrightarrow

$$\begin{aligned} u &= u(x, y, z, t) \\ v &= v(x, y, z, t) \\ \omega &= \omega(x, y, z, t) \end{aligned}$$

Campo escalar de densidad: \longrightarrow

$$\rho = \rho(x, y, z, t)$$

- En el tiempo t_1 : $\rho_1 = \rho(x_1, y_1, z_1)$
- En el tiempo posterior t_2 : $\rho_2 = \rho(x_2, y_2, z_2)$

ANIBAL ALEJANDRO BELEÑO MIER
ARMANDO GARCIA CASTAÑEDA
KLEYVER URBINA MINDIOLA
OSCAR MAURICIO SANTOS

orden para tener continuidad y conexión entre ellos; profundizando por medio de secciones y subsecciones sus contenidos aclarando el uso de la técnica de CFD.

Dicho documento fue elaborado en un procesador de texto **Lyx**, el cual es un procesador de texto interactivo de alto nivel y que está íntimamente relacionado con LaTeX¹, ya que se aprovecha de las características de éste para producir textos de alta calidad en su formato. Gracias a estas funciones es posible ocupar en **Lyx**, directamente comandos que son propios de LaTeX, siendo ambos completamente compatibles. Incluso es posible señalar que **Lyx** es un editor de documentos que sirve de interfaz a LaTeX. Como sucede con LaTeX, en **Lyx** sólo es necesario preocuparse por el contenido, ya que los detalles del formato los entrega la aplicación, lo que convierte a **Lyx** en un software ideal para documentos de gran tamaño como libros o tesis. De hecho **Lyx** se ha convertido en un estándar para publicaciones científicas de alto nivel. Como se ha mencionado anteriormente, **Lyx** trabaja como lo hace LaTeX, es decir bajo la filosofía WYSIWYM ("lo que ves es lo que quieres decir"), a diferencia de otros software que se basan en WYSIWYG ("lo que ves es lo que obtienes"). Esto es así ya que en **Lyx** solo se señala bajo ciertas etiquetas que es lo que se desea hacer y es la aplicación la que realiza los pasos necesarios para dar el formato correcto al documento. Convirtiéndolo en la herramienta ideal para publicaciones específicas que requieren un alto grado de complejidad como una publicación científica o una tesis doctoral.

El documento es anexado en formato físico.

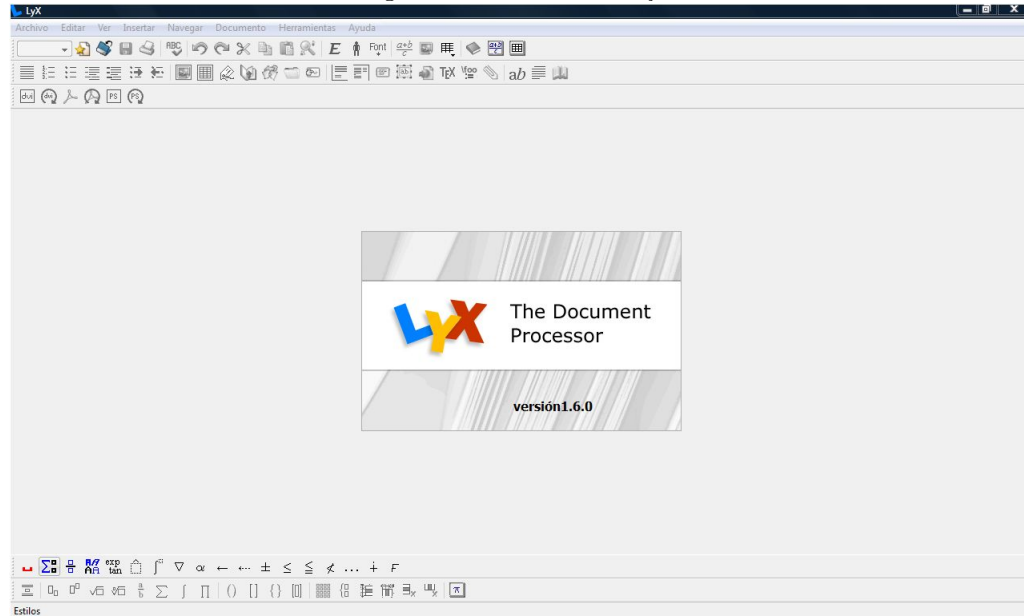
4.3. CÓDIGOS

En el desarrollo del seminario algunos de los subtemas que se plantearon, que son ejemplos de aplicaciones o la solución de ecuaciones discretizadas, es necesario generar un código del cual se obtengan resultados en el caso de la solución de las ecuaciones discretizadas o aproximadas para los ejemplos de aplicación que encajen con la realidad del fenómeno físico. En la Tabla 4.1 se muestra los diferentes subtemas en los cuales es necesario la generación de un código y un pseudo-código.

Para generar los códigos se determinó una estructura que facilita su entendimiento y es flexible en la implementación de los diferentes ejemplos de aplicación de conducción, convección-difusión y el campo de flujo. La estructura comprende las siguientes etapas:

¹Procesador de textos que está formado mayoritariamente por órdenes (macros)

Figura 4.3: Interfaz Lyx.



- *Generación de la malla*
- *Solución de las matrices*
- *Visualización de resultados*

La etapa de *generación de la malla* abarca:

- La geometría del sistema: Número de dimensiones, número de elementos y el número de nodos, así por ejemplo:

- 1 *Indica número de dimensiones*
- 5 *Indica número de elementos en que está dividido el dominio del sistema*
- 6 *Indica número de nodos que contiene el dominio del sistema*

- las características de las celdas en que fue dividido el dominio del sistema:

- | | |
|----------------------|---|
| <code>dpTrue</code> | <i>Indica si todos los elementos son del mismo tipo</i> |
| <code>4</code> | <i>Indica el número máximo de nodos por elemento</i> |
| <code>dpFalse</code> | <i>Indica si hay un solo subdominio</i> |
| <code>0</code> | <i>Indica si la malla es Lattice</i> |

- Condiciones de frontera: cantidad y el valor

```

2      Indica la cantidad de condiciones de frontera
T=100 Valor de la condición de frontera 1
T=500 Valor de la condición de frontera 2
#      Para leer los datos en modo ASCII

```

- Índices y coordenadas en las diferentes dimensiones, cantidad de condiciones de frontera y sus valores correspondientes para cada nodo:

```

1      0.0   1   1

```

El primer dígito indica el índice del nodo, el segundo es la coordenada en que se ubica el nodo en el dominio, el tercer dígito indica que el nodo tiene una condición de frontera y el cuarto dígito indica que la condición de frontera es la número 1.

- Índice, tipo de elemento, tipo de subdominio y los nodos que conforman el elemento:

```

1 ElmB2n1D 1      1   2

```

El primer dígito indica el índice del elemento, le sigue el tipo de elemento, el segundo dígito es el tipo de subdominio del elemento y los dígitos tercero y cuarto son los nodos que conforman el elemento.

Todos estos datos son consignados en un archivo de texto que para nuestro caso lleva por extensión *.Grid* . Un archivo con éstas particularidades permite flexibilidad en el manejo de las características del sistema, ya que con la misma geometría, cantidad de nodos y de elementos se puede solucionar los diferentes fenómenos de transferencia de calor y de campo de flujo en estado estable o transitorio diferenciándose únicamente en las especificaciones de las condiciones de frontera que lee y valida el código como útiles para la solución de la ecuación diferencial discretizada que caracterizan la conducción, convección-difusión y al campo de flujo, en cada caso, así también como para un solo fenómeno se pueden solucionar diferentes geometrías. Hasta éste momento la forma de obtener el archivo *malla* no es de interés del seminario ya que de alguna manera el archivo es generado. Se muestra un ejemplo del archivo de la malla:

```

1
5
6
dpTrue
2
dpFalse
0
2
  T=100
  T=500
#
  1  0.0  1  1
  2  0.1  0
  3  0.2  0
  4  0.3  0
  5  0.4  0
  6  0.5  1  2
1 ElmB2n1D  1  1  2
2 ElmB2n1D  1  2  3
3 ElmB2n1D  1  3  4
4 ElmB2n1D  1  4  5
5 ElmB2n1D  1  5  6

```

Una vez logrado el archivo *.Grid*, el código por medio de funciones lee y almacena las variables que son necesarias para la solución de la matriz. Ésta etapa es conocida como *PRE-PROCESO*.

La etapa de *solución de la matriz* se entiende como el resultado de las variables del sistema de ecuaciones que se consiguen con la discretización de las ecuaciones diferenciales que identifican la conducción, convección-difusión y el campo de flujo en estado estable ó transitorio, es decir, en un sistema de ecuaciones $[A]\{X\} = [B]$ obtener el valor de la variable X .

Para ésta etapa el código establece:

- Llenar la matriz, es decir, almacenar en una matriz los respectivos coeficientes de $[A]$ y de $[B]$ obtenidos teniendo en cuenta las condiciones de frontera descritas en

la Tabla 4.1, las propiedades de cada elemento y las conexiones de los elementos (factores que intervienen significativamente en el logro de los coeficientes y que se establecen en la primera etapa) por medio de ecuaciones particulares en la transferencia de calor y en el campo de flujo.

- Una vez completas las matrices se procede a la solución del sistema de ecuaciones así: $\{X\} = [A]^{-1}\{B\}$, manipulando las matrices en forma *Densa*, *Tri diagonal* ó *Dispersa* dependiendo de las características del sistema y utilizando métodos de solución directos o iterativos como se describen en la Tabla 4.1 el ítem 4 dando la opción de múltiples forma de solución.

Ésta etapa se conoce como *PROCESO*.

Por último está la etapa de *visualización de resultados* ó *POST-PROCESO* con el fin de entender los resultados obtenidos en la solución de la matriz; resultados que varían en número de acuerdo al número de elementos en que se encuentre dividido el dominio del sistema; que pueden ser millones, observarlos gráficamente y facilita la comprensión de la solución

Aquí los resultados son almacenados y procesados a través del programa ***ParaView***; que es un código abierto, multi-plataforma para análisis de datos y aplicación de visualización, a través de un formato de archivo *.case* y *.geo* en el que se describe el fenómeno en particular, es decir, los resultados de las variables, y la geometría respectivamente. Adicionalmente en éstos archivos, si hay múltiples pasos de tiempo, los resultados de las variables y de la geometría en cada paso también pueden ser almacenados.

El arreglo de los formatos *.case* y *.geo* pueden ser vistos de la pagina web <http://www.ensight.com/8.2-manuals/view-category.html> en la opción descargar de *EnSight 8.2-User Manual* en el capítulo 11

4.3.1. Plataforma de realización de los códigos

Todos estos códigos se realizaron en el entorno Visual con lenguaje C++ el cual es un entorno integrado de desarrollo que permite la programación orientada a objetos (POO) conjuntamente con el sistema de desarrollo SDK (Kit de Desarrollo de Software también denominado API) de Windows. Al ser un entorno integrado Visual C++ incluye, entre otras, las siguientes herramientas de desarrollo:

- Editor de texto
- Compilador/Enlazador
- Depurador
- Visor de datos y dependencias (Browser)

Entre sus características están:

1. C++ es un lenguaje con una interfaz y una gramática así como unas directrices que permiten el desarrollo de una programación con un cierto carácter “anárquico”, lo que da lugar a un modelo de programación más personal, una de sus principales señas de identidad es su carácter flexible.
2. El fin hacia el cual se encamina la utilización de dicho lenguaje es un fin que busca dar al usuario una cierta capacidad para crear cualquier tipo de programa, es decir, C++ es un lenguaje generalizado que busca dar solución a problemas de todo tipo. Este hecho puede parecer obvio, ya que dicha finalidad es en prácticamente todos los lenguajes que son utilizados hoy en día. Sin embargo, podemos hallar que los primeros lenguajes creados, tales como MODULA o DINAMO, eran lenguajes destinados tan solo a soluciones de diferentes ciencias específicas, como son la Física o la Ingeniería, por lo que no es de extrañar que los programadores que utilizaban dichos lenguajes fuesen Físicos o Matemáticos.
3. C++ es un lenguaje orientado a objetos, lo cual significa que pueden diseñarse y codificarse programas con módulo (funciones) de procedimientos y pueden definirse y realizarse creaciones de objetos a partir de una declaración (instancias).
4. VISUAL C++ se caracteriza por el uso de variables y localizaciones de almacenamientos que contienen unos valores de datos, poseen en cada variable un tipo que es quien define el formato y el comportamiento de la variable (son tipos de datos: bool, char, wchar_t, int, float y double). Su tamaño dependerá del tipo.
5. VISUAL C++ utiliza clases que forman uno de los aspectos más característicos del lenguaje, facilitándose con ellas la creación de tipos de datos definidos por el usuario juntamente con funciones o métodos para tratar con ellos.

6. Y por último, aunque VISUAL C++ se desarrolle dentro de un entorno de reglas flexibles que pretenden buscar un carácter generalizado para la resolución de algoritmos y problemas no por ello significa que el lenguaje carezca de estructura, ya que sin una estructura clara y definida ninguna clase de lenguaje podría permitir programar. La estructura para la programación en VISUAL C++ se divide por tanto en varias partes o procesos: Declaración de Librerías. Declaración de Constantes. Declaración de Procedimientos y Funciones. Inicio del programa principal. Declaración de variables. Sentencias del Programa. Fin del programa principal. Implementación de Procedimientos y Funciones.

Una vez establecida la estructura y la plataforma de realización de los códigos, se desarrollaron los siguientes códigos en cumplimiento a lo estipulado en la Tabla 4.1:

4.3.2. Conducción (Ecuación de Poisson)

La conducción de calor es un mecanismo de transferencia de energía térmica entre dos sistemas basado en el contacto directo de sus partículas sin flujo neto de materia y que tiende a igualar la temperatura dentro de un cuerpo y entre diferentes cuerpos en contacto por medio de ondas.

El principal parámetro dependiente del material que regula la conducción de calor en los materiales es la conductividad térmica, una propiedad física que mide la capacidad de conducción de calor o capacidad de una sustancia de transferir el movimiento cinético de sus moléculas a sus propias moléculas adyacentes o a otras sustancias con las que está en contacto.

El código se utiliza para el cálculo de conducción en estado estable y en estado transitorio de la siguiente manera:

PRE-PROCESO

- LeeMalla():
- LeeConductividades():
- LeeGeneraciones():

Estas primeras funciones se encargan de establecer las propiedades del dominio del sistema.

- `CeldasFrontera()`: Determina que nodos se encuentran en la frontera del dominio y asigna las diferentes propiedades correspondientes.
- `IniciaMemoria()`: Dimensiona las diferentes matrices.
- `IniciarVariables()`: Llena las matrices y vectores con ceros.
- `CondicionInicial()`: Asigna un valor para el inicio de los cálculos.

PROCESO

- `LLenaMatrizVectorNodo()`: Llena la matriz con respecto a los nodos.
- `LLenaMatrizVectorElemento()`: Llena la matriz con respecto a los elementos.
- `CalculaFlujoElemento()`: Con la correspondiente matriz de elementos calcula los diferentes flujos.
- `CalculaFlujoNodo()`: Con la correspondiente matriz de nodos calcula los diferentes flujos.
- `IsOk()`: Actúa como filtro, o condicionador.
- `Solución()`: Calcula la solución de las diferentes variables.

POST-PROCESO

- `ResultadosCabeceraElemento()`: Genera el archivo *.case* para estado transitorio.
- `ResultadosEstaticoElemento()`: Complementa el archivo *.case* para estado estable.
- `ResultadosTemporalElemento()`: Genera los archivos temporales en cada paso de tiempo.
- `GeometriaElemento()`: Genera el archivo *.geo*.

4.3.3. Convección-Difusión

En problemas donde el flujo juega un papel significativo se debe tener en cuenta los efectos de la convección. La difusión siempre ocurre al lado de la convección. La difusión afecta la distribución de una cantidad a lo largo de sus gradientes en todas las direcciones, mientras que la convección extiende su influencia solamente en la dirección del flujo.

Para la solución de los problemas de convección-difusión en estado estable y transitorio por medio de este código no se hará ninguna referencia acerca de la evaluación de las velocidades en las caras del volumen de control. Se asumirá que de alguna forma se conocen. El código generado tiene la siguiente estructura:

PRE-PROCESO

- ReadF();
- ReadMalla();
- ReadDifusividad();
- ReadGenerations();

Estas primeras funciones se encargan de establecer las propiedades del dominio del sistema.

PROCESO

- LlenarMatriz(): Genera las matrices resultantes por los coeficientes del sistema de ecuaciones.
- Solutions(): Calcula el valor de las diferentes variables.

POST-PROCESO

- ReadResultados(): Genera los archivos *.case* y *.geo*.

4.3.4. Campo de flujo

En algunas circunstancias muy especiales no es posible especificar el campo de flujo, en lugar de ello, se debe calcular las componentes locales de la velocidad y el campo de la densidad a partir de las ecuaciones del movimiento adecuadas. Las componentes de la velocidad están regidas por las ecuaciones de cantidad de movimiento, las cuales son casos particulares de la ecuación diferencial general para ϕ (con $\phi = u$ y $\Gamma = \mu$, y así sucesivamente).

La dificultad en el cálculo del campo de flujo está en el hecho que no se conoce el campo de presión. El gradiente de presión forma parte del término fuente para la ecuación de cantidad de movimiento. Mas, aún no existe una ecuación para obtener la presión, lo que hace necesario un método para obtenerla.

Dentro de los métodos para el cálculo del campo de presión y de velocidades, los más populares son: el algoritmo SIMPLE, el SIMPLER, el SIMPLEC y el algoritmo PISO. Cuando se sustituye la presión correcta en las ecuaciones de cantidad de movimiento, el campo de velocidades resultante satisface la ecuación de continuidad.

Para este código, fue necesario agregar cuatro clases más; Simple.cpp, Simpler.cpp, Simplec.cpp y Piso.cpp, con sus respectivos archivos .h. Como se mencionó anteriormente, el campo de flujo se puede solucionar por medio de estos cuatro de algoritmos y todos están relacionados entre sí, pues cada uno es una mejora del otro. Cada uno de los archivos cpp. cuenta con funciones miembro diferentes aunque únicamente se genera una sola malla, pero siguiendo con resto de las etapas en cada una de las clases agregadas.

En las etapas de *PRE-PROCESO* y *PROCESO* en cada uno de los códigos antes mencionados la manipulación de las matrices y métodos de solución estuvieron a cargo de dos librerías **FEM** y **SOLVERLIB**

Proyectos FEM y SOLVERLIB

Las librerías FEM y SOLVERLIB desarrolladas por los profesores: Ing. David A. Fuentes e Ing. Pedro J. Díaz durante su experiencia en el campo computacional se han agregado a todos los códigos gracias a la autorización de los autores.

FEM: Se encarga de convertir la discretización de elementos finitos a la discretización de volúmenes finitos, conversión necesaria debido a que las ecuaciones de movimiento

Cuadro 4.1: Temas con código y pseudo código

que se utilizaron para la descripción del flujo fueron de manera integral. La conversión de elementos finitos a volúmenes finitos es a través de las clases GridFE.h y GridFV.h.

SOLVERLIB: Esta librería se encarga del manejo y operaciones de las matrices y vectores con arreglos particulares generados por los coeficientes de las ecuaciones algebraicas resultantes de la discretización de las ecuaciones de movimiento; a las que son necesarias una solución, sean lineales o no lineales. La librería tiene clases que se encargan de las ecuaciones lineales como DensMatrix.h y TriDiagmatr.h y para no lineales NonLinEqSolver.h y NewtonRaphson.h.

Tabla 4.1	Código C++	Pseudo código
<p>1. Ecuaciones diferenciales que determinan el movimiento del fluido y condiciones de frontera.</p> <ul style="list-style-type: none"> * Introducción * Cinemática del flujo * Modelo de flujo * Ecuación de conservación * Condiciones de frontera * Ecuaciones para CFD * Coordenadas 		
<p>2. Clasificación matemática de las ecuaciones diferenciales parciales (EDP)</p> <ul style="list-style-type: none"> * Regla de Cramer * Método de los valores propios * Comportamiento general de las diferentes clase de EDP * Coordenada en una y dos vías 		

continúa en la página siguiente

Tabla 4.1	Código C++	Pseudo código
3. Discretización. * Método de las diferencias finita * Sistema de ecuaciones * Método de volúmenes finitos * Aproximación explícita e implícita * Errores y análisis de estabilidad * Propiedades numéricas de los métodos de solución		
4. Solución de las ecuaciones discretizadas. * Métodos directos * Algoritmo para matriz tri-diagonal * Métodos iterativos * Sistemas de ecuaciones no lineales * Sistemas de ecuaciones acopladas y su solución * Disipación y dispersión numérica: Viscosidad artificial	X X X X	
5. Implementación de las condiciones de frontera. * Condiciones de frontera de entrada * Condiciones de frontera a la salida * Condiciones de frontera en la pared * Condiciones de frontera de presión constante * Condiciones de frontera de simetría * Condiciones de frontera cíclica o periódica * Dificultades potenciales y comentarios finales		X X X X
6. Difusión en estado estable * Difusión unidimensional en estado estable		

continúa en la página siguiente

Tabla 4.1	Código C++	Pseudo código
<ul style="list-style-type: none"> * Ejemplo 1: Conducción libre en una barra aislada * Ejemplo 2: Generación de calor * Ejemplo 3: Conducción en una aleta * Conductividad térmica en la interface de la celda * Difusión bidimensional en estado estable * Difusión tridimensional en estado estable * Resumen para problema de difusión 	<ul style="list-style-type: none"> X X X X 	
<p>7. Convección-difusión estable</p> <ul style="list-style-type: none"> * Convección-difusión estable unidimensional * Esquema de diferencia centrada * Propiedades de los esquemas de discretización * Valoración del esquema de diferencia centrada para problemas de convección-difusión * Esquema UPWIND * Esquema de diferenciación híbrido * Esquema POWER-LAW * Esquema Exponencial * Formulación generalizada * Esquema de alto orden para problemas de convección-difusión 	<ul style="list-style-type: none"> X X X X X X X 	
<p>8. Algoritmo para el cálculo del campo de flujo</p> <ul style="list-style-type: none"> * Esquemas aplicados con el método de los volúmenes finitos * Algunas dificultades relacionada * La malla alternada * Las ecuaciones de cantidad de movimiento * Algoritmo SIMPLE 		

continúa en la página siguiente

Tabla 4.1	Código C++	Pseudo código
* Algoritmo SIMPLER * Algoritmo SIMPLEC * Algoritmo PISO		
9. Flujos transitorios * Conducción de calor transitoria unidimensional * Esquema para soluciones explicitas * Ejemplo: Conducción de calor transitoria unidimensional * Ejemplo: Conducción de calor unidimensional solución implícita * Difusión transitoria en dos y tres dimensiones *Discretización temporal de la ecuación de convección-difusión * Ejemplo: Convección difusión transitoria usando el método QUICK * Cálculo del campo de flujo transitorio * Cálculos de estado estable usando una aproximación pseudo transitoria	 X X X	 X

Para verificar que los resultados obtenidos por los códigos son satisfactorios se planteó la solución de un problema de conducción de calor de acuerdo con el ejercicio 7.2 de la referencia [1] y para convección-difusión el ejemplo propuesto en la Sección 4.7 de la referencia [2].

4.3.5. Resultados para conducción de calor.

Para el ejemplo de conducción, de acuerdo al problema planteado, el archivo para la lectura de la malla (*.Grid*) es el siguiente:

2
 12
 20
 dpTRUE
 4
 dpFALSE
 0
 3

T=373
 Q=500000
 Q=0

#

1	0.0	0.0	2	2	3
2	0.1	0.0	1	3	
3	0.2	0.0	1	3	
4	0.3	0.0	1	3	
5	0.0	0.1	1	2	
6	0.1	0.1	0		
7	0.2	0.1	0		
8	0.3	0.1	1	3	
9	0.0	0.2	1	2	
10	0.1	0.2	0		
11	0.2	0.2	0		
12	0.3	0.2	1	3	
13	0.0	0.3	1	2	
14	0.1	0.3	0		
15	0.2	0.3	0		
16	0.3	0.3	1	3	
17	0.0	0.4	2	1	2
18	0.1	0.4	1	1	
19	0.2	0.4	1	1	
20	0.3	0.4	2	1	3

1	ElmB4n2D	1		1	2	5	6
2	ElmB4n2D	1		5	6	9	10
3	ElmB4n2D	1		9	10	13	14

4	ElmB4n2D	1	13 14 17 18
5	ElmB4n2D	1	2 3 6 7
6	ElmB4n2D	1	6 7 10 11
7	ElmB4n2D	1	10 11 14 15
8	ElmB4n2D	1	14 15 18 19
9	ElmB4n2D	1	3 4 7 8
10	ElmB4n2D	1	7 8 11 12
11	ElmB4n2D	1	11 12 15 16
12	ElmB4n2D	1	15 16 19 20

Una vez se realizada la simulación, los archivos *.case* y *.geo* generados para la visualización en el caso de cálculo transitorio, son los siguientes:

Archivo *.case*

```

FORMAT
type: ensight
GEOMETRY
model: placa2d.1.geo
VARIABLE
scalar per element: 1 Temp placa2d.temp***
vector per element: 1 Calor placa2d.calor***
TIME
time set: 1
number of steps: 101
filename start number 0
filename increment 1
time values 36.00 72.00 108.00 144.00 180.00 216.00
252.00 288.00 324.00 360.00 396.00 432.00
468.00 504.00 540.00 576.00 612.00 648.00
684.00 720.00 756.00 792.00 828.00 864.00
900.00 936.00 972.00 1008.00 1044.00 1080.00
1116.00 1152.00 1188.00 1224.00 1260.00 1296.00
1332.00 1368.00 1404.00 1440.00 1476.00 1512.00
1548.00 1584.00 1620.00 1656.00 1692.00 1728.00
1764.00 1800.00 1836.00 1872.00 1908.00 1944.00

```

1980.00 2016.00 2052.00 2088.00 2124.00 2160.00
2196.00 2232.00 2268.00 2304.00 2340.00 2376.00
2412.00 2448.00 2484.00 2520.00 2556.00 2592.00
2628.00 2664.00 2700.00 2736.00 2772.00 2808.00
2844.00 2880.00 2916.00 2952.00 2988.00 3024.00
3060.00 3096.00 3132.00 3168.00 3204.00 3240.00
3276.00 3312.00 3348.00 3384.00 3420.00 3456.00
3492.00 3528.00 3564.00 3600.00 3636.00

Archivo *.geo*

Simulacion
Estatico
node id given
element id given
coordinates
20
1 0 0 0.0
2 0.1 0 0.0
3 0.2 0 0.0
4 0.3 0 0.0
5 0 0.1 0.0
6 0.1 0.1 0.0
7 0.2 0.1 0.0
8 0.3 0.1 0.0
9 0 0.2 0.0
10 0.1 0.2 0.0
11 0.2 0.2 0.0
12 0.3 0.2 0.0
13 0 0.3 0.0
14 0.1 0.3 0.0
15 0.2 0.3 0.0
16 0.3 0.3 0.0
17 0 0.4 0.0
18 0.1 0.4 0.0

```

19 0.2 0.4 0.0
20 0.3 0.4 0.0
part 1
Simulacion
quad4
12
1 1 2 6 5
2 5 6 10 9
3 9 10 14 13
4 13 14 18 17
5 2 3 7 6
6 6 7 11 10
7 10 11 15 14
8 14 15 19 18
9 3 4 8 7
10 7 8 12 11
11 11 12 16 15
12 15 16 20 19

```

Se omite la inclusión de los archivos de resultados (.temp*** y .calor***) debido a que ocupan mucho espacio.

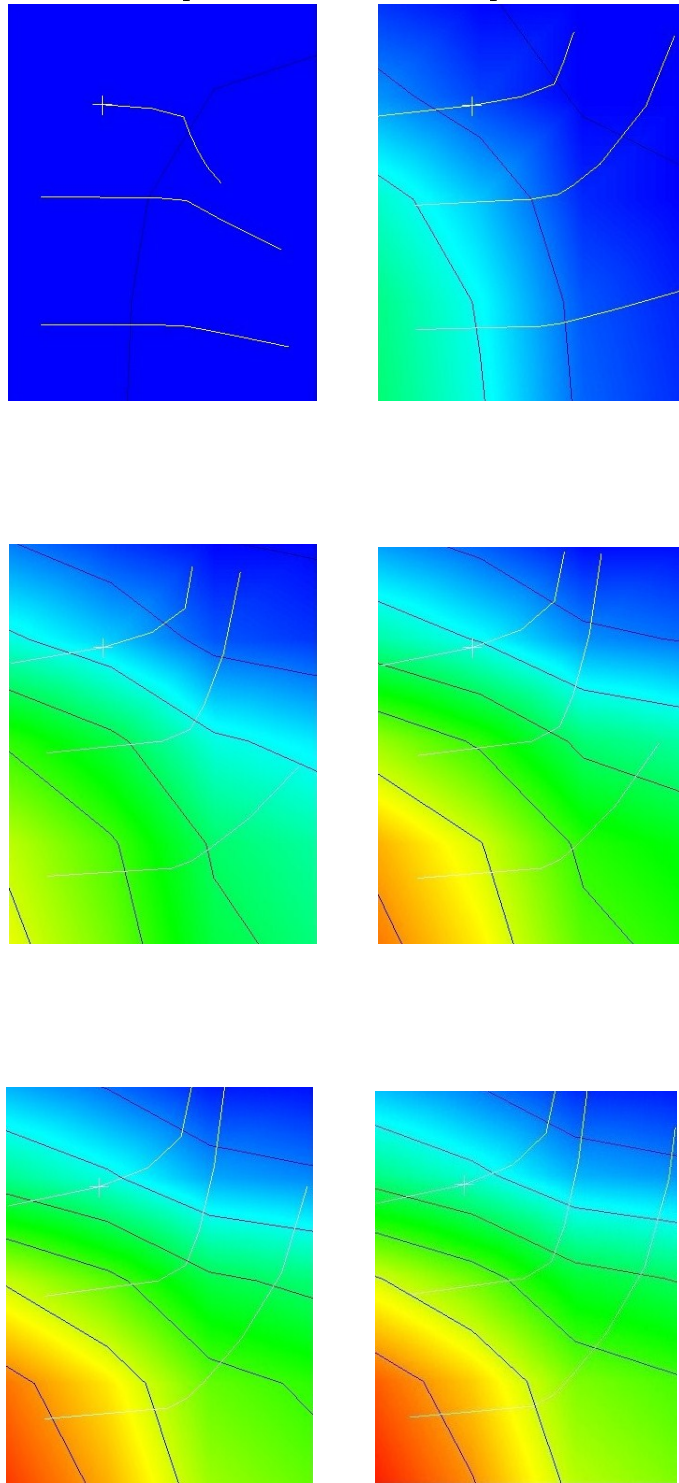
En la Figura 4.4, se muestran los resultados de la simulación para el cálculo transitorio. Se observa en ellas los isocontornos de temperatura por medio de líneas oscuras. Las líneas de flujo de calor constante se representan con color blanco. Debido a que se usó una malla gruesa no es posible confirmar que las líneas de temperatura constantes son perpendiculares a las línea de flujo de calor constante, pero en la mayoría de los casos se aprecia ésta tendencia.

A partir de las Figuras, se puede observar la evolución de la transferencia de calor con el tiempo, hasta llegar a estado estable. Finalmente, los resultados obtenidos están de acuerdo a lo especificado en la literatura.

Finalmente, los resultados en estado estable son:

nodo	valor-x	valor-y	solución numérica
1	0.000	0.000	260.037
2	0.100	0.000	242.275

Figura 4.4: Resultados para el transitorio del problema de conducción



3	0.200	0.000	205.592
4	0.300	0.000	146.322
5	0.000	0.100	227.799
6	0.100	0.100	211.195
7	0.200	0.100	178.178
8	0.300	0.100	129.696
9	0.000	0.200	212.164
10	0.100	0.200	196.53
11	0.200	0.200	166.23
12	0.300	0.200	123.982

los cuales concuerdan con los resultados presentados en la referencia y presentados en el documento anexo a éste proyecto en la Sección DIFUSIÓN BIDIMENSIONAL EN ESTADO ESTABLE

4.3.6. Resultados para convección-difusión

Similarmente al caso de la conducción de calor, se genera un archivo .Grid donde se especifica la geometría y condiciones de frontera para el problema de convección-difusión. Debido a lo extenso del archivo, no se incluye en este informe. De igual forma, una vez realizados los cálculos se generan los archivos .case, .geo, y los archivos de resultados para la variable ϕ , pero debido a lo extenso de su contenido no se incluyen en este informe.

En la Figura 4.5 se muestran los resultados de los cálculos para la convección-difusión. Los resultados obtenidos coinciden con los resultados observados en la literatura consultada.

De igual forma, se puede observar el cálculo transitorio en la Figura 4.6

Figura 4.5: Resultados para el cálculo del problema de convección-difusión

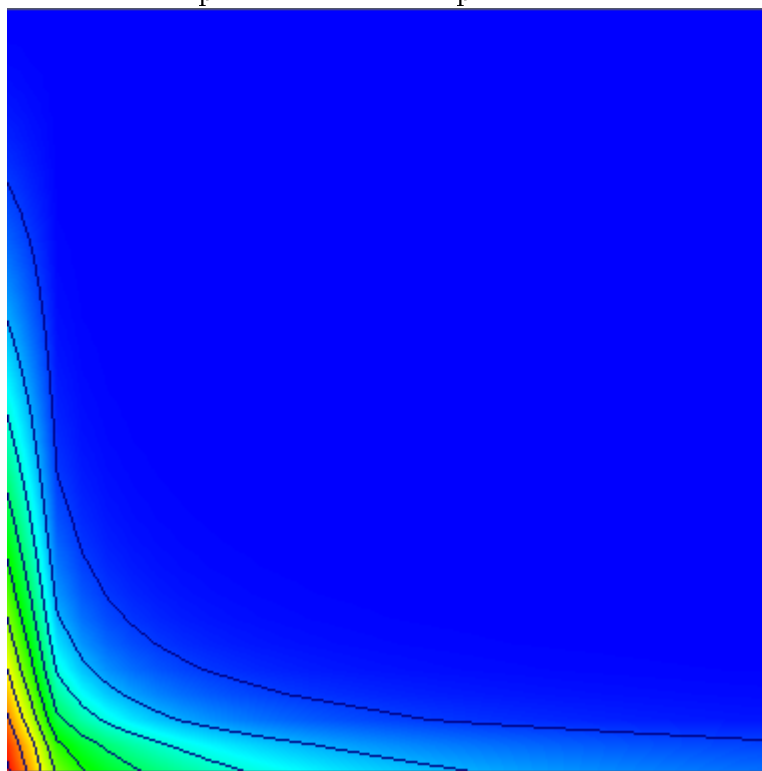
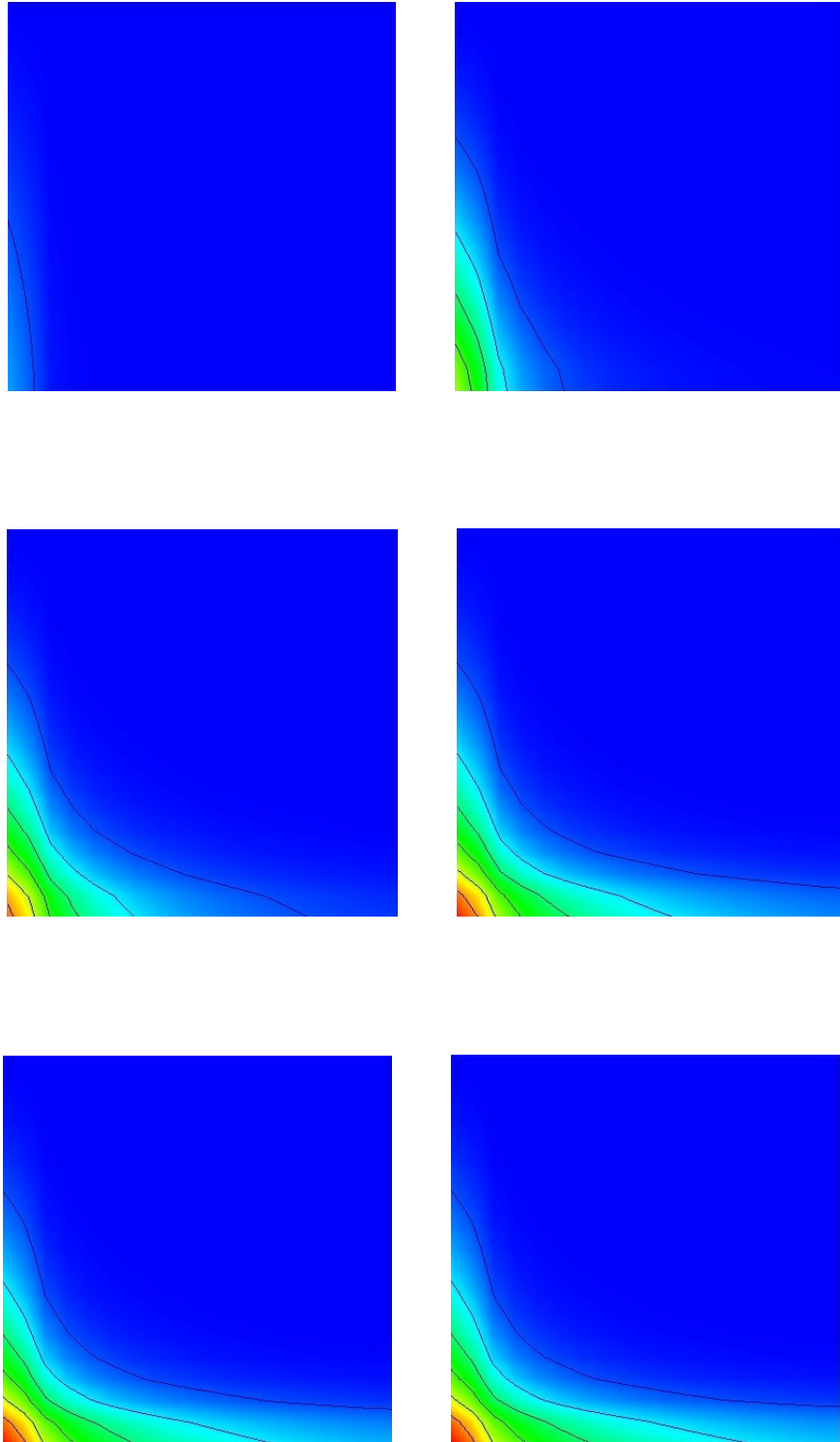


Figura 4.6: Resultados para el transitorio del problema de convección-difusión



Capítulo 5

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

El seminario es una herramienta válida para la formación de investigadores y maestros en una disciplina. Sin dejar de reconocer, que siguen siendo válidas las cátedras magistrales; y lo serán mucho más si se evalúan críticamente y se aprovechan responsablemente las ventajas que poseen.

En el desarrollo del seminario se partió del supuesto que se aprende a investigar investigando y que dicha tarea no simplemente fue la aplicación de ciertas técnicas, si no un proceso a través del cual se integraron conocimientos teóricos y prácticos en función de resolver los problemas planteados en la investigación.

Gracias a los códigos generados se encontraron resultados satisfactorios en la solución de problemas de conducción y convección-difusión en estado estable y transitorio. Para el caso del cálculo del campo de flujo no fue posible alcanzar una solución satisfactoria. Los autores estiman que no fué posible debido a los siguientes inconvenientes:

1. En la imposición de las condiciones de frontera: no se tiene claridad de cuáles condiciones de frontera imponer ni su valor.
2. En la literatura los algoritmos para la solución del campo de flujo son explicados de una forma más sencilla de lo que realmente son, y la implementación con esas condiciones hace que la convergencia de la solución tienda a oscilar.

De acuerdo a los resultados obtenidos el método de los volúmenes finitos es conveniente para el estudio de la dinámica de fluidos, la transferencia de calor y la convección-

difusión debido a que está basada en principios de conservación. De esta forma, se recomienda continuar con el estudio y utilización de éste método.

Un primer paso sería estudiar con mayor cuidado los algoritmos SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEC y PISO para el cálculo del campo de flujo y así lograr soluciones estables y satisfactorias. Así mismo, se pueden ampliar los códigos para encontrar soluciones usando mallas con cuadrilateros no ortogonales y/o con elementos no triangulares a partir de un mallado no estructurado; ya sea para los fenómenos que se trataron en éste trabajo de grado o en otros, como flujos turbulentos, flujos multifásicos, combustión, entre otros.

Capítulo 6

BIBLIOGRAFIA

Bibliografía

- [1] AMES, William F. Numerical methods for partial differential equations. Segunda edición. Orlando, Florida: Academic Press, 1977. 376 p.
- [2] ANDERSON, Dale A. Computational fluid mechanics and heat transfer. Washington, DC: Taylor & Francis, 1997. 803 p.
- [3] ANDERSON, John D. Computational fluid dynamics. The basics with applications. New York: McGraw-Hill, 1995. 547 p.
- [4] BATHE, Klaus-Jürgen. Finite element procedures. New Jersey: Prentice Hall, 1996. 1037 p.
- [5] CHUNG, T. J. Computational fluid dynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. 1012 p.
- [6] COMINI, Gianni. Finite element analysis heat transfer. Basic formulation and linear problems. Washington, DC: Taylor & Francis, 1994. 463 p.
- [7] DONEA, Jean y HUERTA, Antonio. Finite element methods for flow problems. The Atrium, Southern Gate: John Wiley & Sons Ltd, 2003. 350 p.
- [8] FERZIGER, Joel H y PERIC, Milovan. Computational methods for fluid dynamics. Tercera edición. Berlin: Springer, 2002. 423 p.
- [9] HOFFMAN, Klaus A. y CHIANG, Steve T. Computational fluid dynamics. Cuarta edición, volúmenes I, II y III. Wichita, Kansas: Engineering Education System, 2000. 486 p.
- [10] LI, Ronghua y CHEN, Zhongying. Generalized difference methods for differential equations. Numerical analysis of finite volume methods. New York: Marcel Dekker, 2000. 442 p.

- [11] PATANKAR, S.V. Numerical heat transfer and fluid flow. Minnesota: Taylor & Francis, 1980. 197 p.
- [12] SMITH, I. M. y GRIFFITHS, D. V. Programming the finite element method. Segunda edición. Manchester: John Wiley & Sons, 1988. 469 p.
- [13] VERSTEEG, H. K. y MALALASEKERA, W. An introductions to computational fluid dynamics the finite volume method. New York: Longman Scientific & Technical, 1995. 257 p.
- [14] WESSELING, Pieter. Principles of computational fluid dynamics. Berlin: Springer, 2001. 664 p. AMES, William F. Numerical methods for partial differential equations. Segunda edición. Orlando, Florida: Academic Press, 1977. 376 p.

Parte III

Anexo

FUNDAMENTOS DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

Apéndice A

ECUACIONES DIFERENCIALES QUE DETERMINAN EL MOVIMIENTO DEL FLUIDO Y CONDICIONES DE FRONTERA

A.1. INTRODUCCIÓN

Las ecuaciones fundamentales que se usan para describir el movimiento de un fluido son:

- Ecuación de continuidad.
- Ecuación de la segunda ley de Newton.
- Ecuación de la primera ley de la termodinámica.

El fluido se considerará como un continuo. Para su estudio, se describe el comportamiento del fluido en términos de sus propiedades macroscópicas, tales como la velocidad, presión, densidad y temperatura. Al aplicar los principios físicos fundamentales a los modelos de flujo, se obtienen como resultado las ecuaciones que son la base matemática de los principios físicos involucrados. Una vez que se obtienen las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía, se delimitan a formas particularmente convenientes en las soluciones que se formulan para CFD. Finalmente, se deben imponer unas condiciones de frontera apropiadas con sus respectivas representaciones matemáticas.

A.2. MODELOS DE FLUJO

Para obtener las ecuaciones básicas del movimiento del fluido, se seguirá siempre el siguiente procedimiento:

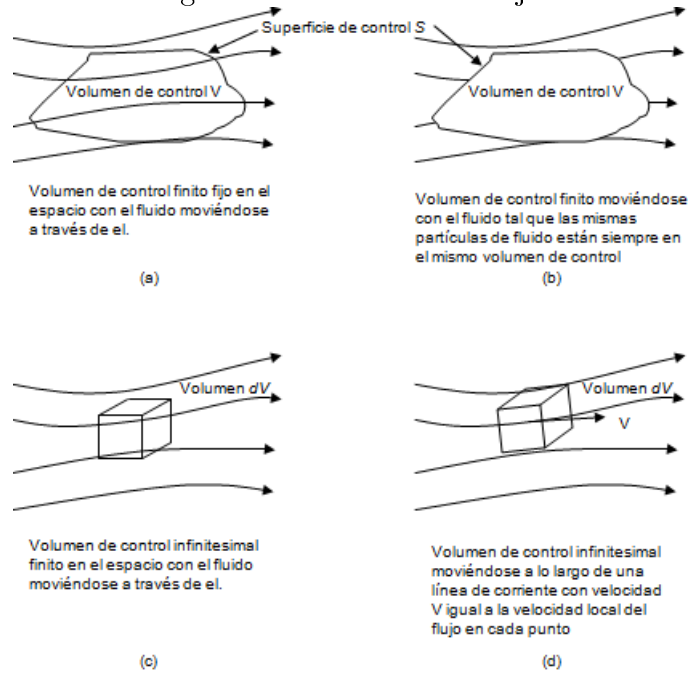
- Elegir los principios físicos fundamentales apropiados a partir de las leyes físicas, tales como:
 - La masa se conserva
 - $\vec{F} = m \vec{a}$
 - La energía se conserva
- Aplicar los modelos físicos a un modelo de flujo conveniente.
- Extraer las ecuaciones matemáticas que contienen tales principios físicos.

Para la descripción el movimiento de un fluido se tiene cuatro modelos de flujo estudiados a continuación.

A.2.0.1. Volumen de control finito

Considérese un campo de flujo general representado por las líneas de corriente en la figura (A.1)(a y b). Imagine un volumen cerrado trazado dentro de una región finita del flujo. Este volumen se define como un volumen de control V , y además existe una superficie de control S definida como la superficie cerrada que le establece límites al volumen. El volumen puede estar fijo en el espacio con el fluido moviéndose a través de él o moviéndose con el fluido tal como lo hiciera una partícula dentro de este. En cualquier caso el volumen de control es una región finita del flujo. Por lo tanto, en lugar de mirar todo el flujo al tiempo, con el volumen de control se centra la atención al fluido que se encuentra dentro del volumen de control mismo. Las ecuaciones del flujo que se obtienen directamente aplicando los principios físicos fundamentales al volumen de control finito son de forma integral. La forma integral de las ecuaciones de movimiento se pueden manipular matemáticamente para obtener indirectamente ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Las ecuaciones obtenidas al aplicar los principios físicos a los volúmenes de control fijos en el espacio (fig(A.1)(a) y (c)), se conocen como formas conservativas de las ecuaciones de movimiento. Las ecuaciones obtenidas al aplicar los principios físicos a los volúmenes de control que se mueven con el fluido (fig(A.1)(b) y (d)), se conocen como formas no conservativas de las ecuaciones de movimiento.

Figura A.1: Modelos de flujo.



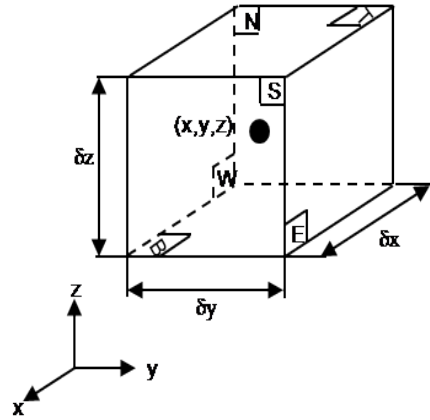
A.2.0.2. Elemento de fluido infinitesimal

Considérese un campo de flujo general representado por las líneas de corriente en la figura (A.1)(c y d). Imagine un elemento de fluido infinitesimal pequeño en el fluido con un volumen diferencial dV . El elemento de fluido infinitesimal está bajo el mismo sentido como en el calculo diferencial; sin embargo, es lo suficientemente grande como para contener un gran numero de moléculas de manera que puede verse como un medio continuo. El elemento puede estar fijo en el espacio con el fluido moviéndose a través de él (fig(A.1)(c)). También, el elemento se puede mover a lo largo de una línea de corriente con un vector de velocidad \vec{V} igual a la velocidad del flujo en cada punto. Los principios físicos serán aplicados al pequeño elemento infinitesimal de fluido. Esta aplicación conduce directamente a la ecuaciones fundamentales en forma de ecuaciones diferenciales parciales.

A.3. ECUACIONES DE CONSERVACIÓN

Las ecuaciones a deducir expresan un principio a conservar, por eso su nombre de ecuaciones de conservación. Una cantidad se determina como variable, y varios factores

Figura A.2: Volumen Infinitesimal.



que influyen en su comportamiento. Se toma un elemento diferencial y se aplican las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía a fin de obtener las ecuaciones.

Todas las propiedades en este estudio son función del tiempo y el espacio, las cuales en las ecuaciones se escribieran de forma simple sin mencionar las variables de las cuales dependen.

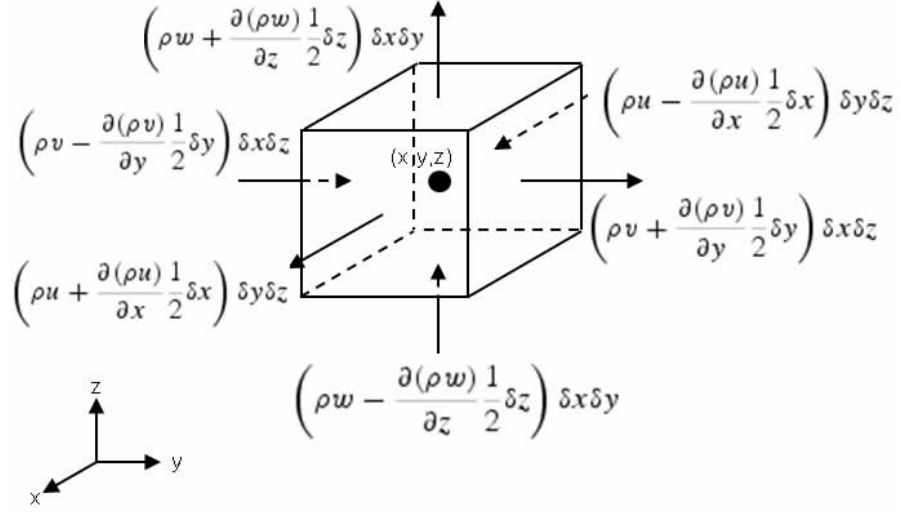
A.3.1. Ecuación de continuidad

A.3.1.1. Elemento infinitesimal fijo en el espacio

Para cualquiera de los modelos de flujo se puede obtener una ecuación de continuidad y se puede trasladar de una forma a otra matemáticamente por medio del teorema de la divergencia. La forma integral admite la presencia de discontinuidades dentro del volumen de control y la forma diferencial asume que las propiedades del flujo son continuas, es por esta razón que las ecuaciones expresadas en forma integral son consideradas como mas fundamentales y esta consideración puede llegar a ser de suma importancia cuando se calcula un flujo con discontinuidades reales. En esta sección obtendremos la ecuación de continuidad para el modelo de volumen infinitesimal fijo en el espacio con el fluido moviendose a través de el. El elemento en consideración se puede considerar tan pequeño, que el flujo de propiedades a través de sus caras se puede expresar adecuadamente por medio de los dos primeros términos de la serie de Taylor. Por ejemplo en el caso de la presión para las caras E y W (fig(A.3)):

$$p - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \delta y \quad (A.1)$$

Figura A.3: Flujo másico a través de las caras del volumen de control.



y

$$p + \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \quad (\text{A.2})$$

La masa acumulada en el elemento se escribe como :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \delta x \delta y \delta z) = \frac{\partial \rho}{\partial t} \delta x \delta y \delta z \quad (\text{A.3})$$

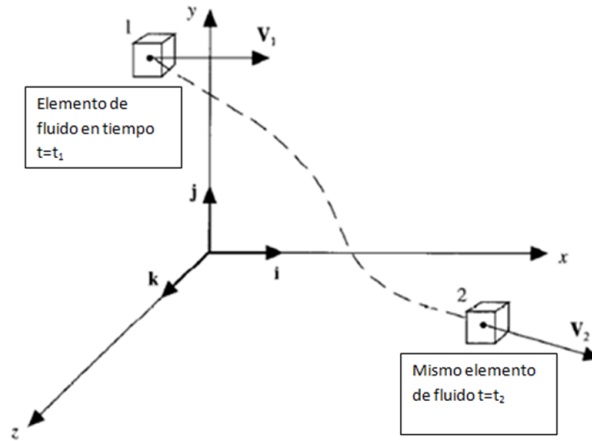
El flujo másico a través del elemento es:

$$\begin{aligned} & \left[(\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x) \delta y \delta z - (\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x) \delta x \delta z \right] + \\ & \left[(\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y) \delta x \delta z - (\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y) \delta x \delta z \right] + \\ & \left[(\rho w - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z) \delta x \delta y - (\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z) \delta x \delta z \right] \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

los términos de signo positivo tienden a incrementar la masa dentro del volumen de control y los de signo negativo tienden a disminuirla. La velocidad de aumento de la masa dentro del volumen de control (ecuación (A.3)) debe ser igual al flujo neto de masa que atraviesa sus fronteras (ecuación (A.4)). Por lo tanto la ecuación de continuidad en forma diferencial da como resultado:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0 \quad (\text{A.5})$$

Figura A.4: Elemento de fluido moviéndose con el flujo-Ilustración para la derivada substancial.



En una notación vectorial mas compacta tenemos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (\text{A.6})$$

A.3.1.2. Elemento infinitesimal moviéndose con el flujo

La derivada substancial. Antes de derivar las ecuaciones con un modelo de flujo en donde el volumen de control se mueve con este, debemos establecer una notación que es muy importante: La Derivada Substancial.

En la figura (A.4) el elemento de fluido está moviéndose con el flujo a través del plano cartesiano. Los vectores unitarios a lo largo de los ejes x, y y z son **i**, **j** y **k** respectivamente. El vector velocidad está dado por:

$$\vec{V} = ui + vj + \omega k \quad (\text{A.7})$$

Donde las componentes de velocidad están dadas respectivamente por:

$$\begin{aligned} u &= u(x, y, z, t) \\ v &= v(x, y, z, t) \\ \omega &= \omega(x, y, z, t) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Adicionalmente el campo escalar de densidad está dado por:

$$\rho = \rho(x, y, z, t) \quad (\text{A.9})$$

En el tiempo t_1 el elemento de fluido está ubicado en el punto 1. En este punto y tiempo, la densidad del elemento de fluido está dada por:

$$\rho_1 = \rho(x_1, y_1, z_1) \quad (\text{A.10})$$

En el tiempo posterior t_2 , el elemento de fluido se ha movido al punto 2. Por lo tanto, en el tiempo t_2 la densidad del mismo elemento de fluido esta dada por:

$$\rho_2 = \rho(x_2, y_2, z_2) \quad (\text{A.11})$$

Puesto que $\rho = \rho(x, y, z, t)$, podemos expandir esta función en una serie de Taylor sobre el punto 1 como sigue:

$$\begin{aligned} \rho_2 = \rho_1 &+ \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)_1 (x_2 - x_1) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_1 (y_2 - y_1) \\ &+ \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right)_1 (z_2 - z_1) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_1 (t_2 - t_1) + \text{términos de orden superior} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Dividiendo por $(t_2 - t_1)$ e ignorando los términos de orden superior tenemos:

$$\frac{\rho_2 - \rho_1}{t_2 - t_1} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)_1 \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_1 \frac{y_2 - y_1}{t_2 - t_1} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right)_1 \frac{z_2 - z_1}{t_2 - t_1} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_1 \quad (\text{A.13})$$

El termino del lado izquierdo de la ecuación (A.13) significa físicamente la razón de cambio de la densidad del elemento de fluido mientras este se mueve del punto 1 al punto 2. En el limite, cuando t_2 se aproxima a t_1 , este termino se convierte en:

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{\rho_2 - \rho_1}{t_2 - t_1} = \frac{D\rho}{Dt} \quad (\text{A.14})$$

El termino $D\rho/Dt$ significa la razón de cambio instantánea de la densidad del elemento de fluido mientras este se mueve a través del punto 1. Por definición este operador es llamado la derivada substancial D/Dt . Nótese que $\frac{D\rho}{Dt}$ es la razón de cambio de la densidad del elemento de fluido dado mientras este se mueve a través del espacio. Aquí nuestros ojos están enfocados sobre el elemento de fluido mientras este se está moviendo, y estamos observando el cambio de la densidad del elemento mientras este se mueve a través del punto 1. Esto es diferente de $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_1$ la cual es físicamente la razón de cambio de la densidad en el punto 1 fijo. Para $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_1$ fijamos nuestros ojos sobre el punto estacionario y observamos el cambio de la densidad debido a las fluctuaciones transitorias en el campo de flujo. Así, $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_1$ y $\frac{D\rho}{Dt}$ son físicamente y numericamente diferentes.

note que:

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} = u \quad (\text{A.15})$$

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{y_2 - y_1}{t_2 - t_1} = v \quad (\text{A.16})$$

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} \frac{z_2 - z_1}{t_2 - t_1} = \omega \quad (\text{A.17})$$

Así tomando el límite de la ecuación (A.13) mientras $t_2 \rightarrow t_1$ obtenemos:

$$\frac{D\rho}{Dt} = u \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + v \left(\frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \omega \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right) \quad (\text{A.18})$$

Observando la ecuación (A.18) podemos obtener la ecuación general para la derivada substancial en coordenadas cartesianas como:

$$\frac{D}{Dt} = u \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) + v \left(\frac{\partial}{\partial y} \right) + \omega \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial t} \right) \quad (\text{A.19})$$

y esta puede ser escrita utilizando el operador ∇ como:

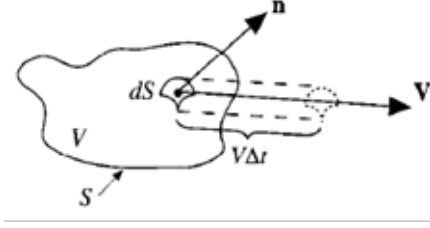
$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \quad (\text{A.20})$$

La ecuación (A.20) representa la definición del operador de derivada substancial en notación vectorial; así esta es válida para cualquier sistema coordenado. $\vec{V} \cdot \nabla$ es la derivada convectiva, la cual es físicamente hablando, la razón de cambio debido al movimiento del elemento de fluido de un lugar a otro en el campo de flujo donde las propiedades del flujo son espacialmente diferentes. La derivada substancial aplica a cualquier variable en el campo de flujo.

Divergencia de la velocidad y su significado físico. El término $\vec{V} \cdot \nabla$ aparece frecuentemente en las ecuaciones de dinámica de fluido y en esta sección consideraremos su significado físico. Consideremos el volumen de control de la figura (A.1)(b). Este volumen de control siempre está conformado por las mismas partículas mientras se mueve con el fluido; por lo tanto su masa es fija y no varía con el tiempo. Sin embargo su volumen \forall y superficie de control S están cambiando con el tiempo mientras este se mueve a una región diferente del flujo. Considere un elemento infinitesimal de superficie dS moviéndose a una velocidad local \vec{V} como se muestra en la figura (A.5).

El cambio del volumen en el volumen de control $\Delta \forall$, debido al movimiento de dS sobre un incremento de tiempo Δt es a partir de la figura (A.5) igual al volumen del cilindro con base dS y altura $(\vec{V} \Delta t) \cdot \vec{n}$, donde \vec{n} es un vector unitario perpendicular a la

Figura A.5: Volumen de control móvil usado para la interpretación física de la divergencia de la velocidad.



superficie sobre dS . Es decir:

$$\Delta\mathcal{V} = [(\vec{V}\Delta t) \cdot \vec{n}] dS = (\vec{V}\Delta t) \cdot \vec{dS} \quad (\text{A.21})$$

Donde el vector \vec{dS} es definido simplemente por $\vec{dS} = \vec{n} ds$. Sobre el incremento del tiempo Δt , el cambio total del volumen en el volumen de control como un todo es igual a la suma de la ecuación (A.21) sobre la superficie de control total. En el límite mientras $dS \rightarrow 0$, la suma se convierte en la integral de superficie:

$$\iint_s (\vec{V}\Delta t) \cdot \vec{dS} \quad (\text{A.22})$$

Si esta integral se divide por Δt el resultado es físicamente la razón de cambio en el tiempo del volumen en el volumen de control, denotado por $D\mathcal{V}/Dt$; es decir,

$$\frac{D\mathcal{V}}{Dt} = \frac{1}{\Delta t} \iint_s (\vec{V}\Delta t) \cdot \vec{dS} = \iint_s \vec{V} \cdot \vec{dS} \quad (\text{A.23})$$

Hemos escrito en el lado izquierdo de la ecuación (A.23) como la derivada substancial de \mathcal{V} , porque estamos tratando con la razón de cambio en el tiempo del volumen de control mientras el volumen se mueve con el flujo. Aplicando el teorema de la divergencia del cálculo vectorial al lado derecho de la ecuación (A.23), obtenemos:

$$\frac{D\mathcal{V}}{Dt} = \iiint_{\mathcal{V}} (\nabla \cdot \vec{V}) d\mathcal{V} \quad (\text{A.24})$$

Ahora imaginemos que el volumen de control móvil se encoje hasta convertirse en un $\delta\mathcal{V}$, esencialmente convirtiéndose en un elemento de fluido infinitesimal móvil como el mostrado en la figura (A.1)(d). Entonces la ecuación (A.24) puede ser escrita como:

$$\frac{D(\delta\mathcal{V})}{Dt} = \iiint_{\delta\mathcal{V}} (\nabla \cdot \vec{V}) d\mathcal{V} \quad (\text{A.25})$$

Asumamos que $\delta\mathcal{V}$ es lo suficientemente pequeño tal que $\nabla \cdot \vec{V}$ es esencialmente el mismo valor a lo largo de $\delta\mathcal{V}$. Entonces la integral de la ecuación (A.25), en el límite

mientras $\delta\mathcal{V}$ se encoje a cero, está dada por $(\nabla \cdot \vec{V})\delta\mathcal{V}$. Reemplazando en la ecuación (A.25) tenemos:

$$\frac{D(\delta\mathcal{V})}{Dt} = (\nabla \cdot \vec{V})\delta\mathcal{V} \quad (\text{A.26})$$

o

$$(\nabla \cdot \vec{V}) = \frac{1}{\delta\mathcal{V}} \frac{D(\delta\mathcal{V})}{Dt} \quad (\text{A.27})$$

En esta ecuación podemos apreciar el significado físico de la divergencia de la velocidad en el termino al lado derecho, que es la razón de cambio del volumen de un elemento de fluido móvil, por unidad de volumen.

Derivación de la ecuación de continuidad. Considérese ahora el elemento diferencial finito mostrado en la figura (A.1)(d). El elemento tiene una masa fija, pero en general su forma y volumen cambian cuando se mueve con la corriente de flujo. La masa fija y el volumen variable se pueden especificar por δm y $\delta\mathcal{V}$ respectivamente. Entonces :

$$\delta m = \rho\delta\mathcal{V} \quad (\text{A.28})$$

Puesto que la masa se conserva , se puede establecer que la variación de la masa con el tiempo es cero cuando el elemento se mueve a lo largo del flujo. Entonces se tiene que:

$$\frac{D(\delta m)}{Dt} = 0 \quad (\text{A.29})$$

Combinando la ecuaciones (A.28) y (A.29) y aplicando la derivada de un producto tenemos:

$$\frac{D(\rho\delta\mathcal{V})}{Dt} = \delta\mathcal{V} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{D(\delta\mathcal{V})}{Dt} = 0 \quad (\text{A.30})$$

dividiendo el termino del lado derecho por $\delta\mathcal{V}$ tenemos:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \left[\frac{1}{\delta\mathcal{V}} \frac{D(\delta\mathcal{V})}{Dt} \right] = 0 \quad (\text{A.31})$$

a partir de la ecuación (A.27) obtenemos:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (\text{A.32})$$

La ecuación (A.32) es una ecuación diferencial en derivadas parciales obtenida a partir de la ecuación de continuidad, es de forma diferente a la expresada en (A.6), pues la ecuación anterior se obtuvo a partir de un elemento de fluido infinitamente pequeño que se mueve con el flujo. El hecho de que el elemento se mueva con el flujo le confiere una forma no conservativa a la ecuación.

A.3.1.3. Volumen de control finito fijo en el espacio

Considere el modelo de flujo mostrado en la figura (A.1)(a), el cual es un volumen de control de forma arbitraria y tamaño finito, además fijo en el espacio. La superficie que delimita este volumen de control se llama superficie de control. El fluido se mueve a través del volumen de control fijo, atravesando la superficies de control. En un punto sobre la superficie de control, la velocidad del flujo es \vec{V} y el vector normal a la superficie es \vec{dS} . También se puede definir un volumen elemental dV dentro del volumen de control. aplicaremos sobre este volumen de control, el principio fundamental de conservación de la masa. El flujo másico de un fluido que se mueve a través de cualquier superficie fija es igual al producto de la densidad multiplicado por el área de la superficie y la componente de la velocidad perpendicular a la superficie. Entonces el flujo másico que cruza el área dS es:

$$\rho \vec{V}_n dS = \rho \vec{V} \cdot \vec{dS} \quad (\text{A.33})$$

Tomamos como convención que \vec{dS} apunta siempre hacia afuera, entonces el flujo neto masa sobre el volumen de control a través de la superficie de control S , es la suma sobre S de todos los flujos que entran y salen expresados por la ecuación (A.33). En el límite, la suma se transforma en una integral a través de la superficie, quedando:

$$\text{flujo neto de masa sobre el volumen de control} = \iint_s \rho \vec{V} \cdot \vec{dS} \quad (\text{A.34})$$

Ahora consideraremos la segunda parte del principio físico de conservación de la masa que consiste en la velocidad de disminución de esta dentro del volumen de control. La masa contenida dentro del volumen de control elemental dV es ρdV . La masa total dentro del volumen de control es:

$$\iiint_V \rho dV \quad (\text{A.35})$$

y la velocidad de disminución de masa dentro del volumen de control es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho dV \quad (\text{A.36})$$

Combinando las ecuaciones (A.34) y (A.36) se tiene finalmente:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho dV = \iint_s \rho \vec{V} \cdot \vec{dS} \quad (\text{A.37})$$

Esta ecuación es una forma integral de la ecuación de continuidad. La ecuación anterior se obtuvo a partir de un volumen de control fijo en el espacio y debido a esto esta expresión es de forma conservativa.

A.3.1.4. Volumen de control finito moviendose con el flujo

Considérese el elemento diferencial mostrado en la figura (A.1)(b), un volumen de control que se mueve con el flujo. El volumen de control tiene una masa fija pero en general su forma y volumen cambiará cuando se mueva con la corriente de flujo. La masa fija y el volumen variable se pueden especificar por dm y $d\forall$ respectivamente. entonces:

$$dm = \rho d\forall \quad (\text{A.38})$$

La masa contenida en el volumen de control será entonces:

$$\iiint_{\forall} \rho d\forall \quad (\text{A.39})$$

Puesto que la masa se conserva se puede establecer, que la variación de la masa con el tiempo es cero cuando el elemento se mueve a lo largo del flujo. Entonces se tiene que:

$$\frac{D}{Dt} \iiint_{\forall} \rho d\forall \quad (\text{A.40})$$

La ecuación (A.40) está deducida sobre un volumen de control \forall que se mueve con el flujo, con un volumen variable y una masa fija. El volumen consiste en un numero infinito de volúmenes infinitesimales $d\forall$ cada uno de ellos de masa fija, donde la magnitud de $d\forall$ también cambia cuando el volumen de control se mueve aguas abajo. Esta ecuación posee una forma integral no conservativa debido a que el volumen de control e mueve con el fluido.

A.3.2. Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento

La segunda ley de NEWTON establece que la razón de cambio de la cantidad de movimiento de una partícula es igual a a la suma de fuerzas sobre la partícula.

La deducción de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento se hará para el modelo de flujo en el cual el elemento infinitesimal se mueve con el fluido.

La segunda ley es una relación vectorial, por lo tanto se puede dividir en tres relaciones escalares a lo largo de los ejes x, y y z. Para la dirección x la segunda ley da como resultado:

$$\sum \text{fuerzas en } x = ma_x \quad (\text{A.41})$$

Las fuerzas en la dirección x pueden ser de cuerpo o de superficie.

para las fuerzas de cuerpo:

Figura A.6: Balance de cantidad de movimiento en dirección x.

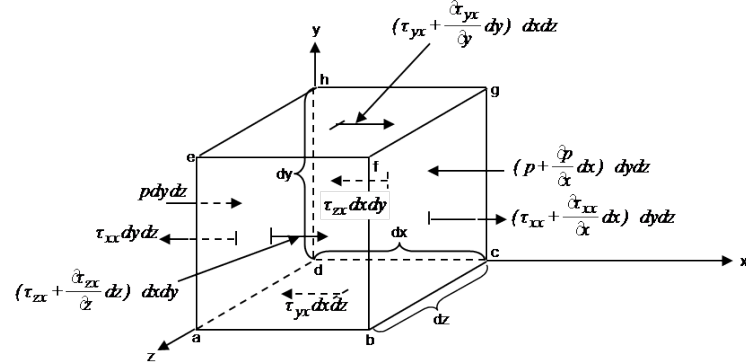
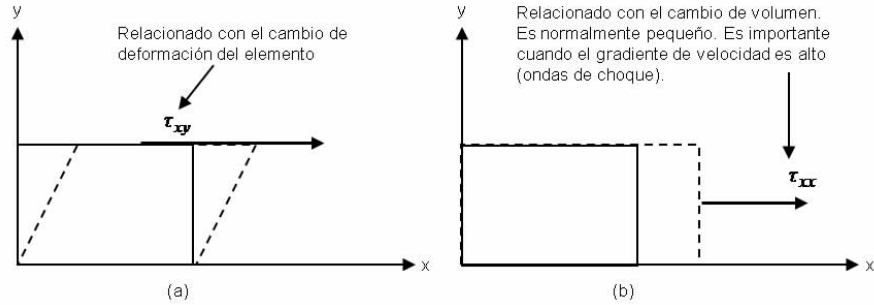


Figura A.7: Forma como actúan el esfuerzo normal y el cortante.

τ_{xx} y τ_{xy} están relacionados con los gradientes de velocidad del flujo



$$\sum \text{fuerzas de cuerpo} = \rho f_x(dx dy dz) \quad (\text{A.42})$$

para las fuerzas de superficie:

los esfuerzos cortantes y normales están relacionados con la variación de la deformación del fluido con el tiempo como se muestra en la figura (A.7).

Las direcciones de los esfuerzos se muestran en la figura (A.6) .

La ecuación de la segunda ley se puede presentar para las fuerzas de superficie como

$$\begin{aligned} \sum \text{fuerzas de superficie} = & \left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dzdy + \\ & \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dydz + \\ & \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} dy \right) - \tau_{yx} \right] dxdz + \\ & \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} dz \right) - \tau_{zx} \right] dxdy \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

La suma de la ecuaciones (A.42) y (A.43) da como resultado:

$$F_x = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] dxdydz + \rho f_x dxdydz \quad (\text{A.44})$$

Para representar la parte derecha de la ecuación (A.41) se debe considerar que la masa del elemento es:

$$m = \rho dxdydz \quad (\text{A.45})$$

La variación de la velocidad u en el tiempo se representa por la derivada sustancial debido a que el elemento se mueve con el fluido:

$$a_x = \frac{Du}{Dt} \quad (\text{A.46})$$

combinando las ecuaciones (A.44), (A.45) y (A.46), se obtiene para la componente en x :

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (\text{A.47})$$

La ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en tres dimensiones se puede escribir de forma abreviada como:

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = -\nabla p + \rho \vec{f} + \nabla \cdot \tau \quad (\text{A.48})$$

donde τ es el tensor de esfuerzos. Isaac Newton estableció que el esfuerzo cortante en un fluido es proporcional al gradiente de la velocidad. Para lo cual Stokes estableció:

$$\begin{aligned}\tau_{xx} &= \lambda(\nabla \cdot \vec{V}) + 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} \\ \tau_{yy} &= \lambda(\nabla \cdot \vec{V}) + 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} \\ \tau_{zz} &= \lambda(\nabla \cdot \vec{V}) + 2\mu\frac{\partial w}{\partial z}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left[\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right] \\ \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left[\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right] \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left[\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right]\end{aligned}\tag{A.49}$$

La ecuación (A.49) se puede aplicar a las ecuaciones de cantidad de movimiento en tres dimensiones y obtener una expresión solo en función de las velocidades y la presión.

A.3.3. Ecuación de conservación de la energía

En la presente sección, se aplicará el tercer principio físico introducido al comienzo de la sección 1.1, conocido como:

Principio físico: La energía se conserva

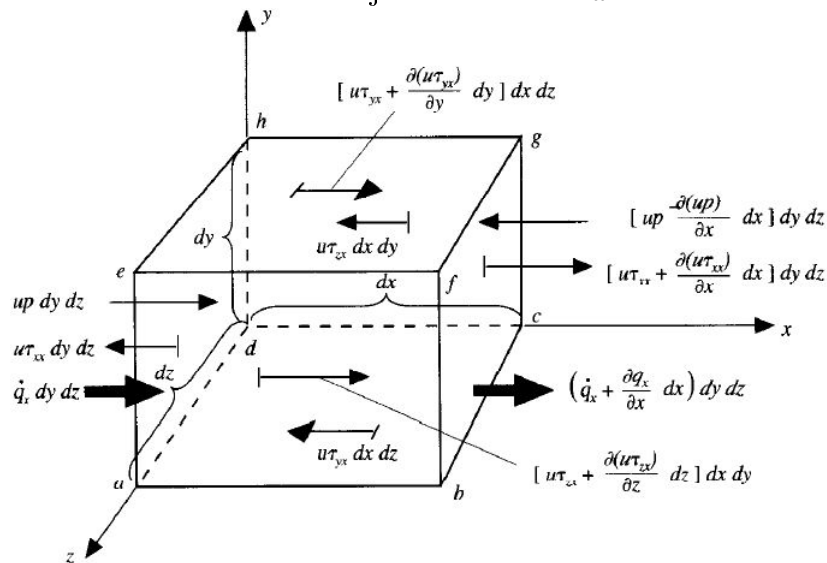
Como se comento en la sección 1.3.2, para la deducción de la ecuación de la energía se usará el modelo de flujo de un elemento infinitesimal que se mueve con el flujo (como se muestra en la figura (A.1) (d)). El principio establecido arriba es nada mas que la *primera ley de la termodinámica*. Cuando se aplica al modelo de flujo de un elemento infinitesimal moviéndose con el flujo, la primera ley establece que:

$$A = B + C\tag{A.50}$$

Donde A es el cambio de energía dentro del elemento, B es el flujo de calor dentro del elemento y C es el trabajo sobre el elemento debido a las fuerzas de cuerpo y de superficie.

Primero se evaluará C, es decir, obtenemos una expresión para el trabajo realizado sobre el elemento en movimiento debido a las fuerzas de cuerpo y superficie. Se demostrará que el trabajo realizado por las fuerzas ejercidas sobre un cuerpo en movimiento es igual

Figura A.8: Flujo de Energía asociados a un elemento infinitesimal que se mueve con el fluido. Solamente se muestran los flujos en dirección x .



al producto de las fuerza y la componente de la velocidad en dirección de la fuerza. Por lo tanto el trabajo realizado por las fuerzas de cuerpo que actúan sobre el elemento en movimiento con una velocidad \vec{V} es:

$$\rho \vec{f} \cdot \vec{V} (dx dy dz)$$

Con respecto a las fuerzas de superficie (presión mas esfuerzo cortante y normal), inicialmente se van a estudiar sólo las dirigidas en dirección x . El trabajo realizado sobre el fluido en movimiento por la presión y el esfuerzo cortante en la dirección x es simplemente la componente x de la velocidad , u , multiplicada por las fuerzas, por ejemplo, en la cara $abcd$ el trabajo realizado por $\tau_{yx} dx dz$ es $u \tau_{yx} dx dz$, con expresiones similares par a las otras caras. Para enfatizar tales consideraciones energéticas, el elemento de fluido en movimiento se muestra en la figura A.8

La expresión anterior sólo tiene en cuenta las fuerzas en la dirección x . Cuando se incluyen las fuerzas de superficie en las direcciones y y z , se pueden obtener expresiones similares. En total, el trabajo neto realizado sobre un elemento de fluido en movimiento es la suma de las contribuciones de las fuerzas de superficie es las direcciones x , y y z , también como las fuerzas de campo. El trabajo neto está especificado como C en la ecuación anterior, esta dada por:

$$\begin{aligned}
C = & \left[-\left(\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right) + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right. \\
& + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \left. \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right] dx dy dz \\
& + \rho \vec{f} \cdot \vec{V} (dx dy dz)
\end{aligned} \tag{A.51}$$

Note que los primeros tres términos del lado derecho de la ecuación (A.51) es simplemente $\nabla \cdot (p\vec{V})$.

Ahora se centrará la atención sobre el término B conocido como el flujo neto de calor en el elemento. El flujo de calor es debido a (1) calentamiento volumétrico tal como absorción o emisión de radiación y (2) transferencia de calor a través de las superficies debido a gradientes de temperatura, por ejemplo, el caso de conducción térmica. Si se define \dot{q} como la velocidad de adición de calor (volumétrico) por unidad de masa. Note que la masa del elemento de fluido en movimiento de la figura (A.8) es $\rho dx dy dz$, se obtiene que:

$$\text{Calentamiento volumétrico del elemento} = \rho \dot{q} dx dy dz \tag{A.52}$$

En la figura (A.8), el calor transferido por conducción térmica entrando al elemento de fluido en movimiento a través de la cara $adhe$ es $\dot{q}_x dx dy dz$, donde \dot{q}_x es el calor transferido en la dirección x por unidad de tiempo y unidad de área. El calor transferido hacia afuera del elemento a través de la cara $bcbf$ es $[\dot{q}_x + \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x}\right) dx] dy dz$. Entonces, el calor transferido neto en la dirección x dentro del elemento de fluido por conducción térmica es:

$$\left[\dot{q}_x - \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} \right) dx \right] dy dz = - \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} \right) dx dy dz \tag{A.53}$$

Teniendo en cuenta el calor transferido en las direcciones y y z a través de las otras caras en la figura(A.8) se obtiene:

$$\text{Calentamiento del elemento de fluido por conducción} = - \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{q}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{q}_z}{\partial z} \right) dx dy dz \tag{A.54}$$

El término B en la ecuación (A.50) es la suma de las ecuaciones (A.52) y (A.54)

$$B = \left[\rho \dot{q} - \left(\frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{q}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{q}_z}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \tag{A.55}$$

El flujo de calor debido a la conducción de calor, a partir de la ley de Fourier de la conducción de calor, es proporcional al gradiente local de temperatura:

$$\dot{q}_x = -k \frac{\partial T}{\partial x} \quad \dot{q}_y = -k \frac{\partial T}{\partial y} \quad \dot{q}_z = -k \frac{\partial T}{\partial z}$$

Donde k es la conductividad térmica. Entonces la ecuación (A.55) se puede escribir como:

$$B = \left[\rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] dx dy dz \quad (\text{A.56})$$

Finalmente, el término A en la ecuación (A.50) implica el cambio de energía en el elemento fluido con el tiempo. En la termodinámica clásica, generalmente se trabaja con sistemas estacionarios, en este caso, la energía que aparece en la formulación de la primera ley de la termodinámica es la *energía interna*. La *energía interna* es simplemente la energía de cada molécula o átomo, sumada en todos los átomos y moléculas del sistema.

Ahora, considerando un medio en movimiento, el término energía incluido en A considera la energía producto del movimiento del elemento fluido. Entonces, el fluido tiene dos contribuciones a su energía:

1. La energía interna debido al movimiento molecular aleatorio, e (por unidad de masa).
2. La energía cinética debido al movimiento traslacional del elemento fluido. La energía cinética por unidad de masa es $V^2/2$.

Entonces, el elemento fluido en movimiento tiene energía cinética y energía interna; de manera que la suma de ellas representa la energía total. La energía total es entonces: $e + V^2/2$. Debido a que se está analizando un elemento fluido que se mueve con el flujo, el cambio de energía por unidad de masa está determinado por la derivada sustancial. Si la masa del elemento fluido es $\rho dx dy dz$, se tiene:

$$A = \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) dx dy dz \quad (\text{A.57})$$

La forma final de la ecuación de la energía se obtiene substituyendo las ecuaciones (A.51), (A.56) y (A.57), resultando:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\
&\quad - \frac{\partial(u\rho)}{\partial x} + \frac{\partial(v\rho)}{\partial y} + \frac{\partial(w\rho)}{\partial z} \\
&\quad + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \\
&\quad + \frac{\partial(u\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zy})}{\partial z} \\
&\quad + \frac{\partial(u\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zz})}{\partial z} \\
&\quad + \rho \vec{f} \cdot \vec{V}
\end{aligned} \tag{A.58}$$

La anterior ecuación se la forma *no conservativa* de la ecuación de la energía, en términos de la energía *total* $+ V^2/2$. La ecuación en forma no conservativa resultante se obtuvo a partir de la aplicación de los principios físicos a un elemento fluido en *movimiento*. Como en el caso de la ecuación de la cantidad de movimiento, la ecuación (A.58) se puede representar de forma condensada mediante la expresión:

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) = \rho \dot{q} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \nabla \cdot (p \vec{V}) + \nabla \cdot (\tau \vec{V}) + \rho \vec{f} \cdot \vec{V} \tag{A.59}$$

El término del lado izquierdo de la ecuación(A.58) involucra la derivada sustancial de la energía $D(e + V^2/2)/Dt$. Es justo una de las muchas formas de la ecuación de la energía; sin embargo la forma presentada fue obtenida directamente del principio de conservación de la energía aplicado a un fluido en movimiento. Esta ecuación se puede modificar fácilmente en dos direcciones:

1. El lado izquierdo se puede expresar en términos de la energía interna (e) solamente, ó en términos de la entalpia (h) solamente, ó en términos de la entalpia total ($h_0 = h + V^2/2$) solamente. En cada caso, el término del lado derecho de la ecuación pertinente también cambiará.
2. Para cada una de las diferentes formas de la ecuación de la energía mencionadas arriba, existirá una forma no conservativa y una conservativa. Entonces, es posible manipular las ecuaciones para convertir de una forma a otra.

Inicialmente, se va a convertir la ecuación (A.58) de tal manera que quede solamente expresada en términos de la energía interna e . Para tal efecto es posible demostrar, con ayuda de la ecuación ((A.47)), que:

$$\rho \frac{D(u^2/2)}{Dt} = -u \frac{\partial p}{\partial x} + u \frac{\partial(\tau_{xx})}{\partial x} + u \frac{\partial(\tau_{yx})}{\partial y} + u \frac{\partial(\tau_{zx})}{\partial z} + \rho u f_x \quad (\text{A.60})$$

$$\rho \frac{D(v^2/2)}{Dt} = -v \frac{\partial p}{\partial y} + v \frac{\partial(\tau_{xy})}{\partial x} + v \frac{\partial(\tau_{yy})}{\partial y} + v \frac{\partial(\tau_{zy})}{\partial z} + \rho v f_y \quad (\text{A.61})$$

$$\rho \frac{D(w^2/2)}{Dt} = -w \frac{\partial p}{\partial z} + w \frac{\partial(\tau_{xz})}{\partial x} + w \frac{\partial(\tau_{yz})}{\partial y} + w \frac{\partial(\tau_{zz})}{\partial z} + \rho w f_z \quad (\text{A.62})$$

Sumando las ecuaciones (1.60) a (A.62), y sabiendo que $V^2 = u^2 + v^2 + w^2$, se obtiene

$$\begin{aligned} \rho \frac{D(V^2)}{Dt} &= -u \frac{\partial p}{\partial x} - v \frac{\partial p}{\partial y} - w \frac{\partial p}{\partial z} + u \left(\frac{\partial(\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zx})}{\partial z} \right) \\ &+ v \left(\frac{\partial(\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zy})}{\partial z} \right) \\ &+ w \left(\frac{\partial(\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zz})}{\partial z} \right) \\ &+ \rho (u f_x + v f_y + w f_z) \end{aligned} \quad (\text{A.63})$$

Restando la ecuación (A.63) de la (A.58), y conociendo que $\rho \vec{f} \vec{V} = \rho (u f_x + v f_y + w f_z)$, se tiene

$$\begin{aligned} \rho \frac{De}{Dt} &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ &- p \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial u}{\partial z} + \\ &\tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v}{\partial z} + \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

La ecuación (A.64) es una forma para la ecuación de la energía donde la derivada sustancial en el lado izquierdo está estrictamente en términos de la energía interna. La energía cinética y el trabajo realizado por las fuerzas de cuerpo han quedado fuera de la ecuación, por cierto, es importante enfatizar que la ecuación de la energía cuando se escribe en términos de e solamente no contiene explícitamente las fuerzas de cuerpo. Comparando con la ecuación (A.58), donde el esfuerzo cortante y normal están multiplicados por la velocidad dentro de las derivadas respecto de x , y y z , en la ecuación (A.64) los esfuerzos viscosos aparecen multiplicados por los gradientes de velocidad. Finalmente, se debe recalcar que la ecuación (A.64) está presentada en forma no conservativa. En forma abreviada la ecuación (A.64) se puede escribir como

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \dot{q} + \nabla \cdot (k \nabla T) + p (\nabla \cdot \vec{V}) + \tau \cdot \nabla \vec{V} \quad (\text{A.65})$$

Si se cambia e por $h = e + p/\rho y$ además con la ecuación de continuidad, la ecuación (A.65) queda:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \rho \dot{q} + \nabla \cdot (k \nabla T) + p (\nabla \cdot \vec{V}) + \tau \cdot \nabla \vec{V} \quad (\text{A.66})$$

A partir de las ecuaciones ((A.49)) donde $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$, entonces algunos factores de la ecuación se pueden factorizar, obteniéndose:

$$\begin{aligned} \rho \frac{De}{Dt} = & \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ & - p \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} \\ & + \tau_{yx} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \tau_{zx} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \tau_{zy} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

Teniendo en cuenta nuevamente que $\tau_{xy} = \tau_{yx}$, $\tau_{yz} = \tau_{zy}$, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$, con el objeto de expresar los esfuerzos viscosos en términos de gradientes de velocidad, la ecuación (A.67) se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \rho \frac{De}{Dt} = & \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ & - p \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \\ & + \mu \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.68})$$

Considerando el lado izquierdo de la ecuación (A.68) y a partir de la definición de la derivada sustancial:

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \nabla e \quad (\text{A.69})$$

Sin embargo

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} = \rho \frac{\partial e}{\partial t} + e \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

ó

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} - e \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (\text{A.70})$$

A partir del vector identidad que involucra la divergencia del producto de un escalar multiplicado por un vector

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V} e) = e \nabla \cdot (\rho \vec{V}) + \rho \vec{V} \cdot \nabla e \quad (\text{A.71})$$

Sustituyendo las ecuaciones (A.70) y (A.71) en la ecuación (A.69) y factorizando

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \frac{\partial e}{\partial t} - e \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) \right] + \rho \vec{V} \cdot \nabla e \quad (\text{A.72})$$

El término entre corchetes es nada más que el lado izquierdo de la ecuación de continuidad que resulta ser igual a cero. Entonces la ecuación (A.72) se convierte en:

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} e) \quad (\text{A.73})$$

Sustituyendo la ecuación (A.73) y (A.68), se tiene:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} e) &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ &\quad - p \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \\ + \mu &\left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.74})$$

La ecuación (A.74) es la ecuación de la energía en forma *conservativa*, escrita en términos de la energía interna solamente. Repitiendo los pasos realizados desde las ecuaciones (A.69) a (A.73) operando sobre la energía total ($e + V^2/2$) en lugar de hacerlo sobre la energía interna, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \rho \left[\left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \left[\frac{\partial (up)}{\partial x} + \frac{\partial (vp)}{\partial y} + \frac{\partial (wp)}{\partial z} \right] \\ &\quad + \frac{\partial (u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial (u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial (u\tau_{zx})}{\partial z} \\ &\quad + \frac{\partial (v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial (v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial (v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial (w\tau_{xz})}{\partial x} \\ &\quad + \frac{\partial (w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial (w\tau_{zz})}{\partial z} + \rho f \vec{V} \end{aligned} \quad (\text{A.75})$$

La ecuación (A.75) es la forma *conservativa* de la ecuación de la energía escrita en términos de la energía total ($e + V^2/2$). En forma condensada queda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \rho \left[\left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] = \rho \dot{q} + \nabla \cdot (k \nabla T) - \nabla \cdot (p \cdot \vec{V}) + \nabla \cdot (\tau \cdot \vec{V}) + \rho f \vec{V} \quad (\text{A.76})$$

Las manipulaciones requeridas para cambiar de la forma no conservativa a la forma conservativa cambian solamente los términos del lado izquierdo de las ecuaciones; el lado derecho permanece invariable.

En la forma de las ecuaciones de energía presentadas a lo largo de la sección no se incluyeron los términos que tienen que ver con la energía potencial del elemento fluido. Para tener en cuenta la energía potencial se debe escribir el término $\rho g \Delta z$ a los términos $(e + V^2/2)$, donde Δz representa la elevación del elemento.

A.3.4. Resumen de las ecuaciones del movimiento para la dinámica de fluidos

Toda la base teórica y computacional de la dinámica de fluidos está basada en las ecuaciones de la conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la energía, es absolutamente *esencial* estar familiarizado con tales ecuaciones y entender su significado físico.

A.3.4.1. ECUACIONES PARA FLUJOS VISCOSOS (ECUACIONES DE NAVIER-STOKES)

Estas ecuaciones se aplican a flujos viscosos, con la excepción de la ecuación de difusión de masa.

A.3.4.2. ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

Forma *no conservativa*

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{V} = 0$$

Forma *conservativa*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0$$

A.3.4.3. ECUACIÓN DE LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO

Forma *no conservativa*

$$\text{Componente x: } \rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zx})}{\partial z} + \rho f_x$$

$$\text{Componente y: } \rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zy})}{\partial z} + \rho f_y$$

$$\text{Componente z: } \rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial(\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zz})}{\partial z} + \rho f_z$$

Forma *conservativa*

$$\text{Componente x: } \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zx})}{\partial z} + \rho f_x$$

$$\text{Componente y: } \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zy})}{\partial z} + \rho f_y$$

Componente z: $\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial(\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(\tau_{zz})}{\partial z} + \rho f_z$

A.3.4.4. ECUACIÓN DE LA ENERGÍA

Forma *no conservativa*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ &\quad - \left[\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right] + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \\ &\quad + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \\ &\quad + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \\ &\quad + \rho \vec{f} \cdot \vec{V} \end{aligned}$$

Forma *conservativa*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \rho \left[\left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \left[\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right] \\ &\quad + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} \\ &\quad + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} \\ &\quad + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} + \rho \vec{f} \cdot \vec{V} \end{aligned}$$

A.3.4.5. FLUJO NO VISCOSO (ECUACIONES DE EULER)

El flujo no viscoso es, por definición, un flujo donde los fenómenos de transporte disipativos de viscosidad, difusión de masa y conductividad térmica son *despreciables*. Las Ecuaciones resultantes para un flujo transitorio, tridimensional, compresible y no viscoso son:

A.3.4.6. ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

Forma *no conservativa*

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{V} = 0$$

Forma *conservativa*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0$$

A.3.4.7. ECUACIÓN DE CANTIDAD DE MOVIMIENTO

Forma *no conservativa*

$$\text{Componente x: } \rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho f_x$$

$$\text{Componente y: } \rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \rho f_y$$

$$\text{Componente z: } \rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho f_z$$

Forma *conservativa*

$$\text{Componente x: } \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho f_x$$

$$\text{Componente y: } \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \rho f_y$$

$$\text{Componente z: } \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho f_z$$

A.3.4.8. ECUACIÓN DE LA ENERGÍA

Forma *no conservativa*

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] = \rho \dot{q} - \left[\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right] + \rho f \vec{V}$$

Forma *conservativa*

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \rho \left[\left(e + \frac{V^2}{2} \right) \vec{V} \right] = \rho \dot{q} - \left[\frac{\partial(up)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right] + \rho f \vec{V}$$

A.4. CONDICIONES DE FRONTERA

Las ecuaciones anteriores gobiernan el flujo de un fluido. Son las mismas ecuaciones si el flujo está, por ejemplo, sobre un avión, a través de un túnel de viento, o pasa por un molino de viento. Sin embargo, el campo fluido es muy *diferente* en cada caso, aunque las ecuaciones de movimiento son las mismas. Estas diferencias se deben a las condiciones de frontera de cada ejemplo. Las condiciones de frontera y, algunas veces las condiciones iniciales, conducen a soluciones particulares de las ecuaciones de movimiento. Entonces, el conductor real para cualquier solución particular son las *condiciones de frontera*. Es de particular importancia en CFD, que cualquier solución numérica de las ecuaciones de movimiento del fluido debe *traducirse* en una *profunda completa* representación numérica de las condiciones de frontera.

Inicialmente, se realiza una revisión de las condiciones de frontera para flujo viscoso. Aquí, la condición de frontera sobre una superficie asume que existe una velocidad relativa cero entre la superficie y el fluido inmediatamente adyacente a la superficie. Esta

condición de frontera se conoce comúnmente como la condición de *no deslizamiento*. Si la superficie es estacionaria, y el flujo está pasando por ella, entonces:

$$u = v = w = 0 \quad \text{en la superficie (para flujo viscoso)} \quad (\text{A.77})$$

Además, existe una condición de *no deslizamiento* análoga asociada con la temperatura en la superficie. Si la temperatura del material en la superficie se asume T_w , entonces la temperatura del fluido en la capa en contacto con la superficie también es T_w . Si en un problema dado la temperatura de la pared es conocida, entonces la condición de frontera apropiada para la temperatura del fluido es:

$$T = T_w \quad (\text{en la pared}) \quad (\text{A.78})$$

Por otro lado, si la temperatura de pared no se conoce, por ejemplo, está cambiando en función del tiempo debido a una transferencia de calor a ó desde una superficie, entonces la ley de Fourier para la conducción de calor proporciona la condición de frontera en la pared, a partir de la ley de Fourier:

$$\dot{q} = - \left(k \frac{\partial T}{\partial n} \right)_w \quad (\text{en la pared}) \quad (\text{A.79})$$

Donde n es la dirección normal a la pared. La superficie del material responde a la transferencia de calor con la pared, \dot{q}_w , cambiando la temperatura T_w , que a su vez afecta a \dot{q}_w . Este problema de transferencia de calor transitoria debe resolverse considerando el flujo viscoso y la respuesta térmica de la pared simultáneamente. Este tipo de condición de frontera, es una condición de frontera que tiene en cuenta el gradiente de temperatura en la pared, en contraste la condición de frontera anterior donde la temperatura se asume a un valor particular. Entonces:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_w = - \frac{\dot{q}_w}{k} \quad (\text{en la pared}) \quad (\text{A.80})$$

Finalmente, existen situaciones donde no hay una transferencia de calor a través de la superficie, entonces se establece una temperatura en la superficie conocida como *temperatura adiabática de la pared*. La condición de frontera para el caso de la pared adiabática es por definición $\dot{q}_w = 0$, entonces:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_w = 0 \quad (\text{en la pared}) \quad (\text{A.81})$$

De todas las condiciones de frontera establecidas anteriormente, las más fácil de aplicar es la de temperatura conocida en la pared, y la siguiente es la de pared adiabática. Estos dos casos representan dos casos extremos del problema general, el cual está asociado con la condición de frontera en la ecuación (A.80). Sin embargo, el problema general, que implica la solución acoplada del flujo con la respuesta térmica del material, es de lejos el más difícil de inicializar.

Por ultimo, hay que tener en cuenta que las únicas condiciones de frontera físicas a lo largo de la pared para un flujo continuo viscoso son las condiciones de no deslizamiento mencionadas; estas condiciones de frontera están asociadas a la velocidad y temperatura de la pared. Las otras propiedades del flujo, tal como la presión y la densidad en la pared, es parte de la solución.

Para un flujo *no viscoso*, no existe fricción que justifique la “adherencia” del flujo a la superficie. Entonces, la velocidad del flujo en la pared tiene un valor finito, diferente de cero. Además, para una pared no porosa, no puede haber flujo de masa hacia o desde la pared; esto significa que el vector de velocidad del flujo inmediatamente adyacente a la pared debe ser tangente a la pared. Si \vec{n} es un vector unitario normal en un punto de la superficie, la condición de frontera está dada por:

$$\vec{V} \cdot \vec{n} = 0 \quad (\text{en la superficie}) \quad (\text{A.82})$$

Esta ecuación establece simplemente que la componente de la velocidad perpendicular a la pared es cero. Esta es la única condición de frontera para un flujo no viscoso. La magnitud de la velocidad, también como los valores de la temperatura, presión y densidad en la pared, hacen parte de la solución.

Dependiendo del problema, si es flujo viscoso o no viscoso, hay varios tipos de condición de frontera en otras partes en el flujo, además de la superficie. Por ejemplo, el flujo a través de una tubería de forma fija, existen unas condiciones de frontera que corresponden a fronteras de entrada o salida del flujo de la tubería. Si el problema involucra un cuerpo inmerso en una corriente libre, entonces las condiciones de frontera aplicadas a una distancia infinitamente lejos aguas arriba, abajo, sobre o debajo del cuerpo serán las condiciones de frontera para corriente libre.

A.5. ECUACIONES PARA CFD

En esta sección, finalmente se direccionará la importancia de considerar las ecuaciones en forma conservativa o no conservativa. Desde el punto de vista histórico de estas ecuaciones, no ha habido razón alguna para preferir una forma u otra, más aún, el desarrollo teórico de la dinámica de fluidos ha evolucionado muy bien en los últimos siglos sin prestar atención a esta clasificación.

La primera perspectiva es simplemente que la forma conservativa de las ecuaciones del movimiento da una “conveniencia” numérica y computacional en donde las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía en forma conservativa se pueden expresar a través de una sola función genérica. Lo anterior ayuda a organizar y simplificar el diseño lógico del programa de computador. Para prepararse para ésta forma genérica, note que todas las ecuaciones en forma conservativa tienen un término en el lado izquierdo expresado a partir de la divergencia de una cantidad. Este término involucra la divergencia del flujo de cierta cantidad física.

Se debe recalcar que la forma conservativa de las ecuaciones se obtuvieron *directamente* a partir de un volumen de control que se mueve con el fluido en lugar de uno que esta fijo en el espacio. Cuando el volumen está fijo en el espacio, se esta tratando con el flujo de masa, cantidad de movimiento y energía entrando y saliendo del elemento. En este caso los flujos en sí mismos pueden ser importantes variables dependientes en las ecuaciones, en lugar de las variables primitivas tales como p , ρ , \vec{V} .

Examinando las formas conservativas de todas las ecuaciones del movimiento del fluido-continuidad, cantidad de movimiento, energía- es posible notar que todas ellas se pueden agrupar en la misma forma genérica. dada por:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial z} = J \quad (\text{A.83})$$

la ecuación (1.83) representa el sistema entero de ecuaciones que describen el movimiento del fluido en forma conservativa, si U , F , G , H y J se interpretan como vectores, dados por:

$$U = \begin{cases} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \end{cases} \quad (\text{A.84})$$

$$F = \begin{cases} \rho u \\ \rho u^2 + p - \tau_{xx} \\ \rho v u - \tau_{xy} \\ \rho w u - \tau_{xz} \\ \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) u + p u - k \frac{\partial T}{\partial x} - u \tau_{xx} - v \tau_{xy} - w \tau_{xz} \end{cases} \quad (\text{A.85})$$

$$G = \begin{cases} \rho v \\ \rho v^2 + p - \tau_{yy} \\ \rho w v - \tau_{yz} \\ \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) v + p v - k \frac{\partial T}{\partial x} - u \tau_{yx} - v \tau_{yy} - w \tau_{yz} \end{cases} \quad (\text{A.86})$$

$$H = \begin{cases} \rho w \\ \rho w^2 + p - \tau_{zz} \\ \rho v w - \tau_{zy} \\ \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) w + p w - k \frac{\partial T}{\partial x} - u \tau_{zx} - v \tau_{zy} - w \tau_{zz} \end{cases} \quad (\text{A.87})$$

$$J = \begin{cases} 0 \\ \rho f_x \\ \rho f_x \\ \rho f_x \\ \rho (u f_x + u f_y + u f_z) + \rho \dot{q} \end{cases} \quad (\text{A.88})$$

En la ecuación (1.83), los vectores F , G y H son conocidos como vectores de *flujo*, y J representa un vector de términos fuente. El vector U es llamado vector solución. El uso de la ecuación genérica escrita en términos de vectores consiste en sumar los elementos correspondientes a cada fila. Por ejemplo, si se suman los elementos de la primera fila, se obtiene la ecuación de continuidad; si se suman los de la segunda fila se obtiene la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección x ; y así sucesivamente.

Si la ecuación (1.83) está escrita con una derivada temporal $\partial U/\partial t$, entonces esta ecuación se aplica a un flujo transitorio. En un problema dado, el transitorio actual es un flujo en condiciones no estables puede ser de primordial interés. En otros problemas, se puede desear una solución en estado estable pero donde la mejor manera para resolver esta condición es resolver las ecuaciones como transitorio y dejar que el estado estable sea aproximado asintóticamente con el tiempo. Para cualquiera de las soluciones transitorias planteadas, la solución de la ecuación (1.83) toma una forma de como si “avanzara con el tiempo”, donde las variables dependientes del campo de fluido son resueltas progresivamente en pasos de tiempo. Para tales soluciones se puede aislar el término $\partial U/\partial t$ y reagrupando la ecuación (1.83)

$$\frac{\partial U}{\partial t} = J - \frac{\partial F}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial y} - \frac{\partial H}{\partial z} \quad (\text{A.89})$$

En la ecuación(A.89), U se conoce como vector solución debido a que los elementos en $U(\rho, \rho u, etc)$ son variables dependientes que usualmente se obtienen numéricamente en pasos de tiempo; en cambio las derivadas espaciales del lado derecho de la ecuación((A.89)) se consideran de “alguna manera” conocidas, es decir, calculadas en el paso anterior.

Desde este punto de vista. los elementos de U son los que se obtienen computacionalmente, son números obtenidos directamente para ρ , ρu , ρv , ρw y $\rho(e + V^2/2)$. Estas variables se conocen como *variables de flujo*. En contraste a u , v , w y e que son ejemplos de variables *primitivas*. Entonces la solución computacional de un problema de un flujo transitorio usando la ecuación(A.89), las variables dependientes son los elementos del vector U , que son ρ , ρu , ρv , ρw y $\rho(e + V^2/2)$. Una vez los números que corresponden a esas variables dependientes sean conocidas, la obtención de las variables primitivas es un paso simple.

$$\rho = \rho \quad (\text{A.90})$$

$$u = \frac{\rho u}{\rho} \quad (\text{A.91})$$

$$v = \frac{\rho v}{\rho} \quad (\text{A.92})$$

$$w = \frac{\rho w}{\rho} \quad (\text{A.93})$$

$$e = \frac{\rho(e + V^2/2)}{\rho} - \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} \quad (\text{A.94})$$

Se puede realizar un tratamiento similar para un flujo no viscoso, se deja para el lector. En CFD, las soluciones de “avanzar” no son exclusivamente para avanzar en el tiempo. Bajo ciertas circunstancias, los flujos es estado estable se pueden resolver “avanzando” en una dirección especial. Estas circunstancias que permiten el uso de “avanzar en el espacio” dependen de las propiedades matemáticas de las ecuaciones del movimiento. Para los propósitos actuales, se puede imaginar un flujo en proceso estable para el cual $\partial U/\partial t = 0$ en la ecuación (1.83). Si se puede aplicar “avanzar en dirección x ”, entonces la ecuación (1.83) se agrupa como:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = J - \frac{\partial G}{\partial y} - \frac{\partial H}{\partial z} \quad (\text{A.95})$$

Entonces F es el vector solución, en donde es posible imaginar que los términos del lado derecho de la ecuación se conocen a partir de la evaluación del paso anterior, por ejemplo, en la localización aguas arriba previa. Por simplicidad, se asumirá que se está tratando con flujo no viscoso, en tal caso, los elementos del vector F son ρu , $\rho u^2 + p$, ρuv , ρuw , $\rho(e + V^2/2)u + pu$. La solución numérica de la ecuación (A.95) produce unos valores para las variables. A partir de estas variables es posible obtener las variables primitivas, aunque el álgebra es más compleja que en el caso anterior discutido. Las variables de flujo que representas el vector F para flujo no viscoso serían:

$$\rho u = c_1 \quad (\text{A.96})$$

$$\rho u^2 + p = c_2 \quad (\text{A.97})$$

$$\rho uv = c_3 \quad (\text{A.98})$$

$$\rho uw = c_4 \quad (\text{A.99})$$

$$\rho (e + V^2/2) u + pu = c_5 \quad (\text{A.100})$$

La solución numérica de la ecuación (A.95) para un flujo no viscoso proporciona los números para c_1 , c_2 , c_3 , c_4 y c_5 en puntos específicos a través del flujo. Una vez esos números son conocidos, se debe resolver simultáneamente el sistema de ecuaciones planteado arriba para encontrar las variables primitivas ρ , u , v , w , e y p en ese punto. Se debe aclarar que existen seis variables primitivas y cinco ecuaciones, la ecuación faltante corresponde a la ecuación de estado del fluido en consideración. Finalmente, hay que notar, que el álgebra involucrada es aún más compleja cuando se considera flujo viscoso, donde los elementos del vector F tienen en cuenta además los términos del flujo y por consiguiente segundas derivadas de las velocidades.

Ahora se enfatizará sobre la diferencia entre la forma no conservativa y la forma conservativa de las ecuaciones del movimiento. La forma conservativa se puede expandir a la definición de dos categorías: *fuerte* y *débil*. Nótese que las ecuaciones del movimiento escritas en la ecuación (1.83) no tienen variables de flujo de las derivadas en x , y , z y t . Las ecuaciones del flujo en la forma en que se presenta en la ecuación (1.83) se dice que son de la forma *fuerte* de la forma conservativa.

Al comienzo de la sección, se mencionó que la naturaleza de la forma conservativa de la no conservativa se discutiría desde dos perspectivas. Ya se comentó que la forma conservativa da una conveniencia numérica y de programación debido a la forma genérica en que se puede plantear la ecuación (1.83). Ahora se considerará la otra perspectiva (más compleja que la anterior). Esta segunda perspectiva está entrelazada con dos distintas y diferentes aproximaciones para el cálculo de flujos con ondas de choque, conocidos como *shock fitting approach* y *shock capturing approach*.

Muchos métodos de cálculo de flujos con ondas de choque se diseñan para que existan ondas de choque y aparezcan naturalmente dentro del dominio computacional como un resultado directo a la solución del campo del fluido, por ejemplo, como un resultado directo del algoritmo general, sin tener un tratamiento especial que lleve con cuidado

las ondas de choque en sí mismas[3]. Tales aproximaciones se conocen como método *shock capturing*. En contraste, existe una expresión alternativa, donde las ondas de choque se introducen explícitamente en la solución del campo fluido, se introducen las relaciones exactas que tienen en cuenta los cambios a través de la onda y que se usan para relacionar el flujo inminentemente delante y detrás de la onda, además las ecuaciones del movimiento se usan para calcular el resto del flujo entre la onda de choque y alguna frontera, por ejemplo, la superficie de un cuerpo aerodinámico. Tal aproximación se conoce como método *shock fitting*.

Para el método *shock capturing*; la experiencia ha demostrado que deberían usarse la *forma conservativa* de las ecuaciones del movimiento [3]. Cuando se usa la forma conservativa, el campo de fluido resultante es generalmente suave y estable. Sin embargo, cuando la forma no conservativa se usa para una solución del tipo *shock capturing* el campo de fluido resultante exhibe usualmente una oscilación especial insatisfactoria aguas arriba y aguas abajo de la onda de choque, las ondas de choque aparecen en una posición equivocada, y la solución puede ser inestable [3]. En contraste, para el método *shock fitting*, se pueden encontrar soluciones satisfactorias con cualquiera de las dos formas de las ecuaciones, conservativas o no conservativas [3].

A.5.1. Ecuación diferencial general

Un resumen de las ecuaciones diferenciales presentadas con anterioridad, indican que todas las variables dependientes de interés vistas obedecen a un principio de conservación generalizado. Si la variable dependiente se asume como ϕ , la ecuación diferencial es

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho\phi\vec{V}) = \text{div}(\Gamma\text{grad}\phi) + S \quad (\text{A.101})$$

Donde Γ es el coeficiente de difusión, S es el término fuente. Las cantidades Γ y S son referidas al significado particular de ϕ .

Los cuatro términos de la ecuación diferencial general son el término transitorio, el término convectivo, el término difusivo, y el término fuente. La variable dependiente ϕ puede tomar una variedad de significados, tal como la masa, fracción de especies químicas, entalpías o temperatura, una componente de la velocidad, entre otras. De acuerdo a cada uno de los valores de ϕ , se tendrá un parámetro Γ y S apropiado.

No todos los flujos difusivos están gobernados por el gradiente de la variable. El uso de $\text{div}(\Gamma\text{grad}\phi)$ como término de difusión, sin embargo, no limita la ecuación general de

ϕ para un proceso de difusión, siempre se podrá incluir como parte del término fuente, de hecho, el término de difusión Γ se puede poner a cero si desea. El término difusivo se ha incluido explícitamente en la ecuación general para ϕ debido a que la mayoría de las variables dependientes requieren un término de difusión en su naturaleza misma.

Aunque se ha considerado todas las variables como cantidades *dimensionales*, algunas veces es más conveniente trabajar con variables *adimensionales*. Una vez más, cualquier ecuación diferencial en particular se puede escribir en términos de las variables adimensionales sin perder el carácter general de la ecuación (A.101), con ϕ , Γ y S cambiadas a una base adimensional.

A.6. COORDENADAS

Hasta ahora se ha centrado la atención a las variables dependientes. Ahora se incluirán algunos comentarios sobre las variables independientes y se discutirán sus propiedades desde el punto de vista computacional.

A.6.1. Variables independientes

La variable dependiente ϕ , en general, sería una función de tres coordenadas espaciales y de tiempo. Entonces:

$$\phi = \phi(x, y, z, t) \tag{A.102}$$

Donde x, y, z y t son las variables independientes. En la solución numérica, se seleccionará los valores de las variables independientes. Para un número más pequeño de variables de ϕ (a través de la especificación de la malla espacio-tiempo).

Afortunadamente, no todos los problemas de ingeniería requieren la consideración de las cuatro variables independientes. Para un número más pequeño de variables independientes en el problema, menos puntos geométricos (puntos en la malla) se necesitarán para los cuales se calcularán los valores de ϕ .

La elección de la variable independiente como esta expresado en la ecuación (A.102) no es la única posibilidad. En lugar de escribir una distribución de temperatura en estado estable como $T(x, y, z)$ se puede escribir:

$$z = z(T, x, y) \tag{A.103}$$

Donde z representa la variable dependiente que muestra la altura de una superficie

isoterma que corresponde con la temperatura T en una posición (x, y) . Se han encontrado métodos basados en la representación anterior, que se conoce como el *método de la migración isotérmica*.

A.6.2. Elección de coordenadas

Puesto que el número de puntos en la malla, en general, estaría relacionado con el número de variables independientes, se puede ahorrar una gran cantidad de espacio en la memoria del computador trabajando con el menor número de variables independientes. Una elección concienzuda del sistema coordenado puede reducir en algunas ocasiones el número de variables independientes requeridas.

Aunque se han usado a lo largo del texto x, y, z como coordenadas espaciales, no implica que se pueda usar sólo el sistema coordenado; cualquier descripción de la localización espacial es útil.

Apéndice B

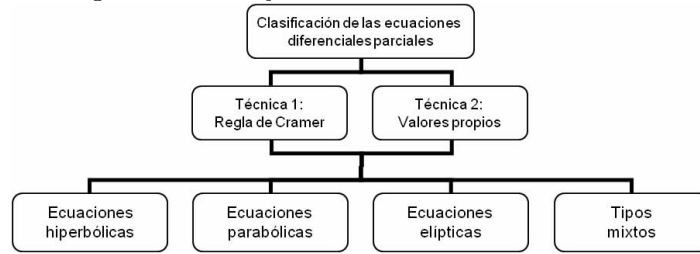
CLASIFICACIÓN MATEMÁTICA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

Antes de estudiar los métodos numéricos para solucionar las ecuaciones del movimiento, es muy útil examinar algunas propiedades matemáticas de las ecuaciones diferenciales parciales. Cualquier solución válida de las ecuaciones exhibirá la propiedad que subyace de la propiedad matemática general de las ecuaciones del movimiento.

Algunas ecuaciones usadas para flujos viscosos y no viscosos se encuentran sistemas cuasi-lineal, por esta razón se explicará en forma básica el sistema cuasi-lineal, que son ecuaciones en donde las derivadas de orden superior ocurren linealmente, no existen productos o exponenciales de las derivadas de orden superior, es decir, aparecen multiplicadas por coeficientes que son funciones de las variables dependientes en sí mismas y el sistema de ecuaciones resultante se conoce como sistema cuasi-lineal. Por ejemplo las ecuaciones para flujo no viscoso, se muestra que las derivadas de orden superior son de primer orden y todo es linealmente. Para flujo viscoso, en las ecuaciones se observa que las derivadas de orden superior son de segundo orden y siempre aparecen linealmente. Por estas razones, en este capítulo se examinarán algunas propiedades matemáticas de un sistema de ecuaciones en derivadas parciales cuasi-lineales.

Finalmente, en la figura (B.1) se muestra la clasificación de las ecuaciones diferenciales parciales. Se discutirán dos técnicas por separadas para determinar la clasificación de las ecuaciones diferenciales parciales: usando las reglas de Cramer, y el método del valor propio. Ambos métodos conducen al mismo resultado. Se verá que las ecuaciones derivadas parciales se pueden clasificar como hiperbólicas, parabólicas, elípticas y otras

Figura B.1: Hoja de ruta para el capítulo 2.



ecuaciones son del tipo mixto.

Ya que el procedimiento para la solución de las ecuaciones diferenciales parciales (PDE), las condiciones iniciales y las condiciones de frontera depende del tipo de ecuación, por eso es importante estudiar varias de las clasificaciones de estas.

La mayor parte de las ecuaciones gobernantes de la mecánica de fluidos y la transferencia de calor son expresadas como PDE de segundo orden y por lo tanto las clasificaciones de tales ecuaciones son consideradas en este capítulo.

B.1. REGLA DE CRAMER

Considere un sistema de ecuaciones cuasi-lineales dadas por:

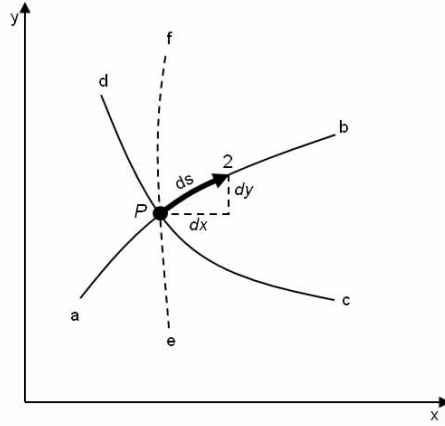
$$a_1 \frac{\partial u}{\partial x} + b_1 \frac{\partial u}{\partial y} + c_1 \frac{\partial v}{\partial x} + d_1 \frac{\partial v}{\partial y} = f_1 \quad (\text{B.1})$$

$$a_2 \frac{\partial u}{\partial x} + b_2 \frac{\partial u}{\partial y} + c_2 \frac{\partial v}{\partial x} + d_2 \frac{\partial v}{\partial y} = f_2 \quad (\text{B.2})$$

donde u y v son las variables dependientes, funciones de x y y , y los coeficientes de $a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2, d_1, d_2, f_1$ y f_2 pueden ser funciones de x, y, u y v . Además, u y v son funciones continuas de x y y , imagine que u y v representan un campo continuo de velocidad en el espacio xy . En cualquier punto en el espacio xy , existe un único valor de u y un único valor de v , más aún, las derivadas de u y v , $\partial u/\partial x, \partial u/\partial y, \partial v/\partial x, \partial v/\partial y$, tienen valores finitos en estos puntos.

Considere un punto en el plano xy , tal como el punto p en la figura (B.2). Busquemos unas líneas (o direcciones) a través de este punto (si existe) junto con las derivadas de u y v que estarán indeterminadas y a través de cuál u y v pueden ser discontinuas.

Figura B.2: Curva característica.



Estas líneas especiales que se buscan se conocen como líneas características. Para encontrar tales líneas, se recalca que u y v son funciones continuas de x y y y sus diferenciales se pueden escribir como:

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy \quad (\text{B.3})$$

$$dv = \frac{\partial v}{\partial x} dx + \frac{\partial v}{\partial y} dy \quad (\text{B.4})$$

Las ecuaciones (B.1), (B.2), (B.3), (B.4), forman un sistema de ecuaciones de cuatro ecuaciones lineales con cuatro términos desconocidos ($\partial u/\partial x, \partial u/\partial y, \partial v/\partial x, \partial v/\partial y$). Estas ecuaciones se pueden escribir en forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & d_2 \\ dx & dy & 0 & 0 \\ 0 & 0 & dx & dy \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial u/\partial x \\ \partial u/\partial y \\ \partial v/\partial x \\ \partial v/\partial y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ du \\ dv \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Definiendo $[A]$ como la matriz de coeficientes

$$[A] = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & d_2 \\ dx & dy & 0 & 0 \\ 0 & 0 & dx & dy \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

Ahora se intentará resolver la Ecuación (B.5) para $\partial u/\partial x$ usando la regla de Cramer. Para hacer esto, se define una matriz $[B]$ como la matriz $[A]$ con su primera columna reemplazada con el vector en el lado derecho de la Ecuación (B.5), entonces,

$$[B] = \begin{bmatrix} f_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ f_2 & b_2 & c_2 & d_2 \\ du & dy & 0 & 0 \\ dv & 0 & dx & dy \end{bmatrix} \quad (\text{B.7})$$

Definir los determinantes de $[A]$ y $[B]$ por $|A|$ y $|B|$, respectivamente, la regla de Cramer especifica que la solución para $\partial u/\partial x$ es

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{|B|}{|A|} \quad (\text{B.8})$$

Para obtener un número para $\partial u/\partial x$ a partir de la Ecuación (B.8), se deben establecer los valores de du, dv, dx y dy que aparecen en las matrices $[A]$ y $[B]$. Pero, qué son du, dv, dx y dy , para dar respuesta a esta pregunta, examine la figura (B.2). Imagine una distancia infinitesimal pequeña fuera del punto P , siguiendo la curva ab , hasta llegar al punto 2. El cambio en x asociado con el movimiento desde el punto P al punto 2 es $dx = x_2 - x_p$, y el cambio asociado en la dirección y es $dy = y_2 - y_p$. Estos son los valores de dx y dy que aparecen en las matrices $[A]$ y $[B]$. Adicionalmente, los valores de u y v en el punto 2 son diferentes a las del punto P ; por lo tanto tales velocidades cambian en las cantidades $du = u_2 - u_p$ y $dv = v_2 - v_p$. Estos son los valores de du y dv que aparecen en la matriz $[B]$. Insertando estos números para dx, dy, du y dv en las matrices $[A]$ y $[B]$ se obtiene la solución para $\partial u/\partial x$, en el caso límite en que dx y dy tiendan a cero. Ahora se traza otra curva arbitraria que pase por P en la figura (B.2), por ejemplo la curva cd . Se podría realizar la misma acción realizada para la curva ab , es decir, moverse una distancia infinitesimal ds fuera del punto P a lo largo de la curva cd y obtener los valores correspondiente para dx, dy, du y dv . Estos valores serán diferentes a los valores obtenidos anteriormente debido a que el movimiento se realiza en una dirección diferente desde el punto P . Sin embargo, cuando los valores de dx, dy, du y dv se insertan en la Ecuación (B.8), y para el caso límite cuando dx y dy tienden a cero, se obtienen el mismo valor para $\partial u/\partial x$ obtenido anteriormente. Efectivamente, este valor debe ser el mismo debido a que el valor de $\partial u/\partial x$ en un punto P .

Sin embargo, existe una excepción mayor al formalismo anterior. ¿Qué pasa si se selecciona una dirección tal que $|A|$ en la Ecuación (B.8) el denominador es cero?, tal dirección se muestra en la figura (B.2) como la curva ef . Entonces en la Ecuación (B.8) el denominador es cero, y el cálculo de $\partial u/\partial x$ para esta dirección particular ef que pasa por P es imposible. En este caso, se dice que la Ecuación (B.8) $\partial u/\partial x$ está indeterminada cuando se elige tal dirección. Por definición, la curva ef se conoce como *curva característica* (o línea característica) a través de P . Entonces, si se considera cualquier punto P en el plano xy , se verán las líneas o direcciones a través de este punto (si existen) a lo largo del cual las derivadas de u y v están indeterminadas y a través del cual también pueden ser discontinuas. Las curvas características son independientes de si se está resolviendo la Ecuación (B.5) para $\partial u/\partial x$ o para $\partial u/\partial y$, $\partial v/\partial x$, o $\partial v/\partial y$; en todos los cuatro casos, $|A|$ es el mismo denominador de acuerdo con la regla Cramer, y $|A| = 0$ define siempre las mismas líneas características.

Cuando las líneas características existen para un sistema dado de ecuaciones, son curvas identificables en el plano xy , tal como la curva ef en la figura (B.2). Por lo tanto, tales curvas es posible calcularlas, y especialmente la pendiente de las curvas en el punto P . Este cálculo se puede realizar a partir de evaluar $|A| = 0$. Reescribiendo los elementos de $|A|$ a partir de la Ecuación (B.6), se tiene:

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & d_2 \\ dx & dy & 0 & 0 \\ 0 & 0 & dx & dy \end{bmatrix} = 0$$

Expandiendo el determinante,

$$(a_1c_2 - a_2c_1)(dy)^2 - (a_1d_2 - a_2d_1 + b_1c_2 - b_2c_1)dxdy + (b_1d_2 - b_2d_1)(dx)^2 = 0 \quad (\text{B.9})$$

Dividiendo la Ecuación (B.9) por $(dx)^2$,

$$(a_1c_2 - a_2c_1)\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 - (a_1d_2 - a_2d_1 + b_1c_2 - b_2c_1)\frac{dy}{dx} + (b_1d_2 - b_2d_1) = 0 \quad (\text{B.10})$$

La Ecuación (B.10) es una ecuación cuadrática para dy/dx . Para cualquier punto en el plano xy , la solución de la Ecuación (B.10) da la pendiente de las líneas a lo largo del

cual las derivadas de u y v están indeterminadas.

En la ecuación (B.10), definiendo

$$a = (a_1c_2 - a_2c_1)$$

$$b = -(a_1d_2 - a_2d_1 + b_1c_2 - b_2c_1)$$

$$c = (b_1d_2 - b_2d_1)$$

Entonces la Ecuación (B.10) se puede escribir como

$$a \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 + b \frac{dy}{dx} + c = 0 \quad (\text{B.11})$$

La ecuación (B.11) puede, en principio, integrarse hasta obtener $y = y(x)$ el cual es la ecuación de la curva característica en el plano xy . Sin embargo, para los propósitos de este curso, se está interesando en conocer sólo las pendientes de las curvas característica que pasan por el punto P en la figura (B.2). Entonces, a partir de la fórmula de la cuadrática:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (\text{B.12})$$

La ecuación (B.12) proporciona las direcciones de las líneas características a través de un punto P en el plano xy , tal como el punto P en la figura (B.2). Definiendo el determinante por D ,

$$D = b^2 - 4ac \quad (\text{B.13})$$

La clasificación matemática del sistema de ecuaciones dadas por las Ecuaciones (B.1) y (B.2) está determinada por el valor de D . Específicamente:

$D > 0$ Se tienen dos soluciones reales y distintas, entonces, se tienen dos líneas características en cada uno de los puntos en el plano xy . El sistema de Ecuaciones (B.1) y (B.2) se conoce como **hiperbólico**.

$D = 0$ El sistema de ecuaciones tienen una solución real y otra imaginaria, entonces se tiene una sola línea característica en cada uno de los puntos en el plano xy . El sistema de Ecuaciones (B.1) y (B.2) se conoce como **parabólico**.

$D < 0$ Las líneas características son imaginarias. El sistema de Ecuaciones (B.1) y

(B.2) se conoce como *elíptico*.

La clasificación de ecuaciones diferenciales parciales cuasi-lineales como elíptico, parabólico, o hiperbólico es común en el análisis de tales ecuaciones.

Si solamente $|A|$ fuera cero, el valor de $\partial u/\partial x$ sería infinito. Sin embargo, la definición de una curva establece que $\partial u/\partial x$ está indeterminado a lo largo de la línea característica, no infinita. Entonces para que $\partial u/\partial x$ sea indeterminada, $|B|$ en la Ecuación (B.8) debe ser cero. Entonces, $\partial u/\partial x$ es de la forma

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{|B|}{|A|} = \frac{0}{0} \quad (\text{B.14})$$

a saber, una indeterminación que puede tener un valor finito. Entonces, a partir de la ecuación (B.7)

$$[B] = \begin{bmatrix} f_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ f_2 & b_2 & c_2 & d_2 \\ du & dy & 0 & 0 \\ dv & 0 & dx & dy \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{B.15})$$

La ecuación para las variables dependientes u y v que se obtiene a partir de (B.15) se conoce como ecuación de *compatibilidad*. Esta ecuación permite conocer las variables dependientes solamente a lo largo de las línea características; la ventaja de esta ecuación de compatibilidad es que tiene una dimensión menos que la ecuación diferencial parcial original. Si la ecuaciones del modelo de flujo tratado son ecuaciones diferenciales parciales en dos dimensiones, entonces la ecuación de compatibilidad tiene una dimensión a lo largo de la línea característica. Como las ecuaciones diferenciales parciales, entonces las ecuaciones características proporcionan alguna ventaja. Esto conduce a una técnica de solución para el sistema de ecuaciones original (Ecuaciones (B.1) y (B.2))en dónde se construyen líneas característica en el plano xy , y se resuelven las ecuaciones de compatibilidad más simples a lo largo de estás líneas características. Esta técnica se conoce como *método de las características*. Este método es especialmente recomendable para sistema de ecuaciones hiperbólicos.

B.2. MÉTODO DE LOS VALORES PROPIOS

Por medio del método de los valores propios, se obtendrá un método más general y sofisticado para determinar la clasificación de las ecuaciones diferenciales en derivadas

parciales cuasi-lineales.

El método de los valores propios es basado en generar un sistema de ecuaciones diferenciales parciales escritas en forma de un vector columna. Por ejemplo, si se asume que f_1 y f_2 en las ecuaciones (B.1) y (B.2) es cero por comodidad, tales ecuaciones serían:

$$a_1 \frac{\partial u}{\partial x} + b_1 \frac{\partial u}{\partial y} + c_1 \frac{\partial v}{\partial x} + d_1 \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{B.16})$$

$$a_2 \frac{\partial u}{\partial x} + b_2 \frac{\partial u}{\partial y} + c_2 \frac{\partial v}{\partial x} + d_2 \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{B.17})$$

Definiendo W como un vector columna

$$W = \begin{Bmatrix} u \\ v \end{Bmatrix}$$

El sistema de ecuaciones dado por las Ecuaciones (B.16) y (B.17) se puede escribir como:

$$\begin{bmatrix} a_1 & c_1 \\ a_2 & c_2 \end{bmatrix} \frac{\partial W}{\partial x} + \begin{bmatrix} b_1 & d_1 \\ b_2 & d_2 \end{bmatrix} \frac{\partial W}{\partial y} = 0 \quad (\text{B.18})$$

o

$$[K] \frac{\partial W}{\partial x} + [M] \frac{\partial W}{\partial y} = 0 \quad (\text{B.19})$$

donde $[K]$ y $[M]$ son las matrices de 2x2 en la Ecuación (B.18). Multiplicando la Ecuación (B.19) por la inversa de $[K]$, se tiene

$$\frac{\partial W}{\partial x} + [K]^{-1} [M] \frac{\partial W}{\partial y} = 0 \quad (\text{B.20})$$

o

$$\frac{\partial W}{\partial x} + [N] \frac{\partial W}{\partial y} = 0 \quad (\text{B.21})$$

donde por definición $[N] = [K]^{-1} [M]$. Con el sistema de ecuaciones escrito en la forma de la Ecuación (B.21), los valores propios de $[N]$ determinan la clasificación del sistema. Si los valores propios son todos reales, las ecuaciones son hiperbólicas. Si los valores propios son todos complejos, las ecuaciones son elípticas. La determinación de los valores

propios de la matriz $[N]$ se deja como ejercicio para el lector. A partir del método de los valores propios, se puede demostrar que, en función del número de Mach (M), el sistema de ecuaciones será hiperbólico si $M > 1$ y elíptico si $M < 1$, de acuerdo con la ecuación:

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{1}{M^2 - 1}} \quad (\text{B.22})$$

donde λ es el valor de la matriz $[N]$.

Para algunos sistemas de ecuaciones, los valores propios pueden tener una mezcla de valores reales y complejos. En estos casos el sistema de ecuaciones no es ni hiperbólico ni elíptico. El comportamiento matemático de tales ecuaciones exhiben una naturaleza hiperbólica y elíptica. Consecuentemente, tenga en mente que los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales no se siempre se pueden ajustar convenientemente a una de las clasificaciones dadas como hiperbólicas, parabólicas o elípticas; algunas veces las ecuaciones tienen un comportamiento mezclado, como se mencionó al principio.

B.3. COMPORTAMIENTO GENERAL DE LAS DIFERENTES CLASES DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

Cada tipo de ecuación tiene un comportamiento matemático diferente, y esto refleja un comportamiento físico diferente de los campos de flujo. A su vez, esto implica que se deben usar diferentes métodos computacionales para resolver las ecuaciones asociadas con las diferentes clasificaciones. Esto es un hecho básico en la vida de CFD, y esta es la razón por el cual se está discutiendo tales temas antes de direccionar cualquier técnica numérica particular.

B.3.1. Ecuaciones hiperbólicas

Para empezar, consideremos una ecuación hiperbólica en dos variables independientes x y y . El plano xy se muestra en la Figura (B.3). Considere un punto P en este plano. Puesto que se trata de una ecuación hiperbólica, existen dos curvas características que se pasan por P . Un significado importante sobre estas líneas características es que la información en un punto P está influenciada solamente por la región entre las dos líneas. Por ejemplo, si en la Figura (B.3) si se provoca una perturbación en el punto P , entonces esta perturbación se sentirá en cada uno de los puntos de la región I en la Figura (B.3), pero solamente en esa región. En este sentido la región I se define como la región de influencia del punto P . Imagine ahora que las dos líneas características se extiendan

hacia atrás del punto P hasta cortar el eje y . La porción del eje y que se intercepta por las dos líneas características se etiqueta como ab . Este punto resulta en un corolario que tiene que ver con las condiciones de frontera para ecuaciones hiperbólicas. Por ejemplo, si se asume que las condiciones de frontera se especifican sobre el eje y ($x = 0$), es decir, las variables dependientes u y v se conocen a lo largo del eje y y entonces la solución de las propiedades de cada punto se pueden obtener mediante un avance respecto de x , comenzando con la condición de frontera dada. Sin embargo, la solución de u y v en el punto P dependerá solamente de la parte de la frontera entre los puntos a y b , como se muestre en la Figura (B.3). Por esta razón, la región a la izquierda del punto P , región III en la Figura (B.3) se conoce como dominio de dependencia del punto P , esto es, las propiedades del punto P dependen solamente de lo que pase en la región III. La información en el punto c , el cual está afuera del intervalo ab , se propaga a lo largo de las líneas características que parten de c e influencia solamente la región II en la Figura (B.3). El punto P se encuentra afuera de la región II y por consiguiente no se ve influenciado por el punto c .

Las ecuaciones hiperbólicas dominan el análisis de problemas de vibración. En general aparecen dependientes del tiempo con una disipación despreciable. Se pueden encontrar los siguientes tipos de flujos que obedecen a ecuaciones hiperbólicas:

- **Flujo no viscoso estable supersónico.** El algoritmo se plantea como una solución paso a paso en la dirección del flujo.
- **Flujo no viscoso transitorio.** El algoritmo se plantea como una solución paso a paso en el tiempo.

B.3.2. Ecuaciones parabólicas

las ecuaciones que gobiernan algunos problemas en la dinámica de fluidos, como la conducción de calor no estable o capa de flujos en la frontera, son parabólicas. Una ecuación diferencial parcial es clasificada como parabólico si $B^2 - 4AC = 0$ en todos los puntos de la región. El dominio de la solución para PDE parabólico es una región abierta.

Como se observa en la Figura (B.4) el plano xy y considerando ahora una ecuación

Figura B.3: Dominio y fronteras para la solución de ecuaciones hiperbólicas. Flujo bidimensional en estado estable.

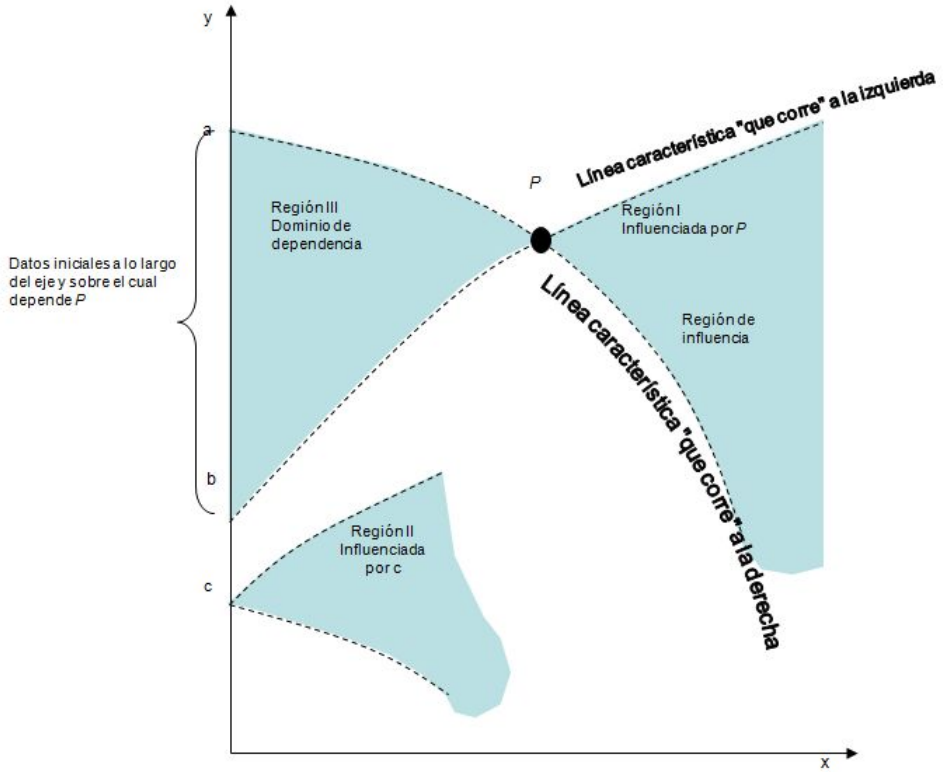
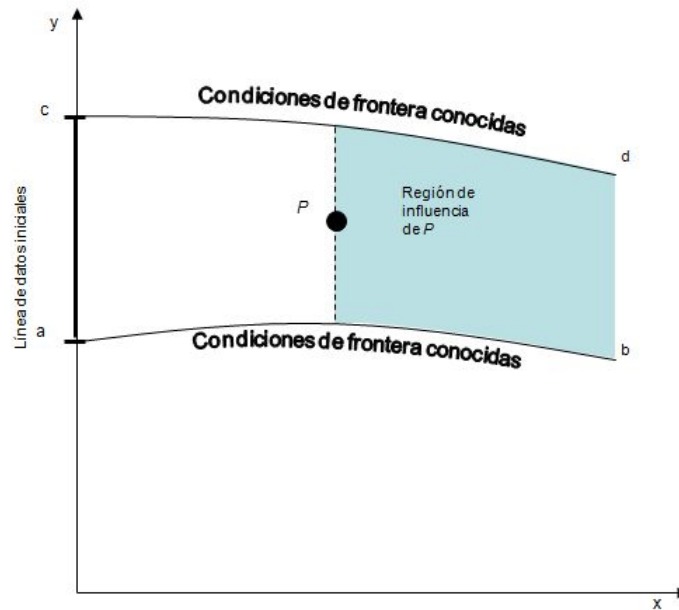


Figura B.4: Dominio y fronteras para la solución de ecuaciones parabólicas en dos dimensiones.



parabólica en dos variables independientes x y y . Considere un punto P en este plano. Puesto que se está tratando con una ecuación parabólica, solamente existe una curva característica que pase por el punto P . Por lo tanto, en la Figura (B.4) se asume que se conocen las condiciones iniciales a lo largo de la línea ac y también las condiciones de frontera a lo largo de las curvas ab y cd . La línea característica está por una línea vertical que pasa por P . En este caso, la información en P influencia la región completa a un lado de la línea característica y contenida dentro de los límites de las dos fronteras, entonces si se pincha el punto P con un pin, el efecto de este pinchazo es sentido a través de toda la región sombreada en la Figura (B.4). Las ecuaciones parabólicas, como las hiperbólicas, se prestan para implementar estrategias de avance. Comenzando con los datos iniciales ac , la solución entre las fronteras ab y cd se obtiene avanzando en la dirección x .

En general, las ecuaciones parabólicas describen problemas dependientes del tiempo que involucran una cantidad significativa de disipación. Aunque las ecuaciones de Navier-Stokes exhiben un comportamiento matemático mezclado, muchas de las formas aproximadas derivadas de las ecuaciones de Navier-Stokes tienen un comportamiento

parabólico. Si se exploran las diversas formas aproximadas de las ecuaciones de Navier-Stokes, los siguientes tipos de modelos de campos de flujo son gobernados por ecuaciones parabólicas.

- **Flujo en estado estable en la capa límite.** En la variedad de una placa, el campo de flujo se divide en dos partes, (1) una región delgada adyacente a la superficie donde están contenidos todos los efectos viscosos y (2) un flujo no viscoso más exterior que la capa anterior, donde no se presentan efectos viscosos, y además fue uno de los desarrollos más profundos en la dinámica de fluidos. La capa viscosa delgada adyacente a la superficie se conoce como capa límite. Las ecuaciones de la capa límite se pueden resolver “avanzando” a través de la distancia s recorrida por el flujo a lo largo de la superficie.
- **Flujos viscosos “parabolizados”.** ¿Qué pasa si la capa límite no es delgada? Entonces todo el campo de flujo es viscoso. Si el número de Reynolds es suficientemente bajo los efectos viscosos alcanzarán una mayor extensión del campo de flujo. Para este caso las ecuaciones de la capa límite no son válidas. Si el campo de flujo no exhibe ninguna región localizada, reservada o separada de flujo en la dirección de flujo, se puede obtener otra versión simplificada de las ecuaciones de Navier-Stokes. Las ventajas de las ecuaciones PNS son (1) son más simples, contienen menos términos que las ecuaciones completas de Navier-Stokes y (2) se pueden resolver mediante procedimientos que avanzan aguas abajo en el flujo.
- **Conducción de calor transitoria.** Considere un cuerpo estacionario (sólido, líquido o gas) donde el calor es transmitido por conducción térmica. Más aún, considere que los gradientes de temperatura cambian como función del tiempo; esto puede suceder debido a un cambio de temperatura en la superficie del cuerpo. La ecuación para la transmisión de calor se puede obtener fácilmente aplicada al caso en que $\vec{V} = 0$. En este caso la ecuación queda

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (\text{B.23})$$

Adicionalmente, si no existe generación de calor ($\dot{q} = 0$), y asumiendo la siguiente

relación de estado $e = c_v T$, la Ecuación (B.23) se convierte en:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho c_v} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] \quad (\text{B.24})$$

La ecuación (B.24) es la ecuación que describe la variación espacial y temporal T en el cuerpo; es parabólica respecto del tiempo, lo que permite implementar una solución paso a paso en el tiempo para el problema de la conducción de calor. Para cada paso de tiempo, la solución espacial del campo de temperaturas debe obtenerse simultáneamente¹.

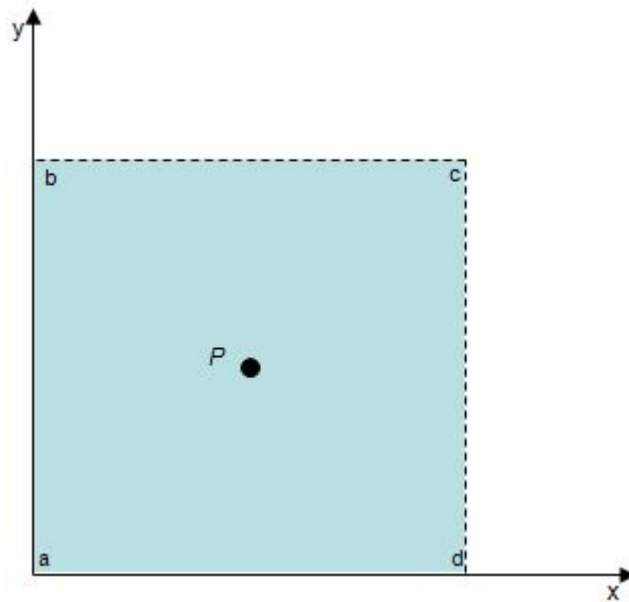
B.3.3. Ecuaciones elípticas

Una ecuación diferencial parcial es elíptica en una región si $(B^2 - 4AC) < 0$ en todos los puntos de la región. Un PDE elíptico tiene las curvas características imaginarias. Una perturbación es propagada al instante en todas las direcciones dentro de la región siendo esta la principal característica de las ecuaciones elípticas. Considerando la Figura (B.5), para las ecuaciones elípticas no existe una región limitada o de influencia o dominio de dependencia; en lugar de ello, la información se propaga a todas partes. Además, debido a que el punto P influncia todos los puntos del dominio, entonces la solución en el punto P se ve influenciada por el dominio completo limitado por $abcd$. Por lo tanto la única manera de encontrar la solución para el punto P es solucionar simultáneamente todos los puntos del dominio. Consecuentemente, la solución a problemas físicos descritos por ecuaciones elípticas siempre son suaves aún sí las condiciones de frontera son discontinuas. Este es un contraste definitivo a las soluciones de avance que aparecen para las ecuaciones parabólicas o hiperbólicas. Por esta razón, los problemas que involucran ecuaciones elípticas se conocen como problemas de equilibrio, debido a que la solución dentro del dominio depende de todo el dominio, las condiciones de frontera se deben aplicar a toda la frontera $abcd$. Estas condiciones de frontera pueden ser de los siguientes tipos:

1. Especificar una variable dependiente a lo largo de la frontera (por ejemplo velocidades). Este tipo de condición de frontera se conoce como condición de **Dirichlet**.

¹Correspondiente con una ecuación elíptica.

Figura B.5: Dominio y fronteras para la solución de ecuaciones elípticas en dos dimensiones.



2. Especificar las derivadas de las variables dependientes, tales como los gradientes de velocidad, a lo largo de la frontera. Este tipo de condición de frontera se conoce como condición de **Newmann**.
3. Una mezcla de las condiciones de Dirichlet y Newmann.

Los problemas de esta categoría son situaciones de estado estable, por ejemplo la distribución de temperatura en estado estable en un sólido, las distribuciones de esfuerzos de un objeto sólido bajo la acción de unas fuerzas aplicadas, y el desarrollo de flujos en estado estable.

Tipos de flujos gobernados por las ecuaciones elípticas:

- **Flujo estable, subsónico, no viscoso.** La palabra clave en este caso es subsónico, las perturbaciones (que viajan a la velocidad del sonido o más rápido) pueden sentirse aguas arriba tan lejos como deseen, al menos teóricamente una perturbación finita en un flujo no viscoso subsónico se propagará al infinito en

Cuadro B.1: Clasificación de las ecuaciones diferenciales parciales.

Tipo de problema	Tipo de ecuación	Ecuación prototipo	Condiciones	Dominio de solución	Suavidad de la solución
Problemas de equilibrio	Elíptica	$div\ grad\ \phi = 0$	Condiciones de frontera	Dominio cerrado	Siempre suave
Problemas de avance con disipación	Parabólica	$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \alpha\ div\ grad\ \phi$	Condiciones iniciales y de frontera	Dominio abierto	Siempre suave
Problemas avance disipación	Hiperbólica	$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = c^2\ div\ grad\ \phi$	Condiciones iniciales y de frontera	Dominio abierto	Pueden haber discontinuidades

todas las direcciones. En ejemplo, son los perfiles de flujo que aparecen en un flujo externo que pasa a través de un ala.

- **Flujo incompresible no viscoso.** Este en realidad es una simplificación del caso anterior donde el número de Mach tiende a cero. Por lo tanto no es una sorpresa que un flujo incompresible no viscoso esté gobernado por ecuaciones elípticas.
- **Conducción de calor en estado estable.** Considere un cuerpo estacionario donde el calor es transmitido por conducción térmica. En este caso el cuerpo ha alcanzado una temperatura estable no uniforme en cada punto del cuerpo. Para este tipo de fenómeno físico, se deba resolver el campo de temperatura del mismo. Lo anterior es una solución que corresponde a ecuaciones elípticas.

En la tabla (B.1) se muestra un resumen de las principales características por las cuales se puede identificar cada una de los tipos de ecuaciones.

B.4. COORDENADAS EN UNA Y DOS VÍAS

Ahora consideraremos nuevos conceptos sobre las propiedades de las coordenadas y se establecerá una conexión entre las coordenadas y la terminología matemática estándar.

Definiciones. Una coordenada **dos vías** es aquella en que las condiciones en un punto

dado están influenciados por los cambios en las condiciones en cualquier lado de este punto. Una coordenada **una vía** es aquella en que las condiciones en un punto dado, en esa coordenada, están influenciadas solamente por los cambios en las condiciones en solamente un lado del punto.

Ejemplos. La conducción de calor uní-dimensional en una varilla da un ejemplo de una coordenada de dos vías. La temperatura de cualquier punto de la varilla puede estar influenciado por los cambios de temperatura en cualquiera de los extremos. Normalmente, las coordenadas espaciales son coordenadas dos vías. El tiempo, por otro lado, siempre es una coordenada una vía. Durante el enfriamiento transitorio de un sólido, la temperatura en un instante dado puede estar influenciada solamente por los cambios de las condiciones que prevalecieron al instante actual.

Coordenadas espaciales como de una vía. Una coordenada espacial puede comportarse como una coordenada una vía bajo la acción del flujo. Si existe un flujo fuertemente unidireccional en la dirección de la coordenada, entonces existe una influencia significativa que viaja solamente en la dirección de aguas arriba a aguas abajo del flujo. Para este caso, las condiciones en un punto están afectadas fuertemente por las condiciones aguas arriba del punto, y débilmente por las condiciones aguas abajo. Para este caso, la naturaleza de una coordenada una vía es una aproximación.

Parabólico, elíptico, hiperbólico. Parece que los términos matemáticos parabólico y elíptico, que se usan para clasificar las ecuaciones diferenciales parciales, corresponden a los conceptos computacionales de coordenadas de una vía y dos vías. El término parabólico indica un comportamiento de una vía, mientras que el elíptico significa el concepto dos vías.

De acuerdo con lo anterior, el problema de la conducción de calor transitoria, que normalmente se conoce como parabólica, es parabólica en el tiempo y elíptica en el espacio. La conducción de calor en estado estable es elíptica en todas las coordenadas. Una capa límite bidimensional es parabólica en la dirección del flujo y elíptica en sentido transversal.

Puesto que tales descripciones no son convencionales, se pueden alcanzar una conexión con la práctica establecida por la siguiente regla:

- Una situación es parabólica si existe al menos una coordenada de una vía, en caso contrario es elíptica.

En cambio, lo que sucede con una situación hiperbólica no se ajusta completamente dentro de la clasificación computacional. Un problema hiperbólico tiene un tipo de comportamiento de una vía, el cual es, sin embargo, no en una de las direcciones coordenadas, sino a lo largo de líneas especiales llamadas líneas características². Existen métodos numéricos que hacen uso de las líneas características, pero están restringidos a problemas hiperbólicos.

Implicaciones computacionales. Si se puede identificar una coordenada una vía en una situación dada, es posible economizar tanto tiempo de cómputo como memoria del computador. Consideremos un problema de conducción bidimensional transitoria. Inicialmente el campo bidimensional de temperatura del cuerpo. Tal campo de temperatura tendrá que ser manejado en el computador para cada instantes sucesivo de tiempo. Sin embargo, y debido a que el tiempo es una coordenada de una vía, el campo de temperaturas en un tiempo dado se verá afectado por los campos futuros. Entonces, queda de la siguiente forma: Dado el campo de temperatura en el tiempo t , encontrar el campo de temperatura en el tiempo $t + \Delta t$. De esta manera, la memoria requerida en el computador será la necesaria para almacenar estos dos campos de temperatura, y el mismo espacio en la memoria se puede usar una y otra vez para todos los pasos de tiempo.

De esta manera, comenzando con un campo de temperaturas iniciales, se puede “avanzar” a través de instantes sucesivos de tiempo. Durante cualquier paso de tiempo, se trabaja simultáneamente con la matriz bidimensional de temperaturas desconocidos solamente. Cada una de las matrices están desacopladas de los valores futuros de temperatura, mientras que los valores previos que tienen influencia son conocidos. De esta forma, se requiere resolver un conjunto de ecuaciones más simples, utilizando para ello menos memoria en el computador.

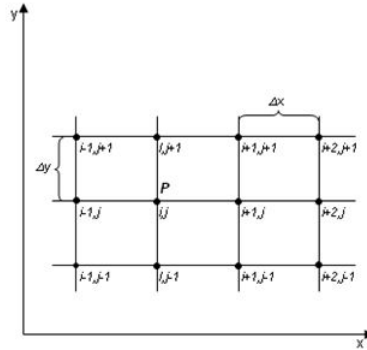
²Ver sección 2.1.

Apéndice C

DISCRETIZACIÓN

En esencia, la discretización es el proceso mediante el cual una expresión matemática cerrada, tal como una función o una ecuación diferencial o integral que involucran funciones, todas ellas vistas como que tiene una serie continua de valores a través de un cierto dominio, es aproximada por expresiones análogas (pero diferentes) que fijan unos valores solamente en un número finito de puntos discretos o volúmenes en el dominio. La solución analítica de una ecuación diferencial parcial involucra expresiones cerradas que dan una variación de las variables de *forma continua* a través del dominio. En contraste, las soluciones numéricas pueden dar una respuesta solamente en *puntos discretos* en el dominio, llamados *puntos de la malla*. Por ejemplo, considere la figura (C.1) la cual muestra una sección de una malla en dirección x es uniforme y dado por Δx y que el espaciamiento de los puntos en la dirección y es también uniforme y dado por Δy , como se muestra en la figura. En general Δx y Δy son diferentes. No es absolutamente necesario que Δx o Δy sean uniformes, sin embargo, la mayoría de las aplicaciones de CFD involucran soluciones numéricas sobre una malla que contiene un espaciamiento uniforme en cada una de las direcciones, debido a que simplifica grandemente la programación de la solución, implica menos memoria, y usualmente se traduce en una mayor exactitud. Este espaciamiento uniforme no tiene que ocurrir en el espacio xy físico; como frecuentemente se hace en CFD, los cálculos numéricos se llevan a cabo en un espacio computacional transformado el cual tiene un espaciado uniforme en las variables independientes transformadas pero que corresponden a un espaciamiento no uniforme en el espacio físico.

Figura C.1: Puntos Discretos en una malla



Imagine ahora que se tiene un campo de flujo bidimensional el cual está gobernado por las ecuaciones de Navier-Stokes, o por las ecuaciones de Euler, vistas en el capítulo 1. Esto da, en principio, expresiones para u , v , p , ρ , etc., como función de x y y , que se pueden usar para obtener los valores de las variables del flujo en cualquier punto que se desee en el flujo, es decir, en cualquier infinito número de puntos (x,y) en el dominio de estudio. Por otro lado, si las derivadas parciales en las ecuaciones del movimiento se reemplazan por cocientes de diferencias algebraicas aproximadas (que se desarrollan a lo largo del capítulo), donde los cocientes de diferencias algebraicas aproximadas se expresan estrictamente en términos de las variables del campo de flujo en dos o mas puntos discretos de la malla mostrados en la figura (C.1) entonces las ecuaciones parciales se pueden reemplazar *totalmente* por un sistema de ecuaciones algebraicas con las que se pueden resolver las variables del campo de flujo en tales puntos discretos *solamente*. En este sentido, la ecuación diferencial parcial original ha sido discretizada. Este método de discretización se conoce como el *método de las diferencias finitas*.

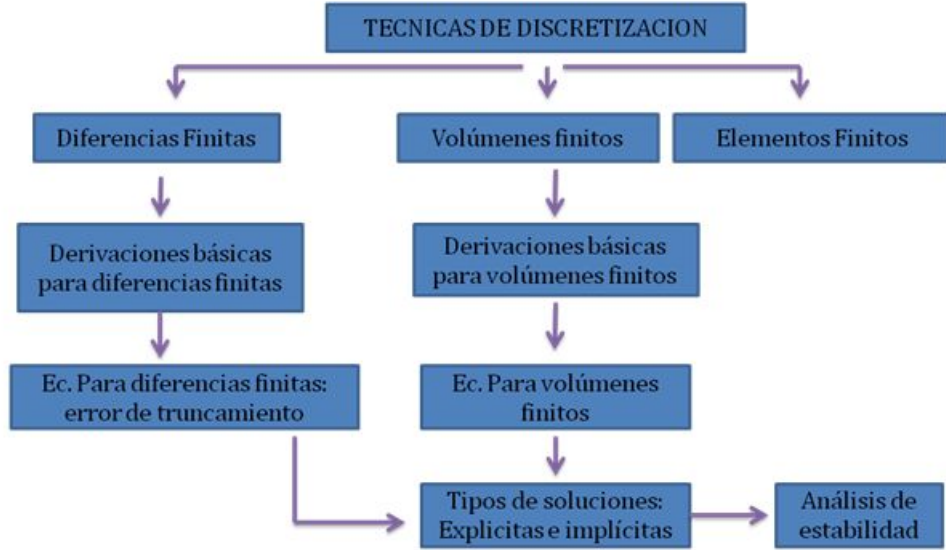
Todos los métodos en CFD utilizan alguna forma de discretización. El proposito de este capítulo es obtener y discutir las formas más comunes de discretización usadas hoy en día.

En la figura (C.2) se observa la hoja de ruta para el capítulo.

C.1. MÉTODO DE LAS DIFERENCIAS FINITAS

En este caso, se está interesado en reemplazar las ecuaciones en derivadas parciales con una ecuación algebraica conveniente, conocida como *diferencia finita*. La forma más común para representar la diferencia finita está basada en la serie de Taylor. Por

Figura C.2: Hoja de ruta para el capítulo 3.



ejemplo, refiriéndose a la figura (C.1), si $u_{i,j}$ es la componente en x de la velocidad en el punto (i, j) , entonces la velocidad $u_{i+1,j}$ en el punto $(i + 1, j)$ se puede expresar en términos de una serie de expansión de Taylor sobre el punto (i, j) como sigue:

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^2}{2} + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^3}{3!} + \dots + \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^n}{n!} \quad (\text{C.1})$$

Resolviendo la ecuación (3.1) para hallar $(\partial u/\partial x)_{i,j}$ se obtiene

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} - \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)}{2} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^2}{3!} - \dots - \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^{n-1}}{n!} \quad (\text{C.2})$$

En la ecuación (C.2), la derivada parcial actual evalua en el punto (i, j) se observa en el lado izquierdo. El primer término del lado derecho $(u_{i+1,j} - u_{i,j})/\Delta x$, es representación en diferencias finitas de la derivada parcial. El resto de los términos al lado derecho constituyen el *error de truncamiento*. Esto quiere decir, que si se desea *aproximar* la derivada parcial con el cociente algebraico en forma de diferencia finita

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \quad (\text{C.3})$$

Entonces el error de truncamiento en la ecuación (C.2) dice que está despreciando ese término en la aproximación. En la ecuación (C.2), el término de más bajo orden en el error de truncamiento involucra términos de Δx a la primera potencia; entonces, la expresión para la diferencia finita en la ecuación (C.3) se conoce como de *primer orden de exactitud*. Normalmente la ecuación (C.2) se escribe como

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (\text{C.4})$$

En la ecuación (C.4), el símbolo $O(\Delta x)$ es una notación matemática que representa “términos de orden Δx ”. La ecuación (C.4) tiene una notación más precisa que la ecuación (C.3), la que incluye la notación “aproximadamente igual”; en la ecuación (C.4) el orden de magnitud del error de truncamiento se muestra explícitamente en la notación. Volviendo a la figura (C.1) observe que la expresión en diferencias finitas en la ecuación (C.4) utiliza información solamente a la derecha del punto (i, j) ; esto es, $u_{i+1,j}$ y $u_{i,j}$. No se usa información a la izquierda de (i, j) . Como resultado de lo anterior, la diferencia finita en la ecuación (C.4) se conoce como *diferencia forward*. Por esta razón, se identificará la representación de primer orden de exactitud para la derivada $(\partial u/\partial x)_{i,j}$ expresada en la ecuación (C.4) como una *diferencia forward de primer orden*.

Usando nuevamente la serie de expansión de Taylor para $u_{i-1,j}$, expandida sobre $u_{i,j}$

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} (-\Delta x) + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{(-\Delta x)^2}{2} + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{(-\Delta x)^3}{3!} + \dots + \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_{i,j} \frac{(-\Delta x)^n}{n!} \quad (\text{C.5})$$

Reagrupando para hallar $(\partial u/\partial x)_{i,j}$ se obtiene

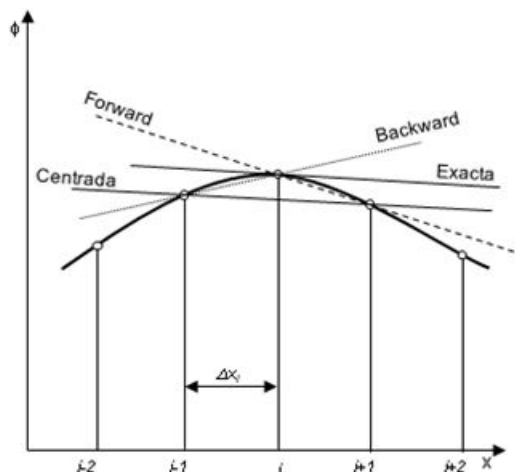
$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (\text{C.6})$$

La ecuación (C.6) se identificará como una *diferencia backward de primer orden*.

Para construir un cociente en diferencias finitas de segundo orden, se debe restar simplemente la ecuación (C.5) de la ecuación (3.1)

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2 \quad (\text{C.7})$$

Figura C.3: Definición de las derivadas y sus aproximaciones.



La información usada en la formación de la ecuación en diferencias finitas en la ecuación (C.7) proviene de *ambos* lados del punto de la malla en (i, j) , usa $u_{i+1,j}$ y $u_{i-1,j}$. Entonces, el cociente en diferencias finitas de la ecuación (C.7) se conoce como *diferencia central de segundo orden*.

A partir de la figura (C.3)..... es obvio que algunas aproximaciones son mejores que otras. La línea para la diferencia central tiene una pendiente más cercana a la pendiente de la línea exacta; si la función $\phi(x)$ fuera de segundo orden y el espaciamiento Δx uniforme, las pendientes serían exactamente iguales.

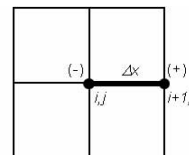
Las expresiones mostradas en la Figura (C.4) son una larga lista de expresiones para diferencia finita, se pueden obtener muchas otras aproximaciones para las derivadas.

En las Tablas (C.1), (C.2), (C.3), (C.4), C.5 y C.6 se encuentran un resumen de varias fórmulas para diferencias finitas de diversos órdenes de exactitud.

Figura C.4: Expresiones en diferencias finitas

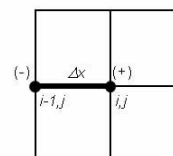
Diferencia forward
de primer orden
respecto a x

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}$$



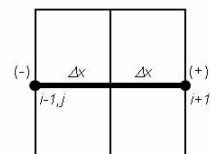
Diferencia backward
de primer orden
respecto a x

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}$$



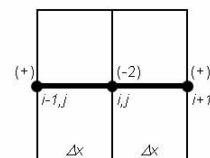
Diferencia centrada
de segundo orden
respecto a x

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}$$



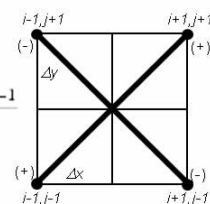
Segunda diferencia
centrada de segundo
orden respecto a x

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}$$



Segunda diferencia
mezclada y centrada
de segundo orden
respecto a x y y

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1}}{4\Delta x \Delta y}$$



Cuadro C.1: Diferencia forward, $O(\Delta x)$

	u_i	u_{i+1}	u_{i+2}	u_{i+3}	u_{i+4}
$\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}$	-1	1			
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	1	-2	1		
$\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$	-1	3	-3	1	
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$	1	-4	6	-4	1

Cuadro C.2: Diferencia backward, $\mathbf{O}(\Delta x)$

	u_{i-4}	u_{i-3}	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i
$\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}$				-1	1
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$			1	-2	1
$\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$		-1	3	-3	1
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$	1	-4	6	-4	1

Cuadro C.3: Diferencia Centrada, $\mathbf{O}(\Delta x^2)$

	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i	u_{i+2}	u_{i+1}
$\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}$		-1	0	1	
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$		1	-2	1	
$\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$	1	2	0	1	2
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$	1	-4	6	-4	1

Cuadro C.4: Diferencia forward, $\mathbf{O}(\Delta x^2)$

	u_i	u_{i+1}	u_{i+2}	u_{i+3}	u_{i+4}	u_{i+5}
$2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}$	-3	4	-1			
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	2	-5	4	-1		
$2\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$	-5	18	-24	14	-3	
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$	3	-14	26	-24	11	-2

Cuadro C.5: Diferencia backward, $\mathbf{O}(\Delta x^2)$

	u_{i-5}	u_{i-4}	u_{i-3}	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i
$2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}$				-1	4	-3
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$			-1	4	-5	2
$2\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$		3	-14	24	18	-5
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$	-2	11	-24	26	-14	3

Cuadro C.6: Diferencia Centrada, $\mathbf{O}(\Delta x^4)$

	u_{i-3}	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i	u_{i+2}	u_{i+1}	u_{i+3}
$2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}$		1	-8	0	8	1	
$\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$		1	16	30	16	-1	
$2\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$	1	-8	13	0	-13	8	-1
$\Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$	-1	12	-39	56	-39	12	-1

Implementación de las condiciones de frontera

Para suministrar una solución única, el problema continuo requiere información sobre la solución en el dominio de la frontera. Generalmente, se conoce, el valor de la variable en la frontera (condiciones de frontera de Dirichlet) o su gradiente en una dirección particular (normalmente en la dirección normal a la frontera- condición de frontera de Neumann) o una combinación lineal de las dos cantidades.

Si se conoce el valor de la variable en algún punto de la frontera, entonces no se necesita realizar mucho más. En todas las ecuaciones de diferencias finitas planteadas en el sistema que contenga datos de este punto, los valores de la variable en la frontera se conocen y no es necesario hacer nada más. El problema aparece cuando se usan derivadas que requieren aproximaciones de orden superior de exactitud (mayor que uno), debido a que se necesitan datos de al menos tres puntos, y la aproximación de algunos nodos interiores pueden demandar información de puntos que están fuera más allá de la frontera. Por lo tanto, puede ser necesario usar diferentes aproximaciones para la derivada en algunos puntos sobre o cerca de la frontera.

Considere la figura(C.5), que muestra una proci3n de la frontera en un campo de flujo, con el eje y perpendicular a la frontera. Imponiendo el punto de la malla 1 justo en la frontera, con los puntos 2 y 3 a una distancia Δy y $2\Delta y$ respectivamente arriba de la frontera. Se desea construir una aproximaci3n en diferencias finitas para $\partial u/\partial y$ en la frontera. Como primera aproximaci3n se puede construir una diferencia forward como :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_i = \frac{u_2 - u_1}{\Delta y} + \mathbf{O}(\Delta y) \quad (\text{C.8})$$

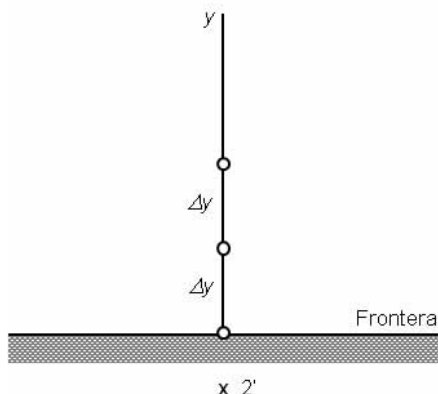
Que como se observa en la ecuaci3n es q de primer orden. Un primer orden de exactitud puede llegar a ser inconveniente por la inclusi3n de una falsa difusi3n. La soluci3n ser3a utilizar un esquema con una diferencia centrada, la cual fallar3a debido a que requiere un punto por fuera de la frontera, tal como se muestra en la figura (C.5) con el punto 2'. El punto 2' esta por fuera del dominio computacional y en general no se tiene informaci3n de u en este punto. En las primeras aplicaciones para CFD, muchas soluciones intentaban sobrepasar este problema asumiendo $u'_2 = u_2$. Esto se conoce como reflexi3n de la condici3n de frontera. En la mayor3a de los casos no tiene sentido f3sico y es inexacto, tanto como la diferencia forward en la ecuaci3n (C.8).

A partir de los resultados obtenidos en las tablas (C.1) a (C.6) se puede utilizar las expresiones para la primera y segunda derivada de orden dos o superior para evaluar la condici3n de frontera especificada como el gradiente de u . Para este caso:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_i = \frac{-3u_i + 4u_2 - u_3}{2(\Delta y)} + \mathbf{O}(\Delta y)^2 \quad (\text{C.9})$$

La ecuaci3n (C.9) es la ecuaci3n deseada de segundo orden de exactitud en la frontera. Las ecuaciones (C.8) y (C.9) son conocidas como *diferencias a un solo lado* debido a

Figura C.5: Puntos de la malla en la frontera



que sólo usan información a un lado de la frontera. Estas ecuaciones son generales, su aplicación no está limitada a puntos en la frontera, también se pueden aplicar a puntos internos de la malla. En algunas aplicaciones para CFD, no es inusual ver diferencias a un lado de cuatro o quinto orden aplicadas en las fronteras. Esto es especialmente cierto para cálculos de flujos viscosos. En tales aplicaciones, el esfuerzo cortante y la transferencia de calor en la pared, debido al flujo sobre la pared, son de particular importancia. El esfuerzo cortante en la pared está dado por:

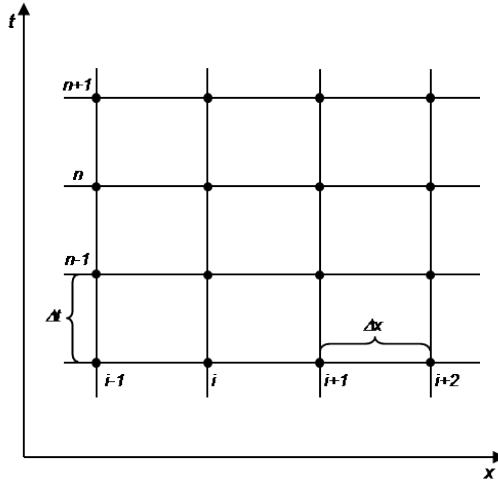
$$\tau_w = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w \quad (\text{C.10})$$

y la transferencia de calor en la pared está dada por:

$$q_w = k \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_w \quad (\text{C.11})$$

En las ecuaciones de diferencias finitas de un flujo viscoso (solución de las ecuaciones de Navier-Stokes, entre otras), se calculan las variables u y T en todos los puntos de la malla, tanto internos como en la frontera. Entonces, después que los valores de estas variables de flujo se obtienen (por medio de algunos algoritmos apropiados), se calculan los esfuerzos cortantes y la transferencia de calor a partir de las ecuaciones (C.10) y (C.11). Obviamente, entre más exacta sea la diferencia a un sólo lado usada que representa $(\partial u / \partial y)_w$ y $(\partial T / \partial y)_w$ en las ecuaciones (C.10) y (C.11), respectivamente, más exactos serán los valores calculados para τ_w y q_w .

Figura C.6: Malla para discretizar la ecuación(C.12).



C.2. SISTEMAS DE ECUACIONES

Cuando se reemplazan todas las derivadas parciales en una determinada ecuación diferencial parcial por expresiones algebraicas en diferencias finitas, la ecuación algebraica resultante se conoce como ecuación en diferencias finitas, que es una representación algebraica de la ecuación diferencial parcial. El objetivo es obtener una ecuación en diferencias para cada punto de la malla y formar un sistema de ecuaciones. Lo anterior se ilustrará mediante un ejemplo sencillo.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{C.12})$$

Ahora se reemplazará esta ecuación por una ecuación en diferencias finitas. Esta ecuación tiene dos variables independientes t y x por lo tanto se considerará el subíndice i para recorrer la malla en dirección x y el superíndice n para recorrer la malla en dirección t.

Por convención en CFD para las variables de avance como t, se usa la letra n y se denota en la ecuación como superíndice. Al reemplazar la derivada temporal por una diferencia forward tenemos:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_i^n = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} - \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right)_i^n \frac{\Delta t}{2} + \dots \quad (\text{C.13})$$

Con un error de truncamiento de primer orden. A su vez, reemplazamos la derivada parcial espacial en x con una diferencia central:

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i^n = \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} - \left(\frac{\partial^4 T}{\partial t^4}\right)_i^n \frac{(\Delta x^2)}{12} + \dots \quad (\text{C.14})$$

Donde el error de truncamiento es de segundo orden. Reordenando e igualando la ecuación diferencial con la ecuación en diferencias finitas llegamos a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 &= \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} - \alpha \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \\ &- \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right)_i^n \frac{\Delta t}{2} + \alpha \left(\frac{\partial^4 T}{\partial t^4}\right)_i^n \frac{(\Delta x^2)}{12} + \dots \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

De aquí los dos primeros términos del lado derecho de la ecuación encajan con los términos del lado izquierdo y el término final del lado derecho representa el error de truncamiento total. La ecuación en diferencias finitas que representa a la ecuación original es:

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (\text{C.16})$$

Cada ecuación en diferencias finitas para cada nodo de la malla contiene información de la variable del nodo y de los nodos vecino. En general, el resultado de la discretización es un sistema de ecuaciones lineales de la forma:

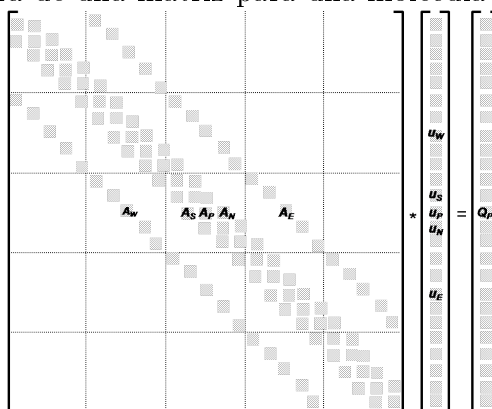
$$\mathbf{A}_p \mathbf{U}_p + \sum_l \mathbf{A}_l \mathbf{u}_l = \mathbf{Q}_p \quad (\text{C.17})$$

El número de ecuaciones y el número de incógnitas debe ser igual, por lo tanto se debe escribir una ecuación para cada nodo; de lo que resulta un gran conjunto de ecuaciones lineales algebraicas que se deben resolver numéricamente. Este sistema se puede escribir en forma matricial como:

$$[\mathbf{A}] \{\mathbf{u}\} = \mathbf{Q}_p \quad (\text{C.18})$$

La matriz A es una matriz dispersa cuadrada es decir que los elementos no cero caen en la diagonal principal y las diagonales vecinas. U es el vector que contiene los valores de las variables en cada nodo y Q contiene los términos del lado derecho de la ecuación. Debido a que la matriz A es dispersa, lo mejor al almacenar en la memoria del computador los elementos no cero en un arreglo de dimensión $1 \times N_i \times N_j$

Figura C.7: Estructura de una matriz para una molécula computacional de 5x5.



donde N_i y N_j son el número de puntos de la malla en las dos direcciones coordenadas. Puesto que cada diagonal representa la conexión a la variable del nodo con respecto al nodo central, entonces se puede nombrar cada diagonal con el subíndice del nodo correspondiente. Para un sistema de 5x5 el arreglo matricial daría como resultado en forma computacional:

C.3. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS

Las leyes de conservación del movimiento de fluidos pueden ser expresadas matemáticamente de forma diferencial o integral. Cuando un esquema numérico es aplicado a una ecuación diferencial, el dominio de la solución es dividido en puntos discretos, con lo cual las ecuaciones de diferencia finita son resueltas. Por otra parte, cuando la forma integral de las ecuaciones es utilizada, el dominio de la solución es dividido en pequeños volúmenes (o aéreas para el caso bidimensional). Así, las leyes de conservación en la forma integral son aplicadas a estos elementos de volumen.

C.3.1. Descripción general de el método de volúmenes finitos.

Para ilustrar el método considérese el proceso de transporte más simple de todos: difusión pura en estado estable. La ecuación que gobierna la difusión en estado estable puede ser fácilmente derivable de la ecuación general de transporte para una propiedad φ eliminando los términos convectivos y transitorios. Lo que da:

$$\text{div}(\Gamma \text{grad} \varphi) + S_\varphi = 0 \quad (\text{C.19})$$

La integración del volumen de control, el cual es el paso clave del método de volumen

finito que lo distingue de todas las otras técnicas en CFD, el campo es de la siguiente forma:

$$\int_{VC} \text{div}(\Gamma \text{grad} \varphi) dV + \int_{VC} S_{\varphi} dV = \int_A \dot{n}(\Gamma \text{grad} \varphi) dA + \int_{VC} S_{\varphi} dV = 0 \quad (\text{C.20})$$

Para trabajar con las ecuaciones de difusión en estado estable unidimensional las técnicas de aproximación que son necesarias para obtener las llamadas ecuaciones de Discretización son introducidas. Luego el método se puede extender a problemas de difusión en dos y tres dimensiones. Una de las características más importantes del MVF (Método de Volúmenes Finitos), es su flexibilidad en mallas no estructuradas debido a que la geometría del dominio es complicada. La idea básica del MVF es de obtener un sistema de ecuaciones algebraicas dadas por la discretización del volumen de control y la superficie de control. En este proceso la conservación de todas las variables es obligada a pasar a través de las superficies de control. Así cuando una cantidad específica de una variable conservada es transportada fuera de un volumen de control, la misma cantidad es transportada al volumen adyacente. Como resultado, no hay ni creación ni destrucción de la variable. Las inexactitudes que pueden generar una malla ordinaria no son el resultado de una falla de las variables, pero si más bien por los errores de aproximación. Otras ventajas de MVF es que la discretización de las ecuaciones que gobiernan el fenómeno contiene su interpretación física. El MVF es efectivo, porque el cálculo de flujos en la superficie del volumen de control adjunto necesita estar ejecutado únicamente una vez después que la expresión sea la misma para ambos volúmenes de control, difiriendo únicamente en el signo. Esto da un aumento en la reducción de costos y simplicidad en el algoritmo.

C.3.2. Método de volúmenes finitos para difusión en estado estable unidimensional

Considere el dominio de la difusión en estado estable de una propiedad φ unidimensional definido en la figura (C.8). El proceso está gobernado por:

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\varphi}{dx} \right) + S = 0 \quad (\text{C.21})$$

Donde Γ es el coeficiente de difusión y S es el término fuente. Los valores de la frontera de φ en los puntos A y B son conocidos. Un ejemplo de este tipo de procesos, es la conducción de calor en una aleta.

Paso 1: Generación de la Malla

Figura C.8: Volumen de control Unidimensional.

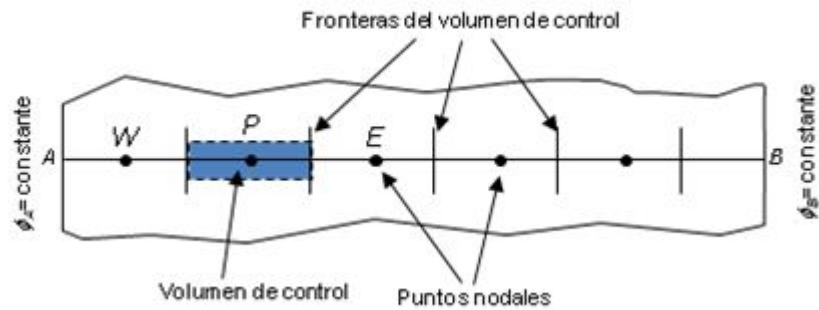
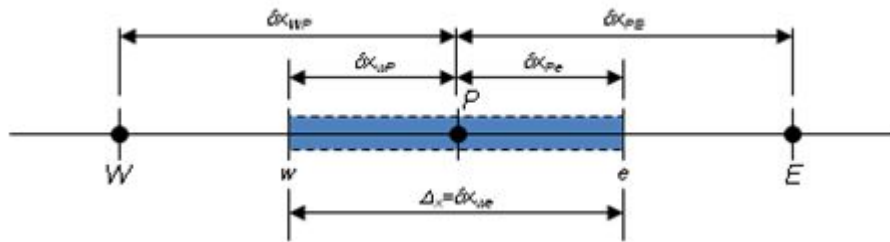


Figura C.9: Convención de la división del volumen de control.



El primer paso en el MVF es dividir el dominio en volúmenes de control discretos. Se le da un número de punto nodal a los espacios entre A y B. las fronteras (o caras) de los volúmenes de control son posicionados entre dos nodos adyacentes. Así cada nodo está encerrado por un volumen de control o celda. Una práctica común es ubicar el volumen de control cerca del borde del dominio, lo cual es una buena forma de hacer coincidir la frontera física con la frontera de volumen de control. En estos puntos es apropiado establecer un sistema de notación que puede ser usado en futuros desarrollos. La convención usual en CFD es mostrado en la figura (C.9)

Un punto nodal general es identificado con P y sus vecinos en una geometría unidimensional al este y oeste, son identificados por W y E respectivamente (iniciales en ingles West y East). La cara del lado este en el volumen de control es referido por "w" y por el lado oeste por "e". La distancia entre los nodos W y P y la distancia entre los nodos P y E son identificados por δx_{WP} y δx_{PE} respectivamente. Similarmente la distancia entre la cara w y punto P y de P a la cara e esta denotada δx_{wP} y δx_{Pe} respectivamente. La figura (C.9) muestra que el volumen de control el ancho $\Delta x = \delta x_{we}$

Paso 2: Discretización

La clave del MVF es la integración de la ecuación (o ecuaciones) sobre el volumen de control para producir una ecuación discretizada en un punto nodal P. Para el volumen de control definido arriba, esta dado por:

$$\int_{VC} \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\varphi}{dx} \right) dV + \int_{VC} S dV = \left(\Gamma A \frac{d\varphi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\varphi}{dx} \right)_w + \bar{S} \Delta V \quad (C.22)$$

Aquí A es el área de la sección transversal de la cara en el volumen de control, ΔV es el volumen y \bar{S} es el promedio del valor fuente S sobre el volumen de control. Algo muy característico del MVF es que la ecuación discretizada tiene claramente una interpretación física. La ecuación (3.4) aclara que el flujo difusivo de φ que sale por la cara Oeste menos el flujo difusivo de φ que entra por la cara Este es igual a la generación, por ejemplo, lo que constituye una ecuación de balance para φ sobre el volumen de control.

Paso 3: Selección del método de aproximación de la distribución de propiedades

Para calcular el gradiente (y así el flujo) en las caras del volumen de control es necesario una aproximación de distribución de propiedades entre los puntos nodales usados. La aproximación lineal parece ser la más obvia y simple forma de calcular los valores de interface y el gradiente. En una malla uniforme la interpolación lineal de los valores Γ_e y Γ_w están dados por:

$$\Gamma_w = \frac{(\Gamma_W + \Gamma_P)}{2} \quad (C.23)$$

$$\Gamma_e = \frac{(\Gamma_P + \Gamma_E)}{2} \quad (C.24)$$

Y los términos del flujo difusivo son evaluados como:

$$\left(\Gamma A \frac{d\varphi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{(\varphi_E - \varphi_P)}{\delta x_{PE}} \right) \quad (C.25)$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\varphi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{(\varphi_P - \varphi_W)}{\delta x_{WP}} \right) \quad (C.26)$$

En situaciones practicas, el termino fuente puede ser función de la variable dependiente. Para tales casos el MVF aproxima el término fuente de modo lineal de la forma:

$$\bar{S} \Delta V = S_u + S_P \varphi_P \quad (C.27)$$

Substituyendo las ecuaciones (C.25), (3.26) y (C.27) en la ecuación (C.22) obtenemos:

$$\Gamma_e A_e \left(\frac{(\varphi_E - \varphi_P)}{\delta x_{PE}} \right) - \Gamma_w A_w \left(\frac{(\varphi_P - \varphi_W)}{\delta x_{WP}} \right) + S_u + S_P \varphi_P = 0 \quad (C.28)$$

Reagrupando

$$\left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e + \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w - S_P \right) \varphi_P = \left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \right) \varphi_E + \left(\frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) \varphi_W + S_u \quad (C.29)$$

Identificando los coeficientes φ_W y φ_E de la ecuación (3.10) como a_E y a_W el coeficiente de φ_P como a_P la ecuación de arriba se puede escribir como:

$$a_P \varphi_P = a_W \varphi_W + a_E \varphi_E + S_u \quad (C.30)$$

Donde:

a_W	a_E	a_P
$\left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{WP}} A_w \right)$	$\left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \right)$	$a_W + a_E + S_u$

El valor de S_u y S_P pueden ser obtenidos de la fuente modelo (C.27) $\bar{S} \Delta V = S_u + S_P \varphi_P$. La ecuación (C.30) y (C.27) representan la forma discretizada de la ecuación (C.19). Este tipo de discretización es central para todos los desarrollos de más adelante.

La anterior demostración de aproximación lineal se basa en:

Considerando un espacio igual en una malla unidimensional (espaciado Δx) mostrado en la figura (C.10)

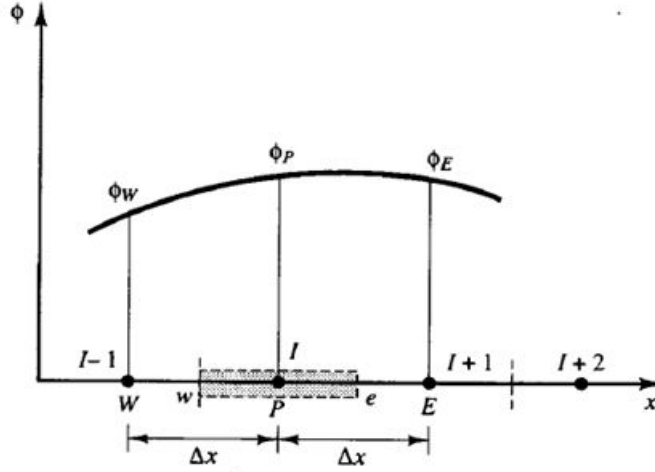
Para una función $\varphi(x)$ el desarrollo de la serie de Taylor de $\varphi(x + \Delta x)$ alrededor de i en x es:

$$\varphi(x + \Delta x) = \varphi(x) + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_x \Delta x + \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right)_x \frac{\Delta x^2}{2} \quad (C.31)$$

En la notación se uso valores de Discretización φ_P y φ_E por $\varphi(x)$ y $\varphi(x + \Delta x)$ respectivamente, así la ecuación (C.31) puede ser escrita como:

$$\varphi_E = \varphi_P + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_P \Delta x + \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right)_P \frac{\Delta x^2}{2} + \dots \quad (C.32)$$

Figura C.10: Aproximación Lineal.



Reagrupando

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_P = \frac{(\varphi_E - \varphi_P)}{\Delta x} - \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right)_P \frac{\Delta x^2}{2} - \dots \quad (\text{C.33})$$

Así

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_P = \frac{(\varphi_E - \varphi_P)}{\Delta x} + \mathbf{O}(\Delta x) \quad (\text{C.34})$$

Despreciando el término truncado $\mathbf{O}(\Delta x)$ el cual involucra el factor multiplicando (Δx) se puede escribir:

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_P \approx \frac{(\varphi_E - \varphi_P)}{\Delta x} \quad (\text{C.35})$$

Lo que se conoce como diferencia forward con respecto a P. De igual forma se puede derivar la diferencia Backward para el punto P

$$\varphi(x - \Delta x) = \varphi(x) - \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_x \Delta x + \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right)_x \frac{\Delta x^2}{2} + \dots \quad (\text{C.36})$$

Después de un poco de álgebra se encuentra la fórmula de la diferencia Backward para $\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)$

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_P = \frac{(\varphi_P - \varphi_W)}{\Delta x} + \mathbf{O}(\Delta x) \quad (\text{C.37})$$

Las ecuaciones (C.31) y (C.36) ambas son de primer orden de aproximación. Ahora, se resta (C.31) y (C.36)) obtenemos:

$$\varphi(x + \Delta x) - \varphi(x - \Delta x) = 2 \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_x \Delta x + \left(\frac{\partial^3\varphi}{\partial x^3}\right)_x \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (\text{C.38})$$

Una tercera ecuación para $\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_P$ puede ser obtenida reagrupando la ecuación (3.19) como:

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_P = \frac{(\varphi_E - \varphi_W)}{2\Delta x} + \mathbf{O}(\Delta x^2) \quad (\text{C.39})$$

Esta ecuación usa los valores de E y W para evaluar el gradiente en el punto P, y es llamada formula de diferencia central. Para malla no uniforme las caras e y w de un nodo general pueden no estar en el punto medio entre los nodos E y W, y los nodos W y P, respectivamente. En estos casos el valor de la interface del coeficiente de difusión Γ es calculado de la siguiente forma:

$$\Gamma_w = (1 - f_w)\Gamma_W + f_w\Gamma_P \quad (\text{C.40})$$

Donde el factor de interpolación f_w está dado por:

$$f_w = \frac{\delta x_{Ww}}{\delta x_{Ww} + \delta_{wP}} \quad (\text{C.41})$$

Y

$$\Gamma_e = (1 - f_P)\Gamma_P + f_P\Gamma_E \quad (\text{C.42})$$

Donde

$$f_P = \frac{\delta x_{Pe}}{\delta_{Pe} + \delta_{eE}} \quad (\text{C.43})$$

Básicamente hay dos prácticas usadas para localizar las caras del volumen de control en mallas no uniformes (Patankar, 1980).

Práctica A

Los puntos nodales son definidos primero y las caras del volumen de control se localizan en la mitad de los puntos de la malla. Como se ilustra en la figura (C.11)

Práctica B

La ubicación de las caras del volumen de control se definen primero y los puntos nodales son puestos en el centro del volumen de control como muestra la figura (C.12). Aquí las caras de un volumen de control no están en el punto medio entre los nodos. La evaluación del gradiente obtenido a través de la aproximación lineal es inalterada porque el gradiente se mantiene el mismo en cualquier punto entre los nodos en cuestión pero los valores del coeficiente de difusión Γ necesitan ser evaluadas usando la función de interpolación (C.40).

Figura C.11: Volumen de control Practica A.

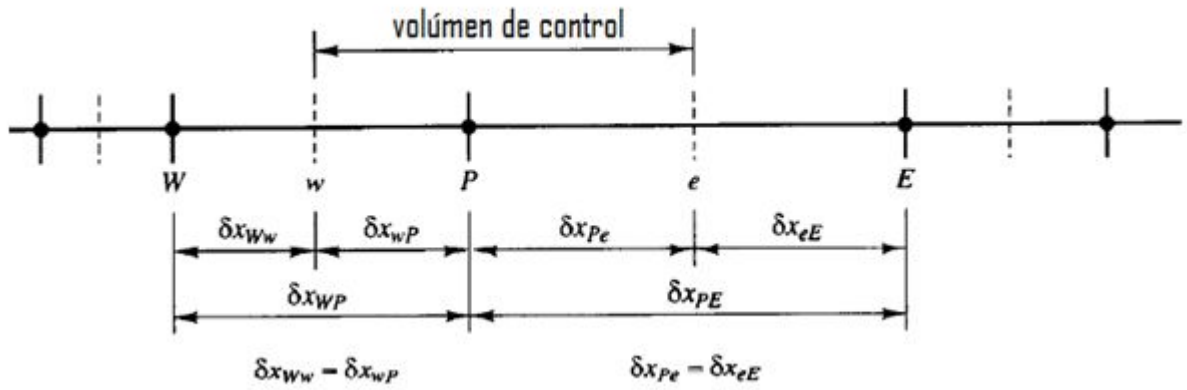
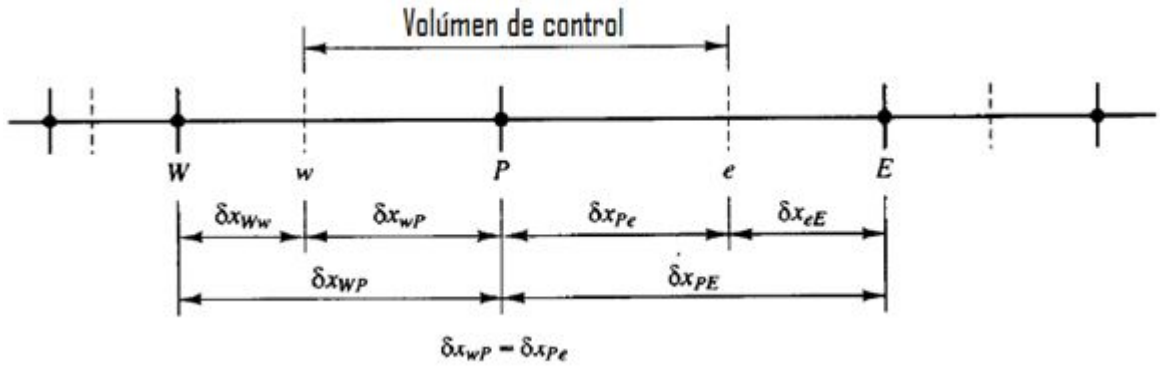


Figura C.12: Volumen de control Practica B.



En la práctica A una cara del volumen de control, e por ejemplo, está en la mitad entre los nodos P y E, la formula de la diferencia usada, para evaluar el gradiente es de segundo orden de aproximación. Una adicional ventaja de la práctica A es que el valor de la propiedad Γ_e y Γ_w etc. Puede ser fácilmente evaluada tomando los valores promedios. La desventaja de la práctica A es que el valor de la variable φ en P puede no necesariamente ser el valor más representativo para el interior del volumen de control pues P no está en el centro del volumen de control. En la práctica B el valor de φ en P es un buen valor representativo para el volumen de control, pues P yace en el centro del volumen de control, pero los esquemas de Discretización pierden precisión.

Paso 4: Solución de las Ecuaciones

Las ecuaciones de la forma (C.30) están en cada uno de los puntos nodales en orden para poder resolver un problema. Para un volumen de control que está adyacente al dominio de la frontera la Discretización general de la ecuación (C.30) es modificada para incorporar las condiciones de frontera. El resultado es un sistema de ecuaciones algebraicas lineales que se solucionan para obtener la distribución de la propiedad φ en los puntos nodales.

C.4. APROXIMACIÓN EXPLÍCITA E IMPLÍCITA

Son técnicas disponibles para la solución de problemas en CFD. En este punto, resulta muy apropiado introducir y definir estas dos aproximaciones generales, ellas representan una distinción fundamental entre varias técnicas numéricas.

Se usará como ecuación modelo para la definición de las aproximaciones explícita e implícita la ecuación de transmisión transitoria unidimensional.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (C.44)$$

$\frac{\partial T}{\partial t}$ Se representará con una diferencia Forward

$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ Se representará con una diferencia Centrada

Remplazando se tiene lo siguiente:

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (C.45)$$

la cual, con algunos arreglos, se puede escribir como:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) \quad (\text{C.46})$$

Ahora se examinarán las implicaciones de la Ecuación (C.44) y de su contraparte en diferencia finitas dada en la Ecuación (C.46). Se debe recalcar que la Ecuación (C.44), a partir de la discusión en la sección 2.3.2, es una ecuación diferencial parabólica, y como tal, produce soluciones de avance, como se describe en la sección. Para este caso la variable de avance es t . Para ser más específicos, considere las mallas en diferencias finitas esquematizada en la Figura (C.13). Asuma que se conoce el valor de T en todos los puntos de la malla en el tiempo n . Avance en el tiempo significa que se pueden calcular los valores T en todos los puntos de la malla en el tiempo $n + 1$ a partir de los valores conocidos en el tiempo n . Cuando el cálculo termina, para un tiempo $n + 1$, se conocen todos los valores de T . Siguiendo el mismo procedimiento se pueden calcular los valores de T para el tiempo $n + 2$ partiendo, en este caso, de los valores en el tiempo $n + 1$. Se puede observar en la Ecuación (C.46) que las propiedades en el tiempo n están escritas en el lado derecho, mientras que las propiedades en el tiempo $n + 1$ están escritas en el lado izquierdo. Es muy importante notar que solamente una incógnita aparece en la Ecuación (C.46), T_i^{n+1} . Por lo tanto la Ecuación (C.46) permite la solución inmediata de T_i^{n+1} a partir de las propiedades en el tiempo n . Como se observa, se tiene una ecuación con una incógnita, nada puede ser más fácil.

Por ejemplo, considere la malla en la Figura C.14, donde se han distribuido siete puntos a lo largo del eje x . Tomando el punto 2 como nodo central son todas conocidas. Tomando ahora el punto 3 como nodo central, la Ecuación (C.46) se escribe como:

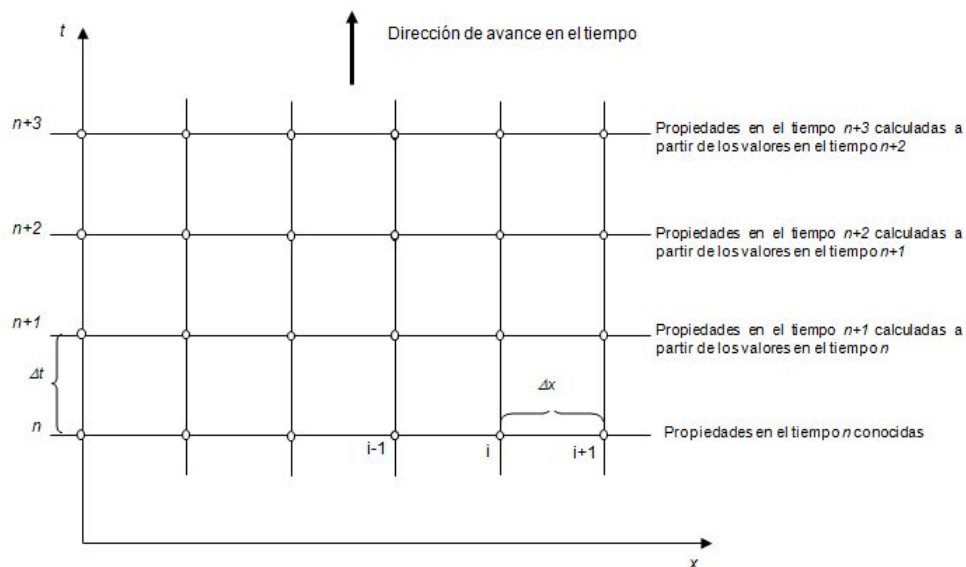
$$T_2^{n+1} = T_2^n + \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_3^n - 2T_2^n + T_1^n) \quad (\text{C.47})$$

La Ecuación (C.47) permite el cálculo directo de T_2^{n+1} puesto que las cantidades en el lado derecho de la ecuación son todas conocidas.

Tomando el nodo 3 como nodo central:

$$T_3^{n+1} = T_3^n + \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_4^n - 2T_3^n + T_2^n) \quad (\text{C.48})$$

Figura C.13: Ilustración de problemas de avance en el tiempo.



De igual forma, con la ecuación anterior es posible calcular directamente T_3^{n+1} puesto que las cantidades en el lado derecho de la ecuación son todas conocidas. Aplicando sucesivamente el procedimiento anterior para los puntos 4, 5 y 6, se obtienen secuencialmente los valores para T_4^{n+1} , T_5^{n+1} y T_6^{n+1} .

En el ejemplo anterior se ha presentado una aproximación o esquema EXPLÍCITO.

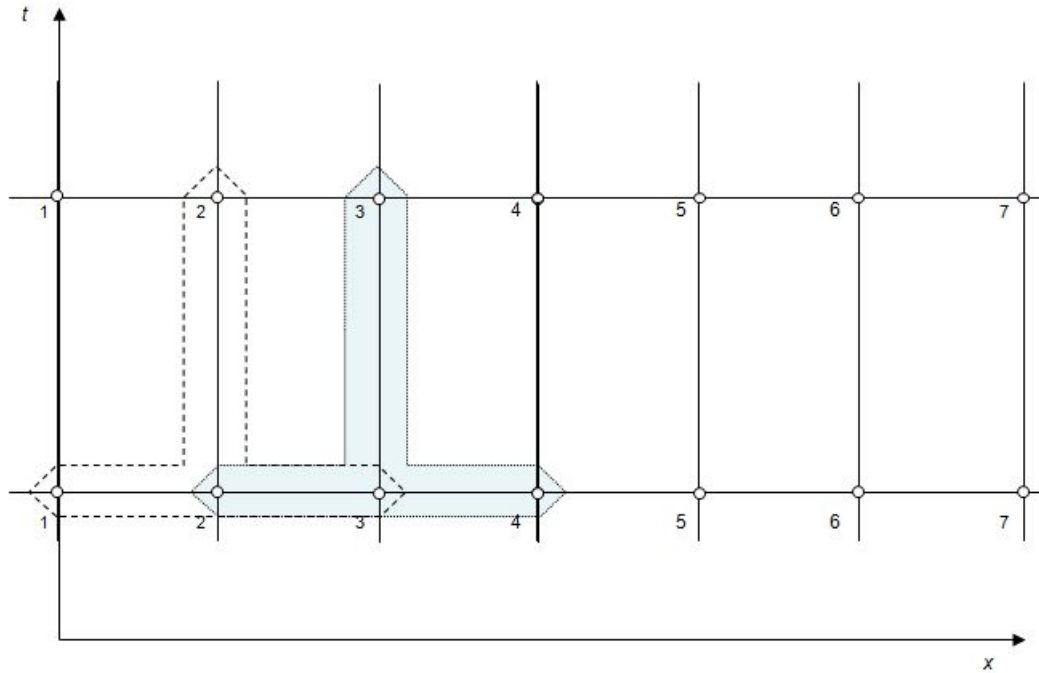
Definición: En una **aproximación explícita** cada ecuación en diferencias contiene solamente una incógnita y por lo tanto se puede resolver explícitamente de una manera directa.

Para explicar la técnica de la **aproximación implícita** nos basaremos en el siguiente ejemplo.

Vamos a escribir la ecuación de transmisión transitoria unidimensional de otra manera a como fue escrita en la forma explícita:

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{\frac{1}{2}(T_{i+1}^{n+1} + T_{i+1}^n) + \frac{1}{2}(-2T_i^{n+1} - 2T_i^n) + \frac{1}{2}(T_{i-1}^{n+1} + T_{i-1}^n)}{(\Delta x)^2} \quad (C.49)$$

Figura C.14: Molécula computacional en diferencias finitas para el esquema explícito.



En esta ecuación los términos en el lado derecho se aproximó escribiendo en términos de la propiedades promedio entre los tiempos n y $n + 1$.

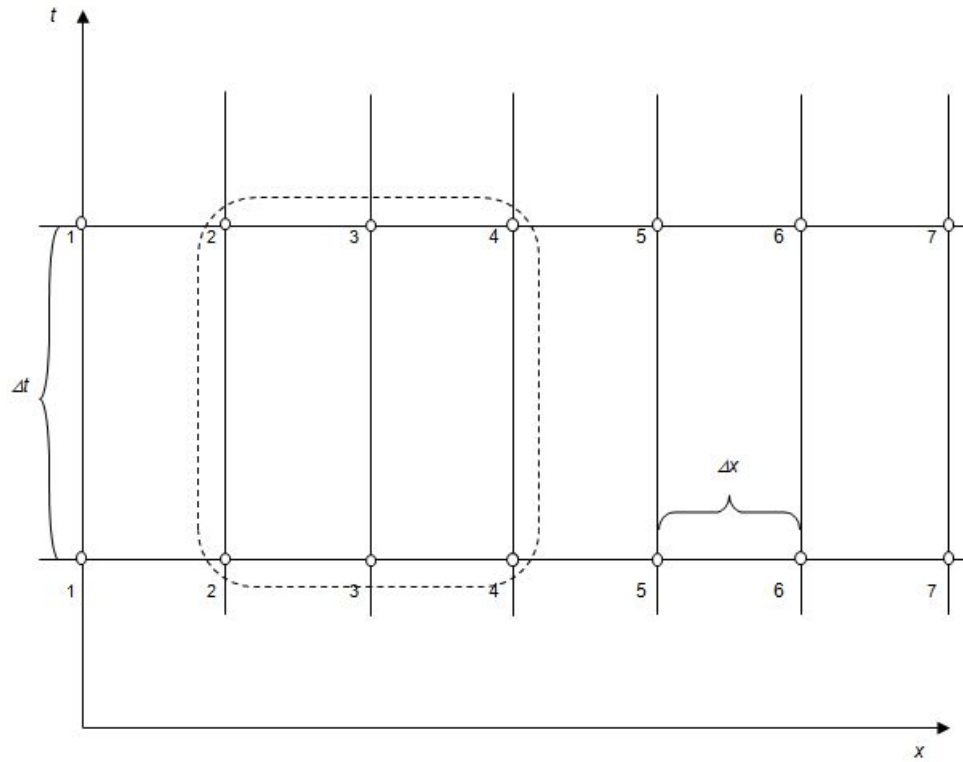
El tipo especial de diferenciación empleado en la Ecuación (C.49) se conoce como el esquema de *Crank-Nicolson*.

Ahora examinaremos más detenidamente la Ecuación (C.49). La incógnita T_i^{n+1} , ahora no está expresada solamente en términos de cantidades conocidas en el tiempo n , T_{i+1}^n , T_i^n y T_{i-1}^n , sino que también contiene términos en el tiempo $n + 1$, T_{i+1}^{n+1} , T_i^{n+1} y T_{i-1}^{n+1} . En otras palabras, la Ecuación (C.49) representa una ecuación con 3 incógnitas, T_{i+1}^{n+1} , T_i^{n+1} y T_{i-1}^{n+1} . Es decir, la Ecuación (C.49) aplicada a un único nodo i no es la única que se necesita para encontrar la solución para T_i^{n+1} para todos los nodos i se resuelven simultáneamente.

Definición: una **aproximación implícita** es una donde el valor de las incógnitas se debe obtener mediante una solución simultánea de las diferentes ecuaciones aplicadas a todos los puntos de la malla dispuestos en un tiempo t .

Por ahora resulta fácil intuir que el esquema implícito involucra un conjunto de cálculos más complejos que el esquema explícito. En contraste a las simple molécula computa-

Figura C.15: Molécula computacional en diferencias finitas para el esquema de Crank-Nicolson.



cional para el esquema explícito mostrado en la Figura (C.14), en la Figura (C.15) se muestra la molécula computacional involucrada en la Ecuación (C.49), delineando claramente las tres incógnitas en el tiempo $n + 1$.

¿Qué pasa cuando la ecuación que identifica el fenómeno físico es no lineal?. Para la forma explícita la ecuación queda lineal por tanto la solución es fácil. Para la forma implícita la ecuación discretizadas resultante es una ecuación algebraica no lineal, para este caso la solución implícita demanda la solución simultanea de una gran sistema de ecuaciones no lineales que resulta ser una tarea aún más difícil. Una forma de evadir este problema, es linealizar las ecuaciones discretizadas de forma aproximada.

Con la complejidad de la aproximación implícita respecto de la explícita en mente, la pregunta inmediata es: ¿Por qué trabajar con la aproximación implícita? ¿Por qué no usar siempre una aproximación explícita? Desafortunadamente, la vida no es tan

fácil. Observe que los incrementos para Δx y Δt aparecen en todas las ecuaciones discretizadas presentadas en la sección. Para el esquema explícito, una vez que se ha elegido un Δx , Δt no es una variable independiente de libre elección; en lugar de ello, Δt está restringido a ser menor o igual a cierto valor prescrito por un criterio de estabilidad. Si el Δt es menor o igual que el límite impuesto por el criterio de estabilidad, el procedimiento de avance en el tiempo será rápidamente inestable, y el programa de computador se desbordará rápidamente debido a que en algún cálculo los números pueden ser infinitos o una raíz cuadrada de un número negativo. En muchos casos, Δt debe ser un valor muy pequeño para mantener la estabilidad; esto puede resultar en grandes tiempos de cómputo. Por otro lado, no existen tales restricciones de estabilidad para aproximaciones implícitas. Para los métodos implícitos, la estabilidad se mantiene aún para grandes valores de Δt que los que encuentran en el método explícito correspondiente; por cierto, algunos métodos implícitos son incondicionalmente estables, significando que para cualquier Δt , sin importar cual grande sea, conducirá a una solución estable.

A continuación se relacionan las ventajas y desventajas de las aproximaciones implícitas y explícitas:

Aproximación explícita

Ventaja: Resulta un programa simple de escribir e inicializar.

Desventaja: Existe una relación entre Δt y Δx que debe ser menor que un límite impuesto para garantizar la estabilidad. En algunos casos, Δt debe ser muy pequeño para mantener la estabilidad; esto resulta en un gran tiempo de cálculo para un intervalo de tiempo t .

Aproximación implícita

Ventaja: La estabilidad se mantiene aún para valores muy grandes de Δt , y de aquí, se necesitan considerablemente menos pasos de tiempo para realizar los cálculos en un intervalo de tiempo t . Esto resulta en un menor tiempo de cálculo de computador.

Desventaja:

- Resulta un programa más complicado de escribir e inicializar.

- Se requieren usualmente grandes manipulaciones de matrices para cada paso de tiempo, el tiempo de computador por paso de tiempo es mucho más grande que en la aproximación explícita.
- Si se toma un Δt muy grande, se tiene un gran error de truncamiento y no se obtienen valores exactos de la solución transitoria.

C.5. ERRORES Y ANÁLISIS DE ESTABILIDAD

En secciones anteriores se han logrado mencionar algunos aspectos y algunas características relacionadas con la estabilidad de las soluciones numéricas cuando se emplean métodos explícitos. De tal forma se mencionó e indicó que tales métodos son inestables si el incremento en la dirección de avance(Δt) excede algún valor preestablecido. La prescripción para este valor máximo deduce, en principio, a partir de un análisis de estabilidad formal de las ecuaciones del movimiento en su forma discretizada. Por ejemplo, no existe un análisis exacto de estabilidad de la representación diferencial de las ecuaciones de Euler o Navier-Stokes. Sin embargo, existen aproximaciones simplificadas a modelos más simples que proporcionan una guía razonable. Un análisis riguroso de estabilidad de los métodos numéricos es un atarea de la matemática aplicada, y este tema está ciertamente fuera de alcance de esta investigación. Sin embargo, es importante para quien trabaja en todo lo relacionado con dinámica de fluidos computacional tener algún criterio sobre la naturaleza del análisis de estabilidad y de los resultados obtenidos.

La ecuación seleccionada para el análisis de estabilidad, es la ecuación unidimensional de conducción de calor.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Y para la representación discretizada de esta ecuación se elige nuevamente la forma explícita dada por la ecuación.

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \frac{\alpha(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)}{(\Delta x)^2}$$

¿Que es estabilidad? ¿Qué es lo que hace que el calculo sea inestable?

Las respuestas son, en mayor parte, dependientes del concepto de error numérico que se genera en el transcurso de un calculo determinado y, más a un, de la manera en que estos errores se propagan de un paso de avance a otro. Hablando más concretamente, si

un error numérico se amplifica al pasar de un paso a otro, el cálculo llegará a un punto de inestabilidad; Si el error no crece, especialmente si disminuye de un paso a otro, el cálculo tendrá un comportamiento estable. Por lo tanto, un análisis de estabilidad debe estar precedido de una discusión sobre errores numéricos.

Considerando una ecuación diferencial parcial, tal como , por ejemplo, la ecuación unidimensional de conducción de calor. La solución numérica está influenciada por dos tipos de errores:

- **Error de discretización:** La diferencia entre la solución analítica exacta de la ecuación diferencial parcial y la solución discretizada exacta, el error de discretización es simplemente el error de truncamiento para la ecuación discretizada mas cualquier error introducido por el tratamiento numérico de la condiciones de frontera.
- **Errores de redondeo:** El error de redondeo es el error numérico introducido después de un numero repetido de cálculos en el que el computador constantemente está redondeando los números a una cifra significativa. En algunos cálculos, la magnitud del error de redondeo es proporcional al numero de puntos en el dominio del problema. En estos casos, el refinado de la malla disminuye el error de truncamiento pero incrementa el error de redondeo.

Si se define,

A= Solución analítica de la ecuación diferencial parcial.

D= Solución exacta discretizada.

N= Solución numérica real obtenida a partir de un computador con una exactitud finita.

Entonces,

Error de discretización = A - D

Error de redondeo = ϵ = N - D

De las ecuaciones representadas anteriormente, podemos obtener a partir de estas la siguiente expresión:

$$N = D + \epsilon$$

Donde, ϵ es el error de redondeo, el cual para el resto de la discusión, por brevedad, se llamará simplemente error. La solución numérica N debe satisfacer la ecuación discretizada. Lo anterior se debe a que el computador se programa para resolver la ecuación discretizada, a pesar que la respuesta obtenida resulte con un error implícito.

$$\frac{D_i^{n+1} + \epsilon_i^{i+1} - D_i^n - \epsilon_i^n}{\alpha \Delta t} = \frac{D_{i+1}^n + \epsilon_{i+1}^n - 2D_i^n - 2\epsilon_i^n + D_{i-1}^n + \epsilon_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

Por definición D es la solución exacta de la ecuación discretizada; por lo tanto, satisface exactamente la ecuación discretizada. Por lo tanto,

$$\frac{D_i^{n+1} - D_i^n}{\alpha \Delta t} = \frac{D_{i+1}^n - 2D_i^n + D_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

resolviendo las dos ecuaciones anteriores, aplicando los respectivos cálculos matemáticos obtenemos de esta manera la siguiente ecuación:

$$\frac{\epsilon_i^{n+1} - \epsilon_i^n}{\alpha \Delta t} = \frac{\epsilon_{i+1}^n - 2\epsilon_i^n + \epsilon_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

A partir de esta ecuación, se puede ver que el error ϵ también satisface la ecuación discretizada.

Ahora se considerarán los aspectos de la estabilidad de la ecuación discretizada. Si los errores ϵ_i están realmente presente en alguna etapa de la solución de esta ecuación (siempre estarán en cualquier solución real de computador), entonces la solución será estable si el error ϵ_i se reduce, o al menos permanece igual, cuando la solución progresa del paso n al paso $n + 1$; por otro lado, si ϵ_i es más grande durante la progresión de la solución del paso n al $n + 1$, la solución es inestable. Entonces para que la solución sea estable se requiere que.

$$\left| \frac{\epsilon_i^{n+1}}{\epsilon_i^n} \right| \leq 1$$

El error ϵ se puede calcular a partir de la utilización de las series truncadas de Fourier, donde se asume que el error tiene una variación exponencial con el tiempo; es decir, el error tiende a aumentar o a disminuir con el tiempo. El error se puede calcular por:

$$\epsilon(x, t) = \sum_{m=1}^{N/2} e^{at} e^{ik_m x}$$

donde, k_m es un número de onda; a es una constante (que puede tomar diferentes valores para diferentes ms); N es el número de puntos de la malla. La ecuación anterior representa una forma final para el cálculo de la variación del error de redondeo respecto del espacio y del tiempo.

Debido a que la ecuación discretizada original, es lineal y debido a que el error de redondeo satisface la misma ecuación discretizada, entonces cuando se sustituye la Ecuación anterior en la Ecuación del error de redondeo, el comportamiento de cada término de la serie es el mismo que el de la serie en sí misma. Entonces, si se trabaja con un sólo término de la serie,

$$\epsilon_m(x, t) = e^{at} e^{ik_m x}$$

Las características de estabilidad se puede estudiar usando justo esta forma para ϵ sin perder la generalidad. Ahora se procederá a encontrar cómo ϵ varía con los pasos de tiempo y por lo tanto se encontrarán qué condiciones se necesitan para Δt de manera que se satisfaga la ecuación de redondeo que también satisface la ecuación discretizada. Para empezar, se sustituirá la ecuación anterior en la ecuación del error de redondeo.

$$\frac{e^{a(t+\Delta t)} e^{ik_m x} - e^{at} e^{ik_m x}}{\alpha \Delta t} = \frac{e^{at} e^{ik_m(x+\Delta x)} - 2e^{at} e^{ik_m x} + e^{at} e^{ik_m(x-\Delta x)}}{(\Delta t)^2}$$

Dividiendo todo por el factor $e^{at} e^{ik_m x}$, tenemos que:

$$\frac{e^{a\Delta t}}{\alpha \Delta t} = \frac{e^{ik_m \Delta x} - 2 + e^{-ik_m \Delta x}}{(\Delta t)^2}$$

Luego despejando el término $e^{a\Delta t}$

$$e^{a\Delta t} = 1 + \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2} (e^{ik_m \Delta x} + e^{-ik_m \Delta x} - 2)$$

Aplicando la siguiente identidad trigonométrica,

$$\cosh(K_m \Delta x) = \frac{e^{ik_m \Delta x} + e^{-ik_m \Delta x}}{2}$$

La ecuación obtenida será entonces,

$$e^{at} = 1 + \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2} [\cosh(k_m \Delta x) - 1]$$

De esta manera aplicando otra identidad trigonométrica

$$\sinh^2 \frac{k_m \Delta x}{2} = \frac{1 - \cosh(k_m \Delta x)}{2}$$

Finalmente tenemos que,

$$e^{a\Delta t} = 1 - \frac{4\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2} \sinh^2 \frac{k_m \Delta x}{2}$$

a partir de la ecuación anterior se tiene como resultado la siguiente expresión,

$$\frac{\epsilon_i^{n+1}}{\epsilon_i^n} = \frac{e^{a(t+\Delta t)} e^{ik_m x}}{e^{at} e^{ik_m x}} = e^{a\Delta t}$$

Combinando las dos ecuaciones anteriores con la condición para que una solución sea estable $\left| \frac{\epsilon_i^{n+1}}{\epsilon_i^n} \right| \leq 1$, tenemos

$$\left| \frac{\epsilon_i^{n+1}}{\epsilon_i^n} \right| = |e^{a\Delta t}| = \left| 1 - \frac{4\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2} \sinh^2 \frac{k_m\Delta x}{2} \right| \leq 1$$

Si se desea obtener una solución estable, tal como lo establece los requerimientos se debe satisfacer la ecuación anterior. Tomando el siguiente factor que se conoce como factor de amplificación y denotado por la letra G.

$$\left| 1 - \frac{4\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2} \sinh^2 \frac{k_m\Delta x}{2} \right| = G$$

Este factor G, tiene dos posibles situaciones que se deben cumplir simultaneamente, una de ella es cuando $G \leq 1$ y la otra cuando $G \geq 1$, llegando a una conclusión final la cual debe cumplirse para que la ecuación discretizada sea estable,

$$\frac{\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}$$

Claramente, para un Δx , el valor permitido de Δt debe ser lo suficientemente pequeño para satisfacer la Ecuación. He aquí el por que de las limitaciones de introducir un esquema explícito en una ecuación discretizada. Mientras que $\alpha\Delta t/(\Delta x)^2 \leq 1/2$ el error no aumentará para pasos subsecuentes en el tiempo t , y la solución numérica permanecerá estable. Por otro lado, si $\alpha\Delta t/(\Delta x)^2 > 1/2$, el error aumentará progresivamente llegando a ser cada vez más grande y causando que la solución numérica desborde la capacidad del computador.

C.6. PROPIEDADES NUMÉRICAS DE LOS MÉTODOS DE SOLUCIÓN

Las ecuaciones discretizadas y su solución mediante métodos numéricos deben asegurar la precisión y exactitud con el problema físico descrito. La exactitud depende de la consistencia, estabilidad y convergencia.

C.6.1. Consistencia

La consistencia se relaciona con qué tanto, la ecuación discretizada se aproxima a la ecuación diferencial parcial. La diferencia entre la ecuación discretizada y la ecuación diferencial parcial es el error de truncamiento. Se dice entonces que la ecuación discretizada es consistente si:

$$\lim_{\text{malla} \rightarrow 0} (EDP - ED) = \lim_{\text{malla} \rightarrow 0} (ET) = 0 \quad (\text{C.50})$$

Este debería ser siempre el caso de manera que el error de truncamiento ET desapareciera cuando la malla se refine; aunque para ecuaciones donde el error de truncamiento es de la forma $0(\Delta t/\Delta x)$, el refinamiento de la malla debe hacerse con cuidado.

C.6.2. Estabilidad

Un esquema numérico usado para la solución de una ecuación discretizada es estable si el error permanece acotado, es decir si al pasar de una iteración a otra o de un tiempo a otro en una solución de avance, este permanece constante o decrece.

C.6.3. Convergencia

Un esquema es convergente cuando su solución se aproxima a la solución analítica en derivadas parciales original, cuando el tamaño de la malla se refina.

C.6.4. Conservación

Debido a que las ecuaciones discretizadas se obtiene a partir de leyes de conservación, el esquema numérico deberá , tanto en un elemento local como a nivel global, cumplir con tales leyes. Si se garantiza una conservación de las ecuaciones y se usa el método de los elementos finitos , por ejemplo, la conservación se asegura para cada volumen individual y para todo el dominio.

Esta es una propiedad importante del método de solución, pues impone una restricción al error. Si la masa, la cantidad de movimiento y la energía no se conservan, el error puede solamente distribuir impropriamente estas cantidades a través de la solución.

C.6.5. Solución acotada

La solución obtenida debe estar entre unos límites. Esto se remite a la característica de estabilidad en la cual ciertas cantidades deben permanecer entre los límites de sus nodos vecinos después de ciertas iteraciones para que el error no crezca, o cantidades como la densidad, energía cinética y turbulencia deben ser positivas. Todos los esquemas de orden superior producen soluciones no acotadas, por lo que se debe asegurar la convergencia en estos esquemas. Una condición para que un esquema de solución converja fue dada por Scarborough, quien demostró la convergencia en términos de los valores de los coeficientes de las ecuaciones discretizadas.

$$\frac{\sum |a_{nb}|}{|a'_p|} = \begin{cases} \leq & 1 \text{ en todos los nodos} \\ \leq & 1 \text{ en al menos un nodo} \end{cases} \quad (\text{C.51})$$

Donde el término en el numerador es la sumatoria de los coeficientes en todos los nodos vecinos y el término en el denominador es la diferencia entre el coeficiente del nodo en estudio y el término fuente en ese nodo.

C.6.6. Posibilidad de llevarlo a cabo

Muchos fenómenos son muy complejos para tratarlos directamente. En este caso se debe diseñar una estrategia que garantice soluciones físicamente reales. Los modelos que no son realizables pueden resultar en soluciones que se salen de la realidad física u ocasionan métodos numéricos divergentes.

C.6.7. Exactitud

Las soluciones obtenidas mediante métodos numéricos son solo aproximaciones. Además de los de programación e introducción de las condiciones de frontera existen tres tipos de errores:

- Error de modelado: es la diferencia entre la solución exacta al modelo matemático y el flujo actual. Estos errores dependen de las consideraciones que se hayan tomado al derivar las ecuaciones de transporte.
- Error de discretización: Es la diferencia entre la solución exacta de las ecuaciones de conservación y la solución exacta de los sistemas de ecuaciones algebraicas.
- Error iterativo: es la diferencia entre la solución iterativa y la exacta del sistema de ecuaciones algebraicas.

Apéndice D

SOLUCIÓN DE LA ECUACIONES DISCRETIZADAS

En las secciones anteriores se discutieron métodos para discretizar las ecuaciones de flujo. Ahora discutiremos los métodos para resolver los sistemas de ecuaciones discretizadas. El sistema de ecuaciones genérico es de la forma:

$$A[X] \times \{X\} = \{B\} \quad (D.1)$$

$\{X\} \rightarrow$ vector de valor nodal

$A[X] \rightarrow$ Matriz de coeficientes

$\{B\} \rightarrow$ terminos conocidos

Si $[A\{X\}]$ no depende de X , se obtiene un sistema de ecuaciones lineal. Existen dos formas para resolver sistemas de ecuaciones lineales:

- Métodos directos
- Métodos indirectos

D.1. MÉTODOS DIRECTOS

Los métodos más conocidos son: la regla de Cramer y la eliminación gaussiana. Discutiremos el método de la eliminación gaussiana, ya que el método de la regla de Cramer es una técnica que no es práctica para sistemas de más de tres ecuaciones, pues utiliza operaciones de determinantes y conforme aumenta el número de ecuaciones, se consume más tiempo evaluando los determinantes.

D.1.1. Eliminación de gauss

Esta técnica fue presentada por el matemático CARL FRIEDERICH GAUSS, pero se conocía anteriormente en un importante libro matemático chino titulado “jiuzhang

suanshu” (nueve capítulos del arte matemático). El objetivo es reducir el sistema a otro equivalente, que tenga las mismas soluciones y hacerlo más pequeño. Se divide en dos operaciones: la reducción y la sustitución regresiva.

Reducción

Consiste en la eliminación de los elementos de la matriz $[A\{X\}]$, transformando en cero los valores $a_{ij} = 0$ para todo $i > j$ ($i, j = 1, 2, 3, \dots, n$) es decir convertir $[A\{X\}]$ en una matriz triangular superior como se muestra en la ecuación (D.2).

$$[A] = \begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{nn} \end{matrix} \text{ donde } A[X] \text{ es una matriz de } nxn \quad (D.2)$$

Por consiguiente se eliminan sistemáticamente las variables $a_{ij} = 0$ para todo $i > j$ de las ecuaciones subsiguientes si:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \dots &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 \dots &= b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 \dots &= b_3 \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 \dots &= b_n \end{aligned} \quad (D.3)$$

El primer paso es eliminar X_1 de las ecuaciones subsiguientes a la primera, para esto:

- Tomamos el coeficiente a_{21} y lo dividimos por a_{11} .
- Multiplicamos a_{21}/a_{11} por la primera ecuación y restamos el resultado a la segunda ecuación.

Al hacer esto se modifican todos los coeficientes de la segunda ecuación y el segundo término del vector de términos independientes. En forma general, para eliminar X_1 de la ecuación i , dividimos a_{i1}/a_{11} , multiplicamos por la primera ecuación y restamos el resultado a la i -ésima ecuación. Al finalizar de eliminar X_1 de las ecuaciones subsiguientes a la primera, procedemos a eliminar X_2 de las ecuaciones subsiguientes a la segunda de la misma forma pero esta vez utilizando la segunda ecuación y el término de la diagonal correspondiente a esta, a_{22} .

Sustitución hacia atrás

El sistema de ecuaciones triangular superior resultante del proceso de eliminación se puede resolver de una forma más fácil. La última ecuación tiene solamente la incógnita

X_n y tiene solución inmediata.

$$x_i = \frac{b_i - \sum a_{ij}x_j}{a_{ii}} \quad (D.4)$$

PSEUDOCODIGO

Input

For k=1,2...n-1

For i=k+1...n

m=a_{ik}/a_{kk}

For j=k+1...n

a_{ij}= a_{ij}-m*a_{kj}

b_i=b_i-m*b_k

end for

end for

end for

For i= n-1...1

Sum=0

For j=i+1...n

Sum=sum+a_{ij} * x_j

end for

end for Output

Dificultades de la eliminación de gauss

Para un sistema de ecuaciones grande de $n \times n$, el número de operaciones requeridas para resolver el sistema de ecuaciones es de $n^3/3$. La mayor parte del trabajo ocurre en la fase de eliminación; por lo tanto el método de eliminación gaussiana posee complejidad computacional y resulta costoso. La división entre cero es otra dificultad que se puede presentar en el método, pero como se trabaja con matrices dispersas entonces esta cuestión no es importante para nuestro estudio. Finalmente, los errores de redondeo, debido a la ejecución de las operaciones, y el manejo limitado de cifras significativas en los computadores, conduce a resultados menos exactos.

D.1.2. Descomposición LU

Es una variación del método de eliminación de GAUSS. La ventaja es que el paso de la eliminación que en el método de GAUSS involucra la matriz de términos independientes, en el de descomposición LU solo involucra la matriz A. Aunque se adiciona otra

operación de reducción, es conveniente para sistemas que tienen la misma matriz de coeficientes y diferente vector de términos independientes. La eliminación de GAUSS consiste en dos pasos: eliminación hacia adelante y sustitución hacia atrás, de los cuales la eliminación representa la mayor parte del tiempo de cálculo. La descomposición LU parte las operaciones de eliminación entre la matriz A y el vector de términos independientes B, para evaluar a B de una forma diferente. La matriz U es la matriz triangular superior obtenida mediante la eliminación gaussiana, y la matriz L triangular inferior, se produce durante el proceso de eliminación de GAUSS de una forma especial. El método de descomposición LU demuestra:

$$[A] = [L] \times [U] \quad (D.5)$$

Para que la anterior proposición se cumpla, los elementos de la diagonal principal de L deben ser iguales a la unidad. Para un sistema de 3×3 por ejemplo:

$$[U] = \begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ f_{21} & a_{22} & a_{23} \\ f_{31} & f_{32} & a_{33} \end{matrix} \quad (D.6)$$

Los elementos f son los factores multiplicativos usados en el método de eliminación de GAUSS (a_{ji}/a_{ij})

$$[L] = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ f_{21} & 1 & 0 \\ f_{31} & f_{32} & 1 \end{matrix} \quad (D.7)$$

Luego la solución del sistema de ecuaciones se da en dos etapas:

$$\text{se define: } [U] \times \{X\} = \{D\} \quad (D.8)$$

$$[L] \times \{D\} = \{B\} \quad (D.9)$$

Se resuelve el sistema para la ecuación (D.9) por sustitución hacia adelante, se halla D y luego se reemplaza en la ecuación (D.8), posteriormente se realiza el procedimiento de sustitución hacia atrás, como en el método de GAUSS. La solución para la ecuación (D.9) es D:

$$d_i = b_i - \left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} b_j \right) \text{ para } i=1,2,3,\dots,n \quad (D.10)$$

Luego procedemos en la ecuación (D.8):

$$x_n = \frac{d_n}{a_{nn}} \quad (D.11)$$

$$x_i = \frac{d_i - \sum a_{ij}x_{ij}}{a_{jj}} \quad (\text{D.12})$$

```

PSEUDOCODIGO
Input
Subrutine descompose
For k=1,2,...n-1
For i=k+1,...n
  factor =
   $\frac{a_{ik}}{a_{kk}}$ 
  aik =factor
  For j= k+1,k+2...n
    aij= aij-factor*akj
  end for
END FOR
END FOR
END SUBROUTINE DESCOMPOSE
SUBROUTINE SUSTITUTE
FOR I=2,3...N
SUM=BI
FOR J= 1,2,3...I-1
SUM=SUM-AI,JBI
END FOR
BI=SUM
END FOR XN= BN/ AN

FOR I=N-1,N-2,...1
FOR J= I+1,I+2,...N
SUM=SUM+AI,J*XJ
END FOR
END FOR
END SUBROUTINE
SUBSTITUTE OUTPUT

```

D.2. ALGORITMO PARA MATRIZ TRI DIAGONAL

Cuando un gran sistema de ecuaciones tiene un patrón especial, tal como el patrón tri dimensional, resulta muy importante desarrollar un método para este patrón único. Existen una variedad de métodos directos de eliminación para resolver sistemas de ecuaciones lineales que tienen patrones especiales en los coeficientes de la matriz. Estos métodos son por lo general eficientes en el tiempo de cálculo y memoria de computador utilizada. Tales métodos deben ser considerados cuando los coeficientes de la matriz se ajustan al patrón requerido, y cuando el uso de la memoria de computador y/o el tiempo de ejecución es importante. Un algoritmo que merece especial atención es el algoritmo de Thomas (1949). Surgen, naturalmente, de acuerdo a la naturaleza del problema, grandes sistemas tri diagonales, especialmente en la solución numérica de ecuaciones diferenciales por métodos implícitos y para solución de ecuaciones diferenciales elípticas. Es por esto que el algoritmo de Thomas se puede encontrar en gran número de aplicaciones. Para deducir el algoritmo de Thomas, inicialmente se aplicará el procedimiento de eliminación de GAUSS a una matriz tri diagonal, [T], modificando el procedimiento para eliminar todos los cálculos innecesarios que involucran ceros. Considere la ecuación matricial:

$$[T] \{\varphi\} = \{C\} \quad (D.13)$$

Que representa un sistema de ecuaciones que tienen la forma tri diagonal:

$$\begin{array}{rcccc}
 \phi_1 & & & & = C_1 \\
 -\beta_2\phi_1 + D_2\phi_2 & & -\alpha_2\phi_3 & & = C_2 \\
 & -\beta_3\phi_2 & +D_3\phi_3 - \alpha_3\phi_4 & & = C_3 \\
 & & \beta_4\phi_3 + D_4\phi_4 & -\alpha_4\phi_5 & = C_4 \\
 & & \cdot & & \cdot \\
 & & & & \cdot \\
 & & & -\beta_n\phi_{n-1} + D_n\phi_n & -\alpha_n\phi_{n+1} = C_n \\
 & & & & \phi_{n+1} = C_{n+1}
 \end{array}$$

La forma general de cualquier ecuación simple es:

$$-\beta_j\varphi_{j-1} + D_j\varphi_j - \alpha_j\varphi_{j+1} = C_j \quad (D.14)$$

Que reescrita

$$\varphi_n = \frac{\alpha_n}{D_n} \varphi_{n+1} + \frac{\beta_n}{D_n} \varphi_{n-1} + \frac{C_n}{D_n} \quad (\text{D.15})$$

Debido a que todos los elementos de la columna 1 por debajo de la fila 2 son ceros, el único elemento a eliminar en la fila es β_2 , similarmente, solamente se debe eliminar el elemento β_3 en la columna 2 de la fila 3, el elemento β_4 en la columna 3 de la fila 4 y así sucesivamente. El elemento eliminado en sí mismo no se necesita calcular, solamente, los elementos en cada diagonal se afectan en el proceso de descomposición. La descomposición de la fila 2 hasta n se realiza como sigue:

$$K = 2 \text{ hasta } n$$

$$\beta_K = \beta_K / D_K$$

$$D_K = D_K - (\beta_K \alpha_{K-1})$$

La matriz tri diagonal [T] de nxn se puede almacenar en una matriz [A'] de nx3 dado que no se necesita almacenar los términos cero. La primera columna de la matriz [A'], los elementos corresponden a la matriz subdiagonal β_K una vez hecha la eliminación correspondiente. La segunda columna de la matriz [A'] corresponden a los elementos de la diagonal principal de acuerdo con la eliminación de arriba, y la tercera columna de la matriz [A'] corresponde a los elementos de la subdiagonal α_j hasta α_n

$$[A'] = \begin{bmatrix} 0 & D_1 & \alpha_1 \\ \beta_2 & D_2 & \alpha_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \beta_n & D_n & 0 \end{bmatrix}$$

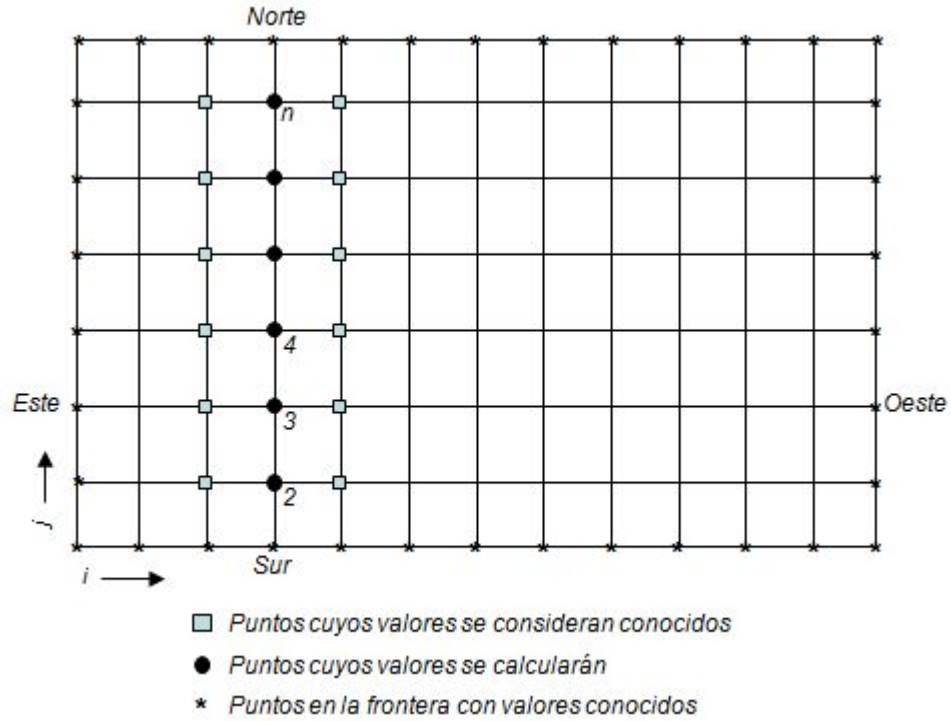
Los elementos del vector {C} también se cambian en un proceso de sustitución hacia adelante. El primer elemento C_1 permanece inalterado, del segundo en adelante cambian de la siguiente forma:

$$C_K = C_K - \beta_K C_{K-1} \quad (K = 2, 3, 4 \dots n)$$

Transformando la ecuación (2) por medio de una sustitución hacia atrás de la siguiente manera:

$$\varphi_n = C_n / D_n$$

Figura D.1: Malla Bidimensional.



$$\varphi_K = \frac{(C_K - \alpha_K \varphi_{K+1})}{D_K}$$

D.2.1. Aplicación de TDMA (Tri Diagonal Matrix Algorithm) en problemas bidimensionales

El TDMA puede ser aplicado iterativamente para solucionar un sistema de ecuaciones para problemas bidimensionales. Considerando la malla en la figura (D.1) y una discretización general Bi-dimensional para la ecuación de transformada de la forma:

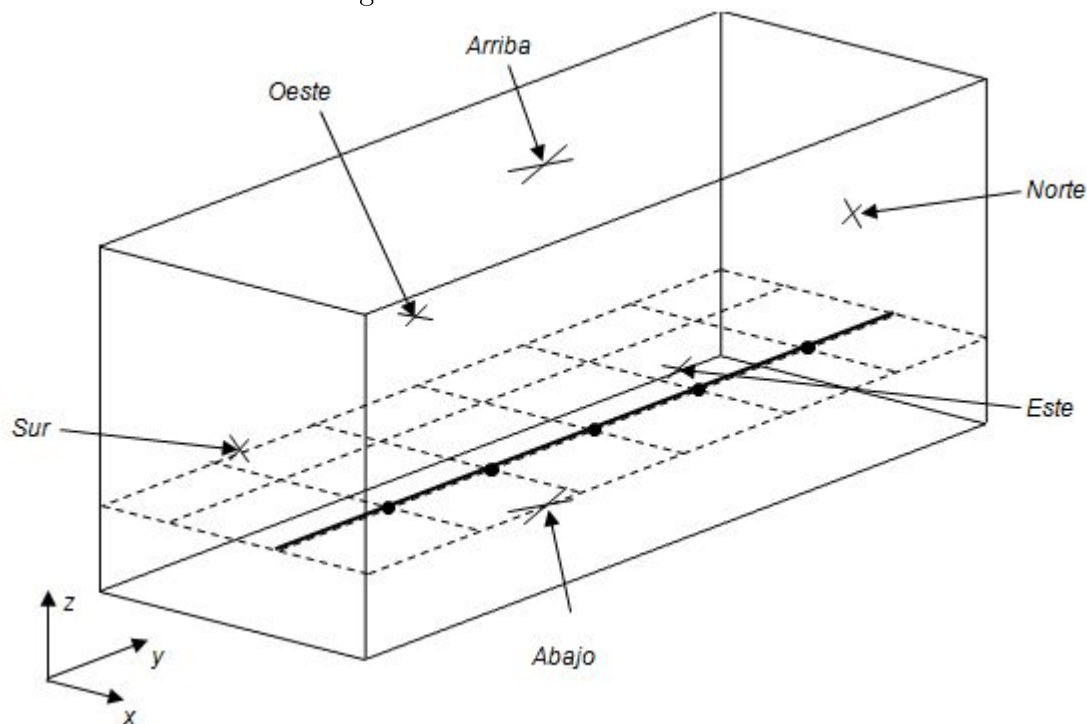
$$a_P \varphi_P = a_W \varphi_W + a_E \varphi_E + a_S \varphi_S + a_N \varphi_N + b$$

Para resolver, el sistema TDMA es aplicado a lo largo de una línea, por ejemplo la línea Norte-Sur. La ecuación discretizada reagrupando es:

$$a_P \varphi_P - a_S \varphi_S - a_N \varphi_N = a_W \varphi_W + a_E \varphi_E + b$$

El lado derecho de la ecuación (7.8) es asumido temporalmente conocido. La ecuación (7.8) es de la forma de la ecuación (7.2). Donde $\alpha_j \equiv a_N$, $\beta_j \equiv a_S$, $D_j \equiv a_P$ y $C_j \equiv a_W \varphi_W + a_E \varphi_E + b$. Ahora se puede solucionar a lo largo de la dirección N-

Figura D.2: Problema tridimensional.



Se calcula el valor de φ en los puntos de la línea escogida para valores $j=2, 3, 4 \dots n$, como muestra la figura (7.1). Así sucesivamente el cálculo es seguido a la próxima línea N-S. La secuencia en la cual las líneas son escogidas es conociendo la dirección de barrido. Si la dirección de barrido es de Oeste a Este (w-e) el valor de φ_W se conoce a partir de los cálculos de la línea anterior. Sin embargo, el valor de φ_E se desconoce, de manera que el cálculo se realiza de forma iterativa. En cada ciclo se toma φ_E como el valor en la iteración anterior o el valor que tenía en la iteración inicial. El cálculo línea a línea se repite tantas veces hasta que se alcance la convergencia.

D.2.2. Aplicación de TDMA a problemas en tres dimensiones

Para problemas en tres dimensiones, el método TDMA se aplica línea a línea sobre un plano seleccionado y, una vez terminado un plano, el cálculo se pasa al siguiente recorriendo todo el dominio plano por plano. Por ejemplo, para resolver a lo largo de una línea norte-sur en un plano $x - y$ en la figura (D.2), se tiene la ecuación de transporte discretizada:

$$-a_S \varphi_S^{n+1} + a_P \varphi_P^{n+1} - a_N \varphi_N^{n+1} = a_W \varphi_W^{n+1} + a_E \varphi_E^{n+1} + a_B \varphi_B^{n+1} + a_T \varphi_T^{n+1} + b \quad (D.16)$$

Los valores en W y E también como aquellos en B y T en el lado derecho de la ecuación anterior se consideran conocidos. Por medio de el TDMA se puede calcular los valores de φ a lo largo de una línea norte-sur seleccionada. El cálculo pasa a la siguiente línea y así seguidamente a través de todo el plano hasta que se calcules todos los valores en cada línea. Una vez que se ha completado un plano se pasa al siguiente plano.

En dos y tres dimensiones, regularmente, se puede acelerar la convergencia alternando la dirección de barrido de manera que la información en la frontera se transmitida al cálculo de una forma más efectiva. Para resolver a lo largo de una línea este-oeste en el caso tridimensional la ecuación se puede reescribir de la forma siguiente:

$$-a_W\varphi_W^{n+1} + a_P\varphi_P^{n+1} - a_E\varphi_E^{n+1} = a_S\varphi_S^{n+1} + a_N\varphi_N^{n+1} + a_B\varphi_B^{n+1} + a_T\varphi_T^{n+1} + b \quad (\text{D.17})$$

D.3. MÉTODOS ITERATIVOS

Se usa para ecuaciones lineales con sistema diagonal dominante. La idea básica de los métodos iterativos es asumir un vector solución inicial $\{x\}^{(0)}$. A partir de la solución inicial, se genera un vector solución mejorado basado en alguna estrategia para reducir la diferencia entre el vector de solución inicial y vector de solución actual $\{x\}$. Luego el procedimiento se repite hasta alcanzar la convergencia. El procedimiento converge si en cada iteración se produce una aproximación al vector solución que se aproxima, a su vez, a la solución exacta cuando el número de iteraciones se incrementa.

Los siguientes son lo métodos iterativos:

- Método iterativo de Jacobi.
- Método iterativo de Gauss-Seidel.
- Método de sobre-relajación sucesiva (SOR).
- Método de los gradientes conjugados.
- Gradiente Biconjugado.

Los métodos iterativos no convergen para todos los sistemas de ecuaciones, ni para todos los posibles distribuciones de un conjunto de ecuaciones particulares. El predominio diagonal es una condición suficiente para la convergencia de los métodos iterativos de Jacobi, Gauss-Seidel, y SOR, para cualquier vector solución inicial. Algunos sistemas que no son diagonalmente dominante se pueden reacomodar (por ejemplo

intercambiando filas) para hacerlos diagonalmente dominantes. Algunos sistemas que no son diagonalmente dominantes pueden converger para ciertos vectores solución iniciales, pero la convergencia no está asegurada. Los métodos iterativos no se deberán usar para sistemas de ecuaciones lineales que no se pueden llevar a un sistema diagonal dominante. El número de iteraciones requeridas para la convergencia depende de:

1. Del predominio diagonal de los coeficientes en la matriz. Si aumenta el predominio diagonal, el número de iteraciones para alcanzar la convergencia disminuye.
2. El método de iteración usado.
3. El vector de solución inicial.
4. El criterio de convergencia especificado.

D.3.1. Exactitud y convergencia de los métodos iterativos

En principio, cuando se resuelven por métodos directos, se puede obtener la solución exacta. Sin embargo, todos los cálculos reales se ejecutan con un número finito de precisión, de manera que los errores de redondeo corrompen la solución.

Los métodos iterativos son menos susceptibles a los errores de redondeo que los métodos de eliminación directa por tres razones:

- El sistema de ecuaciones es predominantemente diagonal.
- El sistema de ecuaciones es típicamente disperso.
- Cada iteración es independiente de los errores de redondeo de la iteración anterior.

Cuando se resuelve un sistema de ecuaciones por métodos iterativos, la solución exacta del sistema de ecuaciones se aproxima asintóticamente cuando el número de iteraciones aumenta. Cuando el número de iteraciones aumenta sin límite, la solución numérica conduce a la solución exacta dentro de los límites de redondeo de la máquina de cálculo. Tales soluciones se dicen correctas a la exactitud de la máquina.

Exactitud

Se refiere al número de términos significantes en los cálculos y se basa en 2 criterios:

$$\textit{Error absoluto} = \textit{valor aproximado} - \textit{valor exacto}$$

$$\text{Error relativo} = \frac{\text{Error absoluto}}{\text{valor exacto}}$$

El error relativo se define directamente como un porcentaje.

Como ejemplo: considere un cálculo iterativo para el cual se desea un error absoluto de $\pm 0,001$. Si la solución exacta es 100,000, entonces el valor aproximado será $100,000 \pm 0,001$, el cual tiene cinco dígitos significativos. Sin embargo, si la solución exacta es 0,001000, entonces el valor aproximado será $0,001000 \pm 0,001$ que no tiene dígitos significativos. Este ejemplo ilustra el peligro de usar el error absoluto como criterio de exactitud. Considere ahora un cálculo iterativo para el cual se desea un error relativo de $\pm 0,00001$. Si la solución exacta es 100,000, entonces el error absoluto será $100,000x(\pm 0,00001) = \pm 0,001$. Esto conduce a los cinco dígitos significativos en el valor aproximado, como en el caso anterior. Si la solución exacta es 0,001000, entonces el error absoluto será $0,001000x(\pm 0,00001) = \pm 0,00000001$. En este caso, se obtendrán cinco dígitos significativos en la solución aproximada. Como conclusión se puede decir con toda certeza que el criterio de error relativo conduce al mismo número de cifras significativas en el valor aproximado, independiente de la magnitud de la solución exacta.

Convergencia

Se refiere al punto en el proceso iterativo cuando se obtiene la exactitud deseada. la solución iterativa de un sistema de ecuaciones lineales, el error, $\Delta x_i = x_i^{(k+1)} - x_i^{exacta}$, se aproxima por $\Delta x_i = x_i^{(k+1)} - x_i^k$. El error también se puede especificar a partir de la evaluación de las magnitudes de los residuales R_i . Cuando se obtiene la respuesta exacta (exacta a la precisión de la computadora), todos los residuales son cero. En cada ciclo en el proceso iterativo, algunos de los residuales pueden ser cercanos a cero mientras que otros serán muy diferentes a cero. Por lo tanto, se debe tener especial cuidado para asegurar la exactitud deseada se alcance en el sistema de ecuaciones completo.

Si se define ε como la magnitud de la tolerancia de la convergencia, se pueden especificar diversos criterios de convergencia. Para un criterio absoluto, se pueden elegir las siguientes opciones:

Criterio absoluto: $|(\Delta x_i)_{max}| \leq \varepsilon$ $\sum_{i=1}^n |\Delta x_i| \leq \varepsilon$ o $[\sum_{i=1}^n (\Delta x_i)] \leq \varepsilon$

Criterio relativo: $\left| \frac{(\Delta x_i)_{max}}{x_i} \right| \leq \varepsilon$ $\sum_{i=1}^n \left| \frac{\Delta x_i}{x_i} \right| \leq \varepsilon$ o $\left[\sum_{i=1}^n \left(\frac{\Delta x_i}{x_i} \right)^2 \right] \leq \varepsilon$

D.3.2. Método iterativo de Jacobi

Transforma una matriz simétrica en una matriz diagonal al eliminar de forma sistemática los términos que están fuera de la diagonal.

Para resolver $[A] \{x\} = \{b\}$ con una aproximación inicial dada $x^{(0)}$, escribe en notación de índices:

$$\sum_{j=1}^n a_{i,j} x_j = b_i \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (D.18)$$

En la iteración de Jacobi, cada ecuación del sistema se resuelve para el componente del vector solución asociado con el elemento en la diagonal, es decir, $\{x_i\}$. Entonces,

$$x_i = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j - \sum_{j=i+1}^n a_{i,j} x_j \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (D.19)$$

Para realizar esta operación, se debe elegir un vector de solución inicial $\{x\}^{(0)}$. El superíndice entre paréntesis denota el número de la iteración, con cero significando el vector de solución inicial. Si se sustituye el vector de solución inicial en la Ecuación (D.19) se obtiene el primer vector solución mejorado de $\{x\}^{(0)}$. El procedimiento se repite hasta que se alcance el criterio de convergencia. El algoritmo general para la iteración (k) es:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{i,j} x_j^{(k)} \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (D.20)$$

Una forma equivalente de la Ecuación (D.20), pero más conveniente, se puede obtener sumando y restando $\{x_j\}^{(k)}$ al lado derecho de la Ecuación (D.20), obteniéndose

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=i}^n a_{i,j} x_j^{(k)} \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (D.21)$$

Algunas veces el método de Jacobi se conoce como el método de iteración simultánea debido a que todos los valores de x_i se iteran simultáneamente. Esto es, todos los valores de $x_i^{(k+1)}$ dependen solamente de los valores de $x_i^{(k)}$. El orden de procesamiento de las

ecuaciones es intrascendente.

PSEUDOCODIGO JACOBI

```
T: tamaño de la matriz
X[T]: vector solución
XOld[T]: vector solución en la iteración previa
A[T][T]: matrix
B[T]: vector de términos independientes
repetir
  for i=0 to T-1 do
    X[i] ← 0
    for j=0 to i-1 do
      X[i] ← X[i]+A[i][j]*XOld[j]
    end for
    for j=i+1 to T-1 do
      X[i] ← X[i]+A[i][j]*XOld[j]
    end for
  end for
  for i=0 to T-1 do
    XOld[i] ← (B[i]-X[i])/A[i][i]
  end for
hasta que el criterio sea alcanzado
```

D.3.3. Método iterativo de Gauss-Seidel

El método de Gauss-Seidel es similar al de Jacobi, excepto se usan los valores más inmediatos de x_i en todos los cálculos. Tan pronto como se obtengan los valores de x_i se usan.

El método de Gauss-Seidel se obtiene a partir de la Ecuación (D.20), por medio de usar los valores $x_j^{(k+1)}$ en la suma desde $j = 1$ a $i - 1$. De modo que,

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{i,j} x_j^{(k)} \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (\text{D.22})$$

La Ecuación (D.22) se puede escribir en términos de los residuales R_i agregando y restando $x_i^{(k)}$ en el lado derecho de la ecuación y agrupando, con lo cual se obtiene

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{R_i^{(k)}}{a_{i,i}} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (\text{D.23})$$

$$R_i^{(k)} = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=1}^n a_{i,j}x_j^{(k)} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (\text{D.24})$$

En ocasiones el método de Gauss-Seidel se conoce como el método de las iteraciones sucesivas debido a que se usan los valores más recientes en todos los cálculos. La iteración de Gauss-Seidel generalmente converge más rápido que la iteración de Jacobi.

PSEUDOCODIGO GAUSS-SEIDEL

```

T: tamaño de la matriz
X[T]: vector solución
XOld[T]: vector solución en la iteración previa
A[T][T]: matrix
B[T]: vector de términos independientes
V: variable intermedia
repetir
  for i=0 to T-1 do
    V ← 0
    for j=0 to i-1 do
      V ← V+A[i][j]*X[j]
    end for
    for j=i+1 to T-1 do
      V ← V+A[i][j]*XOld[j]
    end for
    X[i] ← (B[i]-V)/A[i][i]
  end for
  for i=0 to T-1 do
    XOld[i] ← X[i]
  end for
hasta que el criterio sea alcanzado

```

D.3.4. Método de sobre-relajación sucesiva

Se puede modificar el método de Gauss-Seidel para incluir la sobrerelajación multiplicando simplemente el residual $R_i^{(k)}$ en la Ecuación (D.23), por medio del factor de sobrerelajación.

El método de relajación de Southwell contiene dos procedimientos para acelerar la convergencia del esquema iterativo básico:

1. El orden de relajación se determina buscando el residual de mayor magnitud, $|R_i|_{max}$.
2. Después relajando la ecuación correspondiente calculando un nuevo valor de x_i . Como los otros residuales se relajan, los valores de los R_i dejan de ser cero. El procedimiento se aplica repetidamente hasta que todos los residuales satisfagan el criterio de convergencia.

El método de sobrerelajación sucesiva está dado por

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + w \frac{R_i^{(k)}}{a_{i,i}} x_j^{(k)} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (D.25)$$

$$R_i^{(k)} = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=1}^n a_{i,j} x_j^{(k)} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (D.26)$$

Donde:

$w = 1, 0$ Conduce a la ecuación de Gauss-Seidel.

$1, 0 < w < 2, 0$ El sistema de ecuaciones está sobrerelajado.

$w < 1, 0$ El sistema de ecuaciones está subrelajado.

$w > 2, 0$ El método iterativo diverge.

La subrelajación es apropiada cuando el algoritmo de Gauss-Seidel causa que el vector solución se salga y se mueva cada vez mas lejos de la solución exacta. Este comportamiento se asocia normalmente a la solución iterativa de sistemas de ecuaciones no lineales. El factor de relajación no cambia hasta el final de la iteración dado que este multiplica al residual R_i , el cual es cero cuando se alcanza la solución. la mayor dificultad con el método de la sobrerelajación es la determinación del mejor valor de

sobrerrelajación, w_{op} . Desafortunadamente, no existe una buena regla general para determinar el óptimo valor de la sobrerrelajación.

PSEUDOCODIGO SOBRE-RELAJACIÓN SUCESIVA

```
T: tamaño de la matriz
X[T]: vector solución
XOld[T]: vector solución en la iteración previa
A[T][T]: matrix
B[T]: vector de términos independientes
V: variable intermedia
Omega: Parametro del método
repetir
  for i=0 to T-1 do
    V ← 0
    for j=0 to i-1 do
      V ← V+A[i][j]*X[j]
    end for
    for j=i+1 to T-1 do
      V ← V+A[i][j]*XOld[j]
    end for
    V ← (B[i]-V)/A[i][i]
    X[i] ← XOld[i]+ Omega*(V-XOld[i])
  end for
  for i=0 to T-1 do
    XOld[i] ← X[i]
  end for
hasta que el criterio sea alcanzado
```

D.3.5. Método de los gradientes conjugados

Es un método iterativo que sirve para resolver ecuaciones no lineales. Estos métodos empiezan por convertir el sistema de ecuaciones original en un problema de minimización. La solución de ecuaciones no lineales se puede agrupar en dos grandes categorías: Métodos derivados del método de Newton-Raphson (NR) y métodos globales. El método de NR puede converger rápidamente pero no garantizan que encontrarán la solución final

(si existe), en cambio con el método global sucede lo contrario, garantizan que encontrarán la solución final (si existe) pero no convergen muy rápidamente.

Si el sistema de ecuaciones a resolver está dado por $[A] \{\phi\} = \{Q\}$ y que la matriz $[A]$ es simétrica y su valor propio es positivo; entonces la matriz se define como una matriz positiva. Para matrices positivas, la solución del sistema de ecuaciones se puede seguir por medio de la siguiente secuencia:

- Inicializar las siguientes cantidades: $k = 0$, $\{\phi\}^0 = \{\phi_{ini}\}$, $\{\rho\}^0 = Q - [A] \{\phi_{ini}\}$, $\{p\}^0 = 0$, $s_0 = 10^{30}$.
- Avanzar el contador: $k = k + 1$
- Resolver el sistema: $[M] \{z\}^k = \{\rho\}^{k-1}$
- Calcular: $s^k = \{\rho\}^{k-1} * \{z\}^k$
 $\beta^k = s^k / s^{k-1}$
 $\{p\}^k = \{z\}^k + \beta \{p\}^{k-1}$
 $\alpha^k = s^k / (\{p\}^k * [A] \{p\}^k)$
 $\{\phi\}^k = \{\phi\}^{k-1} + \alpha^k \{p\}^k$
 $\{\rho\}^k = \{\rho\}^{k-1} - \alpha^k [A] \{p\}^k$
- Repetir hasta alcanzar la convergencia.

En el algoritmo anterior, $\{\rho\}^k$ es el residual en la k-ésima iteración, $\{\rho\}^k$ es el k-ésimo vector dirección, $\{z\}^k$ es un vector auxiliar y α^k y β^k son parámetros necesarios para construir la nueva solución, el nuevo residual y la nueva dirección.

PSEUDOCODIGO GRADIENTE CONJUGADO

```

T: tamaño de la matriz
X[T]: vector solución
A[T][T]: matrix
B[T]: vector de términos independientes
R[T]: vector residual
P[T]: vector de búsqueda de dirección
Q[T]: vector ortogonal a la búsqueda de dirección

```

```

Alpha, Beta, Rho, RhoOld: variables escalares
R ← B-A×X
i ← 1
repetir
  Rho ← (R,R)
  if i=1 then
    P ← R
  else
    Beta ← Rho/RhoOld
    P ← R+Beta×P
  end if
  Q ← A×P
  Alpha ← Rho/(P,Q)
  X ← X+Alpha×P
  R ← R-Alpha×Q
  RhoOld ← Rho
  i ← i+1
hasta que el criterio sea alcanzado

```

D.3.6. Gradiente Biconjugado

Es un método iterativo que se usa para sistemas de ecuaciones que no son necesariamente simétricas, es necesario convertir el sistema asimétrico en uno simétrico. Existen dos vías de hacer esto de las cuales la mostrada es la más simple. Considere el siguiente sistema:

$$\begin{bmatrix} 0 & [A] \\ [A]^T & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{\psi\} \\ \{\phi\} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \{Q\} \\ \{0\} \end{Bmatrix} \quad (\text{D.27})$$

El sistema propuesto se puede descomponer en dos subsistemas. El primero es el sistema original; el segundo involucra la transpuesta de la matriz y es intrascendente. Aplicando el método de los gradientes biconjugados tenemos la siguiente secuencia:

- Inicializar las siguientes cantidades: $k = 0$, $\{\phi\}^0 = \{\phi_{ini}\}$, $\{\rho\}^0 = Q - [A] \{\phi_{ini}\}$, $\{\bar{\rho}\}^0 = Q - [A] \{\phi_{ini}\}$, $\{p\}^0 = \{\bar{\rho}\}^0$, $s_0 = 10^{30}$.
- Avanzar el contador: $k = k + 1$
- Resolver el sistema: $[M] \{z\}^k = \{\rho\}^{k-1}$, $[M]^T \{\bar{z}\}^k = \{\bar{\rho}\}^{k-1}$

- Calcular: $s^k = \{\bar{\rho}\}^{k-1} * \{z\}^k$
 $\beta^k = s^k / s^{k-1}$
 $\{p\}^k = \{z\}^k + \beta^k \{p\}^{k-1}$
 $\{\bar{p}\}^k = \{\bar{z}\}^k + \beta^k \{\bar{p}\}^{k-1}$
 $\alpha^k = s^k / (\{\bar{p}\}^k * [A] \{p\}^k)$
 $\{\phi\}^k = \{\phi\}^{k-1} + \alpha^k \{p\}^k$
 $\{\rho\}^k = \{\rho\}^{k-1} - \alpha^k [A] \{p\}^k$
 $\{\bar{\rho}\}^k = \{\bar{\rho}\}^{k-1} - \alpha^k [A]^T \{\bar{p}\}^k$
- Repetir hasta alcanzar la convergencia.

Requiere casi exactamente el doble de esfuerzo por iteración que el algoritmo de gradiente conjugado estándar. No se ha usado en gran medida en aplicaciones CFD pero es un algoritmo muy robusto (se puede aplica a un gran número de problemas sin dificultad).

PSEUDOCODIGO GRADIENTE BICONJUGADO

```

T: tamaño de la matriz
X[T]: vector solución
A[T][T]: matrix
R[T]: vector residual
RTilde[T]: vector residual secundario
P[T]: vector de búsqueda de dirección
PTilde[Size]: vector de búsqueda de dirección secundario
Q[T]: vector ortogonal a la búsqueda de dirección
QTilde[Size]: vector ortogonal a la búsqueda de dirección secundario
Alpha, Beta, Rho, RhoOld: variables escalares
R ← B - A × X
Sleccionar RTilde, por ejemplo RTilde = R
i ← 1
repetir
  Rho ← (R,RTilde)
  if Rho = 0 then
    método falla
  end if

```

```

if i=1 then
  P ← R
  PTilde ← RTilde
else
  Beta ← Rho/RhoOld
  P ← R + Beta × P
  PTilde ← RTilde + Beta × PTilde
end if
Q ← A × P
QTilde ← AT × PTilde
Alpha ← Rho/(PTilde,Q)
X ← X + Alpha × P
R ← R - Alpha × Q
RTilde ← RTilde - Alpha × QTilde
RhoOld ← Rho
i ← i + 1
hasta que el criterio sea alcanzado

```

D.4. SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES

Existen varias técnicas utilizadas para resolver sistemas de ecuaciones no lineales: Los métodos semejantes al método de Newton-Raphson y los métodos globales: El método de Newton-Raphson es el más rápido cuando se tiene un buen estimativo de la solución pero no se asegura que el método no diverge. Con frecuencia se usan combinaciones de los dos métodos.

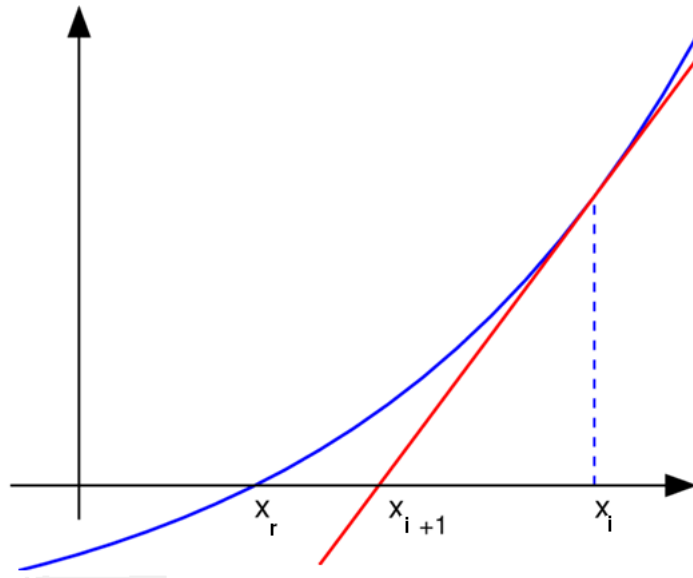
D.4.1. Método de Newton-Raphson

Este método, el cual es un método iterativo, es uno de los más usados y efectivos. A diferencia de los métodos anteriores, el método de Newton-Raphson no trabaja sobre un intervalo sino que basa su fórmula en un proceso iterativo.

Supongamos que tenemos la aproximación x_i a la raíz x_r de $f(x)$,

Trazamos la recta tangente a la curva en el punto $[x_i, f(x)]$; ésta cruza al eje x en un punto x_{i+1} que será nuestra siguiente aproximación a la raíz x_r .

Figura D.3: Tangente a la Curva.



Para calcular el punto x_{i+1} , calculamos primero la ecuación de la recta tangente. Sabemos que tiene pendiente

$$m = f'(x_i)$$

Y por lo tanto la ecuación de la recta tangente es:

$$y - f(x_i) = f'(x_i)(x - x_i)$$

Hacemos $y = 0$

$$-f(x_i) = f'(x_i)(x - x_i)$$

Y despejamos x :

$$x = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Que es la formula iterativa de Newton-Raphson para calcular la siguiente aproximación:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \text{ si } f'(x_i) \neq 0$$

Note que el método de Newton-Raphson no trabaja con intervalos donde nos asegure que encontraremos la raíz, y de hecho no tenemos ninguna garantía de que nos aproximaremos a dicha raíz. Desde luego, existen ejemplos donde este método no converge a la raíz, en cuyo caso se dice que el método diverge. Sin embargo, en los casos donde si converge a la raíz lo hace con una rapidez impresionante, por lo cual es uno de los métodos preferidos por excelencia.

Para un valor inicial de cada una de las variables en el sistema cerca a la solución, el método de N-R converge tan rápidamente como el método para una sola ecuación. Sin embargo, para sistemas grandes, la rápida convergencia es más que compensada por su principal desventaja. Para que el método sea efectivo, se debe evaluar la matriz Jacobiana en cada iteración. Esto presenta dos dificultades. La primera es que, en el caso general, existen elementos en la matriz Jacobiana y su evaluación puede ser la parte más costosa del método. Lo segundo es que no existe un método directo para la evaluación del Jacobiano; muchos sistemas son de tal forma que las ecuaciones son implícitas o demasiado complicadas que la diferenciación es imposible. Para sistemas genéricos de ecuaciones no lineales, el método de la secante es mucho más efectivo. Para una sola ecuación, el método de la secante aproxima la derivada de una función mediante la secante trazada entre dos puntos de la curva. Este método converge más lentamente que el método de N-R, pero como no requiere la evaluación de la derivada, puede encontrar la solución con un costo total más bajo y además se puede aplicar a problemas donde no es posible la evaluación directa de la derivada. Existe un gran número de aplicaciones del método de la secante a sistemas de ecuaciones, la mayoría de ellas son muy efectivas pero no han sido aplicadas a CFD.

Método de la Secante

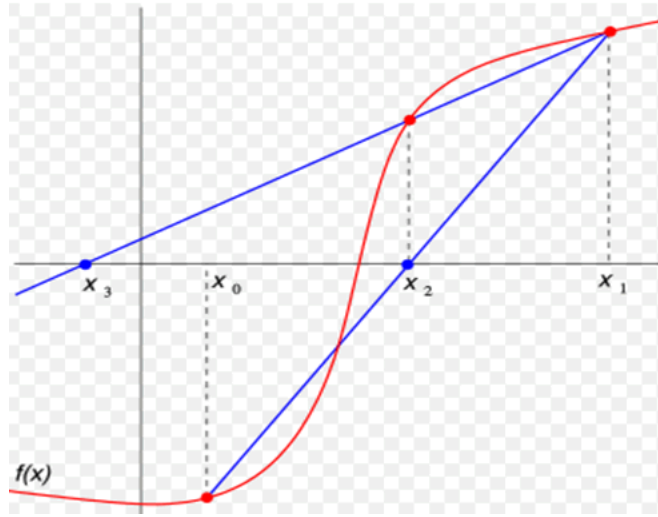
Este método se basa en la fórmula de Newton-Raphson, pero evita el cálculo de la derivada usando la siguiente aproximación:

$$f'(x_i) \simeq \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i}$$

Sustituyendo en la fórmula de Newton-Raphson, obtenemos

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \simeq x_i - \frac{f(x_i)}{\frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i}}$$

Figura D.4: Método de la Secante.



$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)}$$

Que es la fórmula del método de la secante. Nótese que para poder calcular el valor de x_{i+1} , necesitamos conocer los dos valores anteriores x_i y x_{i-1} . Obsérvese también, el gran parecido con la fórmula del método de la regla falsa. La diferencia entre una y otra es que mientras el método de la regla falsa trabaja sobre intervalos cerrados, el método de la secante es un proceso iterativo y por lo mismo, encuentra la aproximación casi con la misma rapidez que el método de Newton-Raphson. Claro, corre el mismo riesgo de éste último de no converger a la raíz, mientras que el método de la regla falsa va a la segura.

D.4.2. Otras técnicas

La aproximación usual a la solución para sistemas acoplados no lineales es el método secuencial desacoplado descrito más adelante. Los términos no lineales (flujo convectivo, término fuente) se pueden linealizar usando la aproximación iterativa de Picard. Para los términos convectivos esto significa que la velocidad de masa se considera conocido, de manera que el término convectivo no lineal en la ecuación para la cantidad de movimiento en x se puede aproximar por:

$$\rho u_j u_i \simeq (\rho u_j)^0 u_i$$

donde el superíndice 0 significa que los valores se toman como los valores de la iteración exterior anterior. Similarmente, el término fuente se puede descomponer en dos partes:

$$S = S_0 + S_\phi\phi$$

La porción S_0 se incluye en el lado derecho de la ecuación algebraica, mientras que S_ϕ contribuye a los coeficientes de la matriz $[A]$. Se puede usar una aproximación similar para los términos no lineales que involucren más de una variable.

Este tipo de linealización requiere de muchas más iteraciones que una técnica acoplada usando una linealización del tipo N-R. Sin embargo, el número de iteraciones exteriores se puede reducir usando técnicas multigrid, lo que hace a esta aproximación atractiva.

D.5. SISTEMAS DE ECUACIONES ACOPLADAS Y SU SOLUCIÓN

La mayoría de problemas en dinámica de fluidos y transferencia de calor requieren la solución de sistema de ecuaciones acopladas, es decir, la variable dominante de cada ecuación aparece en alguna otra ecuación. Existen dos tipos de aproximaciones a tal problema. En el primero, todas las variables se resuelven simultáneamente. En el otro, cada ecuación se resuelve para su variable dominante, tratando las otras variables como conocidas, donde se itera a través de las ecuaciones hasta encontrar la solución global del sistema acoplado. Las dos aproximaciones también se pueden mezclar.

D.5.1. Solución Simultánea

En los métodos de solución simultánea, todas las ecuaciones se consideran para de una sistema simple. Las ecuaciones discretizadas de la mecánica de fluidos tienen, después de una linealización, una estructura bandeda. La solución directa de estas ecuaciones puede llegar a ser muy costosa, especialmente cuando las ecuaciones son no lineales y el problema es tridimensional. Las técnicas de solución iterativas para sistemas acoplados son generalizaciones de los métodos para ecuaciones simples. Los métodos iterativos mostrados arriba se eligieron por su aplicabilidad a sistemas acoplados.

D.5.2. Solución Secuencial

Cuando las ecuaciones son lineales y fuertemente acopladas, las solución simultánea es la mejor opción. Sin embargo, las ecuaciones pueden ser muy complejas y los métodos

para ecuaciones no lineales acoplados son difíciles y costosos de usar. Entonces puede ser preferible tratar cada ecuación como si tuviera solamente una incógnita, tratando temporalmente las otras variables como conocidas, usando el mejor valor disponible para ellas. Las ecuaciones se resuelven repitiendo el ciclo hasta que se cumplan todas las ecuaciones. Cuando se usa este método, se deben tener dos puntos en mente:

- Dado que algunos términos, por ejemplo, los coeficientes y términos fuente que dependen de otras variables que cambian con cada iteración, es ineficiente resolver las ecuaciones exactamente en cada iteración. Si este es el caso, los solucionadores directos son innecesarios y deben preferirse los solucionadores iterativos. Las iteraciones realizadas en cada ecuación se conocen como iteraciones interiores.
- Con el objeto de obtener una solución que satisfaga todas las ecuaciones, los coeficientes de la matriz y el término fuente se debe actualizar después de cada ciclo y el proceso repetido nuevamente. Este ciclo se conoce como iteraciones externas.

La optimización de este tipo de método de solución requiere una cuidadosa elección del número de iteraciones interiores por iteración exterior. También es necesario limitar el cambio en cada variable de una iteración exterior a otra (sub-relajación), debido a que un cambio en una variable cambia los coeficientes en las otras ecuaciones, el cual puede impedir la convergencia o ralentizarla. Desafortunadamente, resulta difícil analizar la convergencia de estos métodos de manera que la selección de los factores de sub-relajación es grandemente empírico.

D.5.3. Sub-relajación

En la n -ésima iteración exterior, las ecuaciones algebraicas para la variable genérica ϕ , en un punto típico p se puede escribir como:

$$a_p \phi_p^n + \sum_l a_l \phi_l^n = Q_p$$

Donde Q contine todos los términos que no depende explícitamente de ϕ^n ; Los coeficientes a_1 y Q pueden depender de ϕ^{n-1} . El esquema de discretización no es relevante. Esta ecuación es lineal y el sistemas de ecuaciones para el dominio de solución completo se resuelve de forma generalmente iterativa (para las iteraciones interiores).

En las iteraciones exteriores iniciales, permitir que ϕ cambie tanto como lo que requiere la ecuación anterior, podría causar inestabilidad, de manera que se permitirá que ϕ^n cambie solamente una fracción α_ϕ de la diferencia:

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

Donde ϕ^{nuevo} es el resultado de la ecuación y el factor de sub-relajación está en el rango $0 < \alpha_\phi < 1$

Dado que los datos de la iteración no se requieren en el futuro una vez que los coeficientes de la matriz y el término fuente se actualicen, la nueva solución se puede sobre escribir. Reemplazando ϕ^{nuevo} en la ecuación por,

$$\phi^{nuevo} = \frac{Q_p - \sum_l a_l \phi_l^n}{a_p}$$

El cual conduce, a partir de la ecuación anterior, a la ecuación modificada del nodo p :

$$\frac{a_p}{\alpha_\phi} \phi_p^n + \sum_l a_l \phi_l^n = Q_p + \frac{1 - \alpha_\phi}{\alpha_\phi} a_p \phi_p^{n-1}$$

Donde $\frac{a_p}{\alpha_\phi}$ y $Q_p + \frac{1 - \alpha_\phi}{\alpha_\phi} a_p \phi_p^{n-1}$ son los elementos modificados en la diagonal principal en la matriz y en el vector de términos independientes. La ecuación modificada se resuelve en las iteraciones interiores. Cuando convergen las iteraciones exteriores, los términos que involucran a se cancelan y se obtiene la solución al problema original.

D.6. DISIPACIÓN Y DISPERSIÓN NUMÉRICA: VISCOSIDAD ARTIFICIAL

Considere la ecuación de onda unidimensional, dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad c > 0 \quad (\text{D.28})$$

Discretizando la ecuación usando una diferencia Forward de primer orden en el tiempo y una diferencia Backward de primer orden en el espacio, queda:

$$\frac{u_i^{t+\Delta t} - u_i^t}{\Delta t} + c \frac{u_i^t - u_{i-1}^t}{\Delta x} = 0 \quad (\text{D.29})$$

La solución presentada en la Ecuación (D.29) es la solución numérica de la Ecuación (D.28) con una cierta exactitud determinada por el error de truncamiento y el error de redondeo. Reemplazando los valor con series de expansión de Taylor como se muestra a continuación:

$$u_i^{t+\Delta t} = u_i^t + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_i^t \Delta t + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_i^t \frac{(\Delta t)^2}{2} + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_i^t \frac{(\Delta t)^3}{3!} + \dots \quad (\text{D.30})$$

$$u_{i-1}^t = u_i^t - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^t \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i^t \frac{(\Delta x)^2}{2} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^t \frac{(\Delta x)^3}{3!} + \dots \quad (\text{D.31})$$

Sustituyendo las ecuaciones (D.30) y (D.31) en la ecuación (D.29), y reagrupando queda,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_i^t + c \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^t &= - \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_i^t \frac{(\Delta t)}{2} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_i^t \frac{(\Delta t)^2}{3!} \\ &+ \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i^t \frac{c(\Delta x)}{2} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_i^t \frac{c(\Delta x)^2}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

El lado izquierdo de la ecuación (D.32) es exactamente el lado izquierdo de la ecuación diferencial original (D.28) y el lado derecho de la ecuación (D.32) es el error de truncamiento asociado con la ecuación (D.29). Reemplazando la ecuación (D.32) todas las derivadas temporales por derivadas espaciales, se obtiene una expresión de la forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} &= (1 - v) \frac{c(\Delta x)}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^3 u c(\Delta x)^2}{\partial x^3 3!} (3v - 2v^2 - 1) \\ &+ O[(\Delta t)^3, (\Delta t)^2, (\Delta x), (\Delta x)^2, (\Delta x)^3] \end{aligned} \quad (\text{D.33})$$

Donde

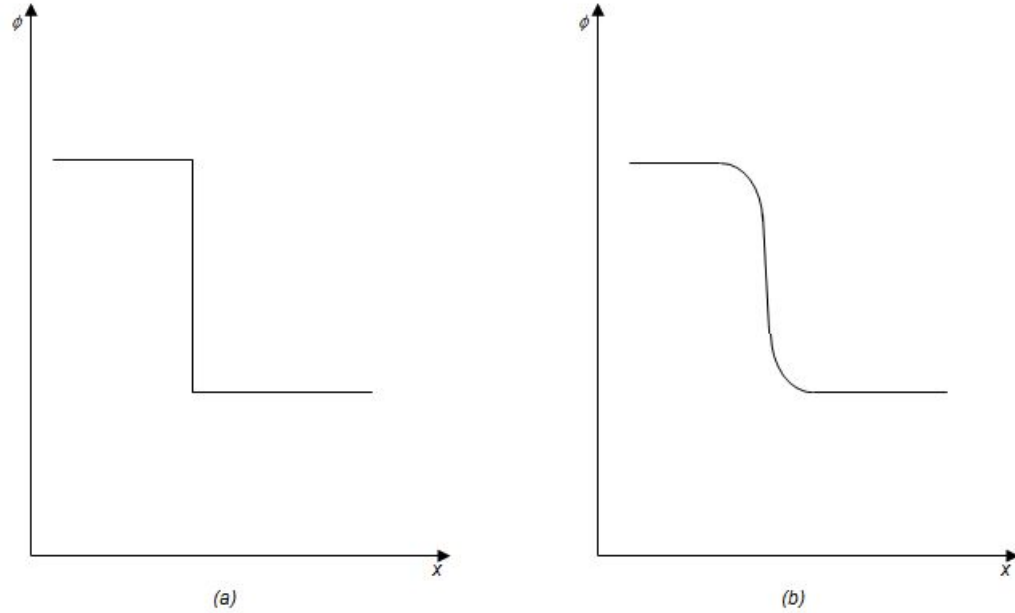
$$v = c \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (\text{D.34})$$

La ecuación (D.33) se conoce como la ecuación modificada, es decir, cuando se usa la ecuación discretizada (D.29) para obtener la solución numérica de la PDE original (D.28), en realidad esta ecuación discretizada está resolviendo una PDE bien diferente, la ecuación (D.33) en lugar de la (D.28).

$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

Término disipativo de la ecuación (D.33) y es de origen puramente numérico sin transcendencia física. Y es por eso que ese término se conoce como **disipación numérica**.

Figura D.5: Efecto de la disipación numérica. (a) Onda inicial en $t=0$. (b) Forma de la onda en un tiempo $t > 0$ donde la solución numérica está afectada por la disipación numérica.

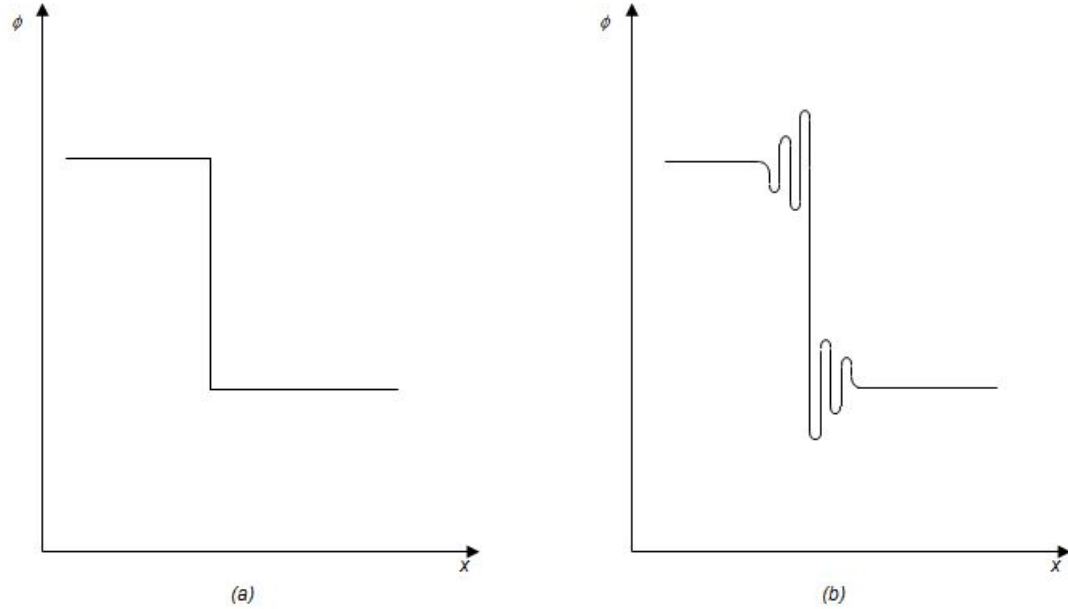


$(1 - \nu) \frac{c(\Delta x)}{2}$ Actúa como una viscosidad y se conoce como **viscosidad artificial**.

La ecuación (D.28) describe la propagación de una onda a través de un fluido no viscoso en una dimensión. En CFD, los términos “disipación numérica” y “viscosidad artificial” frecuentemente son intercambiados y generalmente connotan el comportamiento difusivo de la solución numérica, un comportamiento que tiene un origen puramente numérico. En realidad, si se comienza en el tiempo cero con una discontinuidad exacta como la que se muestra en la Figura D.5, durante el curso de la solución el efecto de la disipación numérica será extender (o dispersar) esta onda más que la viscosidad física podría extender la onda.

De hecho, la razón por qué la onda se esparcirá en la solución numérica no tiene nada que ver con la viscosidad física; más bien, esto tiene que ver con el hecho de que la solución numérica exacta de la ecuación discretizada, Ecuación (D.29), es la solución de la Ecuación (D.33) en lugar de la ecuación diferencial parcial original dada por la Ecuación (D.28), y la Ecuación (D.33) tiene algunos términos en el lado derecho que

Figura D.6: Efecto de la dispersión numérica. (a) Onda inicial en $t = 0$. (b) Forma de la onda en un tiempo $t > 0$ donde la solución numérica está afectada por la dispersión numérica.



juegan un papel de disipación.

Otro aspecto relacionado con los conceptos expuestos arriba es el efecto de la *dispersión numérica*, el cual crea un comportamiento numérico diferente a partir de la disipación numérica. La dispersión resulta en una distorsión de la propagación de las diferentes fases de una onda, los cuales se muestran contoneo en el frente y detrás de la onda. Esto se ilustra esquemáticamente en la Figura D.6. Una de las ventajas de derivar la ecuación modificada asociada con una ecuación discretizada es que se puede evaluar el comportamiento relativo de la difusión y dispersión numérica. La disipación numérica es el resultado directo de derivadas de orden par en el lado derecho de la ecuación modificada ($\partial^2\phi/\partial x^2$, $\partial^4\phi/\partial x^4$, etc.), y la dispersión numérica es el resultado directo de derivadas impares ($\partial^3\phi/\partial x^3$, etc.).

Aunque la viscosidad artificial compromete la exactitud de la solución (lo cual es algo malo), siempre mejora la estabilidad de la solución (lo cual es algo bueno). Para muchas aplicaciones en CFD, la solución no tiene suficiente viscosidad artificial en el algoritmo,

lo que ocasiona que la solución tienda a ser inestable a menos que se agregue más viscosidad artificial explícitamente en el cálculo. Si se agrega intencionalmente más viscosidad artificial a la solución numérica, se está aumentando la probabilidad de tener una solución mas inexacta. Por otro lado, agregando esta viscosidad artificial, se está al menos más seguro de tener una solución estable, mientras que sin ella, en algunos casos no es posible obtener siquiera una solución. Según la experiencia colectiva de la comunidad que trabaja en CFD, en aquellas aplicaciones donde ha sido necesaria el uso de la viscosidad artificial, el uso prudente de esta cantidad ha conducido, para la mayoría de las partes, a una solución numérica razonable y algunas veces muy exacta. Sin embargo, cada cual debe conocer qué está haciendo en este respecto.

Apéndice E

IMPLEMENTACIÓN DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA

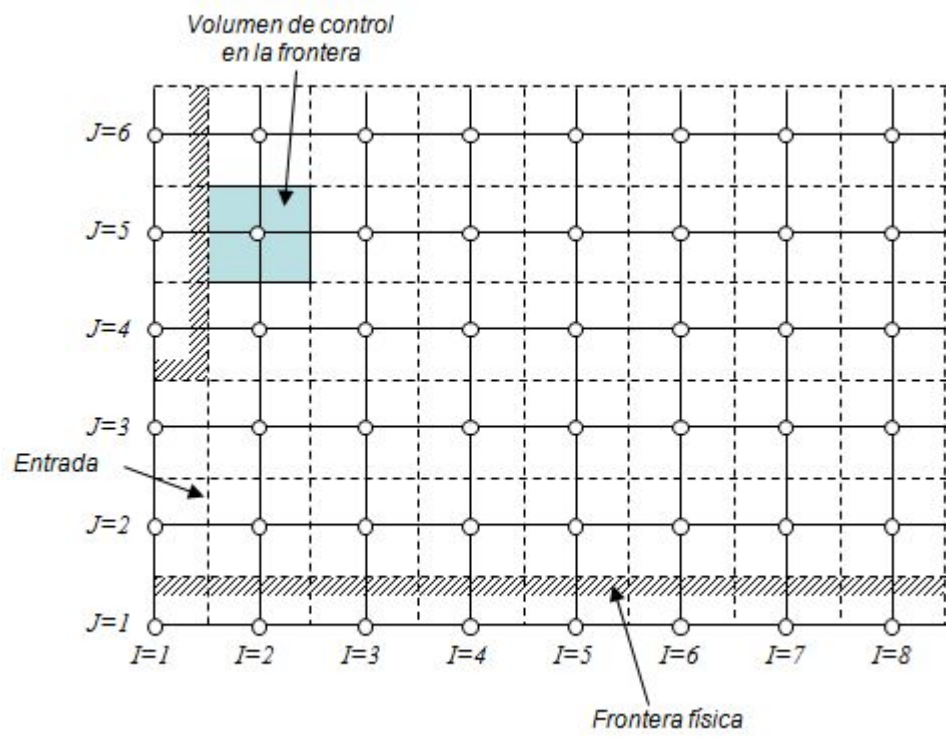
E.1. INTRODUCCIÓN

Todos los problemas en CFD están definidos en términos de las condiciones de frontera iniciales. Es importante que el usuario especifique correctamente y entienda cual es el rol de las dichas condiciones en el algoritmo numérico. En problemas transitorios los valores iniciales de todas las variables de flujo son necesarias para especificar la solución de todos los puntos en el dominio del flujo. El presente capítulo describe la implementación de las siguientes condiciones de frontera mas comunes en las ecuaciones discretizadas en el método de los volúmenes finitos:

- entrada
- salida
- pared
- presión constante
- simetría
- periodicidad (ó condiciones de frontera cíclica)

En la construcción del arreglo de una malla escalonada se han adicionado nodos en torno a la frontera física, como se muestra en la figura (E.1). Los cálculos son hechos en

Figura E.1: Disposición de la malla en la frontera.



los nodos internos únicamente (I=2 y J=2 en adelante). Dos características notables de el arreglo son (i) la frontera física coincide con la frontera del volumen de control escalar y (ii) la disponibilidad de los nodos exactamente por fuera de la entrada del dominio (a lo largo de I=1 en la figura E.1. la misma de arriba) para almacenar las condiciones de entrada. Esto permite la introducción de las condiciones de frontera llevándose a cabo con pequeñas modificaciones en las ecuaciones discretizadas de los nodos cerca de la frontera.

Las condiciones de frontera entran en la ecuación discretizada suprimiendo el vínculo al lado de la frontera y mediante la modificación del término fuente. El coeficiente apropiado de la ecuación discretizada se establece en cero el flujo del lado de la frontera- aproximación exacta o lineal- es introducido por medio del termino fuente S_u y S_P . Frecuentemente se hace uso de un artificio para fijar el flujo de aún variable en la cara de una celda, pero también se necesitará una técnica para afrontar situaciones donde se necesite un valor específico de una variable en un nodo. Esto se puede hacer introduciendo dos grandes términos fuentes en las ecuaciones discretizadas relevantes. Por ejemplo, para establecer la variable φ en el nodo P a valor fijo φ_{fijo} se realiza las siguientes modificaciones al término fuente en la ecuación discretizada:

$$S_P = -10^{30} \text{ y } S_u = 10^{30} \varphi_{fijo}$$

Con estos valores la ecuación discretizada es:

$$(a_P + 10^{30}) \varphi_P = \sum a_{nb} \varphi_{nb} + 10^{30} \varphi_{fijo}$$

La magnitud del número 10^{30} es arbitraria muy grande comparada con todos los coeficientes en la ecuación discretizada original. Si a_P y a_{nb} son todos despreciables, la ecuación discretizada establece que:

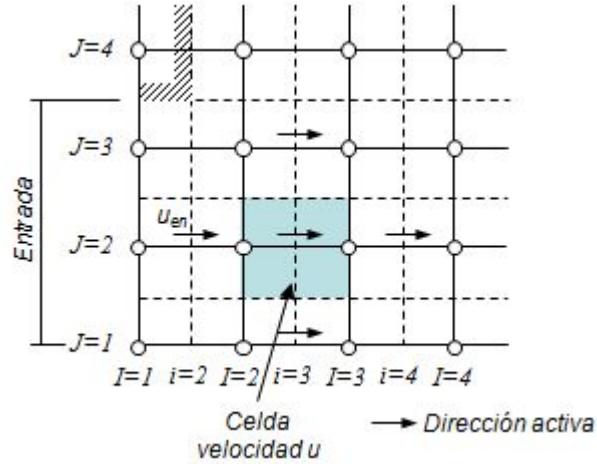
$$\varphi_P = \varphi_{fijo}$$

El cual establece el valor de φ en P.

Además de establecer el valor de una variable en un nodo interno este tratamiento es también útil al considerar obstáculos sólidos dentro de un dominio imponiendo $\varphi_{fijo} = 0$ (o cualquier otro valor deseado) en los nodos dentro de la región sólida. El sistema de ecuaciones del flujo discretizadas se puede resolver de forma normal sin tener que tratar los obstáculos separadamente.

Más adelante serán explicados los detalles de las modificaciones necesarias para implementar las condiciones de frontera más comunes. Se harán las siguientes consideraciones: (i) el flujo siempre será subsónico ($M < 1$), (ii) se usará un modelo

Figura E.2: Celda de velocidad u en la condición de frontera de entrada.



de turbulencia $k - \varepsilon$, (iii) se usará un método de diferenciación híbrido para la discretización, y (iv) se aplicará el algoritmo de solución SIMPLE.

E.2. CONDICIONES DE FRONTERA DE ENTRADA

Para especificar las condiciones de entrada es necesario la distribución de todas las variables de flujo. En esta sección se discutirá el caso de una entrada perpendicular a la dirección x . Las figuras E.2. muestran el arreglo de la malla en la vecindad de una entrada para un momento u y v , corrección de presión y corrección escalar en la celda. La dirección del flujo se asume generalmente de izquierda a derecha en los diagramas. Como se ha dicho, la malla se extiende por fuera de la frontera física y los nodos a lo largo de la línea $I=1$ (o $i=2$ para la velocidad u) se usan para guardar los valores de entrada de las variables de flujo (indicadas por u_{en}, v_{en}, p'_{en}). Justo aguas abajo de estos nodos extras se comienza a resolver las ecuaciones discretizadas para las primeras celdas internas, la cual está sombreada.

Los diagramas también muestran los vecinos “activos” y las caras de las celdas que están representadas en las ecuaciones discretizadas para la celda sombreada asumiendo que se usará una diferenciación híbrida. Por ejemplo, en la figura E.3

los vecinos activos están dados por medio de flechas y las caras activas por medio de puntos sólidos. Las figuras indican que todos los vínculos a los nodos vecinos permanecen activos para las primeras celdas de u, v y φ , de tal forma que para adecuar la condición de frontera para estas variables no es necesario modificar las ecuaciones discretizadas. La

Figura E.3: Celda de velocidad v en la condición de frontera de entrada.

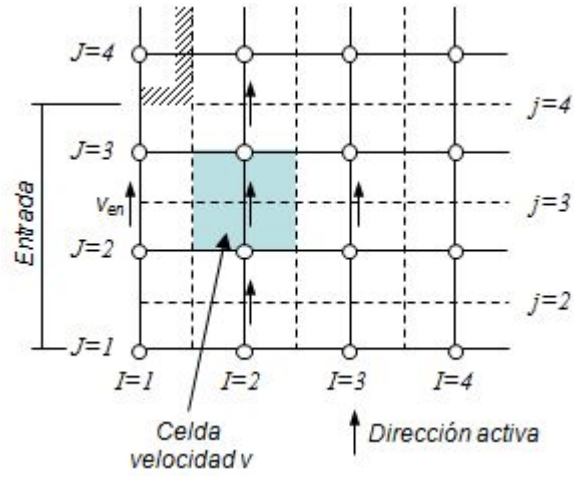


Figura E.4: Celda de corrección de presión p' en la condición de frontera de entrada.

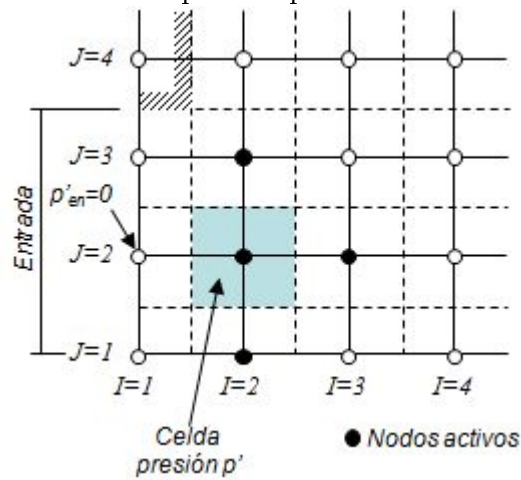


Figura E.5: Celda escalar ϕ en la condición de frontera de entrada.

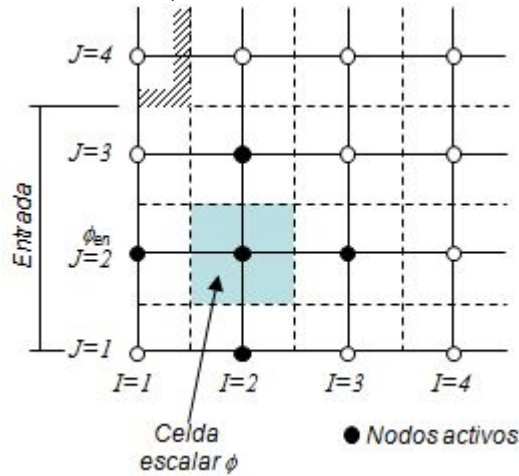


figura E.4 muestra que el vínculo con el lado de la frontera está cortado en la ecuación discretizada de corrección presión estableciendo el coeficiente del lado de la frontera (oeste,w) igual a cero. Dado que se conoce la vecindad a la entrada, no es necesario hacer una corrección a la velocidad y por lo tanto se tiene que:

$$u^*_W = u_W$$

En el término fuente asociado con la corrección de presión discretizada.

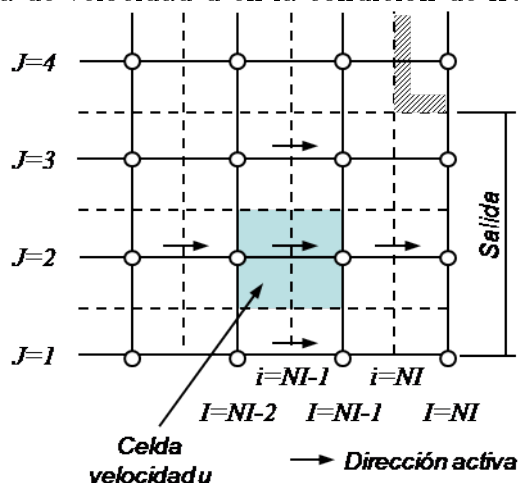
E.2.1. CORRECCIÓN DE PRESIÓN

El campo de presión obtenido resolviendo la ecuación de corrección de presión no da la presión absoluta (Patankar, 1980). Resulta práctico fijar la presión absoluta en un nodo a la entrada e imponer la corrección de presión igual a cero en el nodo. Habiendo especificado un valor de referencia, el campo de presión absoluta dentro del dominio se puede obtener.

E.2.2. ESTIMACIÓN DE k y ε EN LA FRONTERA

Se puede alcanzar las simulaciones más exactas aplicando valores medidos de turbulencia de energía cinética k y de la velocidad de disipación ε . Sin embargo, si se realiza un cálculo para el diseño, tales datos no estarán disponibles. En este caso, los códigos de CFD comerciales a menudo estiman el valor de k y ε con fórmulas aproximadas.

Figura E.6: Celda de velocidad u en la condición de frontera a la salida.



E.2.3. CONDICIONES DE FRONTERA PERPENDICULARES A LA DIRECCIÓN y

El procedimiento mostrado arriba es, de hecho, no restringido a una frontera de entrada perpendicular a la dirección x . Cuando se tiene una entrada perpendicular a la dirección y y la componente de la velocidad v , para el cual el valor de entrada v_{en} se encuentra disponible en $j=2$, toma el lugar de la componente de la velocidad u y los cálculos comienzan en $j=3$. La entrada valores de las otras variables se almacenan en $J = 1$ y la solución comienza en $J = 2$.

E.3. CONDICIONES DE FRONTERA A LA SALIDA

La implementación de las condiciones de frontera a la salida se lleva a cabo de forma análoga con las condiciones de frontera a la entrada en los nodos interiores, pero en esta ocasión, aguas arriba de la salida; teniendo la precaución de tomar la salida lejos de cualquier perturbación que genere turbulencia y resultados distintos a los reales.

Si NI es el número total de nodos en la dirección x , las ecuaciones se resuelven hasta las celdas de $I=NI-1$. Antes de entrar a la solución de las ecuaciones, se determinan los valores de las variables de flujo en el nodo NI , a partir de los valores en los nodos interiores, suponiendo un gradiente de cero para las variables en el plano de salida.

$$U_{NI,J} = U_{NI-1,J} \quad (E.1)$$

Para la ecuación de continuidad se debe tener especial cuidado, pues puede presentar

Figura E.7: Celda de velocidad u en la condición de frontera en la pared.

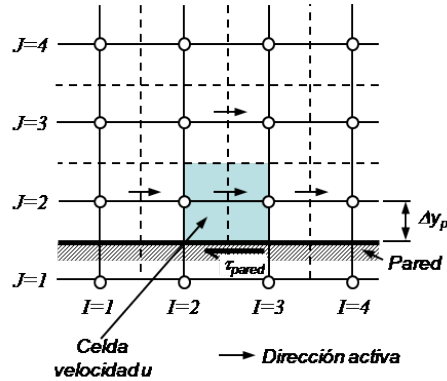
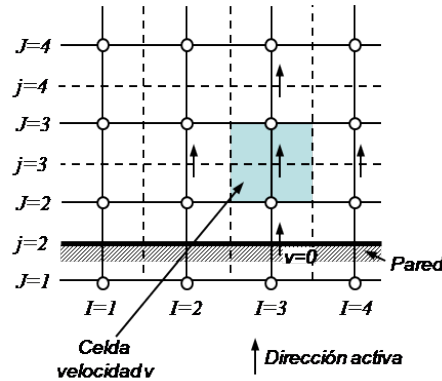


Figura E.8: Celda de velocidad v en la condición de frontera en la pared para $j=2$.



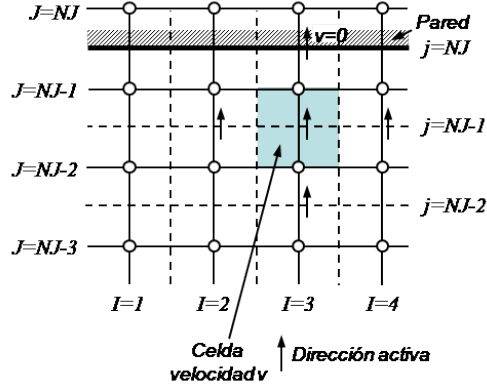
problemas para el algoritmo solución, y se debe aplicar una ecuación adicional.

E.4. CONDICIONES DE FRONTERA EN LA PARED

Es la condición mas común encontrada para fluidos confinados. La condición de no deslizamiento es apropiada para paredes sólidas ($u=0$, $v=0$) en las componentes de la velocidad. Las figuras E.7, E.8 y E.9 ilustran con detalle las condiciones de frontera en la pared para las componentes de velocidad u y v .

La componente normal de la velocidad se puede poner a cero en la pared para $j=2$. por este motivo no se debe efectuar una corrección de presión en este punto. Las condiciones de frontera se pueden aplicar a flujo laminar y a flujo turbulento. Para definir si el flujo es laminar o turbulento se debe evaluar la siguiente expresión:

Figura E.9: Celda de velocidad v en la condición de frontera en la pared para $j=NJ$.



$$y^+ = \frac{\Delta_{yp}}{v} \sqrt{\frac{\tau_{pared}}{\rho}} \quad (E.2)$$

donde Δ_{yp} es la distancia del nodo mas cercano a la pared como se ilustra en la figura E.7. El flujo cerca a la pared se asume laminar si $y^+ \leq 11.63$. Si $y^+ = 11.63$ el flujo se encuentra en la intersección del perfil (laminar-turbulento) lineal y la tendencia logarítmica de manera que se obtiene la solución de:

$$y^+ = \frac{1}{k} \ln(Ey^+) \quad (E.3)$$

Donde $k=0.4187$ (constante de Von Karman) y E es una constante de interacción que depende de la rugosidad de la pared.

Trataremos el caso para el flujo laminar donde: $y^+ \leq 11.63$.

$$\tau_{pared} = \mu \frac{u_p}{\Delta_{yp}} \quad (E.4)$$

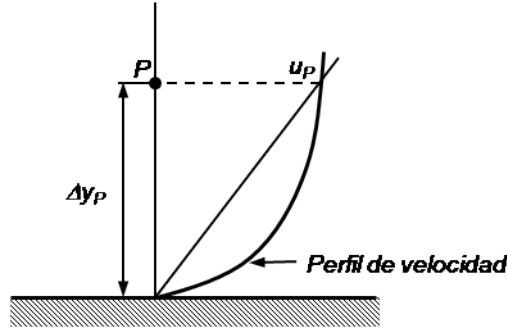
donde u_p es la velocidad en el nodo p de la malla. La figura E.10 muestra que esta ecuación está basada en la consideración que la velocidad varía linealmente con la distancia a partir de la pared en el flujo laminar.

El termino fuente S_p en la ecuación de u se define por:

$$S_p = -\frac{\mu}{\Delta_{yp}} A_{Celda} \quad (E.5)$$

donde A_{Celda} es el área de la pared en contacto con el volumen de control. La transferencia de calor a partir de una pared con temperatura fija hacia un flujo laminar cercano a una pared se calcula a partir de la analogía de Reynolds como:

Figura E.10: Perfil de velocidad u en la pared.



$$q_s = -\frac{\mu C_p (T_p - T_{pared})}{\sigma \Delta_{yp}} A_{Celda} \quad (E.6)$$

Donde C_p es el calor específico del fluido a presión constante, T_p es la temperatura del nodo P y σ es el número de Prandtl laminar. De esta ecuación se pueden extraer los términos fuentes S_p, T_p y s_u para la ecuación de temperaturas en el nodo P. Para un flujo de calor adiabático en la pared: $s_u = 0$

y $S_p = 0$.

E.4.1. Pared rugosa

En la ecuación (E.3) $E = 9.8$ para paredes suaves. Si la pared no es suave se debe ajustar E de acuerdo con la característica de la pared y así calcular un nuevo valor límite de y^+ . E se debe estimar con base en la rugosidad absoluta de la pared.

E.4.2. Pared en movimiento

El movimiento en la dirección x genera un cambio en el valor del esfuerzo cortante en la pared. El valor del esfuerzo cortante se ajusta reemplazando la velocidad u_p en la ecuación esfuerzo cortante (E.4) como sigue:

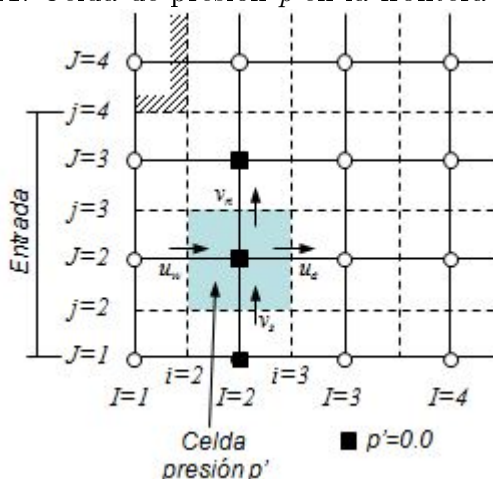
$$\tau_{pared} = \mu \frac{u_p - u_{pared}}{\Delta_{yp}} \quad (E.7)$$

El término fuente asociado a la ecuación (E.5) y los demás para el flujo de calor se ajustan de manera similar.

Se debe resaltar que para poder hacer el ajuste de velocidad relativa en las ecuaciones anteriores se deben hacer las siguientes consideraciones:

- La velocidad es paralela a la pared y varía solamente en la dirección normal a la pared.

Figura E.11: Celda de presión p' en la frontera de entrada.



- No existen gradientes de presión en la dirección de flujo.
- No existen reacciones química en la pared.
- Se aplica para números de Reynolds altos.

Para obtener una buena exactitud se deben mantener las consideraciones anteriores.

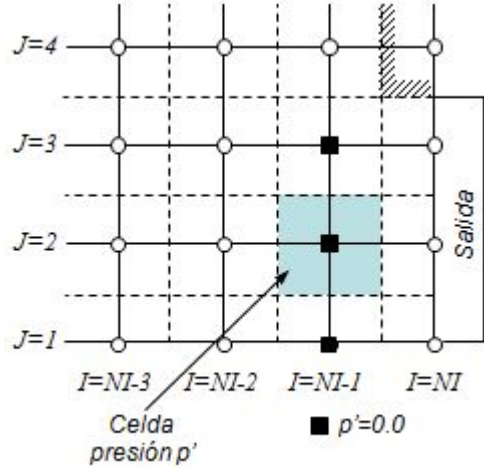
E.5. CONDICIÓN DE FRONTERA DE PRESIÓN CONSTANTE

La condición de frontera de presión constante se usa en situaciones donde no se conocen los detalles exactos de la distribución del flujo pero se conocen los valores de la presión de la frontera. Esta condición de frontera es apropiada para problemas típicos que incluyen flujos alrededor de objetos, superficies de flujo libre, flujo de arrastre tales como ventilación natural, y también flujos internos con múltiples salidas.

En la aplicación de la condición de frontera de presión constante la corrección de presión se pone a cero en el nodo. La distribución de la malla para las celdas de p' cerca un flujo de entrada y de salida se muestran en las figuras E.11 y E.12 .

Una forma conveniente tratar con una condición de frontera de presión constante es fijar la presión en los nodos justamente dentro de la frontera física como se indica en los diagramas por medio de cuadros sólidos. La corrección de presión es puesta a cero haciendo $S_u = 0,0$ y $S_P = -10^{30}$ y la presión nodal se pone al valor requerido en la presión p_{fijo} . La ecuación de cantidad de movimiento para u se resuelve a partir de $i = 3$ y la ecuación de movimiento para v y las otras variables a partir de $(I = 2)$. El

Figura E.12: Celda de presión p' en una frontera de salida.



problema principal es la dirección desconocida del flujo la cual está determinada por las condiciones dentro del dominio de cálculo. La componente de la velocidad u a través de la frontera se genera como parte del proceso de solución garantizando que se satisface la ecuación de continuidad en cada celda. Por ejemplo, en las figura E.11 los valores de u_e , v_s y v_n evolucionan a partir del dominio. Dado estos valores se puede calcular u_w insistiendo en que la masa se conserva para la celda p' . Lo que produce:

$$u_w = \frac{(\rho v A)_n - (\rho v A)_s + (\rho v A)_e}{(\rho A)_w} \quad (\text{E.8})$$

Esta implementación de la condición de frontera causa que la celda p' más cercana a la frontera actúe como fuente o sumidero de masa. Este procedimiento se repite para cada celda de presión de frontera. Otras variables tales como v , T , k , ε deben ser destinadas como valores de afluencia donde la dirección del flujo está dentro del dominio. Donde el flujo sea de salida se deben obtener sus valores justo a la salida del dominio por medio de la extrapolación.

Existen muchas variaciones que pueden ser útiles en circunstancias prácticas. Algunos códigos aplican (i) una condición a la entrada que fija la presión de parada del flujo de entrada justamente afuera del dominio (en $i=2$) en lugar de una presión estática justo dentro del dominio (en $i=3$) y/o (ii) un procedimiento de extrapolación en las salidas para todas las variables incluyendo u .

E.6. CONDICIÓN DE FRONTERA DE SIMETRÍA

Las condiciones en que se establecen una frontera de simetría son:

1. No existe un flujo que cruce la frontera.
2. No existe ningún flujo de ninguna magnitud escalar a través de la frontera.

Para la implementación,

- La velocidad normal a la frontera se pone a cero en la frontera simétrica.
- Los valores de las otras propiedades por fuera del dominio de solución ($I \text{ o } i = 1$) se igualan a los valores en el nodo más cercano justamente dentro del dominio ($I \text{ o } i = 2$):

$$\phi_{1,J} = \phi_{2,J} \quad (\text{E.9})$$

En la ecuaciones discretizadas para p' el vínculo con el lado de la frontera simétrica se corta imponiendo el coeficiente respectivo a cero; no se necesitan más modificaciones.

E.7. CONDICIÓN DE FRONTERA CÍCLICA O PERIÓDICA

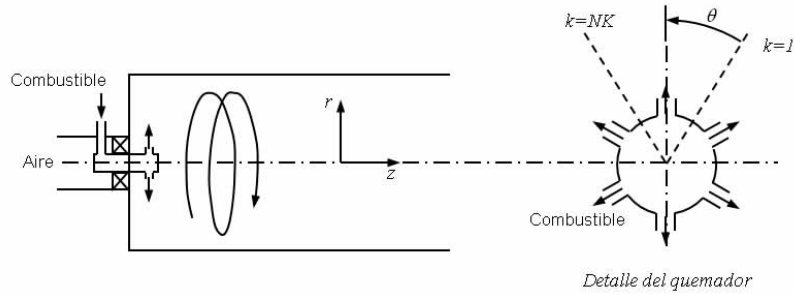
Las condiciones de frontera cíclicas o periódicas aparecen a partir de diferentes tipos de simetría en un problema. Considere por ejemplo un flujo con remolinos en un horno cilíndrico como el que se muestra en la Figura . En el quemador se introduce combustible gaseoso a través de seis agujeros simétricamente espaciados mientras que aire entra a través de un ánulo exterior del quemador.

Este problema se puede resolver en coordenadas cilíndricas (z, r, θ) considerando un sector angular de 60° como se muestra en el diagrama donde k se refiere al plano $r - z$ en la dirección de θ

El flujo rota en esta dirección, y bajo las condiciones dadas el flujo que entra al primer plano k del sector será exactamente el mismo que el que sale en el último plano k . Este es un ejemplo de una simetría cíclica. El par de frontera $k = 1$ y $k = NK$ se llaman fronteras cíclicas o periódicas.

Para aplicar las condiciones de frontera cíclicas se necesita imponer el flujo de todas las variables del flujo que salen de la frontera cíclica de salida igual a los valores de

Figura E.13: Frontera cíclica.



flujo que entran en la frontera cíclica de entrada. Esto se alcanza igualando los valores de cada variable en los nodos aguas arriba y aguas abajo del plano de entrada a los valores nodales aguas arriba y aguas abajo del plano de salida. Para todas las variables excepto para la componente de la velocidad que cruza los planos de entrada y salida (w) se tiene,

$$\phi_{1,J} = \phi_{NK-1,J} \text{ y } \phi_{NK,J} = \phi_{2,J}$$

Para la componente de la velocidad que cruza la frontera se tiene,

$$w_{1,J} = w_{NK-1,J} \text{ y } w_{NK+1,J} = w_{3,J}$$

E.8. DIFICULTADES POTENCIALES Y COMENTARIOS FINALES

El flujo dentro de un dominio de solución en CFD está condicionado por las condiciones de frontera. En un sentido el proceso de resolver un problema de campo no es nada más que la extrapolación de un conjunto de datos definidos en el contorno de la frontera o espacio dentro del dominio interior. Es, por lo tanto, de suprema importancia que se apliquen condiciones de frontera con sentido físico real y que estén bien definidas, o de lo contrario se encontrarán dificultades muy fuertes al obtener la solución. La causa más simple para una rápida divergencia de las simulaciones en CFD es una selección inapropiada de las fronteras.

En capítulos anteriores se mostraron resumidas un conjunto de condiciones de frontera para flujos viscosos que incluyen condiciones de frontera a la entrada, salida y de pared. La implementación respectiva para el método de los elementos finitos se discutió en las secciones 5.2 a 5.4 y en las secciones 5.5 a 5.7 se desarrollaron tres condiciones de frontera adicionales, presión constante, simetría y periodicidad, las cuales son físicamente realistas y muy útiles en cálculos prácticos.

Lo anterior no significa que son las únicas condiciones de frontera. Los software comerciales pueden incluir fronteras móviles, características para incluir fronteras que rotan y aceleran y condiciones especiales para flujos transónicos o supersónicos. Todas estas condiciones de frontera estarían fuera del alcance de este proyecto de grado.

Una simple mala selección de condiciones de frontera podría ser un intento para generar una solución de estado estable en un dominio con frontera de pared y flujo de entrada pero sin frontera de salida. Es obvio que la masa no se puede conservar en estado estable y los cálculos rápidamente se abortan. Este casi trivial ejemplo también sugiere que ciertos tipos de condiciones de frontera deben ir acompañadas por otros. Algunas combinaciones permisibles en flujo subsónico son:

- Solamente paredes
- Paredes, entradas y al menos una salida
- Paredes, entradas y al menos una frontera de presión constante
- Paredes y fronteras de presión constante

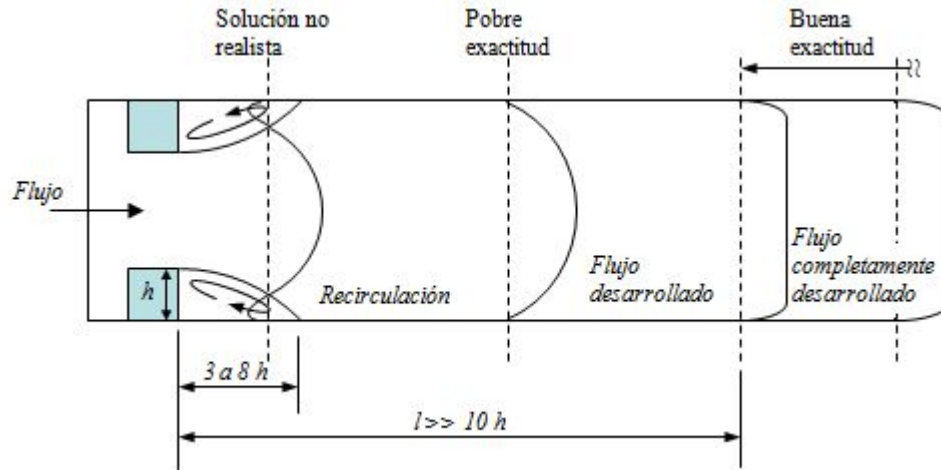
Se debe tener cuidado cuando se aplica una condición de frontera de salida. Solamente se puede usar si todos los flujos que entran en el cálculo están dados por medio de condiciones de frontera de entrada (por ejemplo, la velocidad y magnitudes escalares fijas en la entrada) y se recomienda solamente para dominios de flujo con una sola salida. Físicamente, la presión de salida condiciona la división del flujo entre múltiples salidas y es mejor especificar esta cantidad a la salida con una o más fronteras de presión constante, debido a que la condición de cero gradiente no especifica ni el flujo másico ni la presión de salida, resultando en un problema sub-especificado.

Las limitaciones exactas de las condiciones de frontera individuales han sido mostradas. Además se mostró una pequeña selección de las dificultades más sutiles de la practica de CFD que se necesitan evitar para asegurar una exactitud de simulación óptima.

E.8.1. Posicionando fronteras de salida

Si las fronteras de salida se ponen muy cerca de obstáculos sólidos es posible que el flujo no alcance a desarrollarse (gradientes cero en la dirección del flujo) lo que puede conducir a errores considerables. La figura E.14 muestra en perfil típico de velocidad aguas abajo de un obstáculo, lo que ilustra un peligro potencial.

Figura E.14: Desarrollo del flujo en una tubería.



Si se establece la salida cerca a un obstáculo ésta puede cruzar una región con recirculación. No solamente no se mantiene el gradiente asumido, sino que existe un área con flujo inverso donde el fluido entra al dominio mientras que se podría haber asumido que el fluido sale. De hecho, no se puede confiar si esta condición aparece. Para mayor exactitud es necesario demostrar que la solución interior no se verá afectada por la selección de la localización de la salida por medio de un estudio de sensibilidad para efecto de las diferentes distancias aguas abajo.

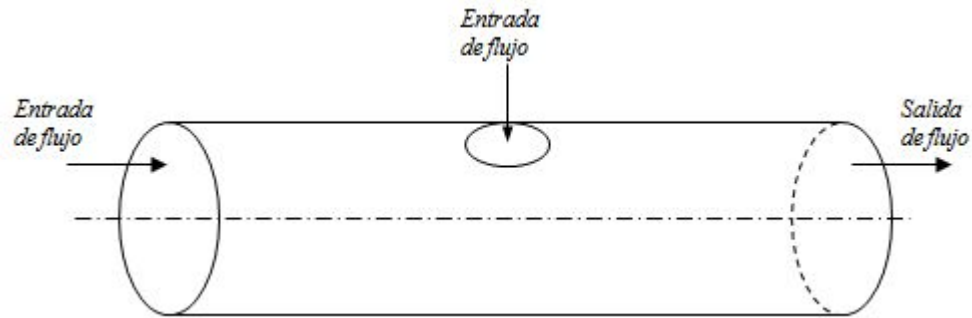
E.8.2. Malla cerca a la pared

La forma más exacta de resolver un flujo turbulento en un programa de CFD de propósito general es hacer uso de unos buenos ajustes empíricos en las aproximaciones de funciones de pared.

Para obtener la misma exactitud por medio de una simulación que incluya puntos dentro de la sub-capa lineal (laminar) y el espaciamiento de la malla debe ser muy fino, tanto que llega a ser anti económico en términos de memoria. El criterio que dice que y^+ debe ser mayor a 11.63 establece un límite **inferior** a la distancia de la pared Δy_P al punto más cercano de la malla. El mecanismo principal para mejorar la exactitud disponible es refinar la malla, pero en la simulación de un flujo turbulento se debe estar seguro que, mientras se refine la malla, el valor de y^+ debe permanecer mayor a 11.63 y es preferible un valor entre 30 y 500.

A menudo es imposible asegurar este caso en cualquier parte en un flujo general; un ejemplo conveniente es un flujo con recirculación. Cerca al punto de entrada la

Figura E.15: Entrada de flujo lateral.



componente paralela a la pared de la velocidad es cero, así por virtud del criterio que y^+ debe ser mayor que 11.63 la simulación se revierte al caso de flujo laminar. Hay un problema adicional asociado con el modelo $k - \varepsilon$ en estas regiones que dan origen a inexactitudes adicionales, aún más importantes. No obstante, el punto que es difícil de mantener y^+ por encima de su valor límite está bien ilustrado.

E.8.3. Aplicación de las condiciones de simetría

Es importante darse cuenta que la simetría geométrica de un dominio de flujo no siempre implica que el flujo posea tal simetría. Un ejemplo de ello se muestra en la figura E.15, que es el flujo a través de una tubería circular con una entrada lateral.

A pesar del hecho que el dominio tenga una condición de simetría de eje la ocurrencia de un flujo cruzado hace que el flujo no tenga simetría de eje.

Aun que sea tentador resolver el problema usando un sistema de coordenadas cilíndricas la solución del flujo será inexacta debido a que el flujo puede cruzar la línea central.

En este capítulo se ha discutido la implementación de las condiciones de frontera más importantes. Además, se han mostrado algunas combinaciones importantes de condiciones de frontera y se han resultado algunas áreas de problemas potenciales.

Apéndice F

DIFUSIÓN EN ESTADO ESTABLE

F.1. DIFUSIÓN UNIDIMENSIONAL EN ESTADO ESTABLE

En esta sección se presenta la aplicación del método de los volúmenes finitos a los problemas de difusión que involucran la transferencia de calor. La ecuación que determina la transferencia de calor unidimensional es:

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + S = 0 \quad (\text{F.1})$$

Donde:

k : Conductividad térmica.

T : Temperatura, y es la variable dependiente.

S : Término fuente (ejemplo: generación de calor debido a una corriente eléctrica pasando por una barra).

La incorporación de las condiciones de frontera y también la incorporación de los términos fuentes serán tratados en los tres ejemplos presentados.

F.1.1. Ejemplo 1: conducción libre en una barra aislada

Considere el problema de una conducción libre en una barra aislada cuyos extremos se mantienen a una temperatura constante de 100°C y 500°C respectivamente.

El esquema uni-dimensional del problema se muestra en la siguiente figura y la ecuación que gobierna el fenómeno es:

Figura F.1: Barra aislada con extremos a temperatura constante.

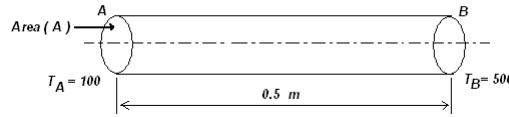
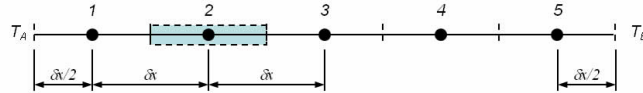


Figura F.2: Malla usada para la solución.



$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) = 0 \quad (\text{F.2})$$

Calcular la distribución de temperatura en la barra. La conductividad térmica k es igual a 1000W/mk , mientras que la sección transversal A es $10 * 10^{-3}\text{m}^2$.

Solución

Inicialmente se divide la longitud de la barra en cinco volúmenes de control iguales como se muestra en la siguiente figura. Esto resulta en que $\delta x = 0,1\text{m}$. La malla consta de cinco nodos. Para cada uno de los nodos 2,3 y 4, los valores de la temperatura de los nodos al este y al oeste están disponibles como valores nodales. Consecuentemente, se deben escribir ecuaciones discretizadas de la siguiente forma para los tres nodos:

$$\left(\frac{k_e}{\delta x_{PE}} A_e + \frac{k_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) T_P = \left(\frac{k_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) T_W + \left(\frac{k_e}{\delta x_{PE}} A_e \right) T_E \quad (\text{F.3})$$

La conductividad térmica ($k_e = k_w = k$), el área transversal ($A_e = A_w = A$), y el espaciamiento δx son constantes. Por lo tanto la ecuación discretizadas para los puntos nodales 2, 3 y a es

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E \quad (\text{F.4})$$

con S_u y S_t son cero en este caso dado que no existe generación de energía.

Los nodos 1 y 5 son nodos de frontera, por lo tanto requieren una atención especial. La interpretación de la ecuación que gobierna la conducción sobre el volumen de control alrededor del punto 1 da

$$kA \left(\frac{T_E - T_P}{\delta x} \right) - kA \left(\frac{T_P - T_A}{\delta x/2} \right) = 0 \quad (\text{F.5})$$

$$a_E + a_W \left(\frac{k_w}{\delta x_{WP}} \right) \left(\frac{k_e}{\delta x_{PE}} \right) a_P$$

a_P	a_W	a_E
$a_E + a_W$	$\left(\frac{k_w}{\delta x_{WP}} \right)$	$\left(\frac{k_e}{\delta x_{PE}} \right)$

Esta expresión muestra que el flujo a través de la frontera A se ha aproximado asumiendo una relación lineal entre la temperatura del cuerpo en el punto A y el nodo P . la ecuación anterior se puede reescribir como

$$\left(\frac{k}{\delta x} A + \frac{2k}{\delta x} A \right) T_P = 0,0 T_W + \left(\frac{k}{\delta x} A \right) T_E + \left(\frac{2k}{\delta x} A \right) T_A \quad (\text{F.6})$$

Se puede identificar fácilmente que la condición de frontera de temperatura fija entra en el cálculo como un término fuente ($S_u + S_P T_P$) con $S_u = (2kA/\delta x) T_A$ y $S_P = -2kA/\delta x$ y que el vínculo a la frontera este se ha suprimido haciendo a_W igual a cero.

La ecuación anterior se puede escribir de forma discretizada por medio de

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + S_u \quad (\text{F.7})$$

con

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P$	0	$\left(\frac{k}{\delta x}A\right)$	$\frac{-2kA}{\delta x}$	$\frac{2kA}{\delta x}T_A$

El volumen de control alrededor del punto 5 se puede tratar de forma similar. Su ecuación discretizada está dada por:

$$kA \left(\frac{T_B - T_P}{\delta x/2} \right) - kA \left(\frac{T_P - T_W}{\delta x} \right) = 0 \quad (\text{F.8})$$

Como antes se asumió una distribución de temperatura lineal entre el nodo P y el punto en la frontera B para aproximar el flujo de calor a través de la frontera del volumen de control. La ecuación anterior se puede escribir como

$$\left(\frac{k}{\delta x}A + \frac{2k}{\delta x}A \right) T_P = \left(\frac{k}{\delta x}A \right) T_W + 0,0T_E + \left(\frac{2k}{\delta x}A \right) T_B \quad (\text{F.9})$$

Finalmente la ecuación discretizada para el nodo de frontera 5 es

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + S_u \quad (\text{F.10})$$

donde

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P$	$\frac{kA}{\delta x}$	0	$\frac{-2kA}{\delta x}$	$\frac{2kA}{\delta x}T_B$

El proceso de discretización ha producido una ecuación para cada uno de los nodos de 1 a 5. La substitución de los valores numéricos resulta en $kA/\delta x = 100$ y cada uno de los coeficientes para cada una de las ecuaciones discretizadas se pueden escribir fácilmente. Los valores se encuentran consignados en la siguiente tabla.

El conjunto de ecuaciones resultantes para el ejemplo es

Cuadro F.1: Valores de los coeficientes de las ecuaciones discretizadas para los nodos 1 a 5.

<i>Nodo</i>	a_W	a_E	S_u	S_P	$a_P = a_E + a_W - S_P$
1	0	100	$200T_A$	-200	300
2	100	100	0	0	200
3	100	100	0	0	200
4	100	100	0	0	200
5	100	0	$200T_B$	-200	300

$$300T_1 = 100T_2 + 200T_A$$

$$200T_2 = 100T_1 + 100T_3$$

$$200T_3 = 100T_2 + 100T_4$$

$$200T_4 = 100T_3 + 100T_5$$

$$300T_5 = 100T_4 + 200T_B$$

Este conjunto de ecuaciones se pueden reescribir como

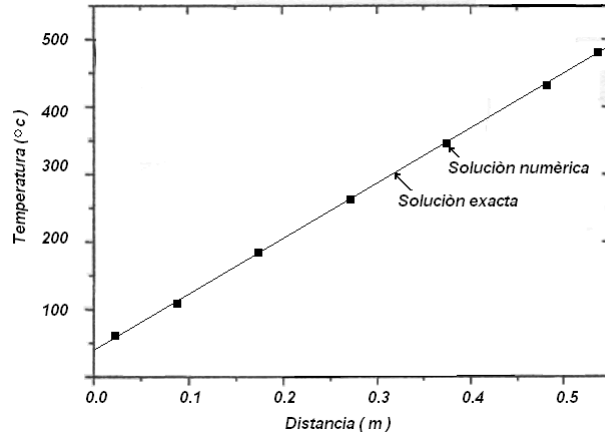
$$\begin{bmatrix} 300 & -100 & 0 & 0 & 0 \\ -100 & 200 & -100 & 0 & 0 \\ 0 & -100 & 200 & -100 & 0 \\ 0 & 0 & -100 & 200 & -100 \\ 0 & 0 & 0 & -100 & 300 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 200T_A \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 200T_B \end{bmatrix}$$

La solución del conjunto de ecuaciones de arriba produce la distribución de temperatura en estado estable para una situación dada. Para problemas que incluyen unos pocos nodos la matriz resultante se puede resolver fácilmente mediante uno de los métodos propuestos anteriormente. Para $T_A = 100$ y $T_B = 500$ la solución de la ecuación anterior usando, por ejemplo, la eliminación de Gauss, es:

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 140 \\ 220 \\ 300 \\ 380 \\ 460 \end{bmatrix}$$

La solución exacta es una distribución lineal entre las dos condiciones de fronteras específicas: $T = 800x + 100$. La siguiente figura muestra que la solución numérica y la solución exacta coinciden.

Figura F.3: Comparación de los resultados numéricos con los resultados analíticos.



Como se aprecia, si la condición de frontera es una temperatura dada, no existe mayor dificultad y no se requieren ecuaciones adicionales. Cuando no se conoce la temperatura como condición de frontera, se necesita construir una ecuación adicional para T_A o T_B según sea el caso en el ejemplo anterior. Esto se realiza integrando la ecuación diferencial en la mitad del volumen de control adyacente a la frontera. Hay que tener en cuenta que se ha agregado un nodo externo a la geometría inicial. Integrando la ecuación que gobierna la conducción sobre este volumen de control, se obtiene

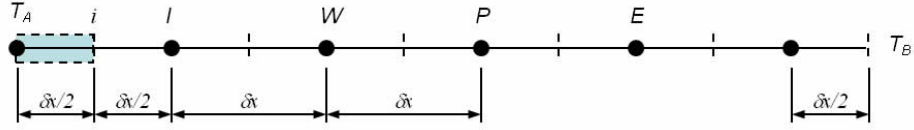
$$q_A - q_i + (S_u + S_P T_A) \delta x / 2 = 0 \quad (\text{F.11})$$

El flujo de calor q_1 se puede calcular a partir de una diferencia centrada con las temperaturas T_A y T_i , el resultado es

$$q_A - \frac{k_i (T_A - T_i)}{\delta x} + (S_u + S_P T_A) \delta x / 2 = 0 \quad (\text{F.12})$$

Cualquier implementación posterior de esta ecuación depende de que se de como dato en el término de flujo de calor en la frontera q_A . Si se proporciona directamente el valor de q_A , La ecuación para T_A sería

Figura F.4: Volumen de control para nodos de frontera.



$$a_A T_A = a_E T_E + S_u \quad (F.13)$$

donde

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P \frac{\delta x}{2}$	0	$(\frac{k}{\delta x} A)$	S_P	$S_u + q_A$

Si se especifica el flujo de calor q_A en términos del coeficiente de transmisión de calor h y la temperatura del ambiente T_∞ tal que

$$q_A = hA(T_\infty - T_A) \quad (F.14)$$

Los coeficientes para la ecuación para T_A están dados por

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P \frac{\delta x}{2} + hA$	0	$(\frac{k}{\delta x} A)$	S_P	$S_u + hAT_\infty$

F.1.2. Ejemplo 2: Generación de calor

En este ejemplo se discutirá la inclusión del término de generación de calor.

La figura muestra una gran placa de espesor $L = 2$ cm con una conductividad térmica constante $K = 0.5$ w/mK y con una generación de calor uniforme $q = 1000$ kW/m³. las caras A y B están a temperatura constante de 100°C y 200°C respectivamente. Asumiendo que las dimensiones en Y y Z son lo suficiente grandes como para que solo

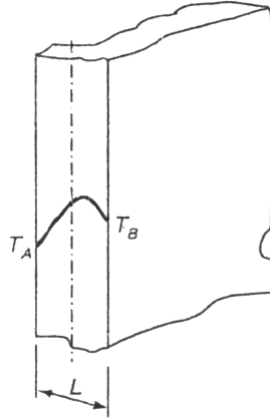


Figura F.5: Placa de espesor 2cm con generación de calor.

se observen gradientes de temperaturas importantes en la dirección X, Calcular la distribución de temperatura en estado estable. Comparar el resultado numérico con el resultado analítico. La ecuación que rige el fenómeno es,

$$\frac{d}{dx}\left(k\frac{dT}{dx}\right) + q = 0 \quad (\text{F.15})$$

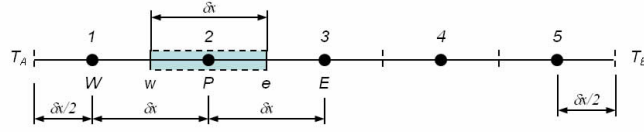
Solución

Como antes el método de solución se demuestra usando una malla simple. El dominio se divide en cinco volúmenes de control resultando en un $\delta x = 0,004\text{m}$; y además se considera una unidad de área en el plano Y-Z.

La integración de la ecuación sobre un volumen de control es,

$$\frac{d}{dx}\left(k\frac{dT}{dx}\right)dV + qdV = 0 \quad (\text{F.16})$$

Figura F.6: Malla usada para la solución del ejemplo 2.



El primer término de la ecuación se tratará como en el ejemplo de arriba. La segunda integral, el término fuente de la ecuación, se evalúa calculando la generación promedio dentro de cada volumen de control. La ecuación se puede escribir entonces como,

$$\left[(kA \frac{dT}{dx})_e - (kA \frac{dT}{dx})_w \right] + q\Delta V = 0 \quad (\text{F.17})$$

$$\left[k_e A \left(\frac{T_E - T_p}{\delta x} \right) - k_w A \left(\frac{T_p - T_W}{\delta x} \right) \right] + q\Delta V = 0 \quad (\text{F.18})$$

La ecuación de arriba se puede reescribir como

$$\left(\frac{k_e A}{\delta x} + \frac{k_w A}{\delta x} \right) T_p = \left(\frac{k_w A}{\delta x} \right) T_W + \left(\frac{k_e A}{\delta x} \right) T_E + qA\delta x \quad (\text{F.19})$$

Esta ecuación se puede escribir de forma general como

$$a_p T_p = a_w T_w + a_E T_E + S_u \quad (\text{F.20})$$

Dado que $k_w = k_e = k$, se tienen los siguientes coeficientes:

La ecuación en forma general es válida solamente para los volúmenes de control en los puntos nodales 2,3 y 4.

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P$	$\frac{kA}{\delta x}$	$\frac{kA}{\delta x}$	0	$qA\delta x$

Para incorporar las condiciones de frontera en los nodos 1 y 5, se realiza una aproximación lineal entre un punto frontera y el punto nodal adyacente. En el nodo 1, se conoce la temperatura al oeste. La integración de la ecuación en el volumen de control 1 produce

$$\left[\left(k_e A \frac{dT}{dx} \right)_e - \left(k A \frac{dT}{dx} \right)_w \right] + q \Delta v = 0 \quad (\text{F.21})$$

La introducción de la aproximación lineal para la temperatura entre A y P resulta en

$$\left[k_e A \left(\frac{T_E - T_p}{\delta x} \right) - k_A A \left(\frac{T_p - T_A}{\delta x/2} \right) \right] + q A \delta x = 0 \quad (\text{F.22})$$

Una vez más, la ecuación de arriba se puede reescribir de forma general como

$$a_p T_p = a_w T_w + a_e T_e + S_u \quad (\text{F.23})$$

si $k_e = k_A = k$, los coeficientes involucrados son

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P$	0	$\frac{kA}{\delta x}$	$\frac{-2kA}{\delta x}$	$qA\delta x + \frac{2kA}{\delta x}T_A$

Para el punto nodal 5, se realiza igual procedimiento, con los siguientes resultados en los coeficientes

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P$	$\frac{kA}{\delta x}$	0	$\frac{-2kA}{\delta x}$	$qA\delta x + \frac{2kA}{\delta x}T_B$

La sustitución de los valores numéricos para $A = 1m^2$, $k = 0,5W/mK$, $q = 1000kW/m^3$ y $\delta x = 0,004m$, en las respectivas ecuaciones produce los coeficientes consignados en la tabla anterior.

Cuadro F.2: Coeficientes nodales para el ejemplo 2.

<i>Nodo</i>	a_W	a_E	S_u	S_P	$a_P = a_E + a_W - S_P$
1	0	125	$4000 + 250T_A$	-250	375
2	125	125	4000	0	250
3	125	125	4000	0	250
4	125	125	4000	0	250
5	125	0	$4000 + 250T_B$	-250	375

Las ecuaciones en forma matricial adquiere la forma

$$\begin{bmatrix} 375 & -125 & 0 & 0 & 0 \\ -125 & 250 & -125 & 0 & 0 \\ 0 & -125 & 250 & -125 & 0 \\ 0 & 0 & -125 & 250 & -125 \\ 0 & 0 & 0 & -125 & 250 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 29000 \\ 4000 \\ 4000 \\ 4000 \\ 54000 \end{Bmatrix}$$

La solución del conjunto de ecuaciones de arriba es

$$\begin{Bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 150 \\ 218 \\ 254 \\ 258 \\ 230 \end{Bmatrix}$$

Computación con la solución analítica

La solución analítica a este problema se obtiene integrando dos veces en la ecuación general que rige la generación de calor respecto de x y aplicando las condiciones de frontera correspondientes. El resultado es,

$$T = \left[\frac{T_B - T_A}{L} + \frac{q}{2k} (L - x) \right] x + T_A \quad (\text{F.24})$$

La comparación entre la solución obtenida aplicando volúmenes finitos y la solución exacta se muestra en la siguiente tabla y en la siguiente figura. Se observa que, aún con una malla de cinco nodos, se obtiene un buen ajuste entre los resultados numéricos y los resultados analíticos.

Cuadro F.3: Comparación entre los resultados obtenidos aplicando volúmenes finitos y la solución analítica.

<i>Nodo</i>	1	2	3	4	5
Distancia (m)	0.002	0.006	0.01	0.014	0.018
Solución por volúmenes finitos	150	218	254	258	230
Solución exacta	146	214	250	254	226
Error (%)	2.73	1.86	1.60	1.57	1.76

F.1.3. Ejemplo 3: Conducción en una aleta

Trataremos el problema para la transferencia de calor de una aleta circular a través de su longitud.

La figura F.8 muestra una aleta de sección circular A. La base de la aleta está $T_B = 100$ °C y el extremo libre se encuentra aislado. La aleta está expuesta a una temperatura ambiente $T_\infty = 20$ °C. La ecuación para la transferencia de calor unidimensional en este caso es:

$$\frac{d}{dx} \left(kA \frac{dT}{dx} \right) - hP(T - T_\infty) = 0 \quad (\text{F.25})$$

Donde h es el coeficiente de transferencia de calor por convección, P es el perímetro, k la conductividad térmica y T_∞ la temperatura del ambiente. Se debe calcular la distribución de temperaturas a través de la aleta y compararla con la solución analítica dada por :

$$\frac{T - T_\infty}{T_B - T_\infty} = \frac{\cosh [m(L - x)]}{\cosh(mL)} \quad (\text{F.26})$$

donde $m^2 = hP/kA$, L es la longitud de la aleta y x es la distancia a lo largo de esta. Para $L = 1$ m, $hP/kA = 25 \text{m}^{-2}$ se realizará la solución de este problema.

Si kA es constante, la ecuación (F.25) se puede escribir como:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{dT}{dx} \right) - m^2(T - T_\infty) = 0 \quad (\text{F.27})$$

Figura F.7: Comparación de los resultados analíticos para el ejemplo 2.

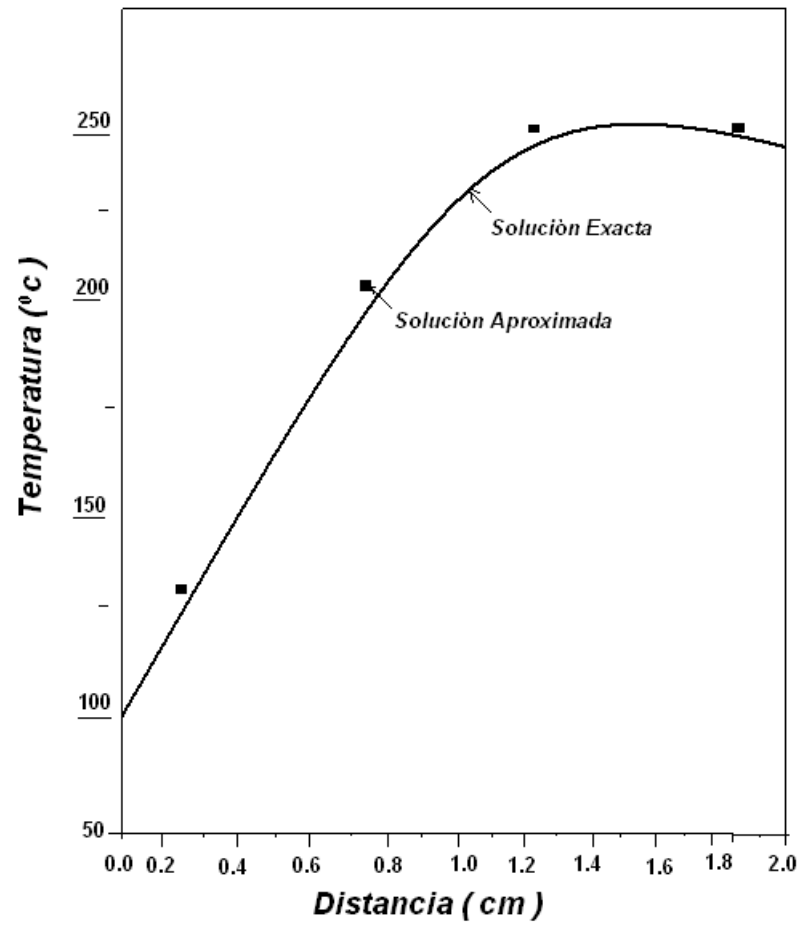


Figura F.8: Aleta sección circular aislada en el extremo.

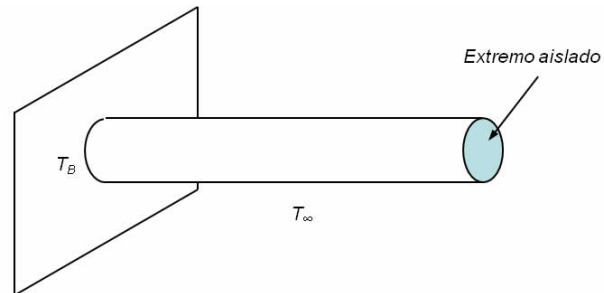
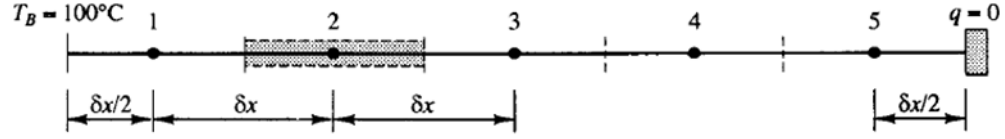


Figura F.9: Malla usada para la solución del ejemplo 3.



Cuadro F.4: Coeficientes para los nodos interiores.

a_p	a_w	a_E	S_p	S_u
$a_E + a_w - S_p$	$\frac{1}{\delta x}$	$\frac{1}{\delta x}$	$-m^2 \delta x$	$m^2 \delta x T_\infty$

Al integrar la ecuación anterior sobre un volumen de control como el mostrado en la figura F.9 produce:

$$\int_{\Delta V} \frac{d}{dx} \left(\frac{dT}{dx} \right) dV + \int_{\Delta V} m^2 (T - T_\infty) dV = 0 \quad (F.28)$$

La primera integral se tratará como en los ejemplos anteriores y la segunda se evaluará asumiendo que la integral es localmente constante dentro de cada volumen de control.

$$\left[\left(A \frac{dT}{dx} \right)_e - \left(A \frac{dT}{dx} \right)_w \right] - [m^2 (T_p - T_\infty) A \delta x] = 0 \quad (F.29)$$

para los nodos interiores la ecuación se puede escribir como:

$$\left[\left(\frac{T_E - T_p}{\delta x} \right)_e - \left(\frac{T_p - T_w}{\delta x} \right)_w \right] - [m^2 (T_p - T_\infty) \delta x] = 0 \quad (F.30)$$

La ecuación anterior se puede reescribir como:

$$\left(\frac{1}{\delta x} + \frac{1}{\delta x} \right) T_p = \left(\frac{1}{\delta x} \right) T_w + \left(\frac{1}{\delta x} \right) T_E + m^2 \delta x T_\infty - m^2 \delta x T_p \quad (F.31)$$

que se puede representar como:

$$a_p T_p = a_w T_w + a_E T_E + S_u \quad (F.32)$$

Los coeficientes para los nodos interiores se muestran en el cuadro F.4.

Ahora se aplicarán las condiciones de frontera en los puntos nodales 1 y 5. En el nodo 1, esta condición de frontera se tratará igual que en los ejemplos anteriores:

$$\left[\left(\frac{T_E - T_p}{\delta x} \right)_e - \left(\frac{T_p - T_B}{\delta x/2} \right)_w \right] - [m^2 (T_p - T_\infty) \delta x] = 0 \quad (F.33)$$

los coeficientes para la condición de frontera del nodo 1 se muestran en el cuadro F.5.

Cuadro F.5: Coeficientes condición de frontera nodo 1.

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P$	0	$\frac{1}{\delta x}$	$-m^2 \delta x - \frac{2}{\delta x}$	$m^2 \delta x T_\infty + \frac{2}{\delta x} T_B$

Cuadro F.6: Coeficientes condición de frontera nodo 5.

a_P	a_W	a_E	S_P	S_u
$a_E + a_W - S_P$	$\frac{1}{\delta x}$	0	$-m^2 \delta x$	$m^2 \delta x T_\infty$

En el nodo 5 el flujo de calor en la frontera oeste es cero, entonces:

$$\left[0 - \left(\frac{T_P - T_W}{\delta x} \right) \right] - [m^2(T_P - T_\infty)] = 0 \quad (\text{F.34})$$

por lo tanto el coeficiente en el oeste es cero y no existen términos fuentes adicionales asociados con la condición de frontera de flujo de calor cero. Los coeficientes para la condición de frontera del nodo 5 se muestran en el cuadro F.6.

La forma matricial del conjunto de ecuaciones es:

$$\begin{bmatrix} 20 & -5 & 0 & 0 & 0 \\ -5 & 15 & -5 & 0 & 0 \\ 0 & -5 & 15 & -5 & 0 \\ 0 & 0 & -5 & 15 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & -5 & 10 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1100 \\ 100 \\ 100 \\ 100 \\ 100 \end{Bmatrix} \quad (\text{F.35})$$

La solución al anterior conjunto de ecuaciones es:

$$\begin{Bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 64,22 \\ 36,91 \\ 26,50 \\ 22,60 \\ 21,30 \end{Bmatrix} \quad (\text{F.36})$$

F.1.4. Comparación con la solución analítica

El cuadro F.7 muestra una comparación de los resultados obtenidos usando volúmenes finitos con los obtenidos con la solución analítica. El máximo porcentaje de error es de

Cuadro F.7: Comparación resultados numéricos y analíticos ejemplo 3.

NODO	DISTANCIA	SOL. NUMÉRICA	SOL. EXACTA	DIFERENCIA	%ERROR
1	0.1	64.22	68.52	4.30	6.27
2	0.3	36.91	37.86	0.95	2.51
3	0.5	26.50	26.61	0.11	0.41
4	0.7	22.60	22.53	-0.07	-0.31
5	0.9	21.30	21.21	-0.09	-0.42

Cuadro F.8: Comparacion resultados numéricos y analíticos ejemplo 3 con una malla de 10 elementos.

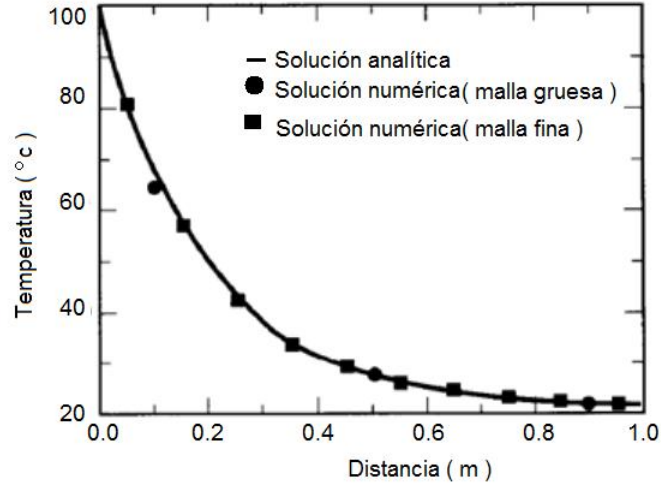
NODO	DISTANCIA	SOL. NUMÉRICA	SOL. EXACTA	DIFERENCIA	%ERROR
1	0.05	80.59	81.31	1.72	2.08
2	0.15	56.94	57.79	0.85	1.47
3	0.25	42.53	42.93	0.40	0.93
4	0.35	33.74	33.92	0.18	0.53
5	0.45	28.40	28.46	0.06	0.21
6	0.55	25.16	25.17	0.01	0.03
7	0.65	23.21	23.19	-0.02	-0.08
8	0.75	22.06	22.03	-0.03	-0.13
9	0.85	21.47	21.39	-0.08	-0.37
10	0.95	21.11	21.11	-0.02	-0.09

6 %. Se puede mejorar la solución numérica empleando una malla mas fina. Considérese el mismo problema pero ahora subdividiendo la barra en 10 volúmenes de control. Los resultados numéricos obtenidos con la segunda aproximación muestran un mejor ajuste con la solución analítica, pues ahora el error máximo es de 2 % como se puede apreciar en el cuadro F.8 y la figura F.10.

F.2. CONDUCTIVIDAD TÉRMICA EN LA INTERFACE DE LA CELDA

En la ecuación F.4 y sus coeficientes asociados, se ha usado k_e para representar el valor de la conductividad k en la interface e del volúmen de control; similarmente, k_w referida a la interface w . Cuando la conductividad k es función de x , seguramente se conocerá

Figura F.10: comparacion de los resultados numéricos con los analíticos para el ejemplo 3



la conductividad en los nodos W, P y E. Para estos casos se necesita una expresión que evalúe la conductividad en la interface en términos de los valores de la conductividad en los puntos nodales.

Una conductividad no uniforme puede aparecer debido a una no homogeneidad del material, como una tabla compuesta. Aún en un material homogéneo, si la conductividad depende de la temperatura puede conducir a una variación de la conductividad en respuesta a la distribución de temperatura. En el tratamiento de la ecuación diferencial general para φ , el coeficiente de difusión Γ se ha introducido de la misma forma que la conductividad k .

El procedimiento más extendido para obtener la conductividad en la interface k_e es asumir una variación lineal de k entre los nodos P y E. Entonces

$$k_e = f_e k_P + (1 - f_e) k_E \quad (\text{F.37})$$

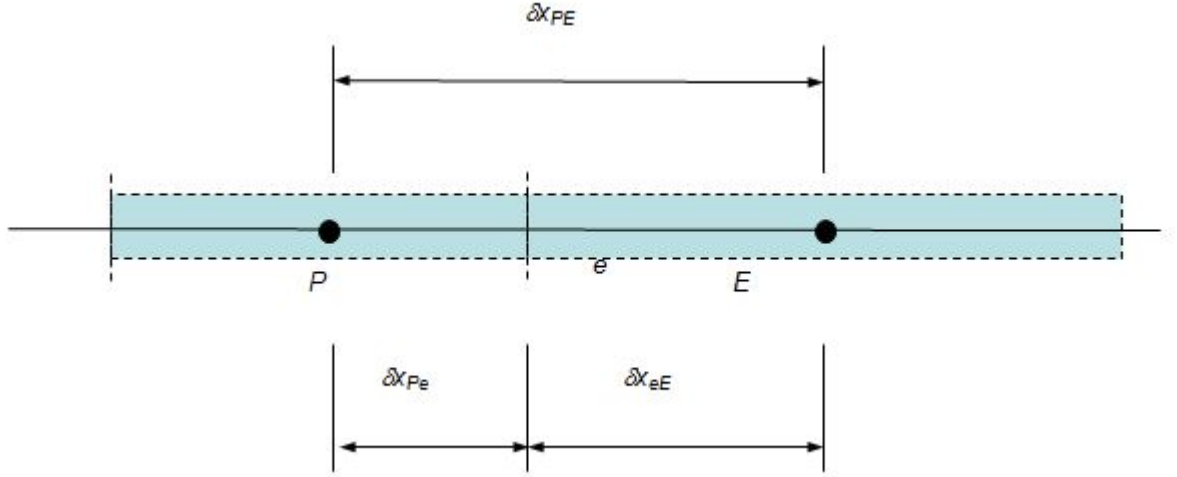
donde f_e es un factor de interpolación que depende de la distancia mostrada en la figura F.11

$$f_e \equiv \frac{\delta x_{eE}}{\delta x_{PE}} \quad (\text{F.38})$$

Si la interface e está en el centro entre los puntos de la malla, f_e sería 0.5, y k_e sería la media aritmética entre k_P y k_E .

Esta simple forma de calcular la conductividad puede conducir a implicaciones incorrectas y no puede manejar exactamente los abruptos cambios de conductividad

Figura F.11: Distancias asociadas con la interfacee



que ocurren en los materiales compuesto. Afortunadamente, se puede formular una alternativa mejor y con una simplicidad comparable. Para desarrollar esta alternativa, se debe reconocer que no es en sí el valor de la conductividad lo que interesa. El objetivo principal es obtener una buena representación del flujo de calor q_e en la interface por medio de

$$q_e = \frac{k_e (T_P - T_E)}{\delta x_{PE}} \quad (\text{F.39})$$

La expresión correcta para k_e es aquella que proporcione un correcto q_e . Considere que el volúmen de control que está alrededor del nodo P tiene una conductividad uniforme e igual a k_P , y que alrededor de E existe un material con conductividad uniforme k_E . Para una tabla compuesta entre los nodos P y E , un análisis unidimensional en estado estable (sin términos fuente) produce

$$q_e = \frac{T_P - T_E}{\delta x_{Pe}/k_P + \delta x_{eE}/k_E} \quad (\text{F.40})$$

combinando las ecuaciones del factor de interpolación y la ecuación anterior se obtiene

$$k_e = \left(\frac{1 - f_e}{k_P} + \frac{f_e}{k_E} \right)^{-1} \quad (\text{F.41})$$

El uso de la ecuación anterior en los coeficientes de la ecuación (F.4) conduce la siguiente expresión para a_E :

$$a_E = \left[\frac{\delta x_{Pe}}{k_P} + \frac{\delta x_{eE}}{k_E} \right]^{-1} \quad (\text{F.42})$$

Se puede observar una expresión similar para $a_W \cdot a_E$ representa la *conductancia* del material entre los puntos P y E.

Las ventajas de la formulación presentada se puede mostrar facilmente con los dos siguientes casos límites:

- $k_E \rightarrow 0$ entonces , a partir de la ecuación ((F.41))

$$k_e \rightarrow 0 \quad (F.43)$$

Esto implica que el flujo de calor en la interface es cero, lo que corresponde a una frontera aislada, como debiera ser. En la formulación aritmética, tendrá un valor no cero, lo que indicaría una situación de flujo de calor, lo que no es cierto.

- $k_P \gg k_E$ entonces

$$k_e \rightarrow \frac{k_E}{f_e} \quad (F.44)$$

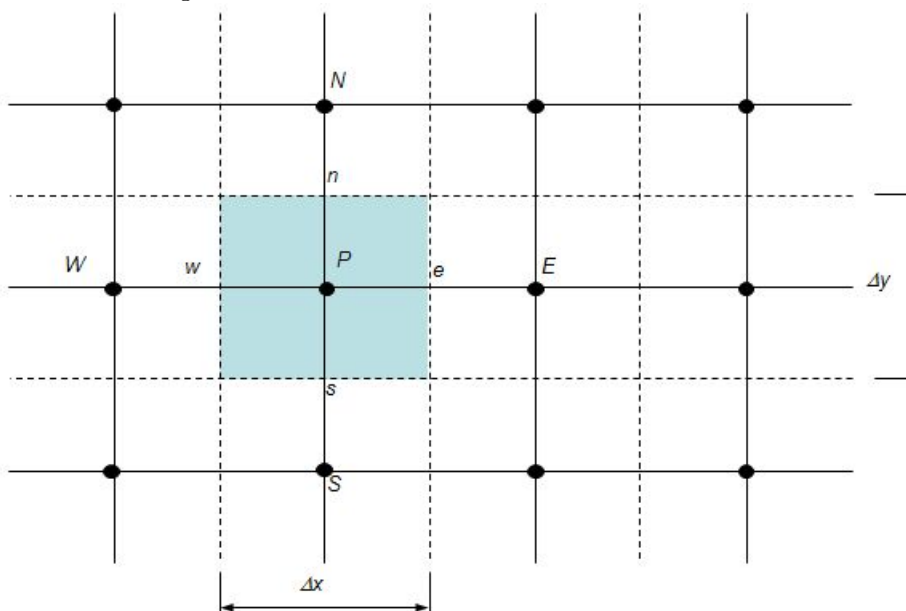
Este resultado tiene don implicaciones. La ecuación anterior indica que la conductividad en la interface k_e no depende de k_P . Esto se espera debido a que un material con alta conductividad alrededor de P ofrecería una resistencia térmica despreciable en comparación con la ejercida por el material en E(la fórmula de la media aritmética incluiría el efecto de k_P en k_e). La otra implicación es que k_e no es igual a k_E sino que multiplicada por el factor $1/f_e$. Una pequeña reflexión mostrará lo apropiado de esto. El objetivo es encontrar el valor correcto de q_e a través de la ecuación ((F.39)). El uso de la ecuación anterior produce

$$q_e = \frac{k_E (T_P - T_E)}{\delta x_{eE}} \quad (F.45)$$

Cuando $k_P \gg k_E$, la temperatura T_P prevalecerá al lado derecho de la interface e , mientras que la caída de la temperatura $T_P - T_E$ ocurrirá en la distancia δx_{eE} . De esta manera, el valor correcto del flujo de calor será como está dado por la ecuación ((F.45)). En otras palabras, el factor f_e en la ecuación ((F.44)) puede ser visto como una compensación para usar la distancia nominal δx_{PE} en la ecuación ((F.39)).

La fórmula recomendada para la conductividad interfacial en la ecuación ((F.41)) se basa en una situación estable, sin términos fuente, unidimensional en que la

Figura F.12: Parte de una malla bidimensional.



conductividad varía de una forma escalonada de un volumen de control a otro. Aún en situaciones con términos fuente o con una variación continua de la conductividad, esta fórmula funciona mejor que la fórmula aritmética.

F.3. DIFUSIÓN BIDIMENSIONAL EN ESTADO ESTABLE

Considere la ecuación de difusión en estado estable para bidimensional dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S = 0 \quad (\text{F.46})$$

En la Figura F.12 se muestra una porción de la malla usada para obtener la ecuación discretizada. Además de los vecinos (E) y (W) un nodo general P ahora tiene unos vecinos norte (N) y sur (S).

Cuando se integra la ecuación anterior sobre un volumen de control se obtiene:

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx * dy + \int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx * dy + \int_{\Delta V} S dV = 0 \quad (\text{F.47})$$

Si $A_e = A_w = \Delta y$ y $A_n = A_s = \Delta x$, se obtiene

$$\left[\Gamma_e A_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w A_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] + \left[\Gamma_n A_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \Gamma_s A_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (\text{F.48})$$

Se pueden escribir unas expresiones para calcular el flujo de ϕ a través de las caras del volumen de control.

- Flujo a través de la cara oeste: $\Gamma_w A_w \frac{\partial \phi}{\partial x} = \Gamma_w A_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\delta x_{WP}}$
- Flujo a través de la cara este: $\Gamma_e A_e \frac{\partial \phi}{\partial x} = \Gamma_e A_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\delta x_{PE}}$
- Flujo a través de la cara sur: $\Gamma_s A_s \frac{\partial \phi}{\partial y} = \Gamma_s A_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\delta x_{SP}}$
- Flujo a través de la cara norte: $\Gamma_n A_n \frac{\partial \phi}{\partial y} = \Gamma_n A_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\delta x_{PN}}$

Sustituyendo las expresiones anteriores se obtiene:

$$\Gamma_e A_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\delta x_{PE}} - \Gamma_w A_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\delta x_{WP}} + \Gamma_n A_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\delta y_{PN}} - \Gamma_s A_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\delta y_{SP}} + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (\text{F.49})$$

Si se linealiza el término fuente, $\bar{S} \Delta V = S_u + S_p \phi_P$, la Ecuación (F.49) se puede escribir

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} + \frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}} + \frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}} - S_p \right) \phi_P \\ & = \left(\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} \right) \phi_W + \left(\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} \right) \phi_E + \left(\frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}} \right) \phi_N + \left(\frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}} \right) \phi_S + S_u \end{aligned} \quad (\text{F.50})$$

La ecuación anterior para los nodos interiores se puede escribir como una ecuación discretizada general dada por

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_u \quad (\text{F.51})$$

Donde,

a_W	a_E	a_N	a_S	a_P
$\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}}$	$\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{WP}}$	$\frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}}$	$\frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}}$	$a_W + a_E + a_N + a_S - S_p$

Por ultimo en la frontera, donde se conoce el valor de la propiedad o el flujo de la misma, se deben modificar las ecuaciones para incorporar estas condiciones de frontera, tal procedimiento consiste:

- Imponer el coeficiente del respectivo lado de la frontera a cero.
- El flujo se introduce como un término fuente que se anexa a los términos existentes S_u y S_p .

F.3.1. Ejemplo de Conducción de calor bidimensional

En la figura F.13 se muestra una placa bidimensional. Con un $k = 1000W/mK$, la frontera oeste recibe un flujo de calor constante de $500kW/m^2$ y las fronteras sur y este están aisladas. Si se mantiene la frontera norte a una temperatura de $100^\circ C$, calcule la distribución de temperatura de la placa. Usar una malla uniforme con $\Delta x = \Delta y = 0,1m$.

La ecuación para la transmisión de calor en estado estable en una placa está regida por

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0 \quad (F.52)$$

Cuya solución de forma discretizada se puede escribir como

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_N T_N + a_S T_S \quad (F.53)$$

Donde

$$a_W = \frac{k}{\Delta x} A_W; \quad a_E = \frac{k}{\Delta x} A_E; \quad a_S = \frac{k}{\Delta x} A_s; \quad a_N = \frac{k}{\Delta x} A_N \quad (F.54)$$

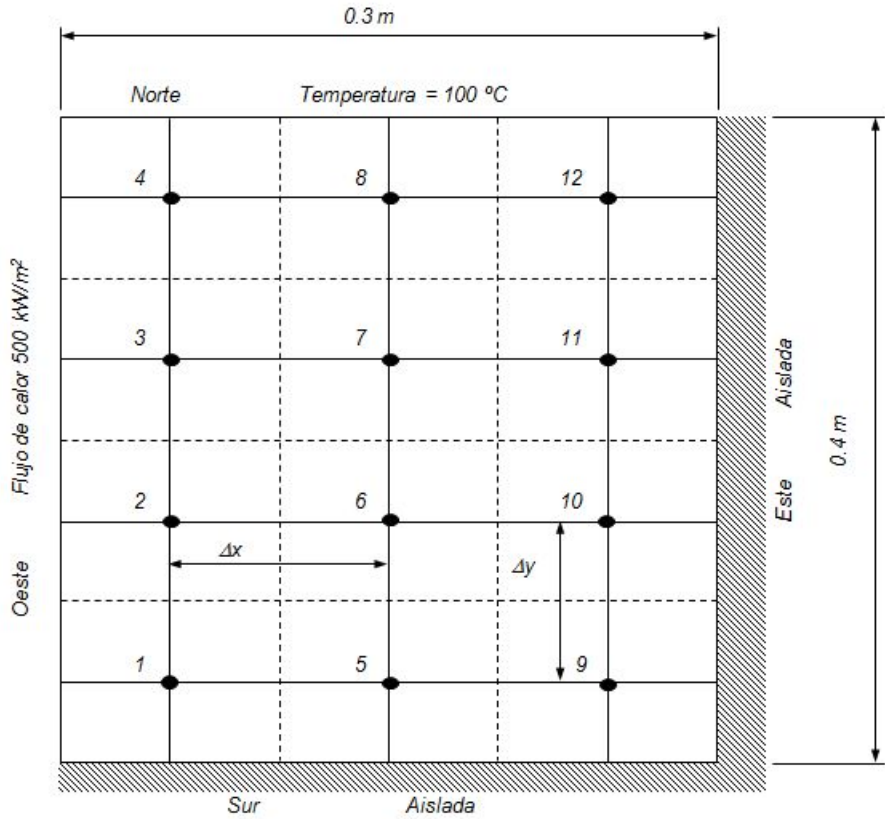
$$a_P = a_W + a_E + a_N + a_S \quad (F.55)$$

En este caso los coeficientes son iguales

$$a_W = a_E = a_S = a_N = \frac{100}{0,1} \times (0,1 \times 0,01) = 10$$

En los nodos interiores 6 y 7

Figura F.13: Placa y condiciones de frontera para el ejemplo de conducción de calor bidimensional.



$$a_P = a_W + a_E + a_N + a_S = 40$$

De manera que las ecuaciones discretizadas para los nodos 6 y 7 son

$$40T_6 = 10T_2 + 10T_{10} + 10T_5 + 10T_7$$

$$40T_7 = 10T_3 + 10T_{12} + 10T_6 + 10T_8$$

Todos los nodos excepto los nodos 6 y 7 tienen fronteras adyacentes. En un nodo de frontera la ecuación discretizada adquiere la forma

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_N T_N + a_S T_S + S_u$$

$$a_P = a_W + a_E + a_N + a_S - S_p$$

Las condiciones de frontera se incorporan en la ecuación discretizada imponiendo el coeficiente respectivo a cero e incluyendo los términos fuentes a través de S_u y S_p .

Los coeficientes y los términos fuentes de las ecuaciones discretizadas para todos los puntos se muestran en la Tabla F.9.

La solución del sistema de ecuaciones resultantes proporciona las temperaturas de cada uno de los nodos mostradas en la Tabla F.10.

F.4. DIFUSIÓN TRIDIMENSIONAL EN ESTADO ESTABLE

La ecuación de difusión en una situación tridimensional está gobernada por

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S = 0$$

Cuadro F.9: Coeficientes y términos fuente nodales para el ejemplo.

Nodo	a_N	a_S	a_W	a_E	a_P	S_u
1	10	0	0	10	20	500
2	10	10	0	10	30	500
3	10	10	0	10	30	500
4	0	10	0	10	40	2500
5	10	0	10	10	30	0
6	10	10	10	10	40	0
7	10	10	10	10	40	0
8	0	10	10	10	50	2000
9	10	0	10	0	20	0
10	10	10	10	0	30	0
11	10	10	10	0	30	0
12	0	10	10	0	40	2000

Cuadro F.10: Solución para el ejemplo.

Nodo	1	2	3	4	5	6
T	260.0	242.2	205.6	146.3	222.7	211.1
Nodo	7	8	9	10	11	12
T	178.1	129.7	212.1	196.5	166.2	124.0

Cuadro F.11: Coeficientes y términos fuentes nodales para el ejemplo.

<i>Nodo</i>	a_N	a_S	a_W	a_E	a_P	a_u
1	10	0	0	10	20	500
2	10	10	0	10	30	500
3	10	10	0	10	30	500
4	0	10	0	10	40	2500
5	10	0	10	10	30	0
6	10	10	10	10	40	0
7	10	10	10	10	40	0
8	0	10	10	10	50	2000
9	10	0	10	0	20	0
10	10	10	10	0	30	0
11	10	10	10	0	30	0
12	0	10	10	0	40	2000

Cuadro F.12: Solución para el ejemplo.

<i>Nodo</i>	1	2	3	4	5	6
<i>T</i>	260.0	242.2	205.6	146.3	222.7	211.1
<i>Nodo</i>	7	8	9	10	11	12
<i>T</i>	178.1	129.7	212.1	196.5	166.2	124.0

En este caso se usa una malla tridimensional para dividir el dominio. En la figura que representa el volumen de control tridimensional con los nodos vecinos se muestra un volumen de control típico.

La celda que contiene al nodo p tiene ahora seis nodos vecinos identificados como oeste (W), este (E), sur (S), norte (N), abajo (B), arriba (T). Como antes, la notación, w , e , s , n , b , y t se usa para referirse a las respectivas caras del volumen de control oeste, este, sur, norte, abajo, y arriba.

La integración de la ecuación de difusión en una situación tridimensional sobre el volumen de control mostrado da

$$\left[\Gamma_e A_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w A_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] + \left[\Gamma_n A_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \Gamma_s A_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] + \left[\Gamma_t A_t \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_t - \Gamma_b A_b \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b \right] + S \Delta V = 0$$

Siguiendo el procedimiento desarrollado para los casos uno y bidimensional, la ecuación discretizada anterior es

$$\left[\Gamma_e A_e \frac{(\phi_E - \phi_p)}{\delta x_{PE}} - \Gamma_w A_w \frac{(\phi_p - \phi_w)}{\delta x_{WP}} \right] + \left[\Gamma_n A_n \frac{(\phi_N - \phi_p)}{\delta y_{PN}} - \Gamma_s A_s \frac{(\phi_p - \phi_S)}{\delta y_{SP}} \right] + \left[\Gamma_t A_t \frac{(\phi_T - \phi_p)}{\delta z_{PT}} - \Gamma_b A_b \frac{(\phi_p - \phi_B)}{\delta z_{BP}} \right] + (S_u + S_p \phi_p) = 0$$

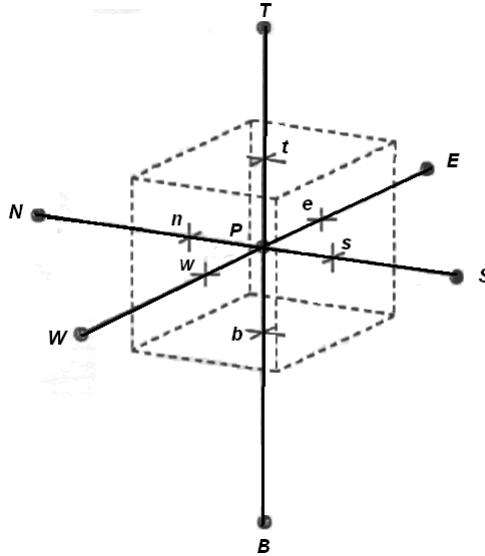
Como antes esta ecuación se puede reescribir y así obtener la ecuación discretizada general para los nodos interiores:

$$a_p \phi_p = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_B \phi_B + a_T \phi_T + S_u$$

Donde las condiciones de frontera se pueden introducir de igual forma a lo descrito en los anteriores ejemplos.

a_W	a_E	a_N	a_S	a_B	a_T	a_p
$\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}}$	$\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{EP}}$	$\frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}}$	$\frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}}$	$\frac{\Gamma_b A_b}{\delta z_{BP}}$	$\frac{\Gamma_t A_t}{\delta z_{TP}}$	$a_W + a_E + a_N + a_S + a_B + a_T - S_p$

Figura F.14: Volumen de control tridimensional con los nodos vecinos.



F.5. RESUMEN PARA PROBLEMAS DE DIFUSIÓN

- Se ha encontrado que las ecuaciones discretizadas para una, dos y tres dimensiones para problemas de difusión tiene la formulación general dad por:

$$a_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + S_u \quad (F.56)$$

Donde \sum indica la suma sobre todos los nodos vecinos (nb), y a_{nb} son los coeficientes de los nodos vecinos. ϕ es el valor de la propiedad en los nodos vecinos y $S_u + S_p \phi_p$ es la linealización del termino fuente.

- En todos los casos los coeficientes alrededor de P satisfacen la ecuación:

$$a_p = \sum a_{nb} - S_p \quad (F.57)$$

- Los términos fuentes se pueden incluir a partir de su forma linealizada $\bar{S} \Delta V = S_u + S_p \phi$ además se debe especificar S_u y S_p .
- Las condiciones de frontera se introducen eliminando el vinculo al lado de la frontera e introduciendo el flujo de la propiedad por medio de los términos fuente adicionales S_u y S_p .

Apéndice G

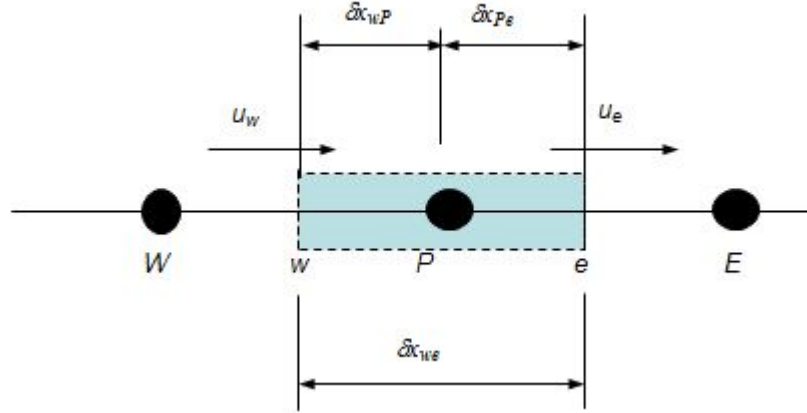
CONVECCIÓN DIFUSIÓN EN ESTADO ESTABLE

El transporte difusivo es multidireccional ya que las propiedades transportadas por choques moleculares lo son en todas las direcciones. Si la difusión se realiza al mismo ritmo en todas las direcciones se dice que el medio es isótropo para la difusión. Este hecho está ligado al carácter escalar de los coeficientes de difusión, circunstancia bastante habitual en Mecánica de Fluidos. En algunos casos relacionados con el cálculo de ciertas variables de flujos turbulentos los coeficientes de difusión no son escalares sino tensores (diagonales o no, pero en cualquier caso simétricos), por lo que existe una dirección predominante de transporte. La descripción de estos casos, sin embargo, aun cuando matemáticamente no son más complicados, se considerarán exclusivamente situaciones en las que la difusión es igual en todas las direcciones.

La convección, al contrario que la difusión, tiene una dirección preferente de transporte de información, la marcada por la velocidad convectiva. Un punto del dominio se ve fuertemente influenciado por los valores de los puntos aguas arriba, pero apenas por aquellos que están aguas abajo. Cuanto mayor sea la importancia de la convección frente a la difusión, mayor será la diferencia de influencias. De hecho si no existiera difusión, el valor de la variable en un punto cualquiera no dependería en absoluto de los valores que la variable toma en puntos aguas abajo. Esta propiedad afecta profundamente a las diferentes propuestas de discretización para el término convectivo.

En problemas donde el flujo del fluido juega un papel significativo se debe tener en cuenta los efectos de la convección. La difusión siempre ocurre al lado de la convección de manera que en esta sección se examinarán los métodos para predecir la convección

Figura G.1: Volumen de control alrededor del punto P.



y la difusión combinada. En el análisis presentado en esta sección no se hará ninguna referencia acerca de la evaluación de las velocidades en las caras del volumen de control. Se asumirá que de alguna forma se conocen. El método para calcular la velocidad será discutido en otra sección.

G.1. CONVECCIÓN-DIFUSIÓN ESTABLE UNIDIMENSIONAL

La ecuación de convección-difusión en estado de una propiedad ϕ en un campo de flujo u unidimensional dado está gobernado por

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (\text{G.1})$$

El flujo también debe satisfacer la ecuación de continuidad, entonces

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0 \quad (\text{G.2})$$

Para la deducción de la ecuación discretizada se considerará el volumen de control mostrado en la Figura G.1

La integración de la primera ecuación mostrada de transporte sobre el volumen de control de la Figura G.1 es

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w \quad (\text{G.3})$$

Y la integración de la ecuación de continuidad (G.2)

$$(\rho u A)_e - (\rho u A)_w = 0 \quad (\text{G.4})$$

Para obtener las ecuaciones discretizadas para el problema de convección difusión resulta conveniente definir dos variable F y D

$F = \rho u$ Flujo másico por unidad de área.

$D = \frac{\Gamma}{\delta x_{WP}}$ Conductancia de difusión en las caras del volumen de control.

Los valores en las caras del volumen de control de las variables F y D se pueden escribir como

$$F_w = (\rho u)_w, \quad F_e = (\rho u)_e \quad (\text{G.5})$$

$$D_w = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}}, \quad D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} \quad (\text{G.6})$$

La ecuación integrada de convección-difusión se puede escribir ahora como

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (\text{G.7})$$

Y la ecuación de continuidad como

$$F_e - F_w = 0 \quad (\text{G.8})$$

Se asume que el campo de velocidades es conocido, el cual es necesario para calcular los valores de F_e y F_w . Para resolver la ecuación integrada de convección-difusión se necesita calcular el valor de la propiedad ϕ en las caras e y w .

G.2. ESQUEMA DE DIFERENCIA CENTRADA

Esta aproximación ha sido usada para representar los términos de difusión de las anteriores ecuaciones y ahora se intentará calcular los valores de la propiedad ϕ en la cara de la celda y resolver los términos convectivos. Para una malla uniforme:

$$\phi_e = (\phi_p + \phi_E)/2 \quad (\text{G.9})$$

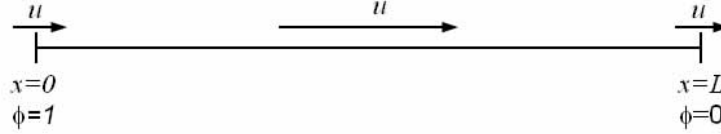
$$\phi_w = (\phi_W + \phi_P)/2 \quad (\text{G.10})$$

La sustitución de las ecuaciones G.9 y G.10 en la ecuación integrada de convección difusión produce:

Cuadro G.1: Coeficientes para la ecuación discretizada.

a_W	a_E	a_P
$D_w + \frac{F_w}{2}$	$D_e - \frac{F_e}{2}$	$a_W + a_E + (F_e - F_w)$

Figura G.2: Representación del ejemplo: Convección-difusión unidimensional.



$$\frac{F_e}{2}(\phi_P + \phi_E) - \frac{F_w}{2}(\phi_W + \phi_P) = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (G.11)$$

esta ecuación se puede reagrupar como:

$$\left[\left(D_w - \frac{F_w}{2} \right) + \left(D_e + \frac{F_e}{2} \right) \right] \phi_P = \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \phi_W + \left(D_e + \frac{F_e}{2} \right) \phi_E \quad (G.12)$$

esta ecuación se puede reescribir usando a_W y a_E para los coeficientes de ϕ_W y ϕ_E :

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (G.13)$$

donde:

Para resolver un problema de convección-difusión unidimensional se escriben las ecuaciones discretizadas de la forma (G.13) para todos los nodos. Esto lleva a un conjunto de ecuaciones algebraicas que se resuelven para obtener la distribución de la propiedad ϕ . El proceso se ilustra a continuación mediante un ejemplo.

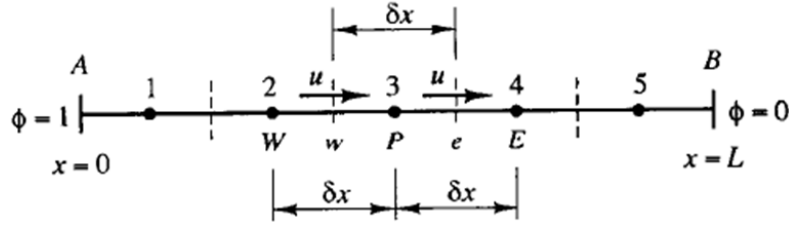
G.2.1. Ejemplo: Convección-difusión unidimensional

Una propiedad ϕ se transporta por medio de convección y difusión a través de un dominio unidimensional como se muestra en la figura G.2.

Para este problema las condiciones de frontera son : $\phi_0=1$ en $x=0$ y $\phi_L=0$ en $x=L$. Usando cinco celdas igualmente espaciadas y el esquema de diferencia centrada para convección y difusión se calculará la distribución de ϕ como función de x para los casos en que : $u=0.1\text{m/s}$, $u=2.5\text{m/s}$ con 5 nodos y $u=2.5\text{m/s}$ con 20 nodos. $L=1.0$ m, $\rho = 1,0\text{Kg/m}^3$, $\Gamma = 0,1\text{Kg/m/s}$.

La solución analítica para este problema es :

Figura G.3: Malla usada en la discretización del ejemplo: Convección-difusión unidimensional.



$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} = \frac{\exp(\rho u x / \Gamma) - 1}{\exp(\rho u L / \Gamma) - 1} \quad (\text{G.14})$$

El dominio se ha dividido en 5 volúmenes de control con $\delta x = 0,2\text{m}$ como se muestra en la figura G.3. Se debe recalcar que $F = \rho u$, $D = \Gamma / \delta x$, $F_E = F_w = F$ y $D_e = D_w = D$ en todo el dominio. Las fronteras se denotan por A y B.

La ecuación (G.13) y sus coeficientes se aplican a los nodos 2, 3 y 4., por otro lado para los nodos de frontera 1 y 5 necesitan un tratamiento especial dado que están adyacentes a las fronteras del dominio. El procedimiento consiste en integrar la ecuación de convección-difusión, y usando una diferencia central para los términos difusivos y convectivos a través de la cara oeste de la celda 1. El valor ϕ está especificado en la cara oeste de la celda ($\phi_w = \phi_A = 1$) y de esta manera no se necesita realizar ninguna aproximación en el flujo convectivo de esta frontera.

En el nodo 1:

$$\frac{F_e}{2}(\phi_P + \phi_E) - F_A \phi_A = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_A(\phi_P - \phi_A) \quad (\text{G.15})$$

para el volumen de control 5, el valor de ϕ en la cara este es conocido ($\phi_e = \phi_B = 0$).

Siguiendo el mismo procedimiento que para el volumen de control 1, se obtiene:

$$F_B \phi_B - \frac{F_w}{2}(\phi_P + \phi_W) = D_B(\phi_B - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (\text{G.16})$$

Al reagrupar las ecuaciones (G.15) y (G.16) se obtiene las ecuaciones discretizadas de la forma:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E - S_u \quad (\text{G.17})$$

con el coeficiente para el nodo central P:

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) - S_P \quad (\text{G.18})$$

Cuadro G.2: Coeficientes ejemplo: Convección-difusión unidimensional.

Nodos	a_W	a_E	S_P	S_u
1	0	$D-F/2$	$-(2D+F)$	$(2D+F)\phi_A$
2,3,4	$D+F/2$	$D-F/2$	0	0
5	$D+F/2$	0	$-(2D-F)$	$(2D-F)\phi_B$

Cuadro G.3: Coeficientes nodales para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 1.

Nodo	a_W	a_E	S_u	S_P	$a_P=a_W+a_E-S_P$
1	0	0.45	$1.1\phi_A$	1.1	1.55
2	0.55	0.45	0	0	1.0
3	0.55	0.45	0	0	1.0
4	0.55	0.45	0	0	1.0
5	0.55	0	$0.9\phi_B$	-0.9	1.45

Resumiendo:

Caso 1

Al reemplazar $u=0.1\text{m/s}$: $F=\rho u=0.1$, $D=\Gamma/\delta x=0.1/0.2=0.5$, se obtienen los coeficientes resumidos en el cuadro G.3.

La expresión matricial correspondiente es:

$$\begin{bmatrix} 1,55 & -0,45 & 0 & 0 & 0 \\ -0,55 & 1 & -0,45 & 0 & 0 \\ 0 & -0,55 & 1 & -0,45 & 0 \\ 0 & 0 & -0,55 & 1 & -0,45 \\ 0 & 0 & 0 & -0,55 & 1,45 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1,1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (\text{G.19})$$

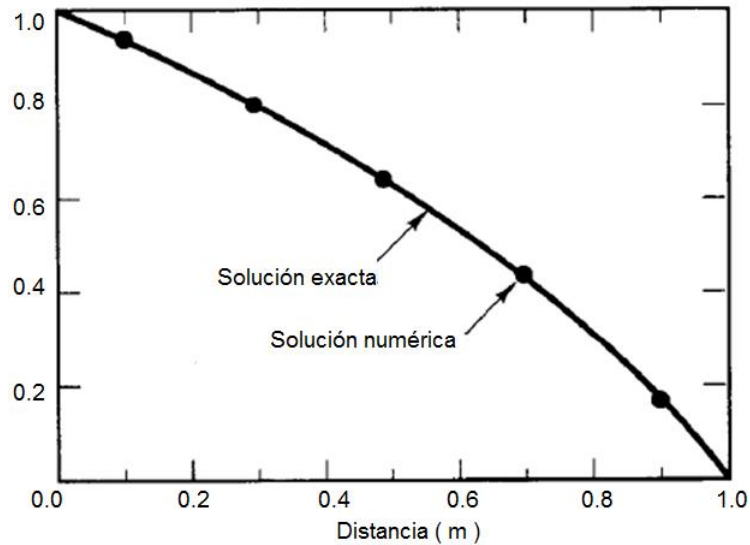
Al resolver el sistema obtenemos:

$$\begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0,9421 \\ 0,8006 \\ 0,6276 \\ 0,4163 \\ 0,1579 \end{Bmatrix} \quad (\text{G.20})$$

Cuadro G.4: Comparacion de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 1.

Nodo	Distancia	sol. numérica	Sol. analítica	Diferencia	%Error
1	0.1	0.9421	0.9387	-0.003	-0.36
2	0.3	0.8006	0.7963	-0.004	-0.53
3	0.5	0.6276	0.6224	-0.005	-0.83
4	0.7	0.4163	0.4100	-0.006	-1.53
5	0.9	0.1579	0.1505	-0.007	-4.91

Figura G.4: Comparacion de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 1.



G.2.2. Comparación con la solución analítica

La substitución de los datos en la ecuación (G.14) proporciona la solución exacta del problema. La comparación de los resultados numéricos y los analíticos se muestran en el cuadro G.4 y la figura G.4. Se puede concluir que para un número de nodos bajo y una velocidad baja el esquema de diferencia centrada tiene un ajuste razonable con la solución analítica.

Cuadro G.5: Coeficientes nodales para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 2.

Nodo	a_W	a_E	S_u	S_P	$a_P = a_W + a_E - S_P$
1	0	-0.75	$3.5\phi_A$	-3.5	2.75
2	1.75	-0.75	0	0	1.0
3	1.75	-0.75	0	0	1.0
4	1.75	-0.75	0	0	1.0
5	1.75	0	$-1.5\phi_B$	1.5	0.25

Cuadro G.6: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 2.

Nodo	Distancia	sol. numérica	Sol. analítica	Diferencia	%Error
1	0.1	1.0356	1.0000	-0.035	-3.56
2	0.3	0.8694	0.9999	0.131	13.05
3	0.5	1.2573	0.9999	-0.257	-25.74
4	0.7	0.3521	0.9994	0.647	64.70
5	0.9	2.4644	0.9179	-1.546	-168.48

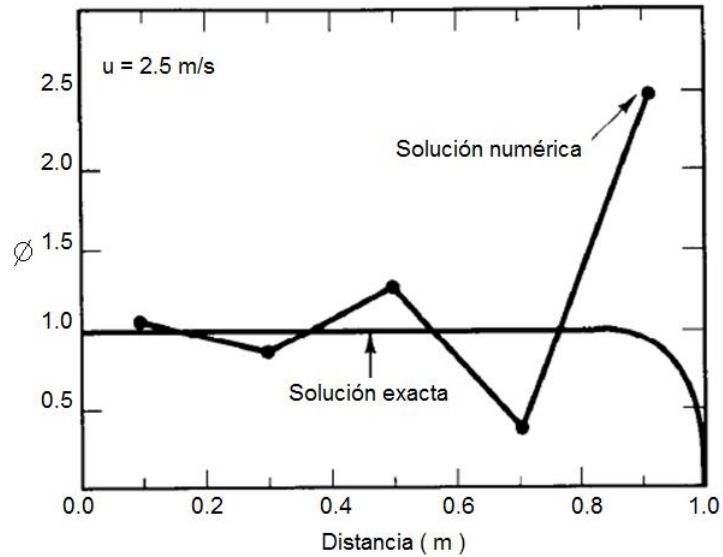
Caso 2

$u=2.5\text{m/s}$: $F=\rho u=2.5$, $D=\Gamma/\delta x=0.1/0.2=0.5$ los coeficientes de las ecuaciones se muestran en el cuadro G.5.

Comparación con la solución analítica

Usando el mismo método que en el caso 1, se forman las ecuaciones matriciales a partir de los coeficientes en el cuadro G.5, se obtiene la solución para ϕ resolviendo el sistema de ecuaciones. La substitución de los datos para el caso 2 en en la ecuación (G.14) proporciona la solución exacta del problema. En el cuadro G.6 y la figura G.5. El esquema de diferencia centrada usado en este caso produce una solución que parece oscilar alrededor de una solución exacta. Claramente el ajuste entre la solución numérica y analítica no es muy bueno.

Figura G.5: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 2.



Cuadro G.7: Coeficientes nodales para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso 3.

Nodo	a_W	a_E	S_u	S_P	$a_P = a_W + a_E - S_P$
1	0	0.75	$6.5\phi_A$	-6.5	7.25
2-19	3.25	0.75	0	0	4.0
20	3.25	0	$5\phi_B$	-1.5	4.75

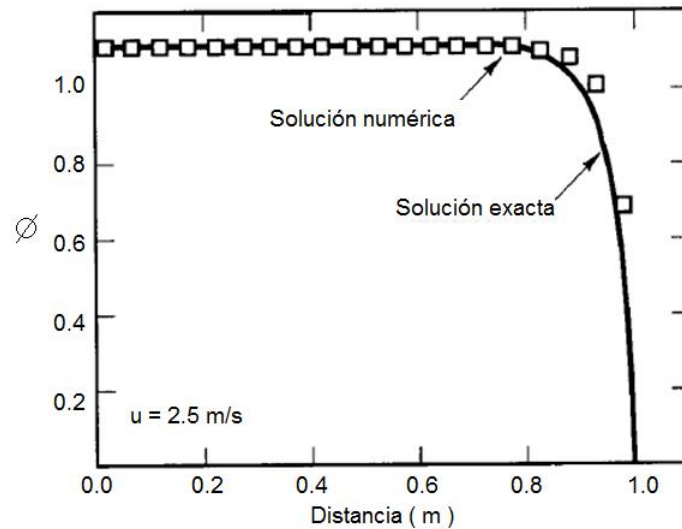
Caso 3

$u=2.5\text{m/s}$: malla de 20 nodos ($\delta x=0.05\text{m}$, $F=\rho u=0.05$, $D=\Gamma/\delta x=0.1/0.05=2.0$.) Los coeficientes se resumen en el cuadro G.7 y la comparación de los resultados obtenidos con la solución analítica se muestra en la figura G.6.

G.3. PROPIEDADES DE LOS ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN

La falla, en ciertos casos, observada en el esquema de diferencia centrada al aplicar convección y difusión combinada fuerza a mirar en profundidad las propiedades de los esquemas de discretización. En teoría los resultados numéricos obtenidos tienden a la solución “exacta” de la ecuación de transporte cuando el número de celdas computacionales tiende a infinito independientemente del método de diferenciación

Figura G.6: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Convección-difusión unidimensional, caso3.



usados. Sin embargo, en la practica, los cálculos normalmente se realizan en un número determinado de celdas, a veces pequeño, así que el resultado numérico sería físicamente realista cuando el esquema de discretización tiene ciertas propiedades fundamentales. Las propiedades mas importantes son:

- Conservativas
- Proporcionar una solución acotada
- Transportividad

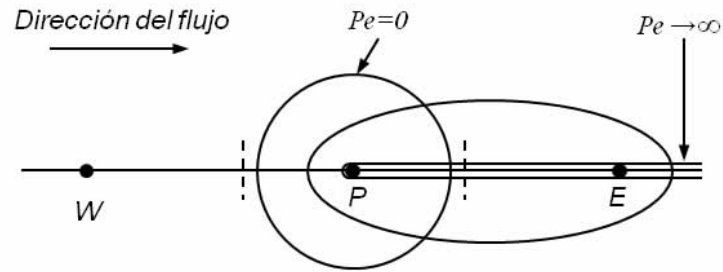
Las propiedades conservativas y de solución acotada se ha estudiado en la sección 3.6. Seguidamente se discutirá la propiedad de transportividad.

Transportividad

La transportividad es una propiedad del flujo (Roache,1976) que se puede ilustrar considerando una fuente constante de φ en un punto P como se muestra en la figura (G.7). Inicialmente se define un número no adimensional Peclet como una medida del efecto relativo de la convección y de la difusión:

$$Pe = \frac{F}{D} = \frac{\rho u}{\Gamma/\delta x} \quad (G.21)$$

Figura G.7: Transportividad.



Donde δx es la longitud característica (longitud de la celda). Las líneas en la figura G.7 indica la forma general de los contornos para un φ constante (digamos $\varphi = 1$) para diferentes valores de Pe .

Ahora se considerarán dos situaciones extremas para identificar la extensión de la influencia del nodo P aguas arriba en el nodo E aguas abajo.

- No existe convección (difusión pura) ($Pe = 0$)
- No existe difusión (convección pura) ($Pe \rightarrow \infty$)

En el caso de la difusión pura el fluido esta estancado ($Pe=0$) y los contornos de φ constante serán círculos concéntricos con P y su centro, dado que el proceso de difusión tiende a dispersar a φ igualmente a todas las direcciones. Las condiciones en el nodo E se verán influenciadas por las condiciones aguas arriba de P y también por las condiciones aguas abajo de E. Cuando Pe aumenta, los contornos cambian de forma circular a elíptica y están alargados en la dirección del flujo como se indica en la figura G.7 Cuando Pe aumenta, aumenta el efecto de las condiciones aguas arriba sobre el nodo aguas abajo, y para este caso, el nodo E se verá fuertemente influenciado por las condiciones en P, pero las condiciones en P experimentarán una influencia débil o ninguna de E. En el caso de convección pura ($Pe \rightarrow \infty$) los contornos elípticos estarán completamente aplastados en la dirección del flujo. Todas las propiedades que salen de P son transportadas inmediatamente aguas abajo hacia E. El valor de φ en E se verá afectado solamente por las condiciones aguas arriba y dado que no existe difusión φ_E será igual a φ_P . Es muy importante que sea mantenida en el esquema de discretización la relación entre la magnitud del número de Peclet y la direccionalidad de influencia, conocida como transportividad.

VALORACIÓN DEL ESQUEMA DE DIFERENCIA CENTRADA PARA PROBLEMAS DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN

Conservativo

El esquema de diferencia centrada usa expresiones consistentes y basadas en principios de conservación para evaluar los flujos difusivos y convectivos en las caras de los volúmenes de control. El sistema es conservativo.

Solución acotada

- Los coeficientes internos de la ecuación de transporte discretizada son

$$\begin{array}{ccc} \hline a_W & a_E & a_P \\ \hline \hline D_w + \frac{F_w}{2} & D_e - \frac{F_e}{2} & a_W + a_E + (F_e - F_w) \\ \hline \hline \end{array}$$

Un campo de flujo estable y unidimensional también está gobernado por la ecuación de continuidad, en este caso

$$a_P = a_W + a_E$$

- Con $a_E = D_e - F_e/2$ la contribución de convección del coeficiente del este es negativa; si la convección es dominante es posible que a_E sea negativo. Dado que $F_w > 0$ y $F_e > 0$, para que a_E sea positivo deben satisfacer la siguiente condición:

$$\frac{F_e}{D_e} = P_e < 2 \quad (\text{G.22})$$

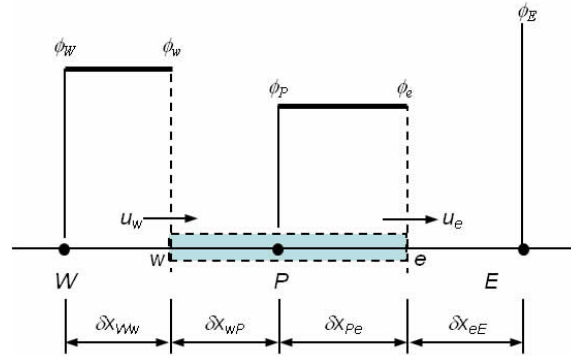
Si P_e es mayor que 2 el coeficiente del este será negativo. Esto viola uno de los requisitos para tener una solución acotada y puede conducir a soluciones con imposibilidad física.

Transportividad

El esquema no reconoce la dirección del flujo o la relación entre la convección y la difusión. Este esquema no posee la propiedad de transportividad para altos P_e .

Exactitud

Figura G.8: Valor nodal usado cuando el flujo va en dirección positiva.



El error de truncamiento del esquema de diferencia centrada es de segundo orden. El esquema será estable y exacto solamente si

$$P_e = \frac{F}{D} < 2$$

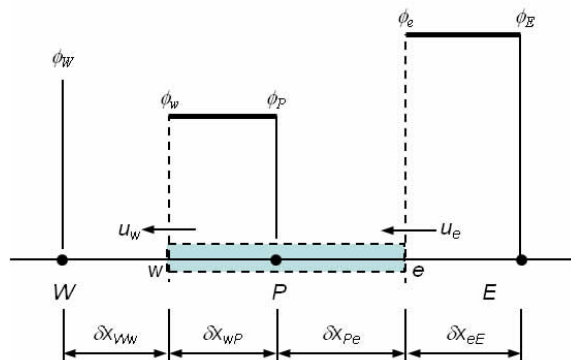
Para valores conocidos de ρ y Γ la única posibilidad de satisfacer la condición $\frac{F_e}{D_e} = P_e < 2$ es que la velocidad sea pequeña. Debido a esta limitación no es una práctica de discretización conveniente usar los esquemas de diferencia centrada para cálculos de flujo de propósito general.

G.4. ESQUEMA UPWIND

Una de las mayores desventajas del esquema de diferencia centrada es su inhabilidad de identificar la dirección de flujo. El valor de la propiedad ϕ en la cara de la celda oeste en el esquema de diferencia centrada estará siempre influenciado por ϕ_p y ϕ_w . En un flujo fuertemente convectivo de oeste a este, el esquema es inadecuado debido a que la cara de la celda del oeste recibiría una influencia mas fuerte del nodo W que del nodo P . El esquema de diferenciación UPWIND tiene en cuenta la dirección del flujo cuando determina el valor en la cara de la celda: el valor transportado por convección de ϕ en una cara de la celda se toma igual al valor en el nodo aguas arriba. En la siguiente figura se muestra el valor nodal usado para calcular los valores en la cara de la celda cuando el flujo va en dirección positiva (de oeste a este).

Cuando el flujo va en la dirección positiva, $u_w > 0$, $u_e > 0$ ($F_w > 0$, $F_e > 0$), el

Figura G.9: Valor nodal usado cuando el flujo va en dirección negativa.



esquema Upwind establece que

$$\phi_w = \phi_W \text{ y } \phi_e = \phi_P$$

y la ecuación integrada de convección-difusión sera

$$F_e \phi_p - F_w \phi_W = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W)$$

Se puede reagrupar como

$$(D_w + D_e + F_e) \phi_p = (D_w + F_w) \phi_W + D_e \phi_E$$

Con lo que se tiene

$$[(D_w + F_w) + D_e + (F_e - F_w)] \phi_p = (D_w + F_w) \phi_W + D_e \phi_E$$

Y en la siguiente figura se muestra el caso en que el flujo viaja en dirección negativa.

Cuando el flujo va en dirección negativa, $u_w < 0$, $u_e < 0$ ($F_w < 0$, $F_e < 0$), el esquema establece que

$$\phi_w = \phi_P \text{ y } \phi_e = \phi_E$$

La ecuación discretizada integrada de convección-difusión será ahora

$$F_e\phi_E - F_w\phi_P = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W)$$

De lo que se obtiene

$$[D_w + (D_e - F_e) + (F_e - F_w)]\phi_P = D_w\phi_W + (D_e - F_e)\phi_E$$

Identificando los coeficientes de ϕ_W y ϕ_E como a_W y a_E las ecuaciones discretizadas integrada de convección-difusión, se pueden escribir de forma general como

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E$$

Con el coeficiente central y los coeficientes vecinos

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w)$$

Una notación para los coeficientes de los vecinos que cubre ambas direcciones de flujo del método de diferenciación UPWIND se presenta abajo como

	a_W	a_E
$F_w > 0, F_e > 0$	$D_w + F_w$	D_e
$F_w < 0, F_e < 0$	D_w	$D_e - F_e$
	a_W	a_E
	$D_w + \max(F_w, 0)$	$D_e + \max(0, -F_e)$

EJEMPLO

Resolver el ejemplo anterior usando el esquema de discretización Upwind para

(i) $u = 0.1$ m/s

(ii) $u = 2.5$ m/s

para una malla de cinco nodos.

Solución

La malla mostrada se usa en este caso para la discretización. La ecuación de discretización en los nodos internos 2,3 y 4 con los coeficientes relevantes de los vecinos está dada por la ecuación

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w)$$

En este ejemplo $F = F_e = F_w = \rho u$ y $D = D_e = D_w = \Gamma/\delta x$

En el nodo de frontera 1, el uso del esquema UPWIND para los términos convectivos da

$$F_e \phi_P - F_A \phi_A = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_A (\phi_P - \phi_A)$$

Y en el nodo 5

$$F_B \phi_P - F_w \phi_W = D_B (\phi_B - \phi_P) - D_W (\phi_P - \phi_W)$$

En los nodos de la frontera se tiene $D_A = D_B = 2\Gamma/\delta x = 2D$ y $F_A = F_B = F$ y como es usual las condiciones de frontera entran al conjunto de ecuaciones discretizadas como contribuciones al término fuente:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u$$

con

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) - S_P$$

Y en este punto, ya se entrará a desarrollar el proceso de calcular los coeficientes y resolver la ecuación matricial. La solución analítica está dada por la siguiente ecuación y se compara con la solución analítica usando el esquema UPWIND.

$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} = \frac{\exp(\rho u x / \Gamma) - 1}{\exp(\rho u L / \Gamma) - 1}$$

Nodo	a_W	a_E	S_P	S_u
1	0	D	$-(2D + F)$	$(2D + F) \phi_A$
2,3,4	D+F	D	0	0
5	D+F	0	$-(2D)$	$2D \phi_B$

Cuadro G.8: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo, Caso 1.

<i>Nodo</i>	<i>Distancia</i>	<i>Sol.numérica</i>	<i>Sol.analítica</i>	<i>Diferencia</i>	<i>%</i>
1	0.1	0.9337	0.9387	0.005	0.53
2	0.3	0.7879	0.7963	0.008	1.05
3	0.5	0.6130	0.6224	0.009	1.51
4	0.7	0.4031	0.4100	0.007	1.68
5	0.9	0.1512	0.1505	-0.001	-0.02

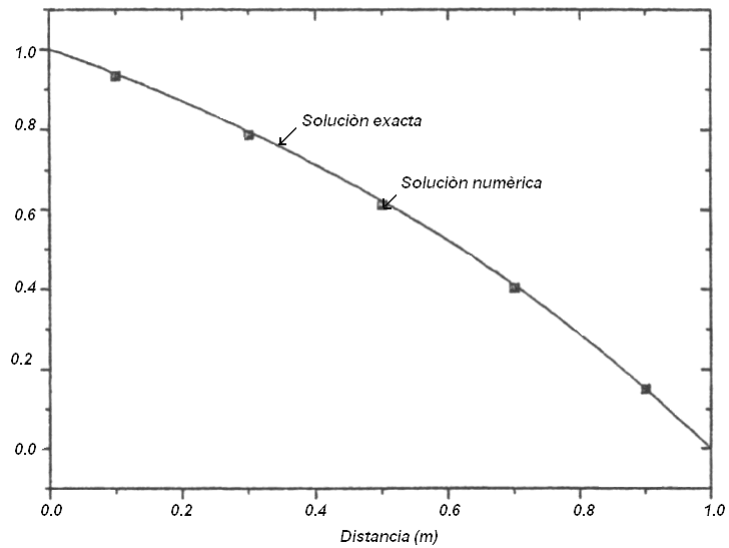


Figura G.10: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo, Caso 1.

(i) Caso 1

$u = 0,1\text{m/s}$: $F = \rho u = 0,1$, $D = \Gamma/\delta x = 0,1/0,2 = 0,5$, $Pe = F/D = 0,2$. Los resultados se resumen en la siguiente tabla y en la siguiente figura se muestran que el esquema UPWIND produce buenos resultados con éste numero de peclét.

(ii) Caso 2

$u = 2,5\text{m/s}$: $F = \rho u = 2,5$, $D = \Gamma/\delta x = 0,1/0,2 = 0,5$, $Pe = 5$. Los resultados numéricos y analíticos se comparan en la siguiente tabla y en la siguiente figura.

Cuadro G.9: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo, Caso 2.

<i>Nodo</i>	<i>Distancia</i>	<i>Sol.numérica</i>	<i>Sol.analítica</i>	<i>Diferencia</i>	<i>%</i>
1	0.1	0.9998	0.9999	0.0001	0.00
2	0.3	0.9987	0.9999	0.001	0.01
3	0.5	0.9921	0.9999	0.007	0.07
4	0.7	0.9524	0.9994	0.047	4.70
5	0.9	0.7143	0.8946	0.180	20.15

G.4.1. Valoración del esquema UPWIND

Conservación

El esquema Upwind utiliza expresiones consistentes para calcular los flujo a través de las caras de las celdas, por lo tanto se puede demostrar fácilmente que la formulación es conservativa.

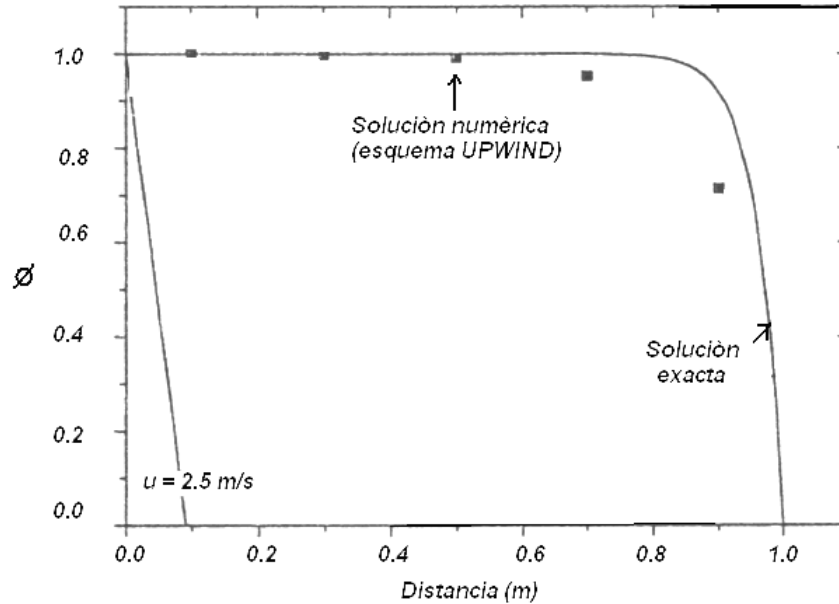
Solución acotada

Los coeficientes de la ecuación discretizada son siempre positivos y satisfacen los requerimientos para tener una solución acotada. Cuando el flujo satisface la ecuación de continuidad el término $(F_e - F_w)$ en a_p es cero y resulta que $a_p = a_w + a_e$, lo cual es deseable para soluciones iterativas estables. Todos los coeficientes son positivos y los coeficientes de la matriz son diagonalmente dominantes; por lo tanto no ocurren oscilaciones en la solución.

Transportividad

El esquema tiene en cuenta la dirección del flujo de manera que la transportividad se construye dentro de la formulación.

Figura G.11: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo, Caso 2.



Exactitud

El esquema se basa en una diferencia backward de manera que la exactitud es solamente de primer orden sobre la base del error de truncamiento de la serie de Taylor.

Debido a su simplicidad el esquema de diferenciación Upwind se ha aplicado ampliamente en los primeros cálculos de CFD. Este esquema se puede extender fácilmente a problemas multidimensionales mediante la aplicación repetida de la estrategia Upwind contenidos el los coeficientes de la ecuación escrita en forma general en cada dirección coordenada. El mayor inconveniente del esquema es que produce resultado erróneos cuando el flujo no se alinea con las líneas de la malla. El esquema Upwind causa que la distribución de las propiedades transportadas lleguen a estar salpicadas en tales problemas. El error resultante tiene una apariencia semejante a una difusión y normalmente se conoce como difusión falsa.

El esquema de diferencia centrada falla al intentar producir un resultado razonable con la misma revolución de malla. El esquema Upwind produce una solución más real, sin embargo, no presenta una solución muy exacta cerca a la frontera B.

G.5. ESQUEMA DE DIFERENCIACIÓN HÍBRIDO

El esquema híbrido de Spalding (1972) se basa en una combinación de un esquema central y un esquema Upwind. El esquema de diferenciación central, el cual tiene una exactitud de segundo orden, se emplea para el número de peclét pequeños ($Pe < 2$) y el esquema Upwind, el cual tiene una exactitud de primer orden pero tiene en cuenta la transportabilidad, se emplea para números de peclét grandes ($Pe \geq 2$). Como antes se desarrollará la discretización de la ecuación de convección-difusión unidimensional sin términos fuentes. Esta ecuación se puede interpretar como una ecuación de balance de flujo. El esquema de diferenciación híbrido usa fórmulas por trozos basado en el número de peclét local para evaluar el flujo neto a través de cada cara del volumen de control. El número de peclét se evalúa en la cara del volumen de control. Por ejemplo, para la cara oeste

$$Pe_w = \frac{F_w}{D_w} = \frac{(\rho u)_w}{\Gamma_w / \delta x_{WP}}$$

La fórmula de diferenciación híbrida para el flujo neto por unidad de área a través de la cara oeste es

$$q_w = F_w \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{2}{Pe_w} \right) \phi_W + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{Pe_w} \right) \phi_P \right] \text{ para } -2 < Pe_w < 2$$

$$q_w = F_w A_w \phi_W \text{ para } Pe \geq 2$$

$$q_w = F_w A_w \phi_P \text{ para } Pe \leq -2$$

Se puede ver fácilmente que para bajos números de peclét el esquema es equivalente a usar una diferenciación central para los términos de convección y difusión, pero cuando $|Pe| > 2$ es equivalente a un esquema Upwind y haciendo la difusión cero. La forma general para la ecuación discretizada es

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E$$

El coeficiente de nodo central es

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w)$$

Después de algún reagrupamiento es fácil establecer que los coeficientes de los vecinos para el esquema de diferenciación híbrido para la convección-difusión estacionaria estable unidimensional se puede escribir como sigue:

a_W	a_E
$max [F_W, (D_W + \frac{F_W}{2}), 0]$	$max [-F_e, (D_e - \frac{F_e}{2}), 0]$

Ejemplo

Revólver el problema considerado en el caso 2 del ejemplo usando un esquema híbrido para $u = 2,5m/s$. Comparando una solución de cinco nodos con una solución de 25 nodos.

Solución

Si se usa una malla de cinco nodos se tiene: $F = F_e = F_w = \rho u = 2,5$ y $D = D_e = D_w = \Gamma/\delta x = 0,05$ y por consiguiente el número de peclét $Pe_w = Pe_e = \rho u \delta x / \Gamma = 5$. Dado que el número de peclét de las celdas es mayor que 2 el esquema híbrido usa la expresión Upwind para los términos convectivos y establece la difusión a cero.

La ecuación discretizada en los nodos internos 2,3 y 5 está definida por la ecuación discretizada en su forma general y sus coeficientes. También se necesita introducir las condiciones de frontera en los nodos 1 y 5 los cuales necesitan un tratamiento especial. En el nodo de frontera 1 se tiene

$$F_e \phi_P - F_A \phi_A = 0 - D_A (\phi_P - \phi_A)$$

y en el nodo 5

$$F_B \phi_P - F_w \phi_W = D_B (\phi_B - \phi_P) - 0$$

Se observa que el flujo difusivo en la frontera entra por el lado derecho y los flujos convectivos están dados por medio del método Upwind. Se debe notar que $F_A = F_B = F$ y $D_B = 2\Gamma/\delta x$ de manera que la ecuación discretizada se puede escribir como:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u$$

con

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) - S_P$$

y con la sustitución de los valores numéricos se obtienen los coeficientes resumidos en la siguiente tabla.

Cuadro G.10: Coeficientes nodales para el ejemplo.

<i>Nodo</i>	a_W	a_E	S_u	S_P	$a_P = a_W + a_E - S_P$
1	0	0	$3.5\phi_A$	-3.5	3.5
2	2.5	0	0	0	2.5
3	2.5	0	0	0	2.5
4	2.5	0	0	0	2.5
5	2.5	0	$1.0\phi_B$	-1.0	3.5

<i>Nodo</i>	a_W	a_E	S_P	S_u
1	0	0	$-(2D + F)$	$(2D + F)\phi_A$
2,3,4	F	0	0	0
5	F	0	$-(2D)$	$2D\phi_B$

La forma matricial del conjunto de ecuaciones es

$$\begin{bmatrix} 3,5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2,5 & 2,5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2,5 & 2,5 & -0,45 & 0 \\ 0 & 0 & -2,55 & 2,5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2,5 & 3,5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 3,5 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

La solución del sistema es

$$\begin{Bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1,0 \\ 1,0 \\ 1,0 \\ 1,0 \\ 0,7143 \end{Bmatrix}$$

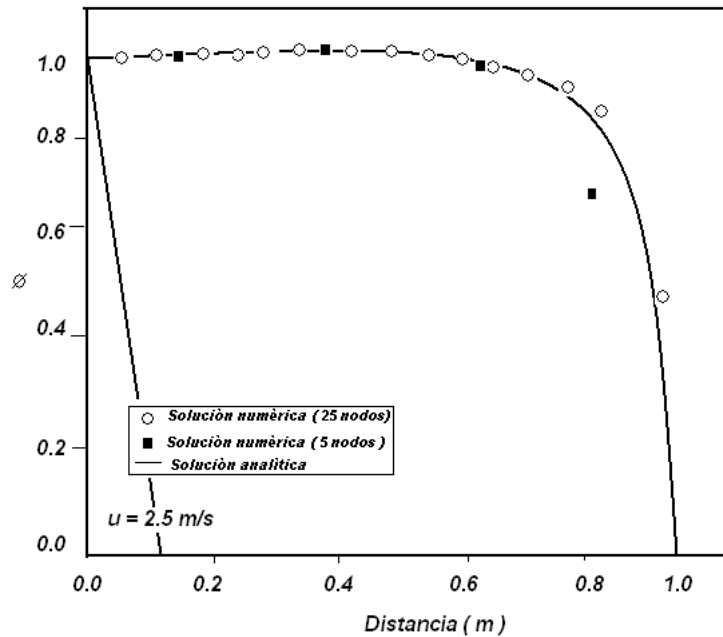
Comparación con la solución analítica

En la siguiente tabla los resultados numéricos se comparan con los resultados analíticos, dado que el número de Peclet en las celdas es alto, son los mismos que los obtenidos usando el esquema Upwind. Cuando se refina la malla a una extensión tal que el número de Peclet en la celda sea menor que 2 el esquema se revierte a una diferencia centrada y produce una solución exacta. Esto se ilustra usando una malla de 25 nodos con

Cuadro G.11: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo.

<i>Nodo</i>	<i>Distancia</i>	<i>Sol.numérica</i>	<i>Sol.analítica</i>	<i>Diferencia</i>	<i>%</i>
1	0.1	1.0	0.9999	-0.0001	-0.01
2	0.3	1.0	0.9999	-0.0001	-0.01
3	0.5	1.0	0.9999	-0.0001	-0.01
4	0.7	1.0	0.9994	-0.0006	-0.06
5	0.9	0.7143	0.8946	0.1843	20.15

Figura G.12: Comparación de los resultados numéricos para el ejemplo.



$\delta x = 0,04m$ de manera que $F = D = 2,5$. Ambos resultados se muestran en la siguiente figura junto con la solución analítica. Ahora $P_e = 1$, el esquema híbrido revierte a una diferencia centrada y como se observa la solución obtenida con la malla fina notablemente buena.

G.5.1. Valoración del esquema híbrido

El esquema híbrido saca provecho de las propiedades favorables de los esquemas Upwind y diferencia centrada. Cambia a un esquema Upwind cuando el esquema de

Cuadro G.12: Coeficientes nodales para el esquema híbrido.

	<i>Unidimensional</i>	<i>Bidimensional</i>	<i>Tridimensional</i>
a_W	$\max [F_w, (D_w + \frac{F_w}{2}), 0]$	$\max [F_w, (D_w + \frac{F_w}{2}), 0]$	$\max [F_w, (D_w + \frac{F_w}{2}), 0]$
a_E	$\max [-F_e, (D_e - \frac{F_e}{2}), 0]$	$\max [-F_e, (D_e - \frac{F_e}{2}), 0]$	$\max [-F_e, (D_e - \frac{F_e}{2}), 0]$
a_S		$\max [F_s, (D_s + \frac{F_s}{2}), 0]$	$\max [F_s, (D_s + \frac{F_s}{2}), 0]$
a_N		$\max [-F_n, (D_n - \frac{F_n}{2}), 0]$	$\max [-F_n, (D_n + \frac{F_n}{2}), 0]$
a_B			$\max [F_b, (D_b + \frac{F_b}{2}), 0]$
a_T			$\max [-F_t, (D_t - \frac{F_t}{2}), 0]$
ΔF	$F_e - F_w$	$F_e - F_w + F_n - F_s$	$F_e - F_w + F_n - F_s + F_t - F_b$

diferencia centrada produce resultados inexactos a altos números de peclet. El esquema es completamente conservativo y dado que los coeficientes son siempre positivos e incondicionalmente acotado. Satisface los requerimientos de transportividad usando la formulación Upwind para grandes números de peclet. El esquema produce unos resultados físicamente reales y es altamente estable comparado con otros esquemas discutidos y se ha probado ser una forma muy útil de predecir flujos prácticos. La desventaja es que la exactitud en términos del error de truncamiento de la serie de Taylor es apenas de primer orden.

G.5.2. Esquema de diferenciación híbrido para convección-difusión multi-dimensional

El esquema híbrido se puede extender fácilmente a problemas bidimensionales y tridimensionales mediante la aplicación repetida de la derivación deducida en cada dirección coordenada. La ecuación discretizada que cubre todos los casos está dada por:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_B \phi_B + a_T \phi_T$$

Con el coeficiente central y los coeficientes nodales para el esquema híbrido dados en la tabla anterior.

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T + \Delta F$$

En las expresiones de arriba los valores de F y D se calculan con las siguientes formulas:

<i>Cara</i>	<i>w</i>	<i>e</i>	<i>s</i>	<i>n</i>	<i>b</i>	<i>t</i>
F	$(\rho u)_w A_w$	$(\rho u)_e A_e$	$(\rho u)_s A_s$	$(\rho u)_n A_n$	$(\rho u)_b A_b$	$(\rho u)_t A_t$
D	$\frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w$	$\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e$	$\frac{\Gamma_s}{\delta y_{SP}} A_s$	$\frac{\Gamma_n}{\delta y_{PN}} A_n$	$\frac{\Gamma_b}{\delta z_{BP}} A_b$	$\frac{\Gamma_t}{\delta z_{PT}} A_t$

G.6. ESQUEMA POWER-LAW

Es una aproximación más exacta a la solución unidimensional y produce mejores resultados que el esquema híbrido. En este esquema la difusión se toma igual a cero cuando el número de Peclet excede a 10. Si $0 < Pe < 10$ se evalúa el flujo por medio de una expresión polinomial, para la cara oeste:

$$q_w = F_w [\phi_W - \beta_w (\phi_P - \phi_W)] \quad \text{para } 0 < Pe < 10 \quad (\text{G.23})$$

Donde

$$\beta_w = (1 - 0,1Pe_w)^5 / Pe_w \quad (\text{G.24})$$

y

$$q_w = F_w \phi_W \quad \text{para } Pe > 10 \quad (\text{G.25})$$

Los coeficientes de la ecuación discretizada unidimensional utilizando el esquema Power-Law para una convección-difusión estable unidimensional están dados por

Coeficiente central: $a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w)$

y

$$a_W = D_w \times \max [0, (1 - 0,1|Pe_w|)^5, 0] + \max [F_w, 0]$$

$$a_E = D_e \times \max [0, (1 - 0,1|Pe_e|)^5, 0] + \max [-F_e, 0]$$

El esquema Power-Law es más exacto para problemas unidimensionales dado que este intenta representar la solución exacta mas cercanamente. El esquema ha probado ser útil en cálculos de flujo prácticos y se puede usar como una alternativa al esquema híbrido. Algunos programas de CFD comerciales, como el FLUENT, usan este esquema como esquema por defecto.

G.7. ESQUEMA EXPONENCIAL

Considere el flujo total J que sobra del flujo de convección $\rho u \varphi$ y el de difusión $-\Gamma d\varphi/dx$. Entonces

$$J = \rho u \varphi - \Gamma \frac{d\varphi}{dx} \quad (\text{G.26})$$

A partir de la definición dada en la ecuación ((G.1)), la ecuación anterior es

$$\frac{dJ}{dx} = 0 \quad (\text{G.27})$$

la cual, integrado en el volúmen de control mostrado en la figura (G.1), da

$$J_e - J_w = 0 \quad (\text{G.28})$$

Ahora la solución exacta (ecuación (G.14)) se puede usar como perfil entre los puntos P y E, como φ_P y φ_E reemplazando a φ_0 a φ_L , y la distancia δx reemplazando a L. La sustitución de este perfil en la ecuación ((G.26)) daría una expresión para J_e :

$$J_e = F_e \left(\varphi_P + \frac{\varphi_P - \varphi_E}{\exp(Pe_e) - 1} \right) \quad (\text{G.29})$$

donde

$$Pe_e = \frac{(\rho u)_e}{\Gamma_e / (\delta x)_e} = \frac{F_e}{D_e} \quad (\text{G.30})$$

Observe que J_e no depende de la localización de la interface entre los puntos P y E.

Finalmente, la substitución de la ecuación ((G.29)) y con una expresión similar para J_w en la ecuación ((G.28)) conduce a

$$F_e \left(\varphi_P + \frac{\varphi_P - \varphi_E}{\exp(Pe_e) - 1} \right) - F_w \left(\varphi_w + \frac{\varphi_W - \varphi_P}{\exp(Pe_w) - 1} \right) = 0 \quad (\text{G.31})$$

La que se puede escribir en la forma estándar

$$a_P \varphi_P = a_W \varphi_W + a_E \varphi_E \quad (\text{G.32})$$

Donde el coeficiente central está dado por:

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w)$$

y

a_W	a_E
$\frac{F_w \exp(F_w/D_w)}{\exp(F_w/D_w) - 1}$	$\frac{F_e}{\exp(F_e/D_e) - 1}$

Estos coeficientes definen el esquema exponencial

G.8. UNA FORMULACIÓN GENERALIZADA

Para construir un esquema general que involucre los diversos esquemas considerados hasta ahora de manera que puedan ser adaptados a un concepto general y para un mejor entendimiento de la formulación involucrada, se explorarán algunas propiedades generales de los coeficientes involucrados. Para un volumen de control infinitesimal el flujo que cruza la interface entre los nodos W y P se puede representar como:

$$J^* = \frac{J\delta x}{\Gamma} = Pe\phi - \frac{d\phi}{d(x/\delta x)} \quad (G.33)$$

El valor de ϕ en la interface w, será alguna ponderación entre ϕ_w y ϕ_p , mientras que el gradiente $d\phi/d(x/\delta x)$ será algún múltiplo de $\phi_w - \phi_p$. De esta manera J^* queda:

$$J^* = Pe[\alpha\phi_W + (1 - \alpha)\phi_P] - \beta(\phi_P - \phi_W) \quad (G.34)$$

Donde α y β son multiplicadores adimensionales que dependen de Pe. De esta manera, J^* se puede expresar como:

$$J^* = B\phi_W - A\phi_P \quad (G.35)$$

Una expresión mas general para la ecuación (G.35) se puede plantear definiendo el subíndice i para el nodo que está mas a la izquierda de la interface entre dos volúmenes de control, y el subíndice $i+1$ para el nodo a la derecha de la interface. De esta manera la ecuación (G.35) queda como:

$$J^* = B\phi_i - A\phi_{i+1} \quad (G.36)$$

donde A y B son coeficientes adimensionales que son función de Pe y la dirección de flujo.

Dos propiedades de A y B son importantes en el estudio de la dependencia de Pe. Primero, se observa que si ϕ_i y ϕ_{i+1} son iguales, los flujos de difusión son cero, y J tendría en cuenta solamente el flujo convectivo $\rho u\phi_i$. Bajo estas condiciones, se tiene:

$$J^* = Pe\phi_i = Pe\phi_{i+1} \quad (G.37)$$

La combinación de las ecuaciones (G.36) y (G.37) conduce a:

$$B = A + Pe \quad (\text{G.38})$$

La segunda propiedad de A y B trata sobre la simetría entre estos dos coeficientes. Si se invierte el eje coordenado entonces Pe aparece como -Pe y A y B intercambian sus papeles. De esta manera A(Pe) y B(Pe) deben estar relacionados por:

$$\begin{aligned} A(Pe) &= B(Pe) - Pe \\ &= A(-Pe) - Pe \\ &= A(|Pe|) - Pe \end{aligned} \quad (\text{G.39})$$

De esta manera, para todos los valores de Pe, positivos y negativos, se puede escribir :

$$A(Pe) = A(|Pe|) + \text{Max}[-Pe, 0] \quad (\text{G.40})$$

Entonces de acuerdo a la ecuación (G.38), se obtiene:

$$B(Pe) = A(|Pe|) + \text{Max}[Pe, 0] \quad (\text{G.41})$$

Si se aplica la ecuación (G.36) en la interfaces w y e del volumen de control infinitesimal y se usan las ecuaciones (G.40) y (G.41), se obtiene la siguiente relación general para la formulación de la convección-difusión unidimensional en estado estable:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (\text{G.42})$$

donde:

$$a_W = D_w A(|Pe_w|) + \text{max}[F_w, 0] \quad (\text{G.43})$$

$$a_E = D_e A(|Pe_e|) + \text{max}[-F_e, 0] \quad (\text{G.44})$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (\text{G.45})$$

Los esquemas discutidos hasta ahora se pueden representar como elecciones de la función A(Pe). En el cuadro G.13 se muestran las expresiones de A(Pe) para cada esquema.

Cuadro G.13: Función A(Pe) para los diversos esquemas.

Esquema	Función A(Pe)
Diferencia centrada	$1 - 0.5 Pe $
Upwind	1
Híbrido	$\max[0, 1 - 0,5 Pe]$
Power-law	$\max[0, (1 - 0,1(Pe)^5)]$
Exponencial	$ Pe / [\exp(Pe - 1)]$

En el caso de tratarse de problemas multidimensionales, el esquema general se puede aplicar por medio de la expresión general estándar:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_B \phi_B + a_T \phi_T + S_u \quad (\text{G.46})$$

con el coeficiente central dado por:

$$a_P = a_W + a_E + a_N + a_S + a_B + a_T + \Delta F - S_P \quad (\text{G.47})$$

Los coeficientes nodales vistos en la ecuación (G.47) se dan en el cuadro G.14.

G.9. ESQUEMAS DE ALTO ORDEN PARA PROBLEMAS DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN

La exactitud de los esquemas híbrido y upwind es solamente de primer orden en términos del error de truncamiento de la serie de Taylor. El uso de cantidades upwind asegura que el esquema sea muy estable y cumpla con los requerimientos de transportividad pero la exactitud de primer orden ocasiona que sea propenso a los errores de difusión numérica. Tales errores se pueden minimizar empleando esquemas de mas alto orden de discretización. Los esquemas de mas alto orden involucran mas nodos vecinos y reducen los errores de discretización .

G.9.1. Esquema QUICK

Significa esquema cuadrático de interpolación upwind y usa tres puntos aguas arriba con una interpolación cuadrática para los valores en las interfaces de las celdas. El valor en la interface de ϕ se obtiene a partir de una interpolación cuadrática que pase por dos nodos asociados (uno a cada lado de la interface) y un nodo aguas arriba para una malla uniforme como se muestra en la figura G.13.

Cuadro G.14: Coeficientes nodales para la formulación general.

Coeficiente	Unidimensional	Bidimensional	Tridimensional
a_W	$D_w A(Pe_w)$ + $\max[F_w, 0]$	$D_w A(Pe_w)$ + $\max[F_w, 0]$	$D_w A(Pe_w)$ + $\max[F_w, 0]$
a_E	$D_e A(Pe_e)$ + $\max[-F_e, 0]$	$D_e A(Pe_e)$ + $\max[-F_e, 0]$	$D_e A(Pe_e)$ + $\max[-F_e, 0]$
a_S		$D_s A(Pe_s)$ + $\max[F_s, 0]$	$D_s A(Pe_s)$ + $\max[F_s, 0]$
a_N		$D_n A(Pe_n)$ + $\max[F_n, 0]$	$D_n A(Pe_n)$ + $\max[F_n, 0]$
a_B			$D_b A(Pe_b)$ + $\max[F_b, 0]$
a_T			$D_s A(Pe_s)$ + $\max[F_s, 0]$
ΔF	$F_e - F_w$	$F_e - F_w + F_n - F_s$	$F_e - F_w + F_n - F_s$ + $F_t - F_b$

Cuadro G.15: Coeficientes para la ecuación estándar cuando $F_w < 0$ y $F_e < 0$.

a_w	a_E	a_{WW}	a_P
$D_w + \frac{6}{8}F_w + \frac{1}{8}F_e$	$D_e - \frac{3}{8}F_e$	$-\frac{1}{8}F_w$	$a_W + a_E + a_{WW} + (F_e - F_w)$

Cuadro G.16: Coeficientes para la ecuación estándar cuando $F_w > 0$ y $F_e > 0$.

a_w	a_E	a_{EE}	a_P
$D_w + \frac{3}{8}F_w$	$D_e - \frac{6}{8}F_e - \frac{1}{8}F_w$	$\frac{1}{8}F_e$	$a_W + a_E + a_{EE} + (F_e - F_w)$

$$\left[D_w - \frac{3}{8}F_w + D_e + \frac{6}{8}F_e \right] \phi_P = \left[D_w + \frac{6}{8}F_w + \frac{1}{8}F_e \right] \phi_W + \left[D_e - \frac{3}{8}F_e \right] \phi_E - \frac{1}{8}F_w \phi_{WW} \quad (G.52)$$

La ecuación general del esquema se puede escribir como:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_{WW} \phi_{WW} \quad (G.53)$$

Donde:

Para $F_w < 0$ y $F_e < 0$ el flujo cruza la frontera este y oeste y se puede expresar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \phi_w &= \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_W - \frac{1}{8}\phi_E \\ \phi_e &= \frac{6}{8}\phi_E + \frac{3}{8}\phi_P - \frac{1}{8}\phi_{EE} \end{aligned} \quad (G.54)$$

La sustitución de estas dos expresiones para los términos convectivos de la ecuación de transporte de convección-difusión junto con la diferencia central para los términos difusivos produce los siguientes coeficientes:

Se pueden obtener expresiones generales validas para ambos tipos de flujo tanto positivos como negativos. El esquema QUICK se puede sintetizar para problemas unidimensionales de convección-difusión como sigue:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_{WW} \phi_{WW} + a_{EE} \phi_{EE} \quad (G.55)$$

Cuadro G.17: Coeficientes para la expresión general del esquema QUICK.

a_W	a_E	a_{EE}	a_P
$D_w + \frac{6}{8}\alpha_w F_w + \frac{1}{8}F_e + \frac{3}{8}(1 - \alpha_w)F_w$	$-\frac{1}{8}\alpha_w F_w$	$D_e - \frac{3}{8}\alpha_e F_e - \frac{6}{8}(1 - \alpha_e)F_e - \frac{1}{8}(1 - \alpha_w)F_w$	$-\frac{1}{8}(1 - \alpha_e)F_e$

Con el coeficiente central:

$$a_P = a_W + a_E + a_{WW} + a_{EE} + (F_e - F_w) \quad (G.56)$$

Donde:

Donde:

$$\alpha_w = 1 \text{ para } F_w \geq 0 \quad y \quad \alpha_e = 1 \text{ para } F_e \geq 0$$

$$\alpha_w = 0 \text{ para } F_w \leq 0 \quad y \quad \alpha_e = 0 \text{ para } F_e \leq 0$$

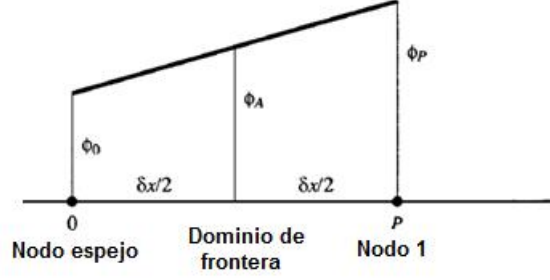
Ejemplo: Usando el esquema QUICK

Para el problema considerado en el ejemplo 5 con $u = 0.2$ m/s en una malla de 5 puntos use el esquema QUICK.

Solución

Como antes, se usa la malla de 5 nodos introducida en el ejemplo 5 para la discretización. Con los datos de este ejemplo se tiene que $F = F_e = F_w = 0.2$ y $D = D_e = D_w = 0.5$ de manera que el número de Peclet es $P_{e_e} = P_{e_w} = \frac{\rho u \delta x}{\Gamma} = 0.4$. La ecuación de discretización para el esquema QUICK en los nodos internos 3 y 4 está dada por la ecuación (G.55) junto con sus coeficientes asociados. En el esquema QUICK el valor de ϕ en la frontera se calcula con las ecuaciones (G.49) y (G.50) que usan tres valores nodales. Los nodos 1, 2 y 5 están afectados por la proximidad de las fronteras del dominio y se necesita tratarlos separadamente. En el nodo de frontera 1, ϕ está dado en la cara oeste w o sea que $\phi_w = \phi_A$, pero no existe un nodo W para evaluar por medio de la ecuación (G.50) a ϕ_e en la cara este. Para sobreponerse a este problema Leonard (1979) sugiere una extrapolación lineal para crear un nodo espejo a una distancia $\delta x/2$ al oeste de la frontera física. Esto se ilustra en la figura G.14.

Figura G.14: Tratamiento de nodo espejo en la frontera para esquema QUICK.



Se puede demostrar que:

$$\phi_0 = 2\phi_A - \phi_P \quad (\text{G.57})$$

La extrapolación al nodo espejo proporciona el nodo W requerido para la ecuación (G.50) que calcula ϕ_e en la cara este del volumen de control 1 de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \phi_e &= \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{1}{8}(2\phi_A - \phi_P) \\ &= \frac{7}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{2}{8}\phi_A \end{aligned} \quad (\text{G.58})$$

En los nodos de la frontera se deben evaluar los gradientes usando una expresión consistente con la ecuación (G.58). Se puede demostrar que el flujo difusivo a través de la frontera oeste está dado por:

$$\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_A = \frac{D_A}{3} (9\phi_P - 8\phi_A - \phi_E) \quad (\text{G.59})$$

Finalmente la ecuación discretizada para el nodo 1 es:

$$F_e \left[\frac{7}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{2}{8}\phi_A \right] - F_A \phi_A = D_e (\phi_E - \phi_P) - \frac{D_A}{3} (9\phi_P - 8\phi_A - \phi_E) \quad (\text{G.60})$$

Para el nodo 5, el valor de ϕ_e en la cara este se conoce $\phi_e = \phi_B$ y el flujo difusivo de ϕ a través de la frontera este está dado por:

Cuadro G.18: Coeficientes nodales para el ejemplo: Usando el esquema QUICK.

Nodo	a_W	a_E	a_{WW}	S_u	S_P	a_P
1	0	0.592	0	$1.583\phi_A$	-1.583	2.175
2	0.7	0.425	0	$-0.05\phi_A$	0.05	1.075
3	0.675	0.425	-0.025	0	0	1.075
4	0.675	0.425	-0.025	0	0	1.075
5	0.817	0	-0.025	$1.133\phi_B$	-1.133	1.925

$$\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_B = \frac{D_B}{3} (8\phi_B - 9\phi_P - \phi_W) \quad (\text{G.61})$$

La ecuación discretizada para el nodo 5 es entonces:

$$F_B \phi_B - F_w \left[\frac{6}{8} \phi_W + \frac{3}{8} \phi_P - \frac{1}{8} \phi_{WW} \right] = \frac{D_B}{3} (8\phi_B - 9\phi_P + \phi_W) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (\text{G.62})$$

Puesto que se usó una expresión especial para evaluar ϕ en la cara este del volumen de control 1 se debe usar la misma expresión para ϕ para calcular el flujo convectivo a través de la cara oeste del volumen de control 2 que asegure una consistencia en el flujo. De esta forma en el nodo 2 se tiene:

$$F_e \left[\frac{6}{8} \phi_P + \frac{3}{8} \phi_E - \frac{1}{8} \phi_W \right] - F_w \left[\frac{7}{8} \phi_W + \frac{3}{8} \phi_P - \frac{2}{8} \phi_A \right] = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (\text{G.63})$$

La ecuación discretizada para los nodos 1,2 y 5 se puede escribir de una forma general como:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_{WW} \phi_{WW} + S_u \quad (\text{G.64})$$

con el coeficiente central:

$$a_P = a_W + a_E + a_{WW} + (F_e - F_w) - S_P \quad (\text{G.65})$$

La sustitución de los valores numéricos da como resultado los coeficientes mostrados en el cuadro G.18.

Cuadro G.19: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: Usando el esquema QUICK.

Nodo	Distancia	Sol. analítica	Sol. numérica	Diferencia	Sol. diferencia centrada	Diferencia
1	0.1	0.9653	0.9648	0.0005	0.9696	0.0043
2	0.3	0.8713	0.8707	0.0006	0.8786	0.0073
3	0.5	0.7310	0.7309	0.0001	0.7421	0.0111
4	0.7	0.5218	0.5226	-0.0008	0.5374	0.0156
5	0.9	0.2096	0.2123	-0.0027	0.2303	0.0207
\sum error absoluto				0.0047		0.059

La forma matricial del conjunto de ecuaciones formado es:

$$\begin{bmatrix} 2,175 & -0,592 & 0 & 0 & 0 \\ -0,7 & 1,075 & -0,425 & 0 & 0 \\ 0,025 & -0,675 & 1,075 & -0,425 & 0 \\ 0 & 0,025 & -0,675 & 1,075 & -0,425 \\ 0 & 0 & 0,025 & -0,817 & 1,925 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,583 \\ -0,05 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{G.66})$$

La solución del sistema de ecuaciones es:

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,9648 \\ 0,8707 \\ 0,7309 \\ 0,5226 \\ 0,2123 \end{pmatrix} \quad (\text{G.67})$$

Comparación con la solución analítica

El cuadro G.19 muestra que la solución proporcionada por el esquema QUICK es prácticamente igual a la solución exacta. Los errores son muy pequeños aun para una malla tan gruesa. La suma del error absoluto indica que el esquema QUICK da una solución más exacta que el esquema de diferencia centrada.

G.9.2. Valoración del esquema QUICK

Para este esquema los valores de los flujos en las caras de las celdas se calculan siempre mediante una interpolación cuadrática entre dos nodos asociados y uno aguas arriba,

por lo tanto es un esquema conservativo. Dado que el esquema se basa en una función cuadrática tiene una exactitud basada en el error de truncamiento de la serie de Taylor de tercer orden cuando se usa una malla uniforme. El punto débil del esquema es que no se garantiza que los coeficientes para E y W sean positivos y que los coeficientes a_{WW} y a_{EE} sean negativos. Por ejemplo, si $u_w \geq 0$ y $u_e \geq 0$ el coeficiente del este puede ser negativo a números de Peclet relativamente modestos por ejemplo $Pe_e=8/3$. Esto genera problemas de estabilidad y soluciones no acotadas bajo ciertas condiciones de flujo. Por lo tanto el esquema QUICK es estable bajo ciertas condiciones. Otra de las características es que las ecuaciones discretizadas no solo involucran nodos adyacentes sino que también toman otros nodos mas lejanos. En este caso no se pueden aplicar los métodos de solución tridiagonales estudiados en capítulos anteriores.

Apéndice H

ALGORITMO PARA EL CÁLCULO DEL CAMPO DE FLUJO

En este capítulo se tomarán las técnicas numéricas básicas de discretización aproximadas discutidas en el capítulo 3 y se combinarán en varias técnicas que permitirán la solución de varios tipos de problemas de flujo. Existen varias técnicas en CFD, algunas simples y otras complejas con sus respectivas fortalezas y debilidades. Nuestro propósito es desarrollar algunas herramientas para CFD que no son demasiado sofisticadas y que sirvan como introducción simple a CFD.

H.1. ESQUEMAS APLICADOS CON EL MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS

H.1.1. Interpolación y diferenciación

Las aproximaciones de las integrales requieren el valor de las variables en otros puntos diferentes a los nodos en las ecuaciones de flujo. Estos valores se deben expresar en términos de los valores en los nodos por interpolación; las técnicas de interpolación se discutirán a continuación y se expondrá el ejemplo para una de las caras (cara e) en cada caso.

Interpolación upwind

Aproximar el valor de ϕ_e por el valor de ϕ en el nodo aguas arriba de e , es equivalente a usar una aproximación de diferencia finita forward o backward para la primera derivada (dependiendo de la dirección de flujo). En el esquema upwind, ϕ_e se aproxima por:

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{si } (\vec{V} \cdot \vec{n})_e \geq 0 \\ \phi_E & \text{si } (\vec{V} \cdot \vec{n})_e \leq 0 \end{cases} \quad (\text{H.1})$$

Esta es solamente es una aproximación que satisface el criterio de tener un comportamiento correspondiente a la realidad física y no tener una solución oscilatoria aunque no es totalmente confiable.

Para la serie de expansión de Taylor sobre el punto P si $(\vec{V} \cdot \vec{n})_e \geq 0$:

$$\phi_e = \phi_P + (x_e - x_P) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_P + \frac{(x_e - x_P)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_P + \frac{(x_e - x_P)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_P + \dots \quad (\text{H.2})$$

La aproximación upwind retiene solamente el primer termino del lado derecho de la ecuación (H.2) y en consecuencia , es un esquema de primer orden, que conduce a un termino de error de truncamiento difusivo, es decir semejante a un flujo difusivo:

$$f_e^d = \Gamma_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \quad (\text{H.3})$$

donde f_e^d es el flujo difusivo en e. El coeficiente de la falsa difusión es $\Gamma_e^{num} = (\rho u)_e \Delta x / 2$. La difusión numérica y el error puede volverse importante en varios tipos de problemas de flujo y se requieren mallas muy finas para producir una solución exacta.

Interpolación lineal

Otra aproximación para los valores en la frontera del volumen de control es la interpolación lineal entre los nodos mas cercanos a la frontera. En el punto P en una malla cartesiana se tiene:

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P (1 - \lambda_e) \quad (\text{H.4})$$

donde el factor de interpolación lineal λ_e se define por:

$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} \quad (\text{H.5})$$

La ecuación (H.4) es una ecuación de segundo orden que conduce a un error de truncamiento proporcional al cuadrado del espaciamiento de la malla en mallas

uniformes y no uniformes. Este esquema puede producir soluciones oscilatorias, aunque este esquema es el mas simple y el que mas se usa.

La consideración de un perfil lineal entre los nodos P y E también ofrece la forma mas simple para aproximar el gradiente:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (\text{H.6})$$

Expandiendo la serie de Taylor sobre ϕ_e se puede demostrar que el error de truncamiento de la ecuación (H.6) es:

$$\epsilon_\tau = \frac{(x_e - x_P)^2 - (x_E - x_e)^2}{2(x_E - x_P)} \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_e - \frac{(x_e - x_P)^3 - (x_E - x_e)^3}{6(x_E - x_P)} \left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_e + \dots \quad (\text{H.7})$$

Cuando el punto e está en la mitad entre E y P como en las mallas uniformes, la aproximación es de segundo orden de exactitud, puesto que el primer termino del lado derecho desaparece y la expresión queda proporcional a Δx y al factor de expansión de la malla menos uno.

Interpolación upwind cuadrática

La interpolación upwind cuadrática aproxima la variación de la variable entre P y E por una parábola en lugar de hacerlo con una recta. Para construir la parábola se necesitan los datos de mas de un punto de acuerdo a las siguientes convecciones:

$$\begin{aligned} \text{punto } W \text{ si : } u &\geq 0 \\ \text{punto } EE \text{ si : } u &\leq 0 \end{aligned} \quad (\text{H.8})$$

Se obtiene entonces:

$$\phi_e = \phi_U + g_1(\phi_D - \phi_U) + g_2(\phi_U - \phi_{UU}) \quad (\text{H.9})$$

donde los subíndices D, U y UU indican los nodos aguas abajo . Los coeficientes g_1 y g_2 se expresan en términos de las coordenadas de los nodos por:

$$g_1 = \frac{(x_e - x_U)(x_e - x_{UU})}{(x_D - x_U)(x_D - x_{UU})}; \quad g_2 = \frac{(x_e - x_U)(x_D - x_e)}{(x_D - x_{UU})(x_U - x_{UU})} \quad (\text{H.10})$$

Para una malla uniforme, los coeficientes de los tres puntos nodales involucrados en la interpolación son: $3/8$ para el nodo aguas abajo, $6/8$ para el primer nodo aguas arriba y $-1/8$ para el segundo nodo aguas arriba. Este esquema generalmente es más complejo que el esquema lineal, pues extiende la molécula computacional un punto más en cada dirección. El esquema de interpolación cuadrático tiene un tercer orden en el error de truncamiento para mallas uniformes y no uniformes. Esto se puede demostrar eliminando la segunda derivada de la serie de expansión de Taylor alrededor del punto P usando ϕ_W , el cual, en una malla, uniforme en el espacio con $u \geq 0$ da:

$$\phi_e = \frac{6}{8}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{1}{8}\phi_W - \frac{3(\Delta x)^3}{48} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_P + \dots \quad (\text{H.11})$$

Los primeros tres términos en el lado derecho representan la aproximación QUICK, mientras que el último término representa el término principal del error de truncamiento.

Esquemas de mayor orden

Las interpolaciones de órdenes mayores que un tercero tienen sentido solamente si las integrales se aproximan usando fórmulas de mayor orden. Si se usa la regla de Simpson en una integral de superficie en 2D, se debe interpolar con polinomios de al menos grado tres, con el que se obtienen errores de interpolación de cuarto orden. Por ejemplo, el ajuste por medio de un polinomio:

$$\phi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 \quad (\text{H.12})$$

A través de los valores de ϕ en cuatro nodos, se pueden determinar los cuatro coeficientes a_i y encontrar ϕ_e como una función de los valores nodales. Para una malla uniforme, se obtiene la siguiente expresión:

$$\phi_e = \frac{27\phi_P + 27\phi_E - 3\phi_W - 3\phi_{EE}}{48} \quad (\text{H.13})$$

El mismo polinomio se puede usar para determinar la derivada de ϕ , se necesita derivar la ecuación anterior, con lo que se obtiene:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 \quad (\text{H.14})$$

el cual, con una malla uniforme, produce:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e = \frac{-27\phi_P + 27\phi_E + \phi_W - \phi_{EE}}{24\Delta x} \quad (\text{H.15})$$

La aproximación anterior se conoce como esquema centrado de cuarto orden. Una vez se obtiene de las variables y sus derivadas en el centro de la frontera, se puede interpolar en la frontera para obtener los valores en las esquinas del volumen de control.

Se debe tener en cuenta que un alto orden de aproximación no necesariamente garantiza una solución mas exacta en cualquier malla simple; una alta exactitud se alcanza solamente cuando la malla es lo suficientemente fina para capturar todos los detalles esenciales de la solución.

La elección de cualquiera de los esquemas de interpolación debe estar sujeto a una serie de condicionamientos a cumplir: inicialmente se requiere que cumplan con dos criterios fundamentales: a) debe corresponder a un comportamiento real y b) debe cumplirse un balance global de la propiedad ϕ .

El realismo físico es fácil de entender, al menos en casos simples. Las variaciones que se muestran en la figura H.1 ayudan a ilustrar este concepto. Por ejemplo, en la conducción de calor entre dos fuentes de calor, la temperatura no puede estar por fuera del rango de temperaturas establecidas en las fronteras.

El requerimiento de balance global implica una conservación de la propiedad en el dominio completo. Los flujo de calor, los flujos másicos y de cantidad de movimiento deben dar un balance exacto teniendo en cuenta los sumideros o fuentes, para cualquier numero de puntos.

H.2. ALGUNAS DIFICULTADES RELACIONADAS

H.2.1. Representación del gradiente de presión

Si se empieza a construir la forma discretizada de la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección x para la situación unidimensional mostrada en la Figura H.2,

Se encuentra una nueva característica que es la representación del gradiente de presión $-dp/dx$ integrado sobre un volumen de control. La contribución resultante a la ecuación discretizada es la caída de presión $p_w - p_e$ en términos de las presiones nodales

$$p_w - p_e = \frac{p_W + p_P}{2} - \frac{p_P + p_E}{2} = \frac{p_W - p_E}{2} \quad (\text{H.16})$$

Figura H.1: Comportamiento físicamente correcto e incorrecto

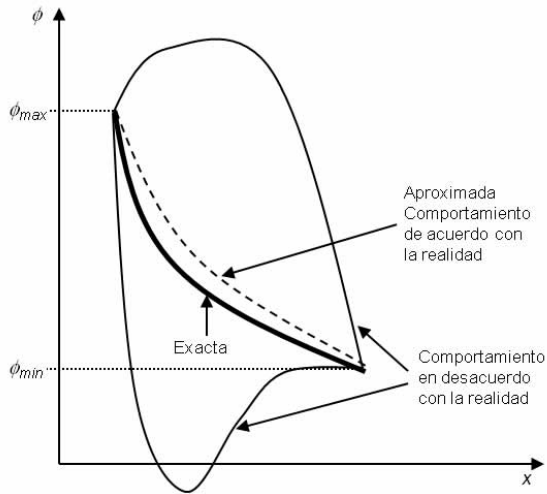


Figura H.2: Sector de una malla de tres puntos típico.

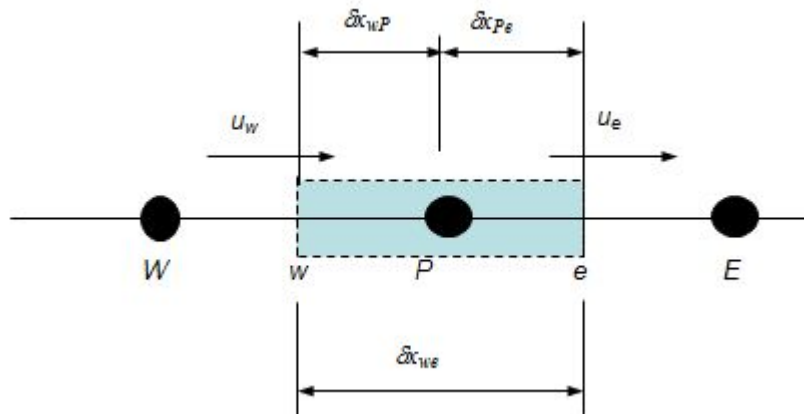


Figura H.3: Campo de presión en zigzag.

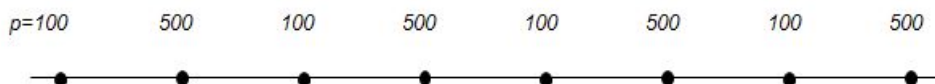
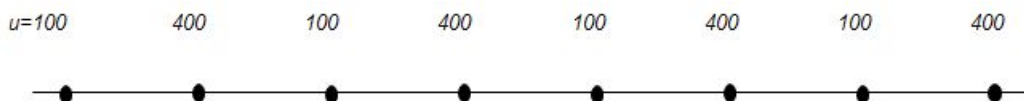


Figura H.4: Campo de velocidad.



Esto significa que la ecuación de cantidad de movimiento contendrá la diferencia de presión entre dos puntos alternados de la malla, y no entre puntos adyacentes. Otra implicación se puede ver a partir de la Figura H.3, donde se propone un campo de presión en términos de puntos nodales de presión.

El zigzag no puede considerarse como real; pero, para cualquier punto P , el correspondiente $p_w - p_e$ será cero, dada la alternancia entre los valores de presión igual.

H.2.2. Representación de la ecuación de continuidad

Para un flujo estable unidimensional con una densidad constante, la ecuación de continuidad es

$$\frac{du}{dx} = 0 \quad (\text{H.17})$$

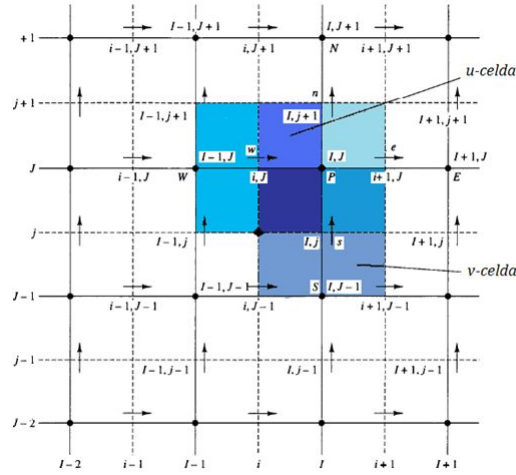
Se integra, el uso de un perfil lineal para u para puntos en la mitad entre dos volúmenes de control queda:

$$u_E - u_W = 0 \quad (\text{H.18})$$

De esta forma la ecuación de continuidad discretizada requiere la igualdad de velocidades en puntos alternados de la malla y no en nodos adyacentes. Una consecuencia es que el campo de velocidad mostrada en la figura H.4, que no podría ser real, satisface la ecuación de continuidad.

En problemas en dos y tres dimensiones, se pueden crear patrones similares para las componentes de la velocidad; que cumplirían con la ecuación de continuidad pero que difícilmente podrían aceptarse como soluciones razonables o válidas.

Figura H.5: Localización alternadas para u y v , $\uparrow = v$, $\bullet =$ otras variables.



H.3. LA MALLA ALTERNADA

El método de volúmenes finitos empieza, como siempre, con la discretización del dominio del flujo y de las ecuaciones de transporte relevantes. Lo primero a decidir es dónde se almacenan las velocidades. Parece lógico definir las en las mismas localizaciones que las otras variables escalares como la presión, temperatura etc... Sin embargo, si la velocidad y la presión están definidas en los mismos nodos de un volumen de control ordinario se puede dar el caso en que un campo de presión altamente no uniforme pueda actuar como un campo uniforme en las ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad. Un remedio a este problema es usar una malla alternada o desplazada para los componentes de la velocidad. La idea es evaluar las variables escalares, tales como la presión, densidad, temperatura, etc., en los puntos nodales ordinarios pero calcular las componentes de la velocidad en una malla desplazada alrededor del centro de las interfaces de las celdas. La disposición para un flujo bidimensional se muestra en la figura mostrada a continuación.

Las variables escalares, incluyendo la presión, se guardan en los nodos marcados con (\bullet). Las velocidades están definidas en las caras de las celdas entre los nodos y están indicadas mediante flechas. La flecha horizontal (\rightarrow) indica las localizaciones para las velocidades u y las flechas verticales (\uparrow) para las velocidades v . Además a la notación W, E, N, S, la figura anterior introduce un nuevo sistema de notación basado en enumerar las líneas de la malla y caras de las celdas.

Por el momento se continuará usando la notación original W, E, S, N ; las velocidades w en las caras s y n (normales a la dirección y). En un flujo tridimensional la componente w se evalúa en las caras b y t . El volumen de control para u y v son diferentes de el volumen de control escalar y diferente de cualquier otro. El volumen de control escalar algunas veces está referido como volumen de control para la presión, debido a que, la ecuación discretizada de continuidad se convierte en una ecuación de corrección de presión, el cual se evalúa en los volúmenes de control escalares.

En la disposición de malla alternada, los nodos de presión coinciden con las caras de la celda del volumen de control u . El gradiente de presión $\frac{\partial P}{\partial x}$ está dado por

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{P_P - P_W}{\delta x_u}$$

donde δx_u es el ancho del volumen de control u . Similarmente, $\frac{\partial P}{\partial y}$ para el volumen de control v está dado por

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{P_P - P_S}{\delta y_v}$$

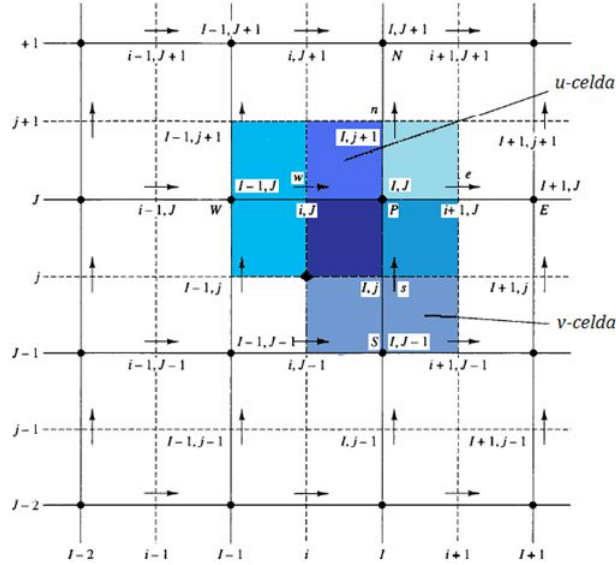
donde δy_v es el alto del volumen de control v .

H.4. LAS ECUACIONES DE CANTIDAD DE MOVIMIENTO

Como anteriormente se ha mencionado, si el campo de presión es conocido, la discretización de las ecuaciones de velocidad y la consecuente solución producida es similar a la de una ecuación escalar. Dado que la velocidad de la malla es alternada la nueva notación basada en la línea de la malla y en la numeración de la cara de la celda será usada. En la figura H.6 las líneas continuas de la malla son numeradas por medio de letras capital. En la dirección x la numeración es ..., $I - 1$, I , $I + 1$, ... etc. y en la dirección y ..., $J - 1$, J , $J + 1$, ... etc. Las líneas punteadas que construyen las caras de la celda escalar son denotadas por letras minúsculas..., $i - 1$, i , $i + 1$, ... y ..., $j - 1$, j , $j + 1$, ... en la dirección x y y respectivamente.

Un sistema de subíndices basados en esta numeración permite definir la localización de los nodos en la malla y en las caras de la celda con precisión. Los nodos escalares, localizados en la intersección de dos líneas de la malla, están indentificados por dos letras capitales: por ejemplo, el punto P en la figura H.6 esta denotado por (I, J) . Las velocidades u están ubicadas en las caras este (e) y oeste (w) del volumen de control escalar. Estas están localizadas en la intersección de una línea definida en el límite y la línea de la malla y están, sin embargo, definidas por una combinación de letras minúsculas y capital: por ejemplo, la cara oeste (w) de la cara alrededor del punto P esta definido por (i, J) . Por esta misma razón la disposición de localización para las

Figura H.6: Malla alternada.



velocidades v son la combinación de una letra capital y una minúscula: por ejemplo, la cara sur (s) esta dada por (I, j) .

Se puede utilizar una malla alternada de velocidades adelantada o atrasada. La malla uniforme en la figura H.6 son escalonamientos atrasados dado que la localización de i para una velocidad u $u_{i,J}$ esta a una distancia de $-1/2\delta x_u$ desde el nodo escalar (I, J) . Asimismo, la localización de j para una velocidad v $v_{I,j}$ es $-1/2\delta y_u$ del nodo (I, J) . Expresado en el nuevo sistema de coordenadas la ecuación de momento u para la velocidad en la localización (i, J) esta dado por:

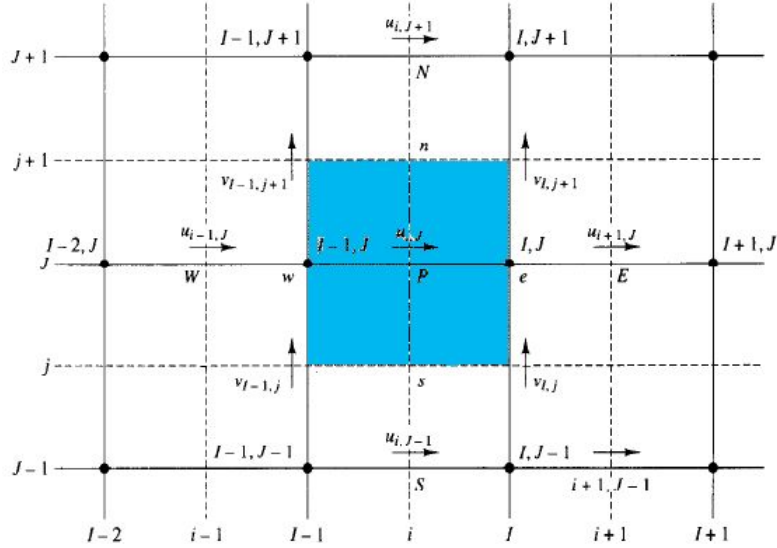
$$a_{i..J}u_{i,J} = \sum a_{nb}u_{nb} - \frac{p_{I,J} - p_{I-1,J}}{\delta x_u} \Delta V_u + \bar{S} \Delta V_u$$

ó

$$a_{i..J}u_{i,J} = \sum a_{nb}u_{nb} + (p_{I,J} - p_{I-1,J})A_{i,J} + b_{i,J} \quad (\text{H.19})$$

Donde ΔV_u es le volúmen de la celda de u , $b_{i,J} - \bar{S} \Delta V_u$ es el término fuente del momento, $A_{i,J}$ es el área de la cara del volúmen de control (este u oeste). El término fuente de gradiente de presión en la ecuación H.19 ha sido discretizada por medio de una interpolación entre la presión de los nodos localizados en los limites del volúmen de control u .

Figura H.7: Volúmen de Control u y sus componentes de velocidad vecinos.



En la nueva numeración del sistema los vecinos E , W , N y S involucrados en la sumatoria $\sum a_{nb}u_{nb}$ están $(i-1, J)$, $(i+1, J)$, $(i, J+1)$, $(i, J-1)$. La localización de las velocidades se muestran más en detalle en la figura H.7. Los valores de los coeficientes $a_{i,j}$ y a_{nb} pueden ser calculados con cualquiera de los métodos (upwind, Híbrido) adecuados para problemas de convección-difusión. El coeficiente contiene combinación de flujo convectivo por unidad de masa F y conductividad difusiva D en las caras del volúmen de control. Aplicando el nuevo sistema de notación

Los valores de F y D para cada una de las caras e , w , n y s de un volúmen de control u son:

$$\begin{aligned}
 F_w &= (\rho u)_w = \frac{F_{i,J} + F_{i-1,J}}{2} \\
 &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_{I,j} + \rho_{I-1,J}}{2} \right) u_{i,J} + \left(\frac{\rho_{I-1,J} + \rho_{I-2,J}}{2} \right) u_{i-1,J} \right] \quad (\text{H.19a})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_e &= (\rho u)_e = \frac{F_{i+1,J} + F_{i-1,J}}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_{I+1,j} + \rho_{I,J}}{2} \right) u_{i+1,J} + \left(\frac{\rho_{I,J} + \rho_{I-1,J}}{2} \right) u_{i,J} \right] \quad (\text{H.19b})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_s &= (\rho v)_s = \frac{F_{i,J} + F_{i-1,J}}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_{I,j} + \rho_{I,J-1}}{2} \right) v_{i,J} + \left(\frac{\rho_{I-1,J} + \rho_{I-1,J-1}}{2} \right) v_{i-1,j} \right] \quad (\text{H.19c})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_n &= (\rho v)_n = \frac{F_{I,j+1} + F_{I-1,j+1}}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_{I,J+1} + \rho_{I,J}}{2} \right) v_{I,j+1} + \left(\frac{\rho_{I-1,J+1} + \rho_{I-1,J}}{2} \right) v_{I-1,j+1} \right] \quad (\text{H.19d})
\end{aligned}$$

$$D_w = \frac{\Gamma_{I-1,J}}{x_i - x_{i-1}} \quad (\text{H.19e})$$

$$D_e = \frac{\Gamma_{I,J}}{x_{i+1} - x_i} \quad (\text{H.19f})$$

$$D_s = \frac{\Gamma_{I-1,J} + \Gamma_{I,J} + \Gamma_{I-1,J-1} + \Gamma_{I,J-1}}{4(y_J - y_{J-1})} \quad (\text{H.19g})$$

$$D_n = \frac{\Gamma_{I-1,J+1} + \Gamma_{I,J+1} + \Gamma_{I-1,J} + \Gamma_{I,J}}{4(y_{J+1} - y_J)} \quad (\text{H.19h})$$

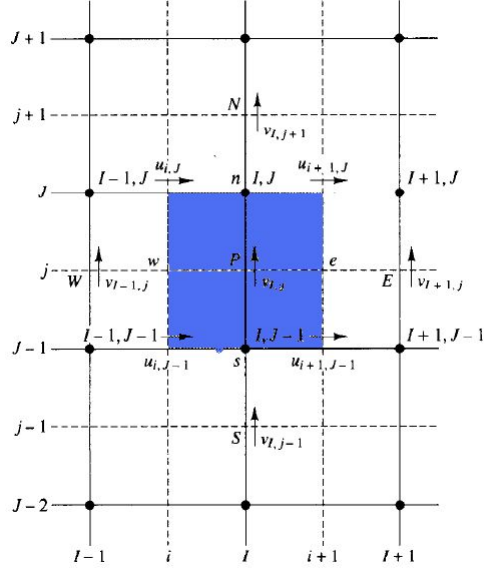
La formulación de ((H.20a)) muestra que donde estén las variables escalares o las componentes de la velocidad no está disponible en el volumen de control una cara, un adecuado promedio de dos o cuatro puntos es formado sobre los puntos más cercanos donde el los valores están disponibles. Durante cada iteración las componentes de la velocidad u y la velocidad v usadas para evaluar las expresiones anteriores son obtenidas de la iteración anterior (o valores supuestos inicialmente en la primera iteración). Nótese que estos valores *conocidos* u y v contribuyen en los coeficientes a en la ecuación (H.19). Estos son distintos de $u_{i,J}$ y u_{nb} en esta ecuación, lo cual denota los valores escalares *desconocidos*.

Análogamente, la ecuación de momento v es:

$$a_{I,j} v_{I,j} = \sum a_{nb} v_{nb} + (p_{I,J-1} - p_{I,J}) A_{I,J} + b_{I,J} \quad (\text{H.20})$$

Los vecinos involucrados en la sumatoria $\sum a_{nb} v_{nb}$ y las componentes se muestran en la figura H.8.

Figura H.8: Volúmen de control v y sus componentes de velocidad vecinos.



Los coeficientes $a_{I,j}$ y a_{nb} nuevamente contienen combinación de flujo convectivo por unidad de masa F y la conductividad difusiva D en las caras de un volúmen de control v . Sus valores son obtenidos por el mismo promedio adoptado para el volúmen de control u y son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 F_w &= (\rho u)_w = \frac{F_{i,J} + F_{i,J-1}}{2} \\
 &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_{I,j} + \rho_{I-1,J}}{2} \right) u_{i,J} + \left(\frac{\rho_{I-1,J-1} + \rho_{I,J-1}}{2} \right) u_{i,J-1} \right] \quad (\text{H.20a})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_e &= (\rho u)_e = \frac{F_{i+1,J} + F_{i+1,J-1}}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_{I+1,j} + \rho_{I,J}}{2} \right) u_{i+1,J} + \left(\frac{\rho_{I,J-1} + \rho_{I+1,J-1}}{2} \right) u_{i,J} \right] \quad (\text{H.20b})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_s &= (\rho v)_s = \frac{F_{I,J-1} + F_{I,J}}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_{I,J-1} + \rho_{I,J-2}}{2} \right) v_{I,J-1} + \left(\frac{\rho_{I,J} + \rho_{I,J-1}}{2} \right) v_{I,j} \right] \quad (\text{H.20c})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_n &= (\rho v)_n = \frac{F_{I,j} + F_{I,j+1}}{2} \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_{I,J} + \rho_{I,J-1}}{2} \right) v_{I,j} + \left(\frac{\rho_{I,J+1} + \rho_{I,J}}{2} \right) v_{I,j+1} \right] \quad (\text{H.20d})
\end{aligned}$$

$$D_w = \frac{\Gamma_{I-1,J-1} + \Gamma_{I,J-1} + \Gamma_{I-1,J} + \Gamma_{I,J}}{4(x_I - x_{I-1})} \quad (\text{H.20e})$$

$$D_e = \frac{\Gamma_{I,J-1} + \Gamma_{I+1,J-1} + \Gamma_{I+1,J} + \Gamma_{I,J}}{4(x_{I+1} - x_I)} \quad (\text{H.20f})$$

$$D_s = \frac{\Gamma_{I,J-1}}{y_j - y_{j-1}} \quad (\text{H.20g})$$

$$D_n = \frac{\Gamma_{I,J}}{y_{j+1} - y_j} \quad (\text{H.20h})$$

Nuevamente en cada nivel de iteración los valores de F son computados usando las componentes de las velocidades u y v resultantes de las iteraciones previas.

Dado el campo de presión p , las ecuaciones de momento discretizadas de la forma (H.19) y (8.20) pueden ser escritas para cada volumen de control de u y v el cual se soluciona para obtener el campo de velocidades. Si el campo de presión es correcto el resultado del campo de velocidad podrá satisfacer la continuidad. Como el campo de presión es desconocido, es necesario un método para calcular la presión.

H.5. ALGORITMO SIMPLE

El acrónimo SIMPLE se entiende por Método Semi-Implícito para Ecuaciones de presión (en ingles, Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). El algoritmo fue originalmente propuesto por Patankar y Spalding (1972) y es, esencialmente una suposición y corrección producida por el cálculo de la presión en la malla alternada descrita anteriormente. El método es ilustrado para consideración de las ecuaciones en flujo laminar en estado estable bi-dimensional en coordenadas cartesianas.

Para inicializar el proceso de cálculo en el algoritmo SIMPLE el campo de presión p^* es asumido.

Las ecuaciones discretizadas de momento (H.19) y (8.20) son resueltas usando lo supuesto para el campo de presión cediendo las componentes u^* y v^* como sigue:

$$a_{i,J}u_{i,J}^* = \sum a_{nb}u_{nb}^* + (p_{I-1,J}^* - p_{I,J}^*)A_{i,J} + b_{i,J} \quad (\text{H.21})$$

$$a_{I,j}v_{I,j}^* = \sum a_{nb}v_{nb}^* + (p_{I,J-1}^* - p_{I,J}^*)A_{I,j} + b_{I,j} \quad (\text{H.22})$$

Ahora se define la corrección p' como la diferencia entre el campo de presión correcta p y el campo de presión asumido p^* , tal que:

$$p = p^* + p' \quad (\text{H.23})$$

Similarmente se define las correcciones de velocidad u' y v' para relacionar las velocidades u y v con las asumidas u^* y v^*

$$u = u^* + u' \quad (\text{H.24})$$

$$v = v^* + v' \quad (\text{H.25})$$

Substituyendo el campo de presión correcto p en las ecuaciones de momento cede el campo de velocidad (u, v) correctos. Las ecuaciones discretizadas (H.19) y (8.20) vinculan el campo de velocidad correcto con el campo de presión correctos.

Restando las ecuaciones (H.21) y (H.22) de (H.19) y (8.20), respectivamente, se tiene:

$$\begin{aligned} a_{i,J}(u_{i,J} - u_{i,J}^*) &= \sum a_{nb}(u_{nb} - u_{nb}^*) \\ &+ [(p_{I-1,J} - p_{I-1,J}^*) - (p_{I,J} - p_{I,J}^*)] A_{i,J} \end{aligned} \quad (\text{H.26})$$

$$\begin{aligned} a_{I,j}(v_{I,j} - v_{I,j}^*) &= \sum a_{nb}(v_{nb} - v_{nb}^*) \\ &+ [(p_{I,J-1} - p_{I,J-1}^*) - (p_{I,J} - p_{I,J}^*)] A_{I,j} \end{aligned} \quad (\text{H.27})$$

Usando la fórmula de corrección (H.23-8.25) las ecuaciones (H.26) y (H.27)

$$a_{i,J}u'_{i,J} = \sum a_{nb}u'_{nb} + (p'_{I-1,J} - p'_{I,J})A_{i,J} \quad (\text{H.28})$$

$$a_{I,j}v'_{I,j} = \sum a_{nb}v'_{nb} + (p'_{I,J-1} - p'_{I,J})A_{I,j} \quad (\text{H.29})$$

En este punto una aproximación es introducida: $\sum a_{nb}u'_{nb}$ y $\sum a_{nb}v'_{nb}$ son insignificantes en las ecuaciones (8.28) y (8.29) para la corrección de velocidad. La omisión de éste término es la principal aproximación del algoritmo SIMPLE. Obteniendo:

$$a_{i,J}u' = d_{i,J}(p'_{I-1,J} - p'_{I,J}) \quad (\text{H.30})$$

$$a_{I,j}v' = d_{I,j}(p' - p') \quad (\text{H.31})$$

Donde

$$d_{i,J} = \frac{A_{i,J}}{a_{i,J}} \quad y \quad d_{I,j} = \frac{A_{I,j}}{a_{I,j}} \quad (\text{H.32})$$

Las Ecuaciones (H.30) y (H.31) describe la corrección a ser aplicada a las velocidades por medio de la formula (8.24) y (8.25), lo cual da:

$$u_{i,J} = u_{i,J}^* + d_{i,J}(p'_{I-1,J} - p'_{I,J}) \quad (\text{H.33})$$

$$v_{I,j} = v_{I,j}^* + d_{I,j}(p'_{I,J-1} - p'_{I,J}) \quad (\text{H.34})$$

Similarmente la expresión existe para $u_{i+1,J}$ y $v_{I,j+1}$:

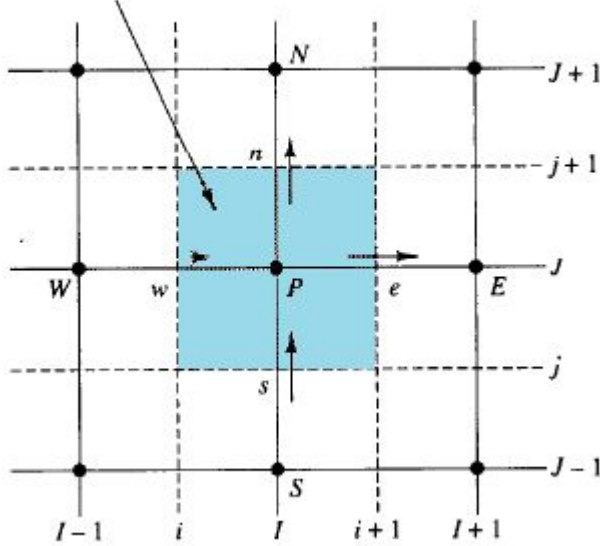
$$u_{i+1,J} = u_{i+1,J}^* + d_{i+1,J}(p'_{I,J} - p'_{I+1,J}) \quad (\text{H.35})$$

$$v_{I,j+1} = v_{I,j+1}^* + d_{I,j+1}(p'_{I,J} - p'_{I,J+1}) \quad (\text{H.36})$$

Hasta ahora únicamente se ha considerado las ecuaciones de cantidad de movimiento pero, como se mencionó anteriormente, el campo de velocidad está también sujeto a la condición que tendrá que satisfacer la ecuación de continuidad $\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0$. La continuidad es satisfecha en la discretización del volumen de control escalar mostrado en la figura (H.9).

Figura H.9: Volúmen de Control Escalar (Ecuación de Continuidad).

*Volúmen de control Escalar
(Ecuación de Continuidad)*



$$[(\rho u A)_{i+1,J} - (\rho u A)_{i,J}] + [(\rho v A)_{I,j+1} - (\rho v A)_{I,j}] = 0 \quad (\text{H.37})$$

La substitución de la correcta velocidad de las ecuaciones (H.33) a (H.36) en la ecuación discretizada de la continuidad (8.37) resulta:

$$\begin{aligned} [(\rho dA)_{i+1,J} + (\rho dA)_{i,J} + (\rho dA)_{I,j+1} + (\rho dA)_{I,j}] p' = & \\ & (\rho dA)_{i+1,J} p' + (\rho dA)_{i,J} p' \\ & + (\rho dA)_{I,j+1} p' + (\rho dA)_{I,j} p' \\ & + [(\rho u * A)_{i,J} - (\rho u * A)_{i+1,J} \\ & + (\rho v * A)_{I,j} - (\rho v * A)_{I,j+1}] \end{aligned} \quad (\text{H.38})$$

Identificando los coeficientes de p' estos pueden ser escritos como:

$$\begin{aligned} a_{I,J} p'_{I,J} = & a_{I+1,J} p'_{I+1,J} + a_{I-1,J} p'_{I-1,J} + a_{I,J+1} p'_{I,J+1} \\ & + a_{I,J-1} p'_{I,J-1} + b'_{I,J} \end{aligned} \quad (\text{H.39})$$

Donde $a_{I,J} = a_{I+1,J} + a_{I-1,J} + a_{I,J+1} + a_{I,J-1}$ y los coeficientes están dados por:

$a_{I+1,J}$	$(\rho dA)_{i+1,J}$
$a_{I-1,J}$	$(\rho dA)_{i,J}$
$a_{I,J+1}$	$(\rho dA)_{I,j+1}$
$a_{I,J-1}$	$(\rho dA)_{I,j}$
$b'_{I,J}$	$(\rho u * A)_{i,J} - (\rho u * A)_{i+1,J} + (\rho v * A)_{I,j} - (\rho v * A)_{I,j+1}$

La ecuación (H.39) representa la ecuación discretizada de la continuidad cómo una ecuación para la corrección de la presión p' . El término b' en la ecuación es la continuidad del desequilibrio resultante del incorrecto campo de velocidades u^* y v^* . Resolviendo la ecuación (H.39), la corrección del campo de presión p' puede ser obtenida en todos los puntos. Una vez el campo de corrección de presión es conocido, el correcto campo de presión puede ser obtenido usando la ecuación (H.23) y las componentes de velocidad por medio de la formulación (H.33) a (H.36). La omisión del término $\sum a_{nb}u'_{nb}$ en la derivación no afecta la solución final, pues la corrección de presión y la corrección de velocidad serán cero cuando la solución converge dando $p^* = p$, $u^* = u$ y $v^* = v$.

La ecuación de corrección de presión es susceptible a diverger a menos que se use una sobre relajación durante el proceso iterativo y una nueva mejora en la presión p^{new} es obtenida con:

$$p^{new} = p^* + \alpha_p p' \quad (\text{H.40})$$

donde α_p es el factor de sobre relajación de la presión. Si se elige α_p igual a 1 el campo de presión asumido p^* es corregido por p' . Sin embargo, la corrección p' , en particular cuando el campo asumido p^* está lejos de la solución final, es a menudo se demora mucho para estabilizar los cálculos. Un valor de α_p entre 0 y 1 permite agregar a el campo asumido p^* una fracción del campo de corrección p' que es lo suficientemente grande para mover el proceso iterativo, pero lo suficientemente pequeño para asegurar estabilizar los cálculos.

Las velocidades también son sobre relajadas. Las mejoras iterativas de las componentes de la velocidad u^{new} y v^{new} se obtienen como:

$$u^{new} = \alpha_u u + (1 - \alpha_u) u^{(n-1)} \quad (\text{H.41})$$

$$v^{new} = \alpha_v v + (1 - \alpha_v) v^{(n-1)} \quad (\text{H.42})$$

Donde α_u y α_v son los factores de sobre relajación de la velocidad u y v con valores entre 0 y 1, u y v son las componentes de velocidad corregidas sin relajación $u^{(n-1)}$ y $v^{(n-1)}$ que representan sus valores obtenidos en la iteración previa. Después de algo de álgebra puede mostrarse que con sobre relajación la ecuación de momento- u discretizada toma la forma de:

$$\frac{a_{i,J}}{\alpha_u} u_{i,J} - \sum a_{nb} u_{nb} + (p_{I-1,J} - p_{I,J}) A_{i,J} + b_{i,J} + \left[(1 - \alpha_u) \frac{a_{i,J}}{\alpha_u} \right] u_{i,J}^{(n-1)} \quad (\text{H.43})$$

Y para la ecuación de movimiento- v discretizada

$$\frac{a_{I,j}}{\alpha_v} v_{I,j} - \sum a_{nb} v_{nb} + (p_{I,J-1} - p_{I,J}) A_{I,j} + b_{I,j} + \left[(1 - \alpha_v) \frac{a_{I,j}}{\alpha_v} \right] v_{I,j}^{(n-1)} \quad (\text{H.44})$$

La ecuación de corrección de presión también es afectado por la velocidad sobre relajada y también se puede mostrar que los términos d de la ecuación de corrección de presión pueden ser:

$$d_{i,J} = \frac{A_{i,J} \alpha_u}{a_{i,J}}, \quad d_{i+1,J} = \frac{A_{i+1,J} \alpha_u}{a_{i+1,J}}, \quad d_{I,j} = \frac{A_{I,j} \alpha_v}{a_{I,j}}$$

y

$$d_{I,j+1} = \frac{A_{I,j+1} \alpha_v}{a_{I,j+1}}$$

Escoger un correcto factor de sobre relajación α es esencial para una simulación efectiva. Un gran valor de α puede generar oscilaciones o incluso no hacer converger la iteración de la solución y con un valor muy pequeño ocasiona una convergencia lenta.

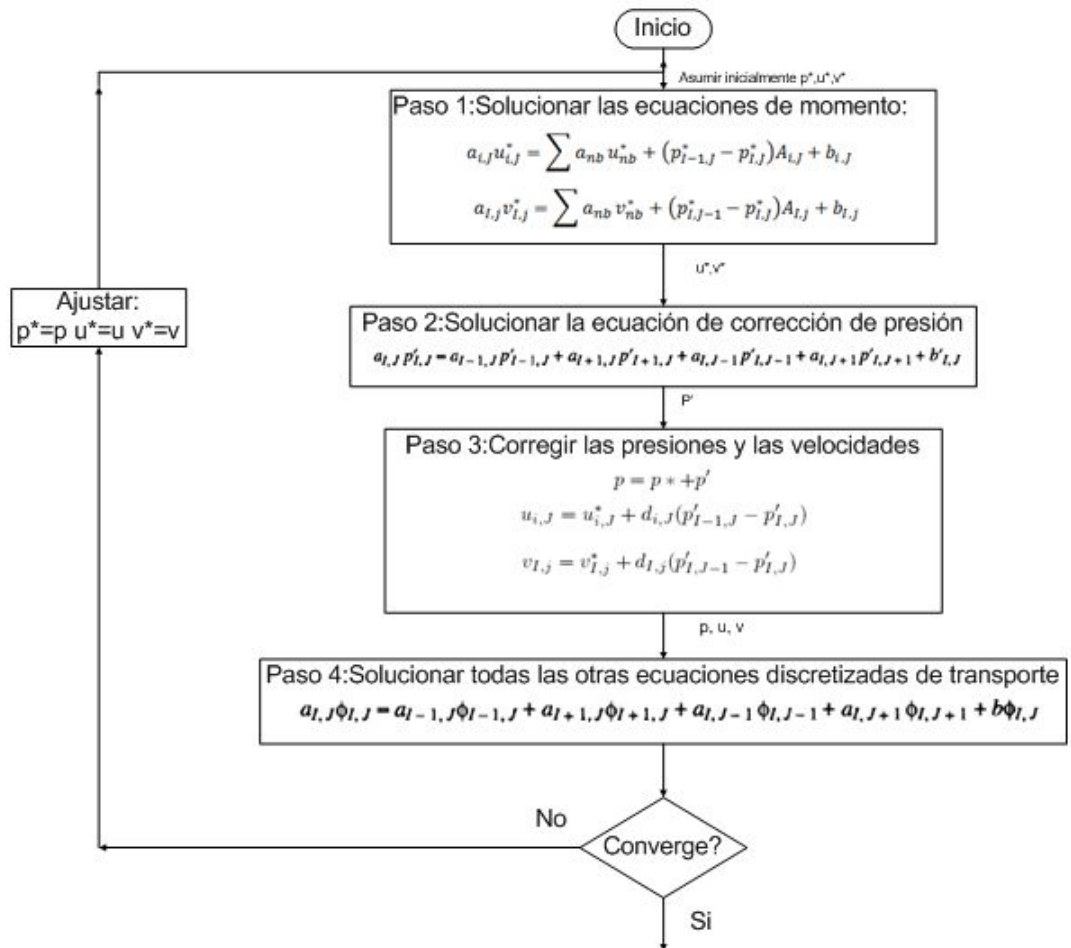
Desafortunadamente, los valores óptimos de los factores de sobre relajación son dependientes del flujo y para cada caso es diferente.

El algoritmo SIMPLE da un método para calcular la presión y la velocidad. El método es iterativo y cuando otros escalares son acoplados a la ecuación de momento, el cálculo necesita estar hecho secuencialmente. La secuencia de operación en CFD que emplea el algoritmo simple se muestra en la figura H.10.

H.6. ALGORITMO SIMPLER

El algoritmo SIMPLER es una versión mejorada del SIMPLE. En este algoritmo la ecuación de continuidad discretizada se usa para obtener una ecuación discretizada

Figura H.10: Diagrama de flujo del Algoritmo SIMPLE.



para la presión, en lugar de una corrección de presión como en el método SIMPLE. De esta manera el campo de presión intermedio se obtiene directamente sin necesidad de usar una corrección.

La aproximación introducida para el calculo de p' conduce a una corrección de presión exagerada y de allí la necesidad de aplicar una estrategia de subrelajación. Dado que la influencia de la velocidad de los nodos vecinos se desprecia en la ecuación de corrección de velocidades, la corrección de presión es la encargada completamente de corregir las velocidades, y esto resulta en un campo muy severo de corrección de presión. En la mayoría de los casos, es razonable suponer que la ecuación de corrección de presión hace un buen trabajo corrigiendo las velocidades, pero uno pobre corrigiendo la presión. Entonces si se emplea la ecuación de corrección de presión solamente para corregir velocidades y se proporciona un medio para obtener un campo de presión mas favorable, se tendrá un algoritmo mas eficiente. Esta es la esencia del algoritmo SIMPLER.

Las ecuaciones de cantidad de movimiento discretizadas se pueden escribir como:

$$u_{i,J} = \frac{\sum a_{nb}u_{nb} + b_{i,J}}{a_{i,J}} + \frac{A_{i,J}}{a_{i,J}}(P_{I-1,J} - P_{I,J}) \quad (\text{H.45})$$

$$v_{Ij} = \frac{\sum a_{nb}v_{nb} + b_{I,j}}{a_{I,j}} + \frac{A_{I,j}}{a_{I,j}}(P_{I,J-1} - P_{I,J}) \quad (\text{H.46})$$

En el algoritmo SIMPLER se definen unas pseudo velocidades \hat{u} y \hat{v} como:

$$\hat{u}_{i,J} = \frac{\sum a_{nb}u_{nb} + b_{i,J}}{a_{i,J}} \quad (\text{H.47})$$

$$\hat{v}_{I,j} = \frac{\sum a_{nb}v_{nb} + b_{I,j}}{a_{I,j}} \quad (\text{H.48})$$

Ahora las ecuaciones (H.45) y (H.46) se pueden escribir como:

$$u_{i,J} = \hat{u}_{i,J} + \frac{A_{i,J}}{a_{i,J}}(P_{I-1,J} - P_{I,J}) \quad (\text{H.49})$$

$$v_{Ij} = \hat{v}_{I,j} + \frac{A_{I,j}}{a_{I,j}}(P_{I,J-1} - P_{I,J}) \quad (\text{H.50})$$

En Las ecuaciones (H.49) y (H.50) se aplica la definición de d vista en la sección anterior y a su vez, estas se sustituyen en la ecuación de continuidad discretizada vista en el

Cuadro H.1: Coeficientes involucrados en la ecuación (H.51).

Coeficiente	Valor
$a_{I+1,J}$	$(\rho dA)_{i+1,J}$
$a_{I-1,J}$	$(\rho dA)_{i,J}$
$a_{I,J+1}$	$(\rho dA)_{I,j+1}$
$a_{I,J-1}$	$(\rho dA)_{I,j}$
$b_{I,J}$	$(\rho \hat{u}A)_{i,J} - (\rho \hat{u}A)_{i+1,J} + (\rho \hat{v}A)_{I,j} + (\rho \hat{v}A)_{I,j+1}$

algoritmo SIMPLER; usando una expresión similar para $u_{i+1,J}$ y $v_{I,j+1}$, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & [\rho_{i+1,J} A_{i+1,J} (\hat{u}_{i+1,J} + d_{i+1,J} (P_{I,J} - P_{I+1,J})) \\
 & \quad - \rho_{i,J} A_{i,J} (\hat{u}_{i,J} + d_{i,J} (P_{I-1,J} - P_{I,J}))] \\
 & + [\rho_{I,j+1} A_{I,j+1} (\hat{v}_{I,j+1} + d_{I,j+1} (P_{I,J} - P_{I,J+1})) \\
 & \quad - \rho_{I,j} A_{I,j} (\hat{v}_{I,j} + d_{I,j} (P_{I,J+1} - P_{I,J}))] = 0
 \end{aligned}$$

La anterior ecuación se puede reagrupar para obtener la ecuación discretizada de la presión:

$$a_{I,J} P_{I,J} = a_{I+1,J} P_{I+1,J} + a_{I-1,J} P_{I-1,J} + a_{I,J+1} P_{I,J+1} + a_{I,J-1} P_{I,J-1} + b_{I,J} \quad (\text{H.51})$$

donde $a_{I,J} = a_{I+1,J} + a_{I-1,J} + a_{I,J+1} + a_{I,J-1}$, con los coeficientes dados en el cuadro H.1.

H.6.1. Secuencia de operaciones para el algoritmo SIMPLER

- Comenzar con un campo de velocidad estimado.
- Calcular los coeficientes para las ecuaciones de cantidad de movimiento y de allí calcular las velocidades \hat{u} y \hat{v} por medio de las ecuaciones (H.47) y (H.48) introduciendo los valores de las velocidades de los vecinos.
- Calcular los coeficientes para la ecuación de presión (H.51), y resolverla para obtener el campo de presión.
- Tratar este campo de presión como P^* y resolver las ecuaciones de cantidad de

movimiento para obtener $u^* y v^*$.

- Calcular el termino fuente b y así resolver la ecuación de corrección de presión del algoritmo SIMPLE.
- Corregir el campo de velocidades por medio de las ecuaciones de corrección de velocidad introducidas en el algoritmo SIMPLE.
- Resolver las ecuaciones de discretización para las otras variables ϕ .
- Repetir desde el paso 2 hasta alcanzar la convergencia.

H.7. ALGORITMO SIMPLEC

La diferencia con el algoritmo SIMPLE es que se manipulan las ecuaciones de cantidad de movimiento de manera que las ecuaciones de corrección de la velocidad omiten los términos que son menos significantes que aquellos omitidos en el algoritmo SIMPLE.

La ecuación de corrección de velocidad es:

$$u'_{i,J} = d_{i,J} (p'_{I-1,J} - p'_{I,J}) \quad (\text{H.52})$$

Donde

$$d_{i,J} = \frac{A_{i,J}}{a_{i,J} - \sum a_{nb}} \quad (\text{H.53})$$

Similarmente la ecuación de corrección de velocidad v' es

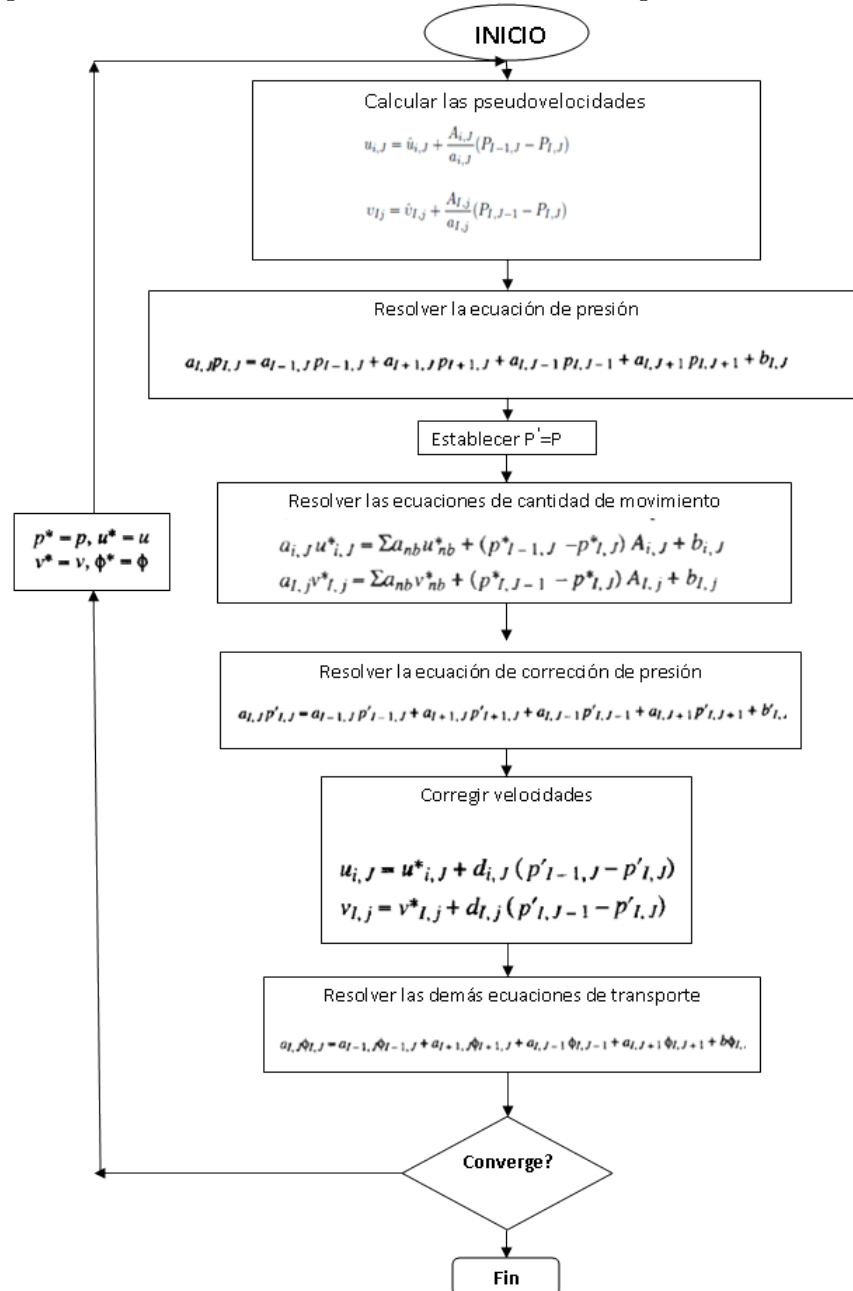
$$v'_{I,j} = d_{I,j} (p'_{I,J-1} - p'_{I,J}) \quad (\text{H.54})$$

Donde

$$d_{I,j} = \frac{A_{I,j}}{a_{I,j} - \sum a_{nb}} \quad (\text{H.55})$$

La ecuación discretizada de corrección de presión es la misma que en el algoritmo SIMPLE, excepto que los términos d se calculan a partir de las ecuaciones a y b. La secuencia de las operaciones del algoritmo SIMPLEC es idéntica a las de SIMPLE ver Figura H.10.

Figura H.11: Secuencia de operaciones para el algoritmo SIMPLER.



H.8. ALGORITMO PISO

El algoritmo PISO, (Pressure Implicit with Splitting of Operators), de Issa es un procedimiento de cálculo de presión velocidad desarrollado originalmente para el cálculo no iterativo de flujos compresibles transitorios. Este procedimiento se ha adaptado de forma exitosa para soluciones iterativas de problemas de estado estable. PISO involucra un paso predictor y dos pasos correctores y se puede ver como una extensión de SIMPLE, con un paso corrector posterior para mejorarlo.

Paso predictor

Se resuelven las ecuaciones de cantidad de movimiento con un campo de presión estimado o intermedio p^* con lo que se obtiene las componentes de la velocidad u^* y v^* usando el mismo método que el algoritmo SIMPLE.

Paso corrector 1

Los campos u^* y v^* no satisfarán la ecuación de continuidad a menos que se corrija el campo de presión P^* . Se introduce el primer paso corrector de SIMPLE con lo que se obtiene el campo de velocidades u^{**} y v^{**} que satisface la ecuación de continuidad. Las ecuaciones resultantes son las mismas que las ecuaciones de corrección de velocidades de SIMPLE pero, dado que existe un paso corrector posterior en el algoritmo PISO, se usa una notación ligeramente diferente:

$$P^{**} = P^* + P'$$

$$u^{**} = u^* + u'$$

$$v^{**} = v^* + v'$$

Estas fórmulas se usan para definir la velocidad corregida u^{**} y v^{**}

$$u_{i,J}^{**} = u_{i,J}^* + d_{i,J} (P'_{I-1,J} - P'_{I,J})$$

$$v_{I,J}^{**} = v_{I,j}^* + d_{I,j} (P'_{I,J-1} - P'_{I,J})$$

Paso corrector 2

Para mejorar el algoritmo SIMPLE, PISO ejecuta un segundo paso corrector. Las ecuaciones de cantidad de movimiento para u^{**} y v^{**} son

$$a_{i,J}u_{i,J}^{***} = \sum a_{nb}u_{nb}^{**} + (P_{I-1,J}^{***} - P_{I,J}^{***}) A_{i,J} + b_{i,J}$$

$$a_{I,j}v_{I,j}^{***} = \sum a_{nb}v_{nb}^{**} + (P_{I,J-1}^{***} - P_{I,J}^{***}) A_{I,j} + b_{I,j}$$

Se debe anotar que los términos involucrados en la sumatoria se evalúan usando las velocidades u^{**} y v^{**} calculadas en el primer paso corrector.

La sustracción de varias ecuaciones da como resultado:

$$u_{i,J}^{***} = u_{i,J}^{**} + \frac{\sum a_{nb}(u_{nb}^{**} - u_{nb}^*)}{a_{i,J}} + d_{i,J} (P_{I-1,J}'' - P_{I,J}'')$$

$$v_{I,J}^{***} = v_{I,J}^{**} + \frac{\sum a_{nb}(v_{nb}^{**} - v_{nb}^*)}{a_{I,J}} + d_{I,j} (P_{I,J-1}'' - P_{I,J}'')$$

Donde P'' es la segunda corrección de presión de manera que P^{***} se puede obtener por

$$P^{***} = P^{**} + P''$$

La sustitución de u^{***} y v^{***} en la ecuación de continuidad discretizada conduce a una segunda ecuación de corrección de presión

$$a_{I,J}P_{I,J}'' = a_{I+1,J}P_{I+1,J}'' + a_{I-1,J}P_{I-1,J}'' + a_{I,J+1}P_{I,J+1}'' + a_{I,J-1}P_{I,J-1}'' + b_{I,J}''$$

donde $a_{I,J} = a_{I+1} + a_{I-1,J} + a_{I,J+1} + a_{I,J-1}$, con los coeficientes dados en la siguiente tabla.

En la obtención de la ecuación anterior el término fuente es cero dado que las componentes de la velocidad u^* y v^* satisfacen la ecuación de continuidad.

$$\left[(\rho u^{**} A)_{i,J} - (\rho u^{**} A)_{i+1,J} + (\rho v^{**} A)_{I,j} - (\rho v^{**} A)_{I,J+1} \right]$$

Cuadro H.2: Coeficientes involucrados en la ecuación anterior.

<i>Coficiente</i>	<i>Valor</i>
$a_{I+1,J}$	$(\rho dA)_{i+1,J}$
$a_{I-1,J}$	$(\rho dA)_{i,J}$
$a_{I,J+1}$	$(\rho dA)_{I,j+1}$
$a_{I,J-1}$	$(\rho dA)_{I,j}$
$a_{I,J}$	$\left(\frac{\rho A}{a}\right)_{i,J} \sum a_{nb} (u_{nb}^{**} - u_{nb}^*) - \left(\frac{\rho A}{a}\right)_{i+1,J} \sum a_{nb} (u_{nb}^{**} - u_{nb}^*)$ $+ \left(\frac{\rho A}{a}\right)_{I,j} \sum a_{nb} (v_{nb}^{**} - v_{nb}^*) - \left(\frac{\rho A}{a}\right)_{I,j+1} \sum a_{nb} (v_{nb}^{**} - v_{nb}^*)$

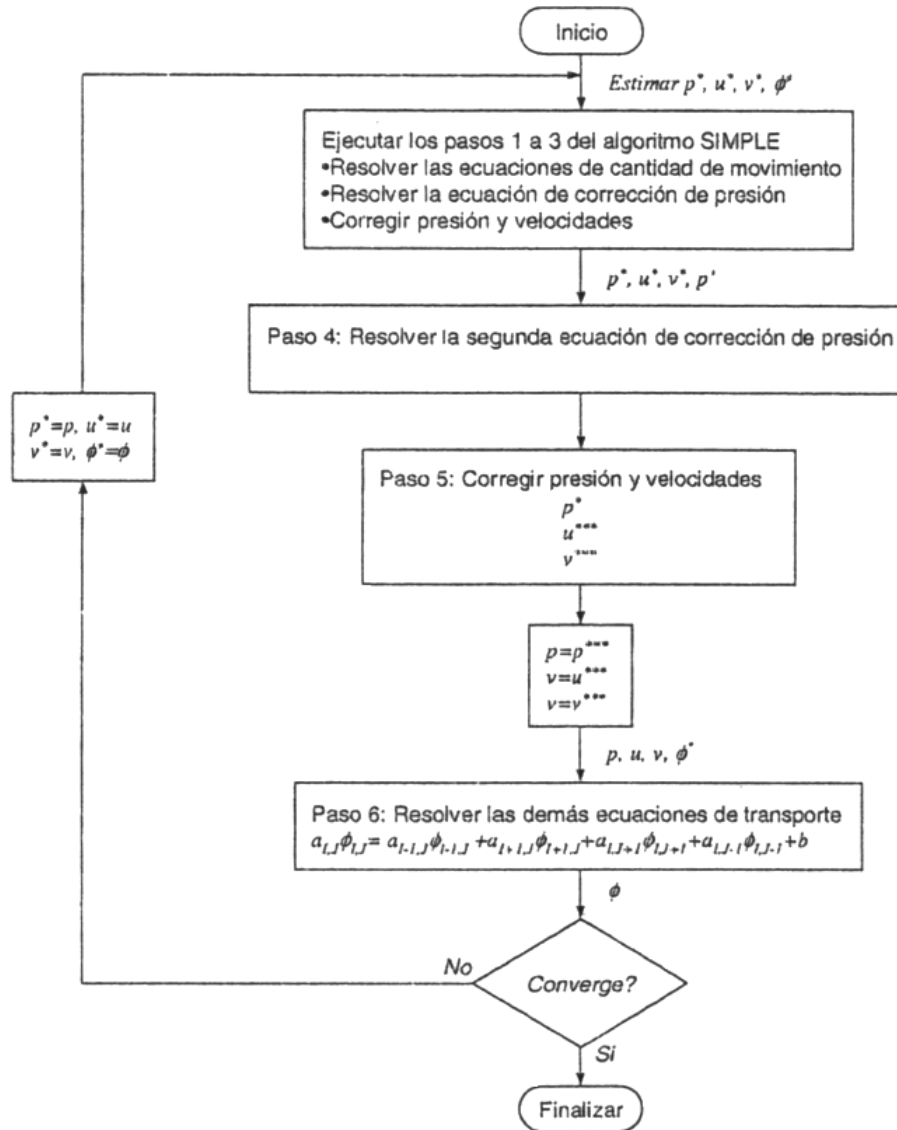
Resolviendo la ecuación anterior para obtener el campo de corrección de presión P'' y el campo de presión corregido dos veces se obtiene de

$$P^{***} = P^{**} + P'' = P^* + P' + P''$$

En un cálculo iterativo de un flujo transitorio el campo de presión P^{***} y los campos de velocidad u^{***} y v^{***} se consideran los valores correctos de u, v y p . La secuencia de las operaciones para el cálculo iterativo estable del algoritmo PISO se muestra en la siguiente Figura.

El algoritmo PISO resuelve la ecuación de corrección de presión dos veces de manera que el método requiere una memoria adicional para calcular el término fuente de la segunda ecuación de corrección de presión. Como antes se requiere una subrelajación con el procedimiento presentado para estabilizar el proceso de cálculo. Aunque este método implica un considerable incremento en el esfuerzo computacional se ha encontrado que es eficiente y rápido.

Figura H.12: Algoritmo PISO.



Apéndice I

FLUJOS TRANSITORIOS

Habiendo finalizado la parte del desarrollo del método del volumen finito para flujos en estado estable, es posible considerar una categoría más compleja en problemas dependientes del tiempo. La ley de conservación para el transporte de una propiedad escalar en un flujo transitorio tiene la forma general:

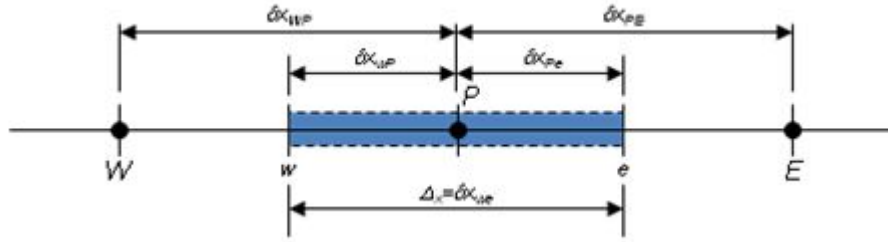
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S_\phi \quad (\text{I.1})$$

El primer término de la ecuación representa la tasa de cambio del término y es cero para estado estable. Para predecir problemas transitorios, es necesario tener en cuenta éste término en la discretización. La integración del volumen finito de la ecuación (I.1) sobre el volumen de control (CV) puede estar aumentando con una integral más allá sobre un tiempo finito Δt .

Reemplazando los términos de las integrales de volumen de la convección y difusión con las integrales de superficie y cambiando el orden de integración en el término de la tasa de cambio se obtiene:

$$\begin{aligned} & \int_{VC} \left(\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dt \right) dV + \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_A n \cdot (\rho u\phi) dA \right) dt \\ & = + \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_A n \cdot (\Gamma \text{grad}\phi) dA \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} S_\phi dV dt \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

Figura I.1: Malla para un problema unidimensional.



Hasta ahora no se han hecho aproximaciones pero para avanzar se necesitan técnicas para evaluar las integrales. La integración del volumen de control es esencialmente el mismo como para flujos en estado estable, explicados en capítulos anteriores para asegurar un tratamiento exitoso de la convección, difusión y términos fuentes. En este capítulo se centrará la atención en los métodos necesarios para la integración en el tiempo. El proceso de la integración respecto del tiempo se introducirá, por simplicidad, mediante el uso de la ecuación de calor unidimensional, y luego se extenderá a procesos en dos y tres dimensiones y posteriormente a problemas de convección-difusión.

I.1. CONDUCCIÓN DE CALOR TRANSITORIA UNIDIMENSIONAL

La conducción de calor transitoria unidimensional está gobernada por la ecuación:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + S \quad (\text{I.3})$$

Considere el volumen de control unidimensional mostrado en la figura (I.1). La integración de la ecuación (I.3) sobre el volumen de control y en un intervalo de tiempo de t a $t + \Delta t$, es:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dV dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} S dV dt \quad (\text{I.4})$$

que se puede escribir como:

$$\int_{VC} \left[\int_t^{t+\Delta t} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dt \right] dV = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(kA \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e - \left(kA \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w \right] dt + \int_t^{t+\Delta t} \bar{S} \Delta V dt \quad (\text{I.5})$$

En la ecuación (I.5), A es el área de la sección transversal del volúmen de control, ΔV es su volúmen, que es igual a $A\Delta x$, donde Δx es el ancho del volúmen de control y \bar{S} es el término fuente promedio. Como se comentó anteriormente, se asume que la temperatura del nodo central prevalece sobre todo el elemento. El lado izquierdo de la ecuación se puede escribir como:

$$\int_{VC} \left[\int_t^{t+\Delta t} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial x} dt \right] dV = \rho c_p (T_p^{n+1} - T_p^n) \Delta V \quad (I.6)$$

En la ecuación (I.6) se reemplazó $\partial T/\partial t$ por una diferencia forward de primer orden $[(T_p^{n+1} - T_p^n)/\Delta t]$ aunque se puede usar cualquier diferencia de orden superior si se desea. Si se diferencia los términos difusivos mediante diferencia centrada, la ecuación (I.5) queda:

$$\begin{aligned} \rho c_p (T_p^{n+1} - T_p^n) \Delta V = & \int_t^{t+\Delta t} \left[k_e A \frac{T_E - T_P}{\delta x_{Pe}} - k_w A \frac{T_P - T_W}{\delta x_{wP}} \right] dt \\ & + \int_t^{t+\Delta t} \bar{S} \Delta V dt \end{aligned} \quad (I.7)$$

Para evaluar el término de la ecuación es necesario asumir cierta variación de T_W , T_P y T_E respecto del tiempo. Se podrían usar las temperaturas en el tiempo t o Δt para calcular la integral temporal o, alternativamente, realizar una combinación de las temperaturas en los tiempos t y Δt . En este punto se generalizará la solución introduciendo un parámetro θ entre 0 y 1 y entonces escribir la integral I_T de la temperatura T_P respecto del tiempo como:

$$I_T = \int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [\theta T_P^{n+1} + (1 - \theta) T_P^n \Delta t] \quad (I.8)$$

de donde, de acuerdo al valor de θ la integral tendrá los valores mostrados en la tabla. En la tabla, se han destacado los valores de la integral I_T para θ de manera que si $\theta = 0$ se usa la temperatura en el tiempo t (anterior); si $\theta = 1$ se usa la temperatura en el tiempo $t + \Delta t$; y finalmente si $\theta = 1/2$ se usa un promedio entre la temperatura en el

Cuadro I.1: Valores de la integral I_T de acuerdo al valor de θ .

θ	0	1/2	1
I_T	$T_P^{n+1}\Delta t$	$\frac{1}{2}(T_P^{n+1} + T_P^n)\Delta t$	$T_P^n\Delta t$

Cuadro I.2: Definición de las constantes en la ecuación anterior.

a_E	a_W	a_P^n	a_P	b
$\frac{k_e}{\delta x_{Pe}}$	$\frac{k_w}{\delta x_{wP}}$	$\rho c_p \frac{\Delta x}{\Delta t}$	$\theta(a_E + a_W)$	$\bar{S}\Delta x$

tiempo t y la temperatura en el tiempo $t + \Delta t$.

Usando la fórmula en la ecuación (I.8) para integrar el primer término del lado derecho de la ecuación (I.7) y dividiendo por $A\Delta t$, y luego escribir la ecuación en su forma estándar:

$$a_P T_P^{n+1} = a_W [\theta T_W^{n+1} + (1 - \theta) T_W^n] + a_E [\theta T_E^{n+1} + (1 - \theta) T_E^n] \\ [a_P^n - (1 - \theta) a_W - (1 - \theta) a_E] T_P^n + b \quad (I.9)$$

donde cada una de las constantes introducidas están definidas en la tabla(I.2)

La forma exacta de la ecuación final discretizada depende del valor de θ . Cuando θ es cero, solamente se usan las temperaturas de T_P , T_W y T_E evaluadas en el tiempo t para el cálculo de la temperatura T_P en el tiempo $t + \Delta t$; el esquema resultante se conoce como esquema *explícito*. Cuando θ está entre cero y uno ($0 < \theta \leq 1$), la temperatura en el tiempo $t + \Delta t$ se calcula como la ponderación entre la temperatura en los tiempos t y $t + \Delta t$; el esquema resultante se conoce como esquema *implícito*. En el caso extremo en que $\theta = 1$ el esquema resultante se conoce como *completamente implícito* y en el caso en que $\theta = 1/2$ el esquema se conoce como el esquema de *Crank Nicolson*.

I.2. ESQUEMA EXPLÍCITO

En el esquema explícito el término fuente será linealizado a partir de la expresión $b = S_u + S_P T_P^n$. La substitución de $\theta = 0$ en la ecuación (9.9) para la conducción de calor transitoria unidimensional:

$$a_P T_P^{n+1} = a_W T_W^n + a_E T_E^n + [a_P^n - (a_W + a_E - S_P)] T_P^n + S_u \quad (I.10)$$

El lado derecho de la ecuación (9.10) solamente contiene términos evaluados en el tiempo

de manera que el lado izquierdo de la ecuación se puede calcular por medio de un procedimiento de avance en el tiempo. El esquema se basa en la diferencia Backward y es de primer orden de exactitud respecto del tiempo. Como se explico en el capítulo 3 todos los términos deben ser positivos. El coeficiente de T_P^n se puede ver como los coeficientes de los vecinos que conectan los valores en el tiempo t a los valores en el tiempo $t + \Delta t$.

Al igual que en el caso del método de las diferencias finitas, el esquema explícito requiere que el paso en el tiempo cumpla con el criterio de estabilidad para así mantener la convergencia en la solución. Una vez más, y como se dedujo anteriormente, el criterio de estabilidad esta dado por:

$$\Delta t \leq \rho c_p \frac{(\Delta x)^2}{2k} \quad (\text{I.11})$$

I.3. ESQUEMA DE CRANK-NICOLSON

El esquema de Crank-Nicolson se obtiene de imponer $\theta = 1/2$ en la ecuación (9.9). Para este caso, la ecuación discretizada para la conducción de calor unidimensional es:

$$a_P T_P^{n+1} = a_W \left[\frac{T_W^{n+1} + T_W^n}{2} \right] + a_E \left[\frac{T_E^{n+1} + T_E^n}{2} \right] + \left[a_P^n - \frac{a_W}{2} - \frac{a_E}{2} \right] T_P^n + b \quad (\text{I.12})$$

donde a_P^n , a_E y a_W están definidos en la tabla I.2. Los términos b y a_P se pueden calcular respectivamente como

$$b = S_u + \frac{1}{2} S_P T_P^n \text{ y } a_P = \frac{1}{2} (a_W + a_E) + a_P^n - \frac{1}{2} S_P.$$

Debido a que se tiene más de una temperatura desconocida para el cálculo de T_P^{n+1} en la ecuación (9.12) el método es implícito y necesita por lo tanto resolver las ecuaciones para todos los puntos de la malla simultáneamente en cada paso de tiempo. Aunque los esquemas con $1/2 \leq \theta \leq 1$, incluyendo el esquema Crank-Nicolson, son incondicionalmente estables para cualquier paso de tiempo es más importante que todos los coeficientes sean positivos si se desea tener unos resultados acotados y en concordancia con la realidad física. Este caso se representa si el coeficiente de T_P^n satisface la condición:

$$a_P^n > \left[\frac{a_E + a_E}{2} \right]$$

que conduce a la condición

$$\Delta t = \rho c_p \frac{(\Delta x)^2}{k} \quad (\text{I.13})$$

Esta limitación en el paso de tiempo es solamente menos restrictiva que la presentada en la ecuación (9.11) asociada con el esquema explícito. El esquema de Crank-Nicolson se basa en una diferencia centrada y por lo tanto tiene un segundo grado de exactitud. Con pasos de tiempo suficientemente pequeños es posible alcanzar una exactitud considerablemente mayor que con el método explícito. La exactitud total de cálculo depende de la diferencia espacial seleccionada, de manera que el esquema Crank-Nicolson se acompaña normalmente con una diferencia espacial centrada.

I.4. ESQUEMA COMPLETAMENTE IMPLÍCITO

Cuando el valor de θ se pone a 1 se obtiene el esquema completamente implícito. La ecuación discretizada correspondiente es:

$$a_P T_P^{n+1} = a_W T_W^{n+1} a_E T_E^{n+1} a_P^n T_P^n + S_u \quad (\text{I.14})$$

donde $a_P = a_P^n + a_W + a_E - S_P$.

Ambos lados de la ecuación contienen temperaturas en el tiempo $t + \Delta t$, y entonces el sistema de ecuaciones algebraicas debe resolverse simultáneamente para cada paso del tiempo. El procedimiento de avance en el tiempo comienza con un valor inicial del campo de temperaturas T^n . Seguidamente la solución de T^{n+1} se asigna como T^n en el siguiente paso y entonces se repite el procedimiento a través de los pasos de tiempo hasta llegar al tiempo final deseado.

Todos los coeficientes son positivos, de manera que el esquema es incondicionalmente estable para cualquier paso de tiempo. Debido a que la exactitud del esquema es de primer orden en el tiempo, se requiere pasos pequeños de tiempo para asegurar una buena exactitud de los resultados. El esquema implícito se recomienda para cálculos transitorios de propósito general debido a su robustez y su estabilidad incondicional.

I.5. ESQUEMAS PARA SOLUCIONES EXPLÍCITAS

I.5.1. Método de Lax-Wendroff

La técnica de Lax-Wendroff es un método explícito particularmente para soluciones de avance. Las soluciones de avance están asociadas con ecuaciones hiperbólicas y

parabólicas. Un ejemplo de un campo de flujo gobernado por ecuaciones hiperbólicas es el caso del flujo no viscoso transitorio usando las ecuaciones de Euler transitorias.

Considérese el flujo no viscoso, bidimensional y transitorio. Las ecuaciones que gobiernan este flujo son como siguen:

$$\text{Ecuacion de continuidad : } \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\left(\rho \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial v}{\partial y} + v \frac{\partial \rho}{\partial y}\right) \quad (\text{I.15})$$

$$\text{Ecuacion de cantidad de movimiento en } x : \frac{\partial u}{\partial t} = -\left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}\right) \quad (\text{I.16})$$

$$\text{Ecuacion de cantidad de movimiento en } y : \frac{\partial v}{\partial t} = -\left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y}\right) \quad (\text{I.17})$$

$$\text{Ecuacion de energía : } \frac{\partial e}{\partial t} = -\left(u \frac{\partial e}{\partial x} + v \frac{\partial e}{\partial y} + \frac{p}{\rho} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{p}{\rho} \frac{\partial v}{\partial y}\right) \quad (\text{I.18})$$

En las anteriores ecuaciones para mayor simplicidad, se ha asumido que no existe generación de calor ni fuerzas de cuerpo. El método de Lax-Wendroff se basa en la expansión de las series de Taylor en el tiempo como se explica a continuación. Se elige cualquier variable dependiente del flujo; para este caso se elegirá a ρ . Definiendo $\rho_{i,j}^t$ como la densidad el punto i,j en el tiempo t , entonces la densidad en el mismo punto de la malla i,j en el tiempo $t + \Delta t$, definido como $\rho_{i,j}^{t+\Delta t}$, está dada por la serie de Taylor por:

$$\rho_{i,j}^{t+\Delta t} = \rho_{i,j}^t + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t \Delta t + \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}\right)_{i,j}^t \frac{(\Delta t)^2}{2} + \dots \quad (\text{I.19})$$

Cuando se usa la ecuación (I.19), se asume que se conoce el campo de flujo en el tiempo t , y entonces la ecuación (I.19) proporciona el campo de flujo en el tiempo $t + \Delta t$. Si se encuentran los valores numéricos para $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t$ y $\left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}\right)_{i,j}^t$, se puede calcular la densidad en el próximo paso de tiempo, por lo tanto $\rho_{i,j}^{t+\Delta t}$ se calcula explícitamente a partir de la ecuación (I.19). Debido a que la ecuación (I.19) es justamente matemática, la física del flujo debe influir en el calculo de alguna forma. La física está implícita en la ecuaciones (I.15), (I.16), (I.17) y (I.18). A partir de la ecuación de continuidad se obtendrá el termino $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t$ como sigue:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t = - \left(\rho_{i,j}^t \frac{u_{i+1,j}^t - u_{i-1,j}^t}{2\Delta x} + u_{i,j}^t \frac{\rho_{i+1,j}^t - \rho_{i-1,j}^t}{2\Delta x} \right. \\ \left. + \rho_{i,j}^t \frac{v_{i,j+1}^t - v_{i,j-1}^t}{2\Delta y} + v_{i,j}^t \frac{\rho_{i,j+1}^t - \rho_{i,j-1}^t}{2\Delta y} \right) \quad (\text{I.20})$$

En la ecuación (I.20) los términos del lado derecho son conocidos debido a que se conoce el campo de flujo en el tiempo t. La ecuación (I.20) proporciona el término para $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t$, que se introducirá en la ecuación (I.19). El término para $\left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}\right)_{i,j}^t$ se obtiene derivando la ecuación (I.15) respecto del tiempo como se muestra a continuación:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = - \left(\rho \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial t} \right. \\ \left. \rho \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial t} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial t} + v \frac{\partial^2 \rho}{\partial y \partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial t} \right) \quad (\text{I.21})$$

Las segundas derivadas en la ecuación (I.21), se obtienen derivando las ecuaciones (I.15) a (I.18) con respecto a la derivada espacial apropiada. Por ejemplo $\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}$ se obtiene diferenciando la ecuación (I.16) respecto de x:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} = -u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + v \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad (\text{I.22})$$

En la ecuación (I.22), todos los términos del lado derecho se expresan como diferencia centrada de segundo orden en el tiempo t, de la siguiente forma:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right)_{i,j}^t = -u_{i,j}^t \frac{u_{i+1,j}^t - 2u_{i,j}^t + u_{i-1,j}^t}{(\Delta x)^2} + \left(\frac{u_{i+1,j}^t - u_{i-1,j}^t}{2\Delta x}\right)^2 + \\ v_{i,j}^t \frac{u_{i+1,j+1}^t + u_{i-1,j-1}^t - u_{i-1,j+1}^t - u_{i+1,j-1}^t}{4(\Delta x)(\Delta y)} \\ + \frac{u_{i,j+1}^t - u_{i,j-1}^t}{2\Delta y} \frac{v_{i+1,j}^t - v_{i-1,j}^t}{2\Delta x} + \frac{1}{\rho_{i,j}^t} \frac{p_{i+1,j}^t - 2p_{i,j}^t + p_{i-1,j}^t}{(\Delta x)^2} \\ - \frac{1}{(\rho_{i,j}^t)^2} \frac{p_{i+1,j}^t - p_{i-1,j}^t}{2\Delta x} \frac{\rho_{i+1,j}^t - \rho_{i-1,j}^t}{2\Delta x} \quad (\text{I.23})$$

En la ecuación (I.23) todos los términos al lado derecho se conocen a partir del campo de flujo ya conocido en el tiempo t y a su vez esta ecuación proporciona un número para la derivada $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right)_{i,j}^t$. Este número se sustituye por el término $\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}$ en la ecuación (I.21). Para las demás derivadas se siguen procesos similares y así se puede obtener el valor para $\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}$ con la ecuación (I.21). El valor de la derivada $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ ya se conoce a partir de la ecuación (I.20). Con todo lo anterior ya podemos reemplazar en la ecuación (I.19) en el tiempo $t + \Delta t$, dado por $\rho_{i,j}^{t+\Delta t}$.

Para encontrar las variables restantes del campo de flujo en el punto i,j de la malla en el tiempo $t + \Delta t$, se debe simplemente repetir el procedimiento anterior. Este método permite conocer las variables del campo de flujo en un punto de la malla en el tiempo $t + \Delta t$ a partir de las variables del campo de flujo conocidas en los puntos de la malla $(i+1,j)$, $(i-1,j)$, $(i,j+1)$ y $(i,j-1)$ en el tiempo t .

EL método descrito anteriormente es de segundo orden de exactitud en el espacio y en el tiempo. El inconveniente del método Lax-Wendroff es como se puede ver lo tedioso del álgebra de las ecuaciones. En solución a esto, se da el método que se discutirá a continuación.

I.5.2. Técnica de MacCormack

Esta técnica es una variante de la anterior, que resulta ser mucho más simple en su aplicación. Ésta técnica al igual que la anterior es explícita con segundo orden de exactitud en el espacio y en el tiempo. Consideremos nuevamente las ecuaciones (I.15), (I.16), (I.17) y (I.18). Como en la sección anterior se asumirá que se conoce el campo de flujo en cada punto de la malla en el tiempo t y que se desea calcular el campo de flujo para el tiempo $t + \Delta t$ para los mismos puntos de la malla. En el caso del método de MacCormack la densidad en el tiempo $t + \Delta t$ por ejemplo, se obtiene a partir de:

$$\rho_{i,j}^{t+\Delta t} = \rho_{i,j}^t + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av} \Delta t \quad (I.24)$$

Donde $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av}$ es un valor medio representativo de $\partial \rho / \partial t$ entre los tiempos t y $t + \Delta t$. En la ecuación (I.24), el valor de $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av}$ se calcula de esa forma para preservar el segundo orden de exactitud sin la necesidad de calcular los valores de la segunda derivada presentes en el método de Lax-Wendroff, el cual tiene muchos más términos e involucra una gran cantidad de álgebra. Con el método de MacCormack el álgebra se evade. Este método aplica la filosofía corrector-predicor que se explicará a continuación.

I.5.3. Predictor

En la ecuación de continuidad discretizada se reemplazan las derivadas espaciales en el lado derecho por diferencias forward, de manera que:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t = - \left(\rho_{i,j}^t \frac{u_{i+1,j}^t - u_{i,j}^t}{\Delta x} + u_{i,j}^t \frac{\rho_{i+1,j}^t - \rho_{i,j}^t}{\Delta x} + \rho_{i,j}^t \frac{v_{i,j+1}^t - v_{i,j}^t}{\Delta y} + v_{i,j}^t \frac{\rho_{i,j+1}^t - \rho_{i,j}^t}{\Delta y} \right) \quad (I.25)$$

En la ecuación (I.25), todas las variables se conocen en el tiempo t . En este punto se puede tener un valor estimado de la densidad $(\bar{\rho})^{t+\Delta t}$, a partir de los dos primeros términos de la serie de Taylor:

$$(\bar{\rho})^{t+\Delta t} = \rho_{i,j}^t + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t \Delta t \quad (I.26)$$

En la ecuación (I.26) $\rho_{i,j}^t$ es un valor conocido y $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t \Delta t$ se evalúa a partir de la ecuación (I.25). Ésta ecuación es de primer orden de exactitud puesto que solamente tiene en cuenta los dos primeros términos de la serie de Taylor.

I.5.4. Corrector

A partir de los valores obtenidos en el paso predictor, se obtiene un valor estimado de las derivadas temporales para $t + \Delta t$, sustituyendo los valores estimados de las variables ρ, u, v y e en el lado derecho de las respectivas ecuaciones, reemplazando las derivadas con diferencias backward. Por ejemplo para la ecuación de continuidad:

$$\left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t}\right)_{i,j}^{t+\Delta t} = - \left[(\bar{\rho})_{i,j}^{t+\Delta t} \frac{(\bar{u})_{i,j}^{t+\Delta t} - (\bar{u})_{i-1,j}^{t+\Delta t}}{\Delta x} + (\bar{u})_{i,j}^{t+\Delta t} \frac{(\bar{\rho})_{i,j}^{t+\Delta t} - (\bar{\rho})_{i-1,j}^{t+\Delta t}}{\Delta x} + (\bar{\rho})_{i,j}^{t+\Delta t} \frac{(\bar{v})_{i,j}^{t+\Delta t} - (\bar{v})_{i,j-1}^{t+\Delta t}}{\Delta y} + (\bar{v})_{i,j}^{t+\Delta t} \frac{(\bar{\rho})_{i,j}^{t+\Delta t} - (\bar{\rho})_{i,j-1}^{t+\Delta t}}{\Delta y} \right] \quad (I.27)$$

El valor promedio de la derivada temporal de la densidad en la ecuación (I.24) se obtiene a partir de la media aritmética de $(\partial \rho / \partial t)_{i,j}^t$ obtenida de la ecuación (I.25) y $(\partial \rho / \partial t)_{i,j}^{t+\Delta t}$ obtenida de la ecuación (I.27). Entonces:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{av} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^t + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{i,j}^{t+\Delta t} \right] \quad (I.28)$$

La secuencia Predictor-corrector permite obtener el valor de la variable en el punto de la malla i,j en el tiempo $t + \Delta t$. La técnica MacCormack descrita, debido a las diferencias forward y backward, es un método de segundo orden de exactitud; es decir tiene la misma exactitud del método de Lax-Wendroff descrito en la sección(I.5.1), sin embargo, método de MacCormack es mucho más fácil de aplicar, debido a que no se necesita evaluar la segunda derivada temporal como es el caso del método de Lax-Wendroff.

I.5.5. Flujo viscoso, forma conservativa y avance en el espacio

En las secciones anteriores se eligieron las ecuaciones de Euler para mostrar el uso de los métodos de Lax-Wendroff y MacCormack asumiendo flujo no viscoso y usando la forma no conservativa de las ecuaciones de Euler. Las técnicas estudiadas también se pueden aplicar a flujos viscosos, a ecuaciones del movimiento del fluido en forma conservativa y a problemas de avance en el espacio siempre y cuando cumpla con la condición que el flujo esté gobernado por ecuaciones parabólicas o hiperbólicas.

I.6. EJEMPLO: CONDUCCIÓN DE CALOR TRANSITORIA UNIDIMENSIONAL

Una placa delgada está a una temperatura uniforme de $200^{\circ}C$. En $t = 0$ la temperatura del lado este del plato se reduce repentinamente a $0^{\circ}C$. La otra superficie está aislada. Calcula la solución transitoria de:

- $t = 40\text{sg}$
- $t = 80\text{sg}$
- $t = 120\text{sg}$
- Recalcular la solución numérica usando a paso de tiempo igual al valor límite dado por la ecuación

$$\Delta t \leq \rho c_p \frac{(\Delta x)^2}{2k}$$

Para $t=40\text{sg}$ y compare los resultados con la solución analítica.

Espesor de la placa $L = 2\text{cm}$, conductividad térmica $k = 10\text{W/mk}$ y $\rho c =$

$$10 * 10^6 J/m^3/K$$

Solución

La ecuación de conducción de calor unidimensional es:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (I.29)$$

Las condiciones iniciales son

$$T = 200 \quad \text{en} \quad t = 0$$

Y las condiciones de frontera

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial x} &= 0 \quad \text{en} \quad x = 0, t > 0 \\ T &= 0 \quad \text{en} \quad x = L, t > 0 \end{aligned}$$

La solución analítica está dada por

$$\frac{T(x, t)}{200} = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{2n-1} \exp(-\alpha \lambda_n^2 t) \cos(\lambda_n x) \quad (I.30)$$

Donde

$$\lambda_n = \frac{(2n-1)\pi}{2L}, \quad \text{y} \quad \alpha = k/\rho c$$

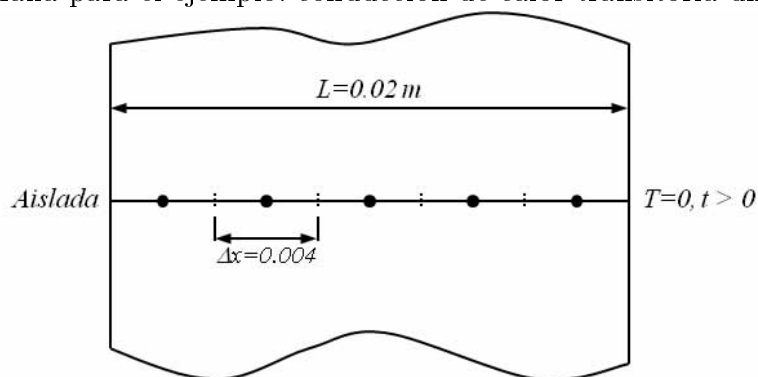
La solución numérica con el método explícito se genera dividiendo el ancho del dominio L en cinco volúmenes de control con $\Delta x = 0,004\text{m}$.

La malla unidimensional resultante se muestra en la Figura I.2

Los volúmenes de control 1 y 5 están contiguos a las fronteras, de manera que se deben anular los vínculos en la dirección de la frontera y los flujos se incluyen en los términos fuente. La ecuación discretizada en el nodo 1 queda

$$\rho c \frac{(T_P - T_P^0)}{\Delta t} \Delta x = \left[\frac{k}{\Delta x} (T_E^o - T_P^o) \right] - 0 \quad (I.31)$$

Figura I.2: Malla para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional.



Cuadro I.3: Coeficientes nodales para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional.

Nodo	a_W	a_E	S_u
1	0	$k/\Delta x$	0
2,3,4	$k/\Delta x$	$k/\Delta x$	0
5	$k/\Delta x$	0	$2k/\Delta x(T_B - T_P^o)$

La ecuación discretizada en el nodo 5 queda

$$\rho c \frac{(T_P - T_P^o)}{\Delta t} \Delta x = \left[\frac{k}{\Delta x/2} (T_B - T_P^o) \right] - \left[\frac{k}{\Delta x} (T_P^o - T_W^o) \right] \quad (\text{I.32})$$

Todas las ecuaciones se pueden escribir de la forma estándar:

$$a_P T_P = a_W T_W^o + a_E T_E^o + [a_P^o - (a_W + a_E)] T_P^o + S_u \quad (\text{I.33})$$

Donde

$$a_P = a_P^o = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

Los coeficientes dados en la tabla I.3

El paso de tiempo para el esquema explícito esta sujeto a la condición

$$\Delta t < \frac{\rho c (\Delta x)^2}{2k}$$

Cuadro I.4: Resultado para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional (método explícito).

Paso de tiempo	Tiempo (s)	Nodo						
		1	2	3	4	5	6	
		$x = 0,0$	$x = 0,002$	$x = 0,006$	$x = 0,01$	$x = 0,014$	$x = 0,018$	$x = 0,02$
0	0	200	200	200	200	200	200	200
1	2	200	200	200	200	200	150	0
2	4	200	200	200	200	193.75	118.75	0
3	6	200	200	200	199.21	185.16	98.43	0
4	8	200	200	199.9	197.55	176.07	84.66	0
5	10	199.98	199.98	199.62	195.16	167.33	74.92	0
6	12	199.94	199.94	199.11	192.24	159.26	67.74	0
7	14	199.83	199.83	198.35	188.35	151.94	62.24	0
8	16	199.65	199.65	197.36	197.36	145.36	57.89	0
9	18	199.37	199.37	196.17	196.17	139.45	54.35	0
10	20	198.97	198.97	194.79	194.79	134.12	51.40	0

$$\Delta t < \frac{10 \times 10^6 (0,004)^2}{2 \times 10}$$

$$\Delta t < 8s$$

Se selecciona $\Delta t = 2s$, substituyendo los valores numéricos se obtiene

$$\frac{k}{\Delta x} = \frac{10}{0,004} = 2500$$

$$\frac{\rho c \Delta x}{\Delta t} = 10 \times 10^6 \times \frac{0,004}{2} = 20000$$

Después de la substitución de los valores numéricos y algunas simplificaciones las ecuaciones discretizadas para los diferentes nodos son:

$$\text{Nodo 1: } 200T_P = 25T_E^o + 175T_P^o$$

$$\text{Nodo 2,3,4: } 200T_P = 25T_W^o + 25T_E^o + 150T_P^o$$

$$\text{Nodo 5: } 200T_P = 25T_W^o + 125T_P^o$$

La tabla I.4 muestra los resultados de los primeros 10 pasos de tiempo (método explícito)

Cuadro I.5: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional.

	Numérico	Analítico	%Error
Tiempo $t = 40s$			
Nodo			
1	188.64	188.39	-0.13
2	176.41	175.76	-0.36
3	148.29	147.13	-0.79
4	100.76	99.50	-1.26
5	35.94	35.38	-1.57
Tiempo $t = 80s$			
1	153.33	152.65	-0.43
2	139.05	138.36	-0.50
3	111.29	110.63	-0.59
4	72.06	71.56	-0.69
5	24.96	24.77	-0.75
Tiempo $t = 120s$			
1	120.53	119.87	-0.55
2	108.82	108.21	-0.56
3	86.47	85.96	-0.58
4	55.58	55.25	-0.60
5	19.16	19.05	-0.59

La tabla I.5 muestra los resultados numéricos y analíticos en los tiempos 40, 80 y 120 s.

I.7. EJEMPLO: CONDUCCIÓN DE CALOR TRANSITORIA UNIDIMENSIONAL SOLUCIÓN IMPLÍCITA

Resolver el problema anterior usando el esquema completamente implícito, comparar las soluciones de los métodos explícitos e implícitos para un lapso de tiempo de 8 segundo.

I.8. Solución

Cuadro I.6: Comparación de los resultados numéricos y analíticos para el ejemplo: conducción de calor transitoria unidimensional solución implícita

	<i>Numérico</i>	<i>Analítico</i>	<i>%Error</i>
<i>Nodo</i>	<i>Tiempot = 40s</i>		
1	188.64	188.39	-0.13
2	176.41	175.76	-0.36
3	148.29	147.13	-0.79
4	100.76	99.50	-1.26
5	35.94	35.38	-1.57
	<i>Tiempot = 80s</i>		
1	153.33	152.65	-0.43
2	139.05	138.36	-0.50
3	111.29	110.63	-0.59
4	72.06	71.56	-0.69
5	24.96	24.77	-0.75
	<i>Tiempot = 120s</i>		
1	120.53	119.87	-0.55
2	108.82	108.21	-0.56
3	86.47	85.96	-0.58
4	55.58	55.25	-0.60
5	19.16	19.05	-0.59

Para la solución de este ejemplo se usará la misma disposición de malla que el ejemplo anterior. El esquema completamente implícito describe los eventos en los volúmenes de control internos 2, 3, y 4 por medio de la ecuación:

$$a_P T_P^{n+1} = a_W T_W^{n+1} + a_E T_E^{n+1} + a_P^n T_P^n + S_u \quad (\text{I.34})$$

Los volúmenes de control en la frontera 1 y 5 requieren un tratamiento especial. Para incorporar la condición de frontera para el nodo 1 se tiene

$$\rho c \frac{T_P - T_P^0}{\Delta t} \Delta x = \left[\frac{k}{\Delta x} (T_E - T_P) \right] - 0 \quad (\text{I.35})$$

y para el nodo 5:

$$\rho c \frac{T_P - T_P^0}{\Delta t} \Delta x = \left[\frac{k}{\Delta x/2} (T_B - T_P) \right] - \left[\frac{k}{\Delta x} (T_P - T_W) \right] \quad (\text{I.36})$$

Las ecuaciones discretizadas se pueden escribir en la forma estándar:

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_P^0 T_P^0 + S_u \quad (\text{I.37})$$

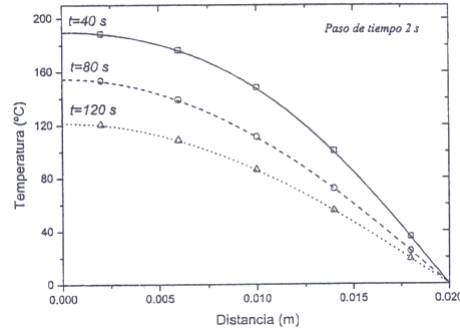
donde $a_P = a_W + a_E + a_P^0 - S_P$ y $a_P^0 = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t}$ y los coeficientes para cada uno de los nodos especificados en la siguiente tabla.

Aunque este método implícito permite grandes valores para Δt , se usarán pasos de tiempos razonablemente pequeños para asegurar una buena exactitud. Con el espaciamiento de la malla y los otros datos se obtiene

Cuadro I.7: Coeficientes nodales.

<i>Nodo</i>	a_W	a_E	S_P	S_u
1	0	$\frac{k}{\Delta x}$	0	0
2,3,4	$\frac{k}{\Delta x}$	$\frac{k}{\Delta x}$	0	0
5	$\frac{k}{\Delta x}$	0	$-\frac{2k}{\Delta x}$	$\frac{2k}{\Delta x}T_B$

Figura I.3: Comparación de los resultados numéricos y analíticos a diferentes tiempos.



$$\frac{k}{\Delta x} = \frac{10}{0,004} = 2500 \quad (\text{I.38})$$

$$\rho c = \frac{\Delta x}{\Delta t} = 10 * 10^6 * \frac{0,004}{2} = 20000 \quad (\text{I.39})$$

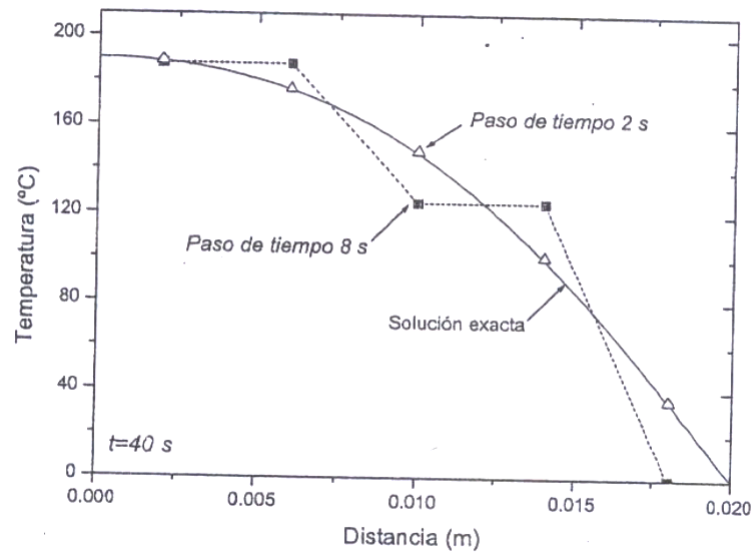
Después de substitución de los valores numéricos y las simplificaciones necesarias, las ecuaciones discretizadas para cada uno de los nodos son:

$$\text{Nodo1} : 225T_P = 25T_E + 200T_P^0 \quad (\text{I.40})$$

$$\text{Nodo2,3,4} : 250T_P = 25T_W + 25T_W + 200T_P^0 \quad (\text{I.41})$$

$$\text{Nodo5} : 175T_P = 25T_W + 200T_P^0 + 50T_B \quad (\text{I.42})$$

Figura I.4: Comparación de los resultados numéricos y analíticos a diferentes pasos de tiempo.



Observe que $T_B = 0$, el conjunto de ecuaciones a resolver en cada paso de tiempo es

$$\begin{bmatrix} 225 & -25 & 0 & 0 & 0 \\ -25 & 250 & -25 & 0 & 0 \\ 0 & -25 & 250 & -25 & 0 \\ 0 & 0 & -25 & 250 & -25 \\ 0 & 0 & 0 & -25 & 275 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T1 \\ T2 \\ T3 \\ T4 \\ T5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 200T_1^0 \\ 200T_2^0 \\ 200T_3^0 \\ 200T_4^0 \\ 200T_5^0 \end{bmatrix}$$

La ecuación matricial enfatiza que las ecuaciones para cada punto contienen las temperaturas desconocidas de sus vecinos. El esquema explícito involucra una evaluación de cada ecuación algebraica para encontrar cada nueva temperatura nodal, pero el esquema completamente implícito requiere la solución de un sistema de ecuaciones en cada paso de tiempo. A continuación se muestra la comparación de los resultados numéricos con la solución analítica.

Cuadro I.8: Comparación de los resultados numéricos y analíticos.

	<i>Numérico</i>	<i>Analítico</i>	<i>%Error</i>
<i>Nodo</i>	<i>Tiempo t = 40s</i>		
1	187.38	188.38	0.51
2	176.28	175.76	-0.29
3	150.04	147.13	-1.97
4	103.69	99.50	-4.20
5	37.51	35.38	-6.02
	<i>Tiempo t = 80s</i>		
1	153.72	152.65	-0.7
2	139.79	138.36	-1.03
3	112.38	110.63	-1.57
4	73.09	71.56	-2.13
5	25.38	24.77	-2.46
	<i>Tiempo t = 120s</i>		
1	153.72	152.65	-0.7
2	139.79	138.36	-1.03
3	112.38	110.63	-1.57
4	73.09	71.56	-2.13
5	25.38	24.77	-2.46

Apéndice J

DIFUSIÓN TRANSITORIA EN DOS Y TRES DIMENSIONES

En general, el esquema implícito es recomendado para programas de CFD de propósito general tomando como criterio su estabilidad. Ahora se establecerá la extensión del método implícito a problemas en dos y tres dimensiones en el espacio. La difusión en tres dimensiones se representa por la ecuación diferencial

$$\rho c_p \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S \quad (\text{J.1})$$

Como resulta obvio, se considerará un volumen de control bidimensional para la discretización en dos dimensiones y uno tridimensional para la discretización en tres dimensiones. La ecuación es:

$$a_P \phi_P^{n+1} = a_W \phi_W^{n+1} + a_E \phi_E^{n+1} + a_S \phi_S^{n+1} + a_N \phi_N^{n+1} + a_B \phi_B^{n+1} + a_T \phi_T^{n+1} + a_P^n \phi_P^n + S_u \quad (\text{J.2})$$

donde

$$a_P = a_P^n + a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T - S_P$$

y

$$a_P^n = \rho c_p \frac{\Delta V}{\Delta t}$$

Los coeficientes en la vecindad del punto P son a_W y a_E para problemas unidimensionales; en problemas bidimensionales son a_W , a_E , a_S y a_N ; mientras que problemas

Cuadro J.1: Coeficientes en la vecindad de P

	a_W	a_E	a_N	a_S	a_B	a_T
1D	$\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{wP}}$	$\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{Pe}}$				
2D	$\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{wP}}$	$\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{Pe}}$	$\frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{Pn}}$	$\frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{sP}}$		
3D	$\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{wP}}$	$\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{Pe}}$	$\frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{Pn}}$	$\frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{sP}}$	$\frac{\Gamma_b A_b}{\delta z_{bP}}$	$\frac{\Gamma_t A_t}{\delta z_{Pt}}$

Cuadro J.2: Áreas y Volúmenes a usar en cada una de las dimensiones

	1D	2D	3D
ΔV	Δx	$\Delta x \Delta y$	$\Delta x \Delta y \Delta z$
$A_w = A_e$	1	Δy	$\Delta y \Delta z$
$A_n = A_s$		Δx	$\Delta x \Delta z$
$A_b = A_t$			$\Delta x \Delta y$

tridimensionales son a_W , a_E , a_S , a_N , a_B y a_T . El término fuente se ha linealizado como $b = (S_u + S_P \phi_P)$.

En la tabla J.1 se muestra un resumen de los diferentes coeficientes en la vecindad de P .

En la tabla (J.2) se muestra un resumen de las áreas y volúmenes a usar en los tres casos mostrados en la tabla J.1

J.1. DISCRETIZACIÓN TEMPORAL DE LA ECUACIÓN DE CONVECCIÓN DIFUSIÓN

En la aproximación completamente implícita introducida anteriormente para problemas de difusión multidimensional, el termino proveniente de la discretización temporal aparece como:

ecuación.

Los otros coeficientes permanecen inalterados y son los mismos que en las ecuaciones discretizadas para problemas de estado estable. Usando esto como base, las ecuaciones discretizadas para las ecuaciones de convección-difusión transitorias son simples de obtener. La ecuación de transporte transitoria de una propiedad ϕ está dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho\vec{V}\phi) = \text{div}(\Gamma\text{grad}\phi) + S_\phi \quad (\text{J.3})$$

La ecuación de convección-difusión transitoria de una propiedad ϕ en un campo de velocidad \vec{V} está gobernada por:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w\phi)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + S \quad (\text{J.4})$$

La ecuación discretizada completamente implícita es:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + a_S\phi_S + a_N\phi_N + a_B\phi_B + a_T\phi_T + \overset{\circ}{a}_p\phi_p + S_u \quad (\text{J.5})$$

Con el coeficiente central dado por:

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T + \overset{\circ}{a}_p + \Delta F - S_P \quad (\text{J.6})$$

con:

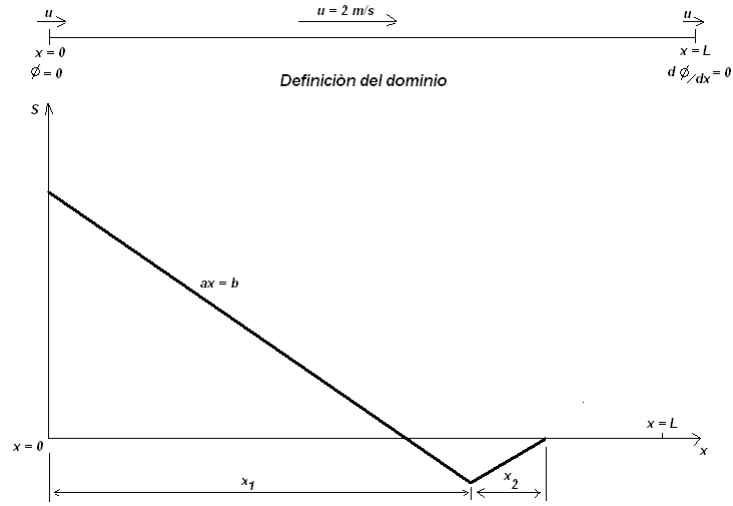
$$\overset{\circ}{a}_p = \frac{\overset{\circ}{\rho}_P\Delta V}{\Delta t} \quad (\text{J.7})$$

y

$$\bar{S}\Delta V = S_u + S_P\phi_P \quad (\text{J.8})$$

Los coeficientes nodales están dados por la formulación general estudiada en el capítulo 8.

Figura J.1: Distribución del término fuente.



J.2. EJEMPLO: CONVECCIÓN-DIFUSIÓN TRANSITORIA USANDO EL MÉTODO QUICK

Considerando el problema convección-difusión en el dominio unidimensional mostrado en la siguiente figura. Calcular el campo de temperaturas transitorio si la temperatura inicial es cero en todo el dominio y las condiciones de frontera con $\phi = 0$ en $x = 0$ y $\partial\phi/\partial x = 0$ en $x = L$. Los datos del problema son $L = 1,5 \text{ m}$, $u = 2 \text{ m/s}$, $\rho = 1 \text{ Kg/m}^3$, y $\Gamma = 0,03 \text{ Kg/m/s}$. La distribución del término fuente se muestra en la siguiente figura y se aplica para tiempos $t > 0 \text{ s}$ con $a = -200$, $b = 100$, $x_1 = 0 \text{ m}$, $x_2 = 0,2 \text{ m}$. Escribir un programa para calcular la distribución transitoria de temperatura hasta que se alcance el estado estable usando el método implícito para la integración en el tiempo y el es que QUICK para los términos convectivos y difusivos y comparar con la solución analítica estable.

Solución

La ecuación de convección-difusión transitoria unidimensional sujeta a un término fuente está gobernada por:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + S \quad (\text{J.9})$$

Para la solución del problema se usará una malla de 45 nodos para subdividir el dominio y ejecutar todos los cálculos. Se usará la formulación de Hayase. Del método QUICK para la solución.

La velocidad es $u = 2m/s$ y el ancho de la celda es $\Delta x = 0,0333$ de manera que $F = \rho u = 2$ y $D = \Gamma/\delta x = 0,9$. La formulación de Hayase proporciona el valor de ϕ en las caras de las celdas por medio de las siguientes fórmulas:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{1}{8} (3\phi_E - 2\phi_P - \phi_W) \quad (\text{J.10})$$

$$\phi_w = \phi_W + \frac{1}{8} (3\phi_P - 2\phi_W - \phi_{WW}) \quad (\text{J.11})$$

La ecuación implícita en nodo general con el esquema QUICK está dada por:

$$\frac{\rho(\phi_P - \phi_P^0)\Delta x}{\Delta t} + F_e \left[\phi_P + \frac{1}{8} (3\phi_E - 2\phi_P - \phi_W) \right] - F_w \left[\phi_W + \frac{1}{8} (3\phi_P - 2\phi_W - \phi_{WW}) \right] = D_e (\phi_e - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) + S_u + S_P \phi_P^0$$

El primer y último nodo se deben tratar separadamente. En el volumen de control 1 se usará la aproximación del nodo espejo introducida anteriormente para crear un nodo oeste (W) más allá de la frontera en $x = 0$. Dado que ϕ_A está en la frontera (A) el valor extrapolado linealmente en el nodo espejo está dado por:

$$\phi_0 = -\phi_P \quad (\text{J.12})$$

y el término difusivo en la frontera por

$$\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \Big|_A = \frac{D_A}{3} (9\phi_P - 8\phi_A - \phi_E) \quad (\text{J.13})$$

La ecuación discretizada en el nodo 1 es

$$\begin{aligned}
& \frac{\rho(\phi_P - \phi_P^0) \Delta x}{\Delta t} \\
+ F_e \left[\phi_P + \frac{1}{8} (3\phi_E - 2\phi_P) \right] - F_A \phi_A \\
& = D_e (\phi_E - \phi_P) - \frac{D_A}{3} (9\phi_P - 8\phi_A - \phi_E) + S_u + S_P \phi_P^0
\end{aligned} \tag{J.14}$$

En el último volumen de control, la condición de cero gradiente aplicado a el flujo difusivo a través de la frontera B indica que el valor de ϕ en la frontera es igual al valor en el nodo aguas arriba, donde, $\phi_B = \phi_P$. La ecuación discretizada para el volumen de control 45 es

$$\begin{aligned}
& \frac{\rho(\phi_P - \phi_P^0) \Delta x}{\Delta t} + F_B \phi_P \\
- F_w \left[\phi_W + \frac{1}{8} (3\phi_P - 2\phi_W - \phi_{WW}) \right] \\
& = 0 - D_w (\phi_P - \phi_W) + S_u + S_P \phi_P^0
\end{aligned} \tag{J.15}$$

Las ecuaciones discretizadas anteriores se pueden escribir en la forma estándar

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_P^0 \phi_P^0 + S_u \tag{J.16}$$

con

$$a_P = a_W + a_E + a_P^0 + (F_e - F_w) - S_P \tag{J.17}$$

$$a_P^0 = \frac{\rho \Delta x}{\Delta t}$$

Cuadro J.4: Valores de los coeficientes nodales

<i>Nodo</i>	a_W	a_E	S_P	S_u
1	0	$D_e + \frac{D_A}{3}$	$-\left(\frac{8}{3}D_A + F_A\right)$	$\left(\frac{8}{3}D_A + F_A\right)\phi_A + \frac{1}{8}F_e(\phi_P - 3\phi_E)$
2	$D_w + F_w$	D_e	0	$\frac{1}{8}F_w(3\phi_P - \phi_W) + \frac{1}{8}F_e(\phi_W + 2\phi_P - 3\phi_E)$
3 - 44	$D_w + F_w$	D_e	0	$\frac{1}{8}F_w(3\phi_P - 2\phi_W - \phi_{WW}) + \frac{1}{8}F_e(\phi_W + 2\phi_P - 3\phi_E)$
45	$D_w + F_w$	D_e	0	$\frac{1}{8}F_w(3\phi_P - 2\phi_W - \phi_{WW})$

Cuadro J.5: Ecuaciones discretizadas.

<i>Nodo</i>	a_W	a_E	a_P^0	<i>Fuente</i>	S_P	a_P
1	0	1.2	3.33	$44\phi_A + 0,25(\phi_P - 3\phi_E) + 3,33\phi_P^0$	-4.4	8.93
2	2.9	0.9	3.33	$0,025(5\phi_P - 3\phi_E) + 3,33\phi_P^0$	0	7.13
3-44	2.9	0.9	3.33	$0,025(5\phi_P - \phi_W - \phi_{WW} - 3\phi_E) + 3,33\phi_P^0$	0	7.13
45	2.9	0	3.33	$0,025(3\phi_P - 2\phi_W - \phi_{WW}) + 3,33\phi_P^0$	0	6.23

La ecuación discretizada para el volumen de control 2 se ha ajustado para tener en cuenta la expresión espacial necesaria para evaluar el flujo convectivo a través de la cara de la celda que tiene en común con el volumen de control 1.

Se selecciona un paso de tiempo $\Delta t = 0,01$, el cual está dentro de los límites de estabilidad para esquemas explícitos de manera que se puede obtener una exactitud razonable y resultados estables con el método implícito. La substitución de los valores numéricos da los coeficientes consignados en la siguiente tabla.

Comenzando con el campo inicial de $\phi_P^0 = 0$ en todos los nodos, se define el conjunto de ecuaciones por los coeficientes y contribuciones del término fuente dados en la anterior tabla y se resuelve iterativamente hasta que se alcanza la convergencia. Subsecuentemente, los valores de ϕ_P en el nivel de tiempo actual se asignan a ϕ_P y la solución continua al próximo nivel de tiempo. Para monitorear si se ha alcanzado el estado estable se rastrea la diferencia entre los nuevos y anteriores valores de ϕ_P . Cuando este alcance una magnitud menor a una tolerancia preestablecida (por ejemplo 10_{-9} se considera que la solución ha alcanzado el estado estable).

J.3. Solución analítica

Para encontrar la solución exacta de la ecuación de convección-difusión transitoria unidimensional se impone la derivada respecto del tiempo igual a cero y se integra la ecuación diferencial ordinaria dos veces respecto de x . La distribución del término fuente, incluso periódica en un intervalo $(-L,L)$, se representa por medio de una serie de cosenos de Fourier, la cual proporciona en la ecuación diferencial la función fuerza. Bajo las condiciones de frontera dadas la solución al problema

$$\begin{aligned} \phi(x) = & C_1 + C_2 e^{Px} - \frac{a_0}{P^2} (Px + 1) \\ & - \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left(\frac{L}{n\pi} \right) \left[P \sin \left(\frac{n\pi x}{L} \right) + \left(\frac{n\pi}{L} \right) \cos \left(\frac{n\pi x}{L} \right) \right] / \left[P^2 + \left(\frac{n\phi}{L} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{J.18})$$

con

$$P = \frac{\rho u}{\Gamma} ;$$

$$C_2 = \frac{a_0}{P^2 e^{PL}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n}{e^{PL}} \cos(n\pi) / \left[P^2 + \left(\frac{n\phi}{L} \right)^2 \right] \quad (\text{J.19})$$

y

$$C_1 = -C_2 + \frac{a_0}{P^2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n / \left[P^2 + \left(\frac{n\phi}{L} \right)^2 \right] \quad (\text{J.20})$$

$$a_0 = \frac{(x_1 + x_2)(ax_1 + b) + bx_1}{2L} \quad (\text{J.21})$$

$$a_n = \frac{2L}{n^2\pi^2} \left\{ \left(\frac{a(x_1 + x_2) + b}{x_2} \right) \cos \left(\frac{n\pi x_1}{L} \right) - \left[a + \left(\frac{ax_1 + b}{x_2} \right) \cos \left(\frac{nx(x_1 + x_2)}{L} \right) \right] \right\} \quad (\text{J.22})$$

J.4. CÁLCULO DEL CAMPO DE FLUJO TRANSITORIO

J.4.1. SIMPLE transitorio

Se requiere un término adicional en la ecuación de corrección de presión. La ecuación de continuidad en un flujo transitorio está dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (\text{J.23})$$

La forma integral de esta ecuación en un volumen de control bidimensional escalar es

$$\frac{\rho_P - \rho_P^o}{\Delta t} \Delta V + [(\rho u A)_e - (\rho u A)_w] + [(\rho u A)_n - (\rho u A)_s] = 0 \quad (\text{J.24})$$

La ecuación de corrección de presión se obtiene a partir de la ecuación de continuidad y debería contener términos que representen su comportamiento transitorio. Por ejemplo, la ecuación de corrección de presión para un flujo transitorio bidimensional tendrá la forma

$$a_{I,J} p'_{I,J} = a_{I+1,J} p'_{I+1,J} + a_{I-1,J} p'_{I-1,J} + a_{I,J+1} p'_{I,J+1} + a_{I,J-1} p'_{I,J-1} + b'_{I,J} \quad (\text{J.25})$$

Donde

$$a_{I,J} = a_{I+1,J} + a_{I-1,J} + a_{I,J+1} + a_{I,J-1} \quad (\text{J.26})$$

y

$$b'_{I,J} = (\rho u * A)_{i,J} - (\rho u * A)_{i+1,J} + (\rho v * A)_{I,j} - (\rho v * A)_{I,j+1} + \frac{(\rho_P - \rho_P^o) \Delta V}{\Delta t}$$

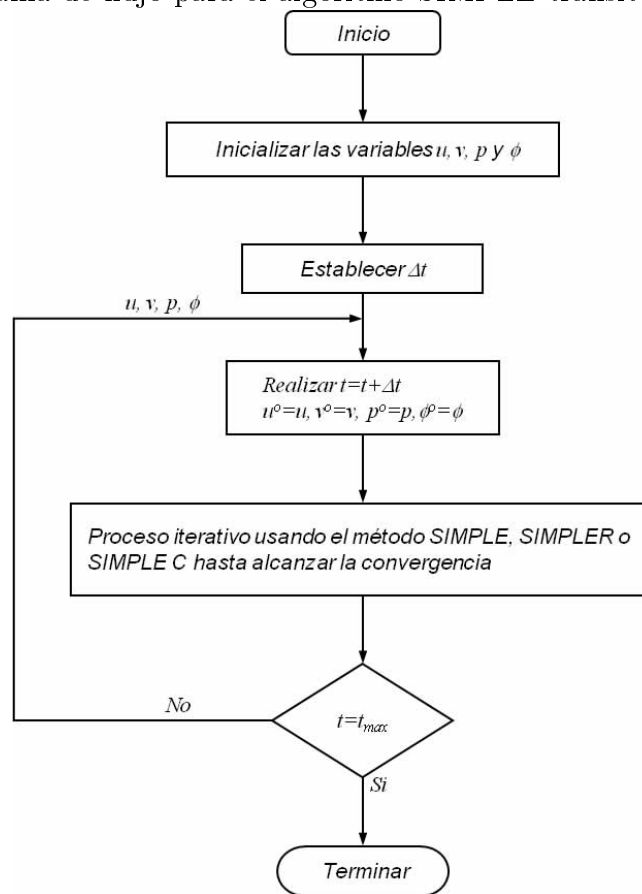
Con los coeficientes de los nodos vecinos

$a_{I-1,J}$	$a_{I+1,J}$	$a_{I,J-1}$	$a_{I,J+1}$
$(\rho u A)_{i,J}$	$(\rho u A)_{i+1,J}$	$(\rho u A)_{I,j}$	$(\rho u A)_{I,j+1}$

La extensión a flujos tridimensionales incluye el mismo término fuentes b' .

En el cálculo transitorio con la formulación implícita, el procedimiento iterativo descrito para cálculos de estado estable que emplean los métodos SIMPLE, SIMPLER o SIMPLEC se aplican a cada nivel de tiempo hasta alcanzar la convergencia. La Figura J.2 muestra la estructura del algoritmo.

Figura J.2: Diagrama de flujo para el algoritmo SIMPLE transitorio y sus variantes.



J.4.2. Algoritmo PISO transitorio

El algoritmo PISO es un procedimiento no iterativo para el cálculo transitorio. Se basa en la exactitud temporal ganada por la práctica de discretización, en particular la técnica del operador de división. En el algoritmo transitorio todos los términos dependiente del tiempo son retenidos en la ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad. Esto produce las siguientes contribuciones adicionales a las ecuaciones de corrección de cantidad de movimiento y de corrección de presión en la forma transitoria PISO:

- Agregar $a_P^o = \rho_P^o \Delta V / \Delta t$ al coeficiente central de las ecuaciones de cantidad de movimiento para u y v respectivamente.
- Agregar $a_P^o u_P^o$ y $a_P^o v_P^o$ al término fuente de las ecuaciones de cantidad de movimiento para u y v .
- Agregar $(\rho_P^o - \rho_P) \Delta V / \Delta t$ al término fuente a la primera y segunda ecuaciones discretizadas para la corrección de presión.

Por lo tanto, los campos de presión y velocidad obtenidos al final del proceso PISO con un paso de tiempo suficientemente pequeño se consideran los suficiente exactos como para proceder al siguiente paso de tiempo inmediatamente ocasionando que el algoritmo sea no iterativo.

Si es necesario un esquema de diferenciación temporal de alto orden se puede incorporar en el algoritmo para mejorar el rendimiento, tal como un esquema implícito de segundo orden que usa tres niveles de tiempo $n + 1$, n , $n - 1$ en intervalos de Δt . Se puede usar el gradiente en el mismo nivel de tiempo n del perfil cuadrático que pasa por T^{n+1} , T^n , T^{n-1} para evaluar $\partial T / \partial t$. La discretización en el tiempo resultante con segundo orden de exactitud es

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\Delta t} (3T^{n+1} - 4T^n + T^{n-1}) \quad (\text{J.27})$$

La incorporación del esquema para formular ecuaciones discretizadas es relativamente directo. Los valores en el nivel de tiempo n y $n - 1$ se conocen del paso de tiempo

anterior y se tratan como parte del término fuente y harán parte del lado derecho de la ecuación.

J.5. CÁLCULOS DE ESTADO ESTABLE USANDO UNA APROXIMACIÓN PSEUDO TRANSITORIA

Como se mencionó en el capítulo 7 la subrelajación es necesaria para estabilizar el proceso iterativo de obtener soluciones de estado estable. La forma sub-relajada de la ecuación de cantidad de movimiento bidimensional para u , por ejemplo, tiene la forma

$$\frac{a_{i,J}}{\alpha_u} u_{i,J} = \sum a_{nb} u_{nb} + (p_{I-1,J} - p_{I,J}) A_{i,J} + b_{i,J} + \left[(1 - \alpha_u) \frac{a_{i,J}}{\alpha_u} \right] u_{i,J}^{n-1} \quad (\text{J.28})$$

Compare esta ecuación con la ecuación implícita transitoria de cantidad de movimiento para u

$$\left(a_{i,J} + \frac{\rho_{i,J}^o \Delta V}{\Delta t} \right) u_{i,J} = \sum a_{nb} u_{nb} + (p_{I-1,J} - p_{I,J}) A_{i,J} + b_{i,J} + \frac{\rho_{i,J} \Delta V}{\Delta t} u_{i,J}^o \quad (\text{J.29})$$

Se puede observar claramente la analogía entre el cálculo transitorio y la sub-relajación en el cálculo de estado estable. Se puede deducir fácilmente que

$$(1 - \alpha_u) \frac{a_{i,J}}{\alpha_u} = \frac{\rho_{i,J} \Delta V}{\Delta t} \quad (\text{J.30})$$

Esta formula muestra que es posible lograr los efectos de los cálculos iterativos de sub-relajación en estado estable a partir de un campo inicial por medio de un cálculo pseudo-transitorio comenzando con el mismo campo inicial y tomando un paso que satisfaga la Ecuación (J.30).