Introducción

Cesar Damián

University of Guanajuato

Una solución numérica de las ecuaciones diferenciales consiste en encontrar los valores de una variable dependiente ϕ en puntos específicos llamados *elementos de malla* y resultan de la discretización de la gemoetría original.
La información de la variable dependiente es usualmente posicionada en el centroide o en los vertices de los elementos discretizados dependiendo del procedimiento empleado.

Entonces, el procedimiento de discretización transforma

$$\text{Ec. diferencial} \rightarrow \text{Sistema de ecuaciones} \tag{1.1}$$

por lo tanto la variable continua ϕ solo es conocida en puntos *discretos* del dominio físico y por lo tanto este procedimiento se llama discretización. Una vez obtenido el sistema de ecuaciones algebraicas este se resuelve mediante un método ya sea iterativo o numérico con el cual es posible interpretar la información obtenida y hacer un análisis de los datos. Este procedimiento usualmente es hecho en cualquier simulación numérica.

Paso 1: Modelado geométrico y físico

Todos los fenómenos físicos pueden ser descritos mediante formulaciones matemáticas que puedan ser reproducibles, validados y probados. En el modelado mediante volumen finito, se requerirá que tanto la geometría como el fenómeno físico sean aproximados para obtener una conclusión.
Por ejemplo en el modelado de una placa en donde se encuentra acoplado un micro chip puede ser modelada matemáticamente mediante

$$-\nabla\left(k\nabla T\right) = \dot{q}\,, \tag{2.1}$$

y la geometría puede ser aproximada mediante elementos estructurados.

Paso 1: Modelado gemoético y físico

En volumen finito, en general existen mallados estructurados y no estructurados como se muestra en la siguiente figura.

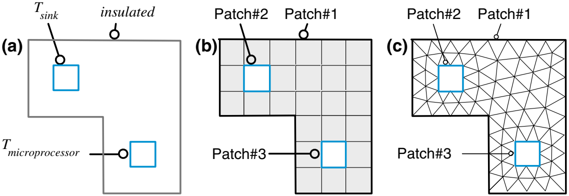

Figure: Formas de discretización.

Paso 2: Discretización del modelo

La discretización del dominio físico resulta en un mallado en el cual las ecuaciones de conservación son satisfechas. El tipo mallado son clasificados de acuerdo a sus características como,

- Estructurado
- Ortogonal
- Bloques
- Forma de celda.
- etc.

Para que un mallado sea efectivo, es necesario conocer tanto aspectos topológicos del mallado como aspectos geométricos.

Paso 2: Discretización del modelo

Alguna información topológica elemental que puede extraerse de un mallado es

1. Conectividad de elemento, útil para llevar los ensambles locales a ensambles globales.
2. Conectividad de cara, útil para cuantificar flujos conservados en lazos cerrados.
3. Conectividad de vértice, útil para cuantificar gradientes en postproceso.

Introducción
Cesar Damián
Introducción
Paso 1
Paso 2
Paso 3
Paso 4
FVM

Por ejemplo considere el siguiente mallado.

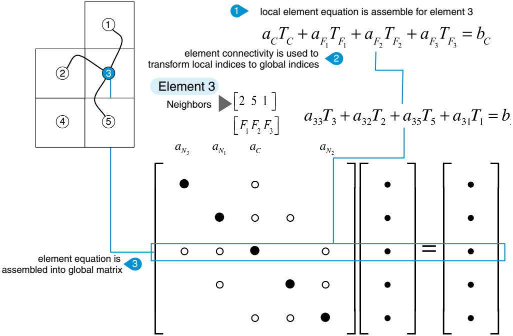

Figure: Ejemplo de conectividad.

Paso 3: Discretización de la ecuación

En este paso, la ecuación diferencial gobernante es transformada en un conjunto de ecuaciones algebráicas de la forma

$$A\phi = \bar{b} \tag{4.1}$$

donde $A \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ y $\bar{b} \in \mathbb{R}^n$.
Este paso es empleado en cada elemento de malla construido.
En el método de volumen finito la discretización se hace primero integrando la ecuación diferencial sobre cada volumen de control para obtener la forma semi-discretizada de las ecuaciones de conservación para posteriormente aproximar la variación de la variable dependiente.

Paso 3: Discretización de la ecuación

La forma en que la variable dependiente influencia a las variables vecinas depende del tipo de ecuación diferencial (parabólica, elíptica o hiperbólica) así como de la aproximación en la discretización.
Esto sugiere que la forma de discretizar una ecuación diferencial es no unica, y de hecho no lo es!, sin embargo la respuesta física que se encuentra si es única. Como ejemplo tome la Ec,

$$-\int_V dV \nabla \cdot (k \nabla T) = \int_V dV \dot{q}\,, \tag{4.2}$$

usando el teorema de divergencia esto nos da,

$$-\int_{\partial V} dS \cdot (k \nabla T) = \dot{q}_c V_C\,, \tag{4.3}$$

Paso 3: Discretización de la ecuación

Ahora, aproximando la integral por una suma se tiene

$$-\sum (k\nabla T)_f \cdot S_f = \dot{q}_C V_C \,, \tag{4.4}$$

donde f representa el punto de integración en el centroide de la cara limitante (aproximación de segundo orden). Posteriormente, el operador nabla es posible discretizarlo para dar la forma completamente discretizada de las ecuaciones de conservación.

Paso 3: Discretización de la ecuación

Por ejemplo, en la dirección x_i asumiendo una variación lineal de T, su derivada se puede aproximar como

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{\delta x_i}\,, \tag{4.5}$$

dando como resultado la ecuación del ensambe local.

Solución de las ecuaciones algebraicas

Como se ha mencionado, la discretización de las ecuaciones de movimiento da lugar a un conjunto de ecuaciones algebraicas que deben ser resueltas para obtener el valor de la variable dependiente en los puntos de malla. Los coeficientes de la ecuación pueden ser independientes de la variable dependiente o dependientes dependiendo si la ecuación diferencial original es lineal o no.

En general los métodos de solución que pueden emplearse se clasifican en

- Métodos directos, eliminación de Gauss, regla de Crammer, inversa, etc.
- Métodos indirectos, Gauss-Seidel, Gauss, SOR, Relajaciones, etc.
- ...

Tarea 1

Realizar una investigación sobre los algoritmos usados para métodos directos así como métodos indirectos y escriba un código para solución de ecuaciones algebraicas por métodos indirectos.

Ecuación semidiscretizada

Como se mencionó anteriormente, en general una ecuaciń‚ de conservación se puede escribir de la forma

$$\frac{\partial\left(\rho\phi\right)}{\partial t}+\partial_i\left(\rho v_i\phi\right)=\partial_i\left(\Gamma^\phi\partial_i\phi\right)+Q^\phi \tag{6.1}$$

el método del volumen finito comienza por integral sobre un volumen de control la ecuación de movimiento. Esto es,

$$\int_V dV\,\partial_i\left(\rho v_i\phi\right)=\int_V dV\,\partial_i\left(\Gamma^\phi\partial_i\phi\right)+\int_V dV\,Q^\phi \tag{6.2}$$

donde se ha despreciado el término transiente por simplicidad.

Ecuación semidiscretizada

Reemplazando las integrales de volumen por integrales de superficie

$$\int_{\partial V} dS_i \left(\rho v_i \phi\right) = \int_{\partial V} dS_i \left(\Gamma^{\phi} \partial_i \phi\right) + \int_{V} dV Q^{\phi} \tag{6.3}$$

donde se identifican los términos de *flujo* como

$$\begin{aligned} J_i^{\phi,C} &= \rho v_i \phi \\ J_i^{\phi,D} &= -\Gamma^{\phi} \partial_{\phi} \end{aligned} \tag{6.4}$$

así como el término de flujo total

$$J_i^{\phi} = J_i^{\phi,C} + J_i^{\phi,C} \tag{6.5}$$

Ecuación semidiscretizada

Donde se aproximan estas integrales de superficies como

$$\int_{\partial V} dS_i J_i^{\phi,C} = \sum_{faces} dS_i \left(\int_f (\rho \phi v_i) \right) \tag{6.6}$$

$$\int_{\partial V} dS_i J_i^{\phi,D} = \sum_{faces} dS_i \left(\int_f \left(\Gamma^{\phi} \partial_i \phi \right) \right) \tag{6.7}$$

donde estas integrales se aproximan como

$$\int_{\partial V} dS_i J_i = \sum_{ip} \left(J_i^{\phi} n_i \right) \omega_{ip} S_f \tag{6.8}$$

donde ip se refiere a los puntos de integración en la superficie f.

Ecuación semidiscretizada

Los factores de peso ω_{ip} dependen de la presición con que se quiera trabajar la aproximación. Algunos ejemplos son

1. $\omega_{ip} = 1.$ Esta aproximación es de segundo orden y es aplicable a dimension 2 y 3.
2. $\omega_{ip} = 2.$ Posicionada en $\xi_{1,2} = (3 \mp \sqrt{3})/6$ y $\omega_i = \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle$.
3. $\omega_{ip} = 3.$ Posicionado en $\xi_{1,2} = (5 \mp \sqrt{15})/10$ and $\xi_3 = 1/2$ con pesos $\omega_i = \langle 5/18, 5/18, 4/9 \rangle$.

Ecuación semidiscretizada

Los volúmenes de integración se pueden representar como

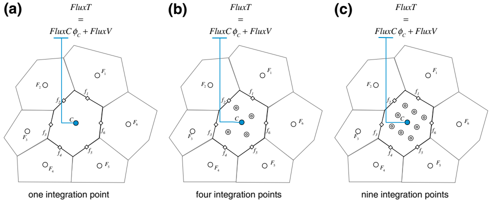

Figure: Volumenes de integración.