

Introducción a la Mecánica de Fluidos Computacional (CFD)



Presentación



Ing. Nicolás G. Tripp

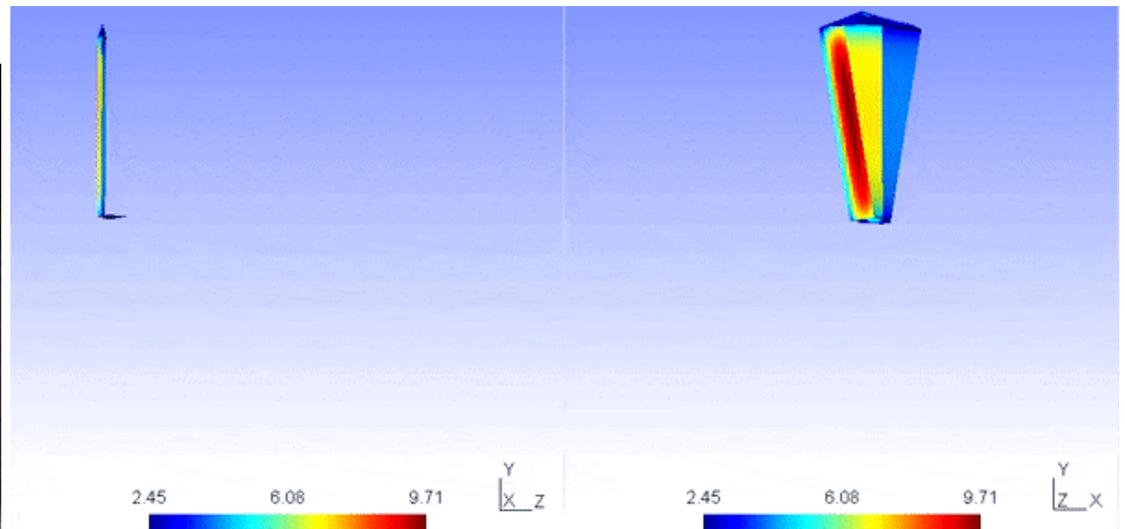
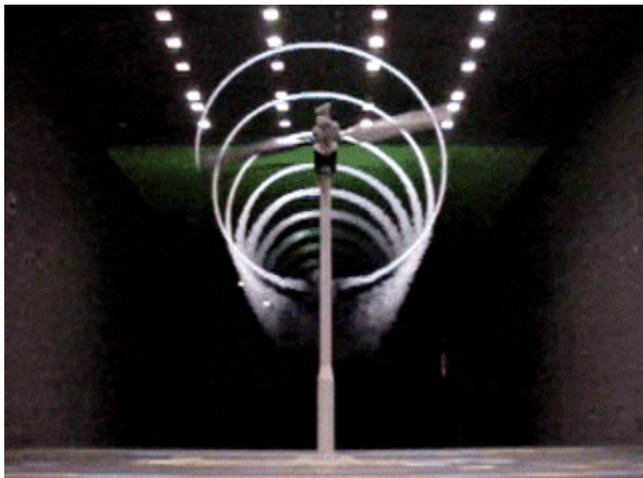
nicolas.tripp@ingenieria.uncuyo.edu.ar

Docente de Cálculo Numérico.

Investigador con gran tolerancia a la frustración

12 años de fanatismo con los métodos numéricos y
software libre!

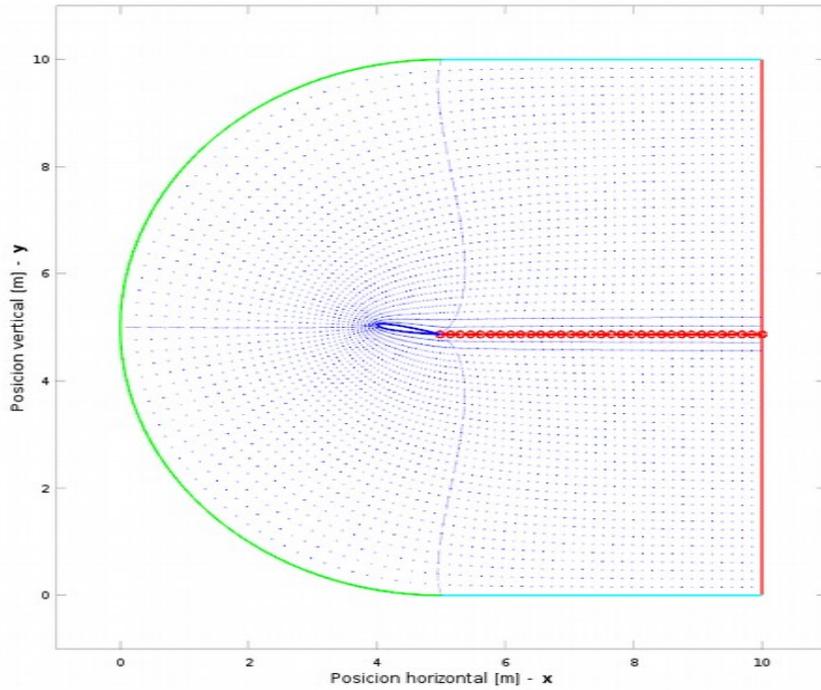
Presentación



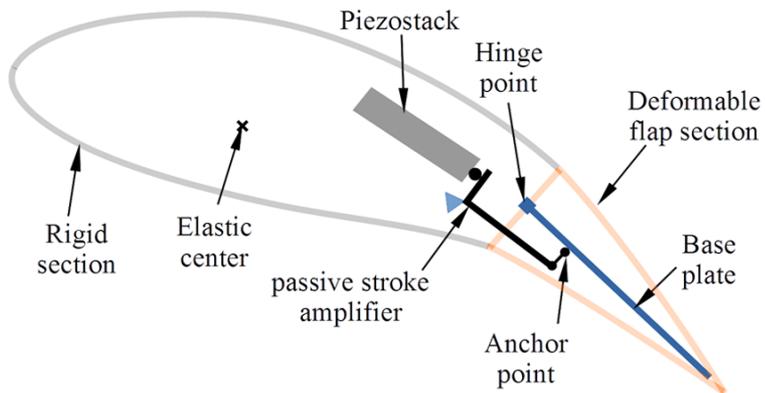
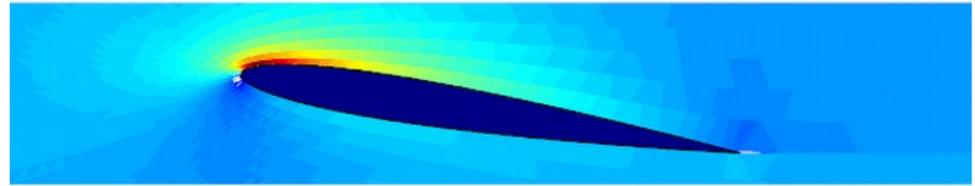
UVLM_{3D}

Presentación

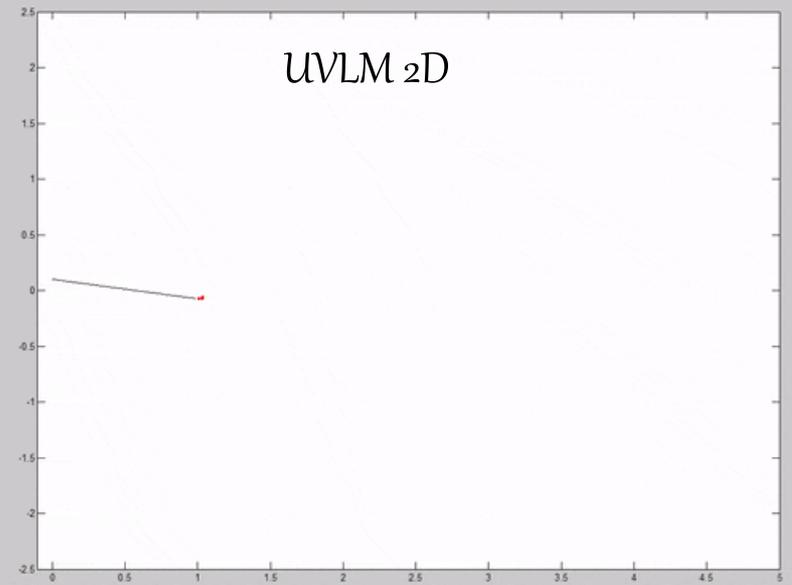
Grilla en dominio fisico



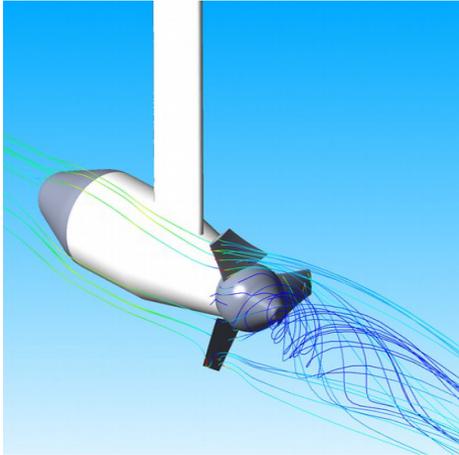
Diferencias Finitas



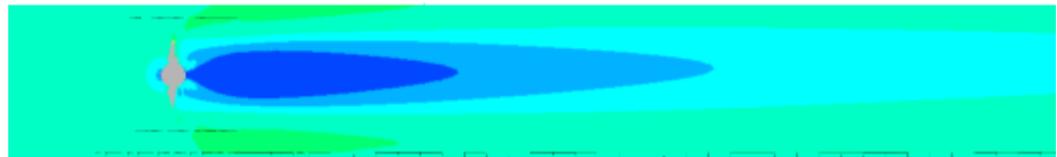
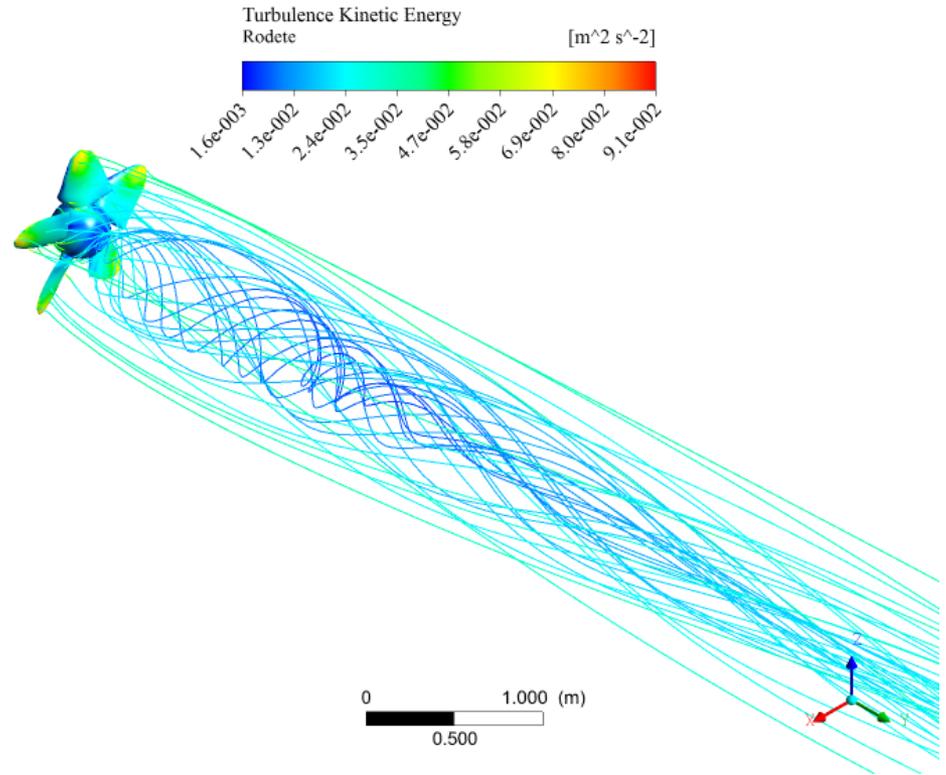
UVLM 2D



Presentación



Volúmenes Finitos



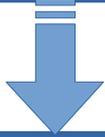
Contenidos

- *Abordaje teórico*
- *Método de los volúmenes finitos (FVM)*
- *Discretización del término difusivo*
- *Discretización del término convectivo*

Referencia: Versteeg H.K. y Malalasekera W. “*An introduction to computational fluid dynamics, the finite volume method*”, 1º Ed, Longman Scientific & Technical, 1995

Abordaje teórico

Principios físicos
(Mecánica de los Fluidos)



Ecuaciones diferenciales
(Análisis Vectorial)



Sistemas de ecuaciones
algebraicas no lineales
(Métodos Numéricos)

- Conservación de la masa
- Balance de la cantidad de movimiento
- Conservación de la energía
- Modelos de turbulencia
- Teorema del transporte de Reynolds

$$\vec{u} = (u(x, y, z), v(x, y, z), w(x, y, z))$$
$$\nabla \cdot \vec{u} = 0$$

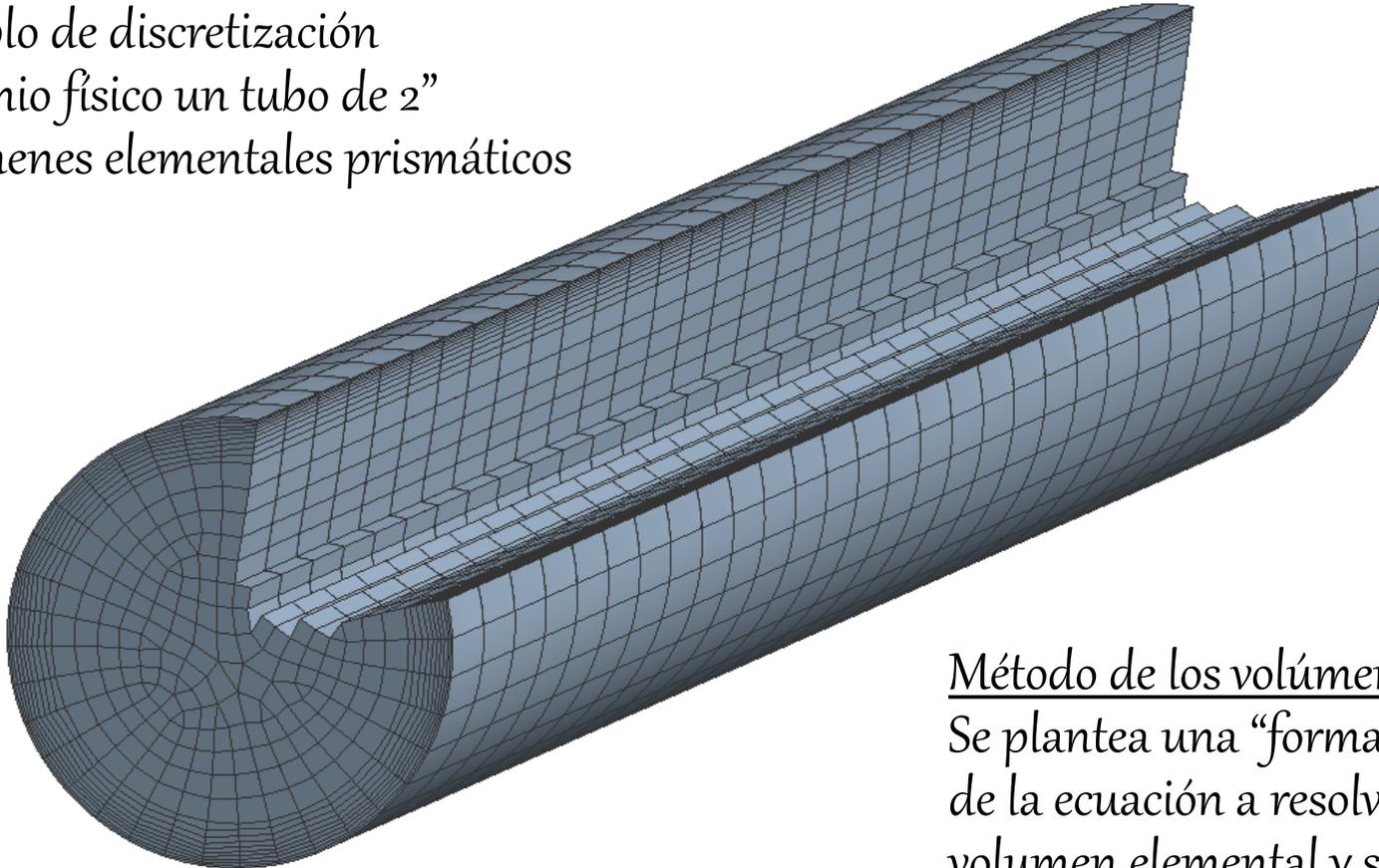
$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{S}_M$$

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla c_p T = \nabla \cdot \lambda \nabla T + S_E$$

- Discretización del dominio
- Linealización de las ecuaciones
- Solución de sistemas de ecuaciones lineales

Abordaje teórico

Ejemplo de discretización
Dominio físico un tubo de 2"
Volúmenes elementales prismáticos



Método de los volúmenes finitos
Se plantea una “forma aproximada”
de la ecuación a resolver en cada
volumen elemental y se resuelven en
conjunto para obtener la solución en
todo el dominio.

Método de los volúmenes finitos

Forma conservativa

Variable transportada (ϕ)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \nabla \cdot (\rho \phi \vec{u}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi$$

Tasa de cambio Convección Difusión viscosa Generación volumétrica

Ejemplos de ϕ

- Componentes del campo de velocidad (u, v, w)
- Parámetros del modelo de turbulencia
- Temperatura
- Densidad

Forma integral (recordar teorema de Gauss para integrales)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\iiint_{cv} \rho \phi dV \right) + \iint_{\partial cv} (\rho \phi \vec{u}) \cdot \hat{n} dA = \iint_{\partial cv} (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{n} dA + \iiint_{cv} S_\phi dV$$

Tasa de cambio Convección Difusión viscosa Generación volumétrica

Método de los volúmenes finitos

$$\begin{array}{ccc}
 & \text{Término Convectivo} & \text{Término Difusivo} \\
 & \text{(direccional)} & \text{(omnidireccional)} \\
 & \downarrow & \downarrow \\
 \frac{\partial}{\partial t} \left(\iiint_{CV} \rho \phi \, dV \right) + \iint_{\partial CV} (\rho \phi \vec{u}) \cdot \hat{n} \, dA = \iint_{\partial CV} (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{n} \, dA + \iiint_{CV} S_\phi \, dV
 \end{array}$$

Se busca transformar la ecuación integral-diferencial, válida para todo el dominio, en una ecuación que aproxima la original en un volumen de control para luego resolverlas en forma simultánea.

$$\begin{pmatrix} d\phi_1/dt \\ d\phi_2/dt \\ \vdots \\ d\phi_n/dt \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden

Discretización del término difusivo

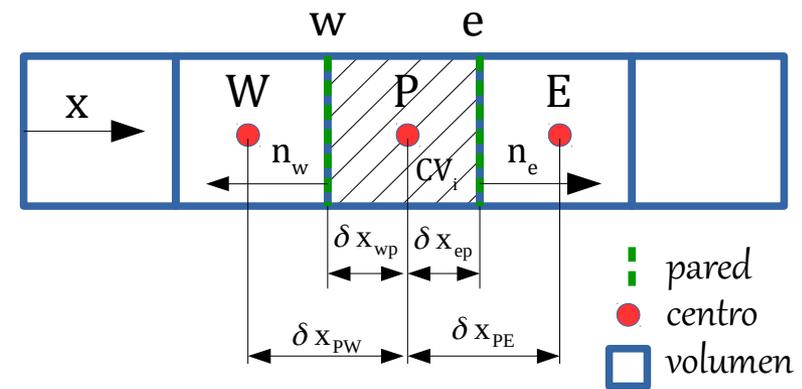
Ejemplo de Difusión estacionaria en 1D (eje x)

(gota de tinta en un estanque quieto)

$$\oint_{\partial CV_i} (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{n} dA + \iiint_{CV_i} S_\phi dV = 0$$

$$\phi = \phi(\mathbf{x}), A = A(\mathbf{x}), \Gamma = \Gamma(\mathbf{x}), S_\phi = S_\phi(\mathbf{x})$$

Generación de malla



Integración de ambos términos para un volumen de control elemental

$$1) \oint_{\partial CV} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \hat{i} \right) \cdot \hat{n} dA = \sum_{j=1}^6 \iint_{\partial CV_j} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \hat{i} \right)_{(j)} \cdot \hat{n}_j dA$$

$$= \iint_{\partial CV_e} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \hat{i} \right)_{(e)} \cdot \hat{n}_e dA + \iint_{\partial CV_w} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \hat{i} \right)_{(w)} \cdot \hat{n}_w dA = \Gamma_{(e)} A_{(e)} \frac{d\phi}{dx} \Big|_e - \Gamma_{(w)} A_{(w)} \frac{d\phi}{dx} \Big|_w$$

$$2) \iiint_{CV} S_\phi dV = \bar{S} \Delta V$$

Discretización del término difusivo

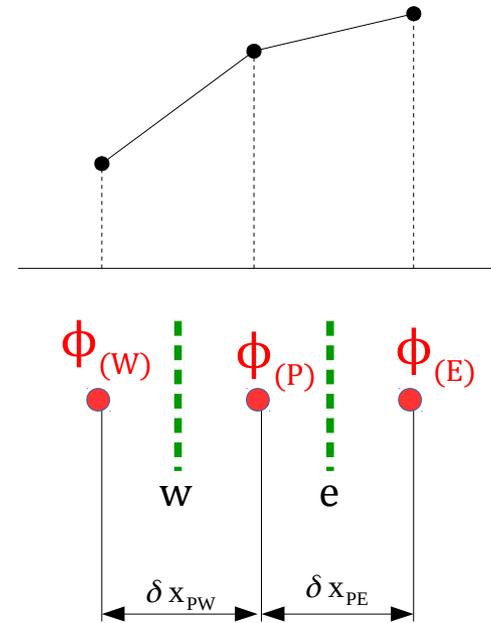
Aproximación de las propiedades y derivadas en las paredes

Se considera que las propiedades se conocen en los nodos y se distribuyen linealmente entre los nodos

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \frac{\phi_{(P)} - \phi_{(W)}}{\delta x_{PW}}, \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{\phi_{(E)} - \phi_{(P)}}{\delta x_{PE}}$$

Las derivadas quedan en función de los valores en los nodos

$$\bar{S} = S_u + S_p \phi_{(P)}$$



Discretización del término difusivo

Fórmula computacional

Reemplazando las aproximaciones en la ecuación de la difusión estacionaria 1D

$$\Gamma_{(e)} A_{(e)} \left(\frac{\phi_{(E)} - \phi_{(P)}}{\delta x_{PE}} \right) - \Gamma_{(w)} A_{(w)} \left(\frac{\phi_{(P)} - \phi_{(W)}}{\delta x_{PW}} \right) + (S_u + S_p \phi_{(P)}) = 0$$

Reagrupando términos se obtiene una aproximación de la ecuación diferencial en el punto P

$$\frac{\Gamma_{(w)} A_{(w)}}{\delta x_{PW}} \phi_{(W)} - \left(\frac{\Gamma_{(e)} A_{(e)}}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_{(w)} A_{(w)}}{\delta x_{PW}} - S_p \right) \phi_{(P)} + \frac{\Gamma_{(e)} A_{(e)}}{\delta x_{PE}} \phi_{(E)} = -S_u$$

Se introducen las siguientes constantes

$$a_E = \frac{\Gamma_{(e)} A_{(e)}}{\delta x_{PE}}, a_W = \frac{\Gamma_{(w)} A_{(w)}}{\delta x_{PW}}, a_P = - \left(\frac{\Gamma_{(e)} A_{(e)}}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_{(w)} A_{(w)}}{\delta x_{PW}} - S_p \right) = a_E + a_W - S_p$$

$$a_W \phi_{(W)} + a_P \phi_{(P)} + a_E \phi_{(E)} = -S_u$$

Discretización del término difusivo

Sistema de ecuaciones

Se plantea la fórmula computacional **para cada elemento** del dominio.

Para obtener la función solución se deben **resolver las ecuaciones de forma conjunta**.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n-1n-2} & a_{n-1n-1} & a_{n-1n} \\ 0 & \dots & 0 & a_{nn-1} & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} S_{u1} \\ S_{u2} \\ \vdots \\ S_{un-1} \\ S_{un} \end{pmatrix}$$

Vector con aproximaciones de la solución en cada nodo P

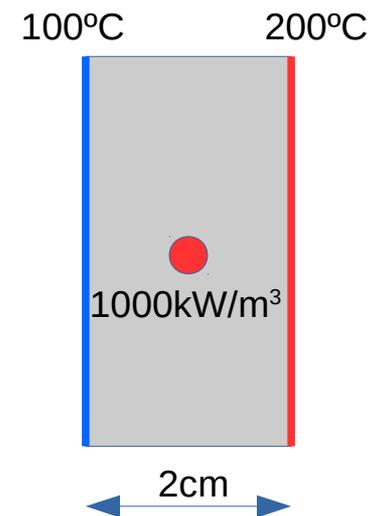
Discretización del término difusivo

Ejemplo

Se busca determinar la distribución de temperatura estacionaria dentro de una pared de 2cm, con una conductividad térmica k de $0,5\text{W/m/C}$ y una fuente interna de generación q de 1000kW/m^3 . La cara exterior se encuentra a 100°C mientras que la interior se encuentra a 200°C .

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi = 0 \rightarrow \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + q = 0$$

$$\frac{kA}{\delta x} T_{(W)} - \left(\frac{kA}{\delta x} + \frac{kA}{\delta x} \right) T_{(P)} + \frac{kA}{\delta x} T_{(E)} = -q A \delta x$$



Discretización del término difusivo

Las condiciones de borde se transforman en términos fuente para las celdas de los extremos

Condiciones de borde

En la cara exterior (fría) de la pared:

$$\frac{kA}{\delta x/2} 100 - \left(\frac{kA}{\delta x} + \frac{kA}{\delta x/2} \right) T_{(P)} + \frac{kA}{\delta x} T_{(E)} = -q A \delta x$$

$$-\left(\frac{kA}{\delta x} + \frac{2kA}{\delta x} \right) T_{(P)} + \frac{kA}{\delta x} T_{(E)} = -q A \delta x - \frac{2kA}{\delta x} 100$$

$$a_w = 0, a_p = -(a_E - S_p), a_E = \frac{kA}{\delta x}, S_p = -2 \frac{kA}{\delta x}, S_u = 2 \frac{kA}{\delta x} 100 + q A \delta x$$

En la cara interior (caliente) de la pared:

$$a_w = \frac{kA}{\delta x}, a_p = -(a_w - S_p), a_E = 0, S_p = -2 \frac{kA}{\delta x}, S_u = 2 \frac{kA}{\delta x} 200 + q A \delta x$$

Discretización del término difusivo

Considerando 3 volúmenes, $\delta x=0,0067$, $kA/\delta x=74,627$, $qA\delta x=6700$

Ubicación	a_w	a_e	a_p	S_u	S_p
interior	74,627	74,627	149,254	6700	0
pared exterior	0	74,627	223,881	6700+ 14925,4	-149,254
pared interior	74,627	0	223,881	6700+ 29850,8	-149,254

Discretización del término difusivo

Solución

El sistema de ecuaciones lineales se resuelve mediante un método iterativo.

El método iterativo se repite hasta alcanzar una tolerancia del error de aproximación preestablecida (convergencia del método).

Para iniciar el proceso se proponen valores para la temperatura (inicialización).

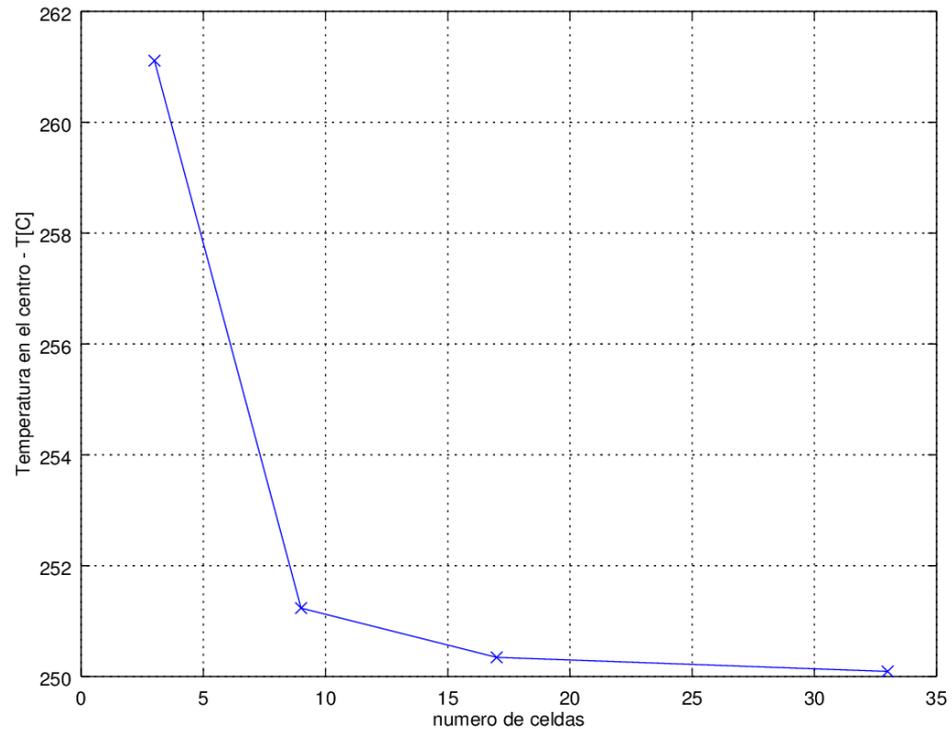
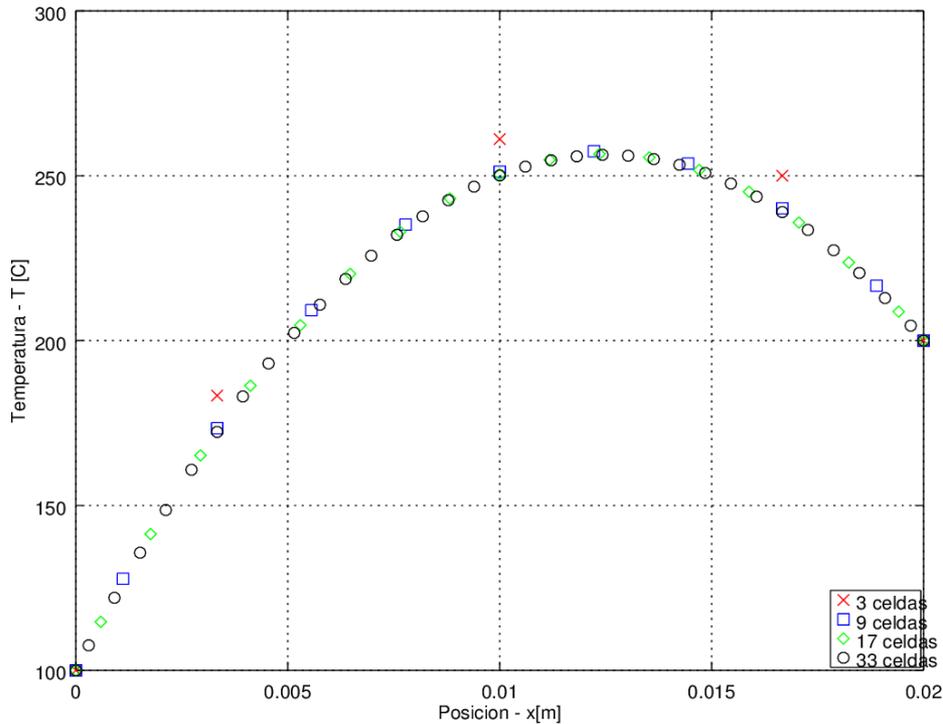
$$\begin{bmatrix} 223,881 & -74,627 & 0 \\ -74,627 & 149,254 & -74,627 \\ 0 & -74,627 & 223,881 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20995,4 \\ 6700 \\ 36550,8 \end{pmatrix}$$

$$\text{Solución: } \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 183,33 \\ 261,11 \\ 250,00 \end{pmatrix}$$

Discretización del término difusivo

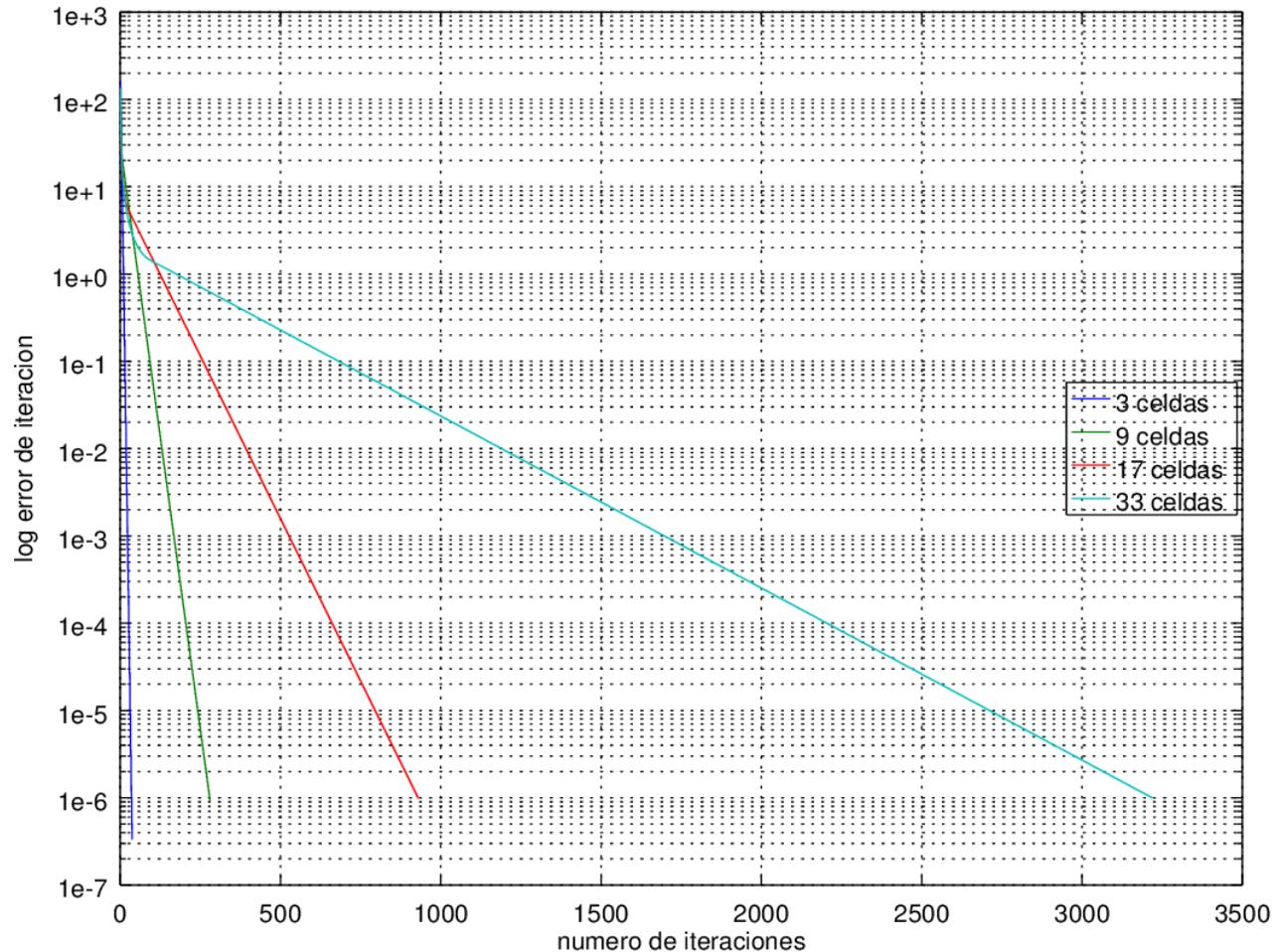
Convergencia de la solución

Evaluación con 3, 9, 17 y 33 elementos interiores



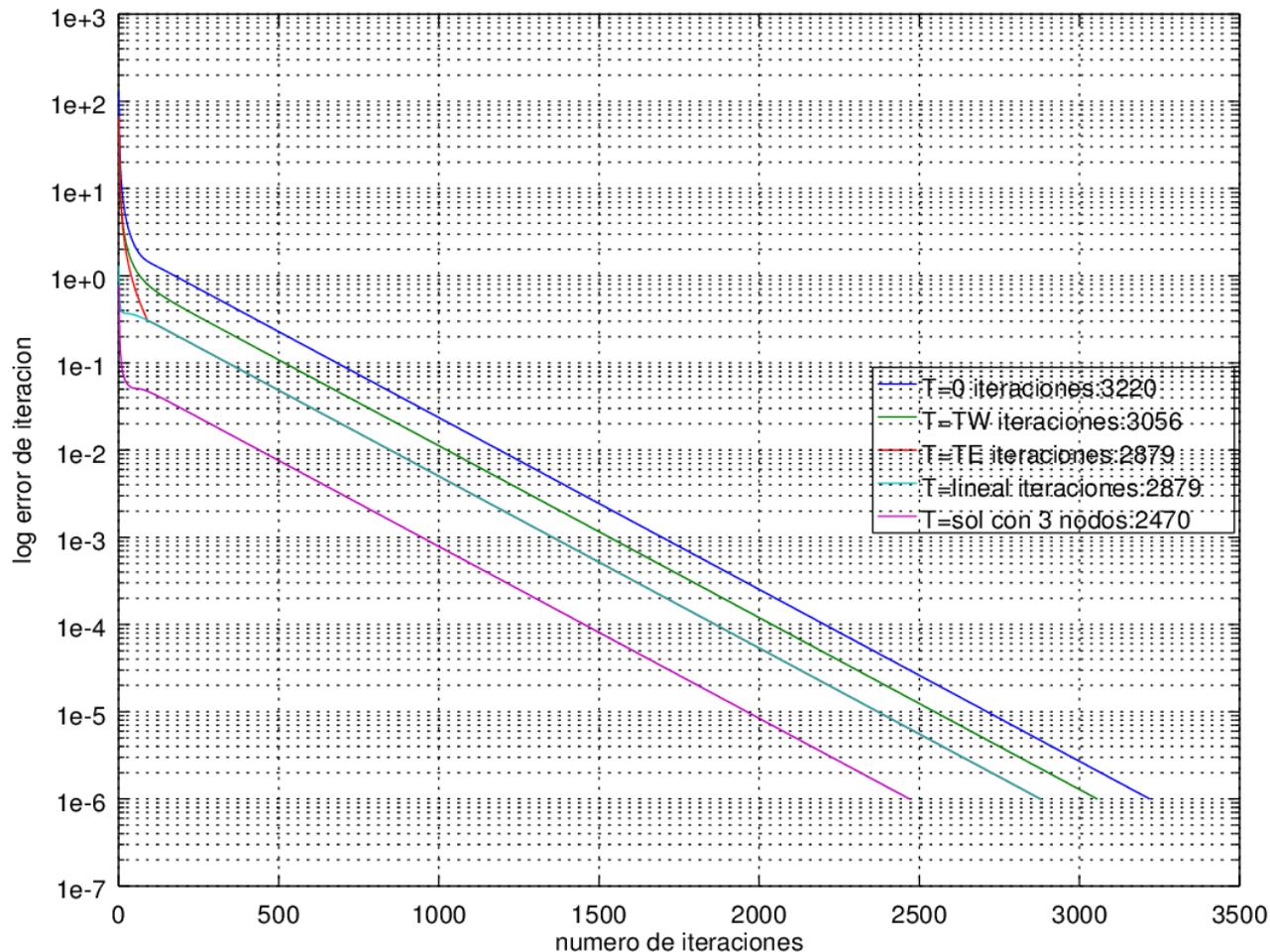
Discretización del término difusivo

Velocidad de convergencia del método iterativo



Discretización del término difusivo

Efecto de la Inicialización
Malla de 33 elementos



Recomendación

Comenzar resolviendo pocos
elementos y luego usarlas
como propuesta inicial para
mallas más finas

Discretización del término convectivo

Difusión-convección 1D

Para resolver el problema se necesitan las ecuaciones de transporte y se requiere la de continuidad.

$$\begin{aligned} \oint_{\partial CV} (\rho \phi \vec{u}) \cdot \hat{n} dA &= \oint_{\partial CV} (\Gamma \nabla \phi) \cdot \hat{n} dA \\ (\rho \phi u A)|_e - (\rho \phi u A)|_w &= \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} A \right)|_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} A \right)|_w \end{aligned} \quad \left| \begin{aligned} \iiint_{CV} \nabla \cdot (\rho \vec{u}) dV &= 0 \\ \oint_{\partial CV} (\rho \vec{u}) \cdot \hat{n} dA &= 0 \\ (\rho u)|_e - (\rho u)|_w &= 0 \end{aligned} \right.$$

Se definen las siguientes constantes y se aproxima el término difusivo como antes

(convección) $F = \rho u$, (difusión) $D = \frac{\Gamma}{\delta x}$

Se evalúa en las paredes Se evalúa en los nodos

$$\begin{aligned} 1) F_{(e)} \phi_{(e)} - F_{(w)} \phi_{(w)} &= D_{(e)} (\phi_{(E)} - \phi_{(P)}) - D_{(w)} (\phi_{(P)} - \phi_{(W)}) \\ 2) F_{(e)} - F_{(w)} &= 0 \end{aligned}$$

Discretización del término convectivo

Aproximación de las propiedades y derivadas en las paredes por Diferencia central

$$\phi_{(e)} = \frac{\phi_{(P)} + \phi_{(E)}}{2}, \quad \phi_{(w)} = \frac{\phi_{(P)} + \phi_{(W)}}{2}$$

Reemplazando las aproximaciones en la ecuación 1

$$F_{(e)} \left(\frac{\phi_{(P)} + \phi_{(E)}}{2} \right) - F_{(w)} \left(\frac{\phi_{(P)} + \phi_{(W)}}{2} \right) = D_{(e)} (\phi_{(E)} - \phi_{(P)}) - D_{(w)} (\phi_{(P)} - \phi_{(W)})$$

Reordenando términos

$$\left[D_{(w)} + \frac{F_{(w)}}{2} \right] \phi_{(W)} - \left[\left(D_{(w)} + \frac{F_{(w)}}{2} \right) + \left(D_{(e)} - \frac{F_{(e)}}{2} \right) + (F_{(e)} - F_{(w)}) \right] \phi_{(P)} + \left[D_{(e)} - \frac{F_{(e)}}{2} \right] \phi_{(E)} = 0$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_{(e)} - F_{(w)})$$

$$a_W \phi_{(W)} + a_P \phi_{(P)} + a_E \phi_{(E)} = 0$$

Discretización del término convectivo

Propiedades de la Diferencia Central

Conservatividad: OK.

Acotamiento: posee una restricción para estabilidad $Pe = \frac{F}{D} < 2$

Transportividad: No considera la dirección de la convección. Ésto es un problema si la velocidad de transporte es grande porque es el efecto dominante.

Precisión: orden $O(\delta x^2)$

Discretización del término convectivo

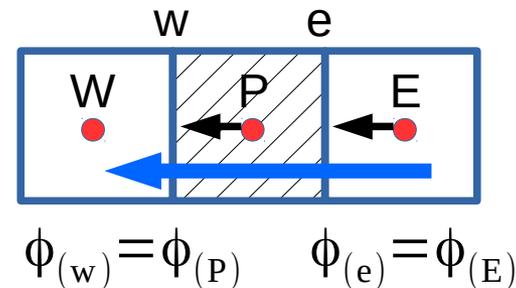
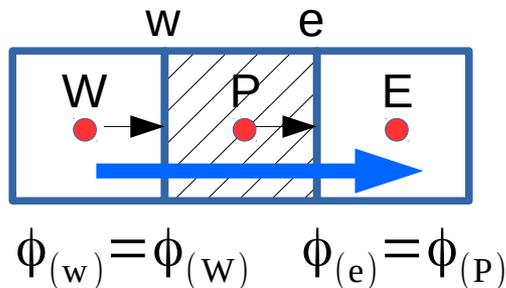
Aproximación de las propiedades y derivadas en las paredes por
“Upwind”

Para mejorar la estabilidad se debe considerar la direccionalidad del flujo. En este esquema se hace una interpolación direccionada por la velocidad de transporte u

$$\text{si } u_{(w)} > 0 \wedge u_{(e)} > 0 \rightarrow \phi_{(w)} = \phi_{(W)}, \phi_{(e)} = \phi_{(P)}$$

$$\text{si } u_{(w)} < 0 \wedge u_{(e)} < 0 \rightarrow \phi_{(w)} = \phi_{(P)}, \phi_{(e)} = \phi_{(E)}$$

$$a_E = D_{(e)} + \text{máx}(0, -F_{(e)}), a_W = D_{(w)} + \text{máx}(0, F_{(w)}), a_P = a_W + a_E + (F_{(e)} - F_{(w)})$$



Discretización del término convectivo

Propiedades del esquema Upwind

Conservatividad: OK.

Acotamiento: OK, *sin restricciones de estabilidad*.

Transportividad: Considera la dirección de la influencia. Si el flujo no está alineado con los ejes cartesianos, *se produce una “falsa difusión”*.

Precisión: orden $O(\delta x^1)$. *Requiere más celdas* para alcanzar la misma precisión que la diferencia central.

Discretización del término convectivo

Otros esquemas

Híbrido

Evalúa el Peclet en cada celda.

Si $Pe < 2$ usa diferencia central.

Si $Pe > 2$ usa Upwind.

Posee las mismas propiedades que el esquema upwind pero es más preciso

Ley de la potencia

Evalúa el Peclet en cada celda.

Si $Pe < 10$ usa polinomio interpolante para el flujo.

Si $Pe > 10$ considera cero difusión.

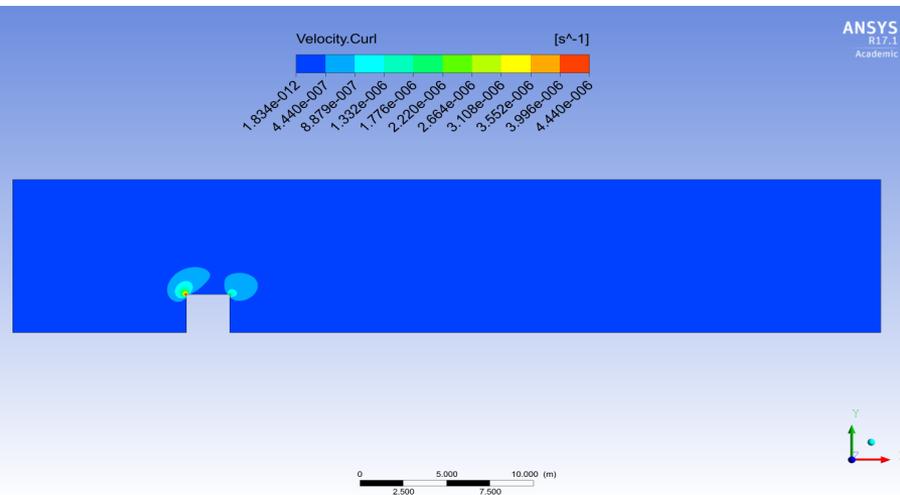
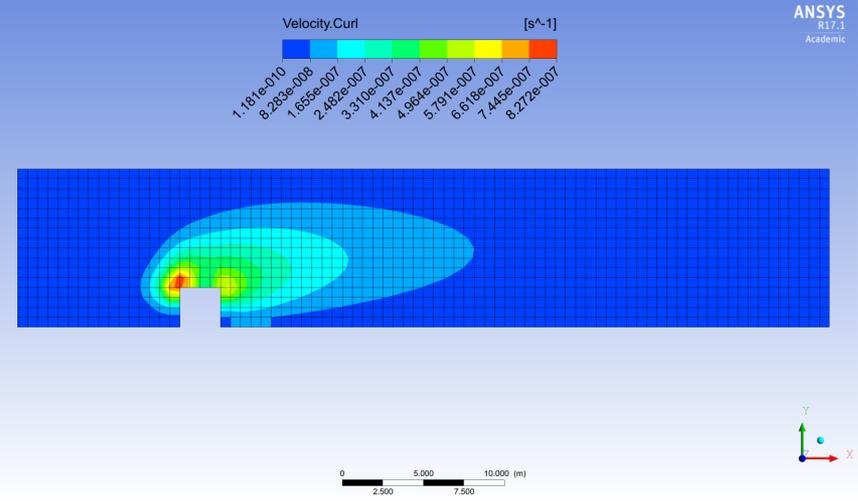
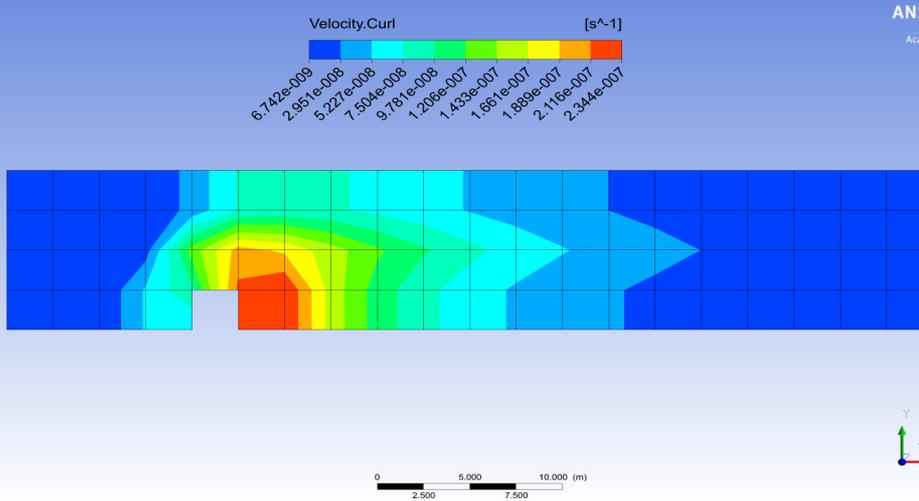
Posee las mismas propiedades que el esquema híbrido pero es más preciso en 1D

Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinetics

Usa una aproximación de 3 puntos según la dirección del flujo.

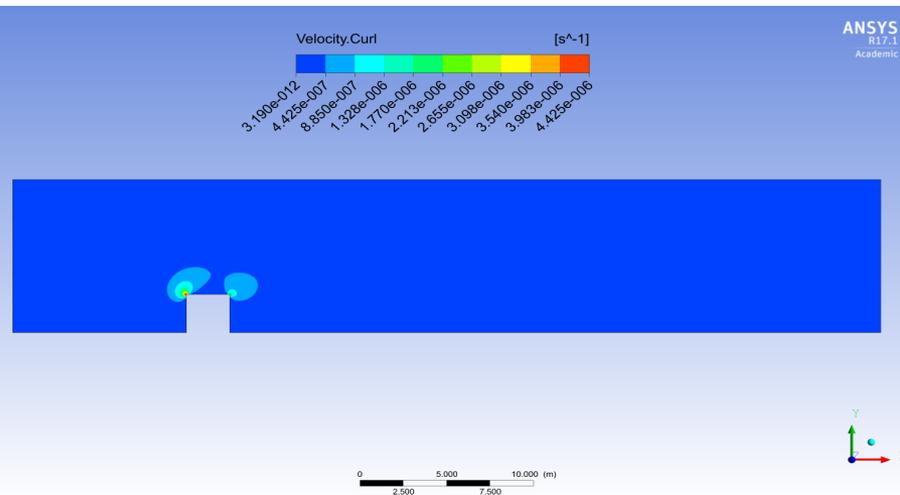
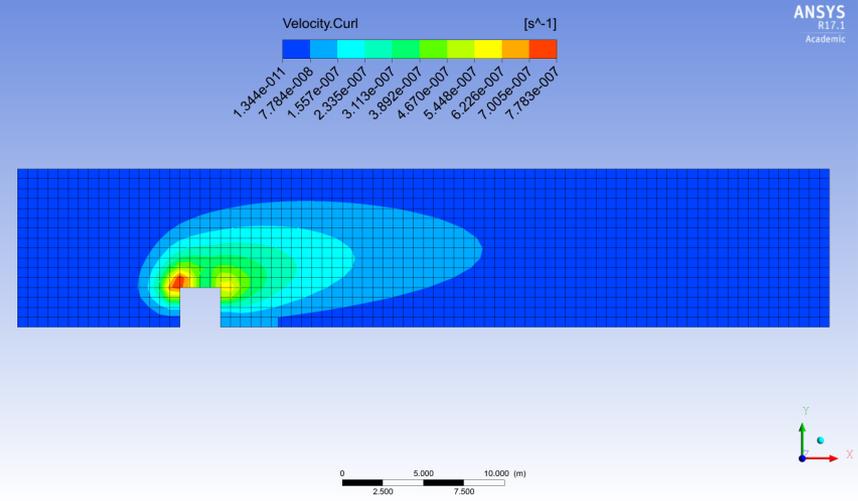
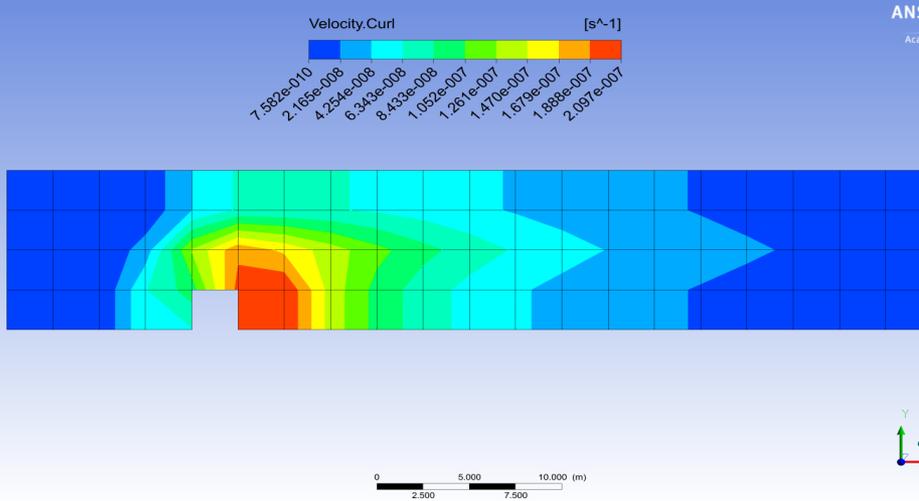
Es de orden $O(\delta x^3)$, produce pequeña difusión falsa y pequeños sobre saltos

Ejemplo de flujo sobre un obstáculo



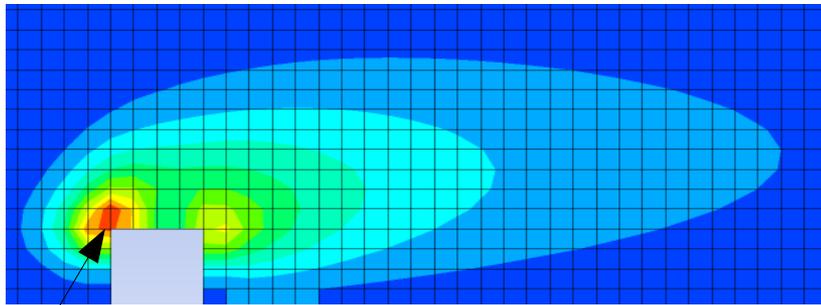
Diferencia central

Ejemplo de flujo sobre un obstáculo



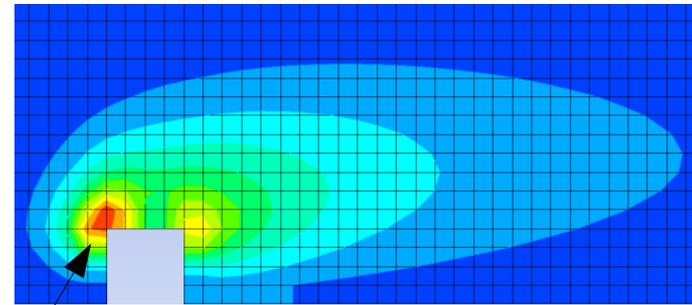
Upwind

Ejemplo de flujo sobre un obstáculo



$8,27E-7$

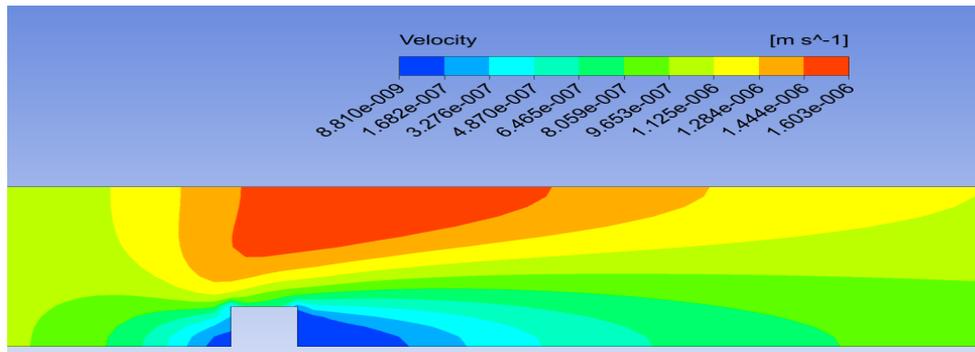
Diferencia Central



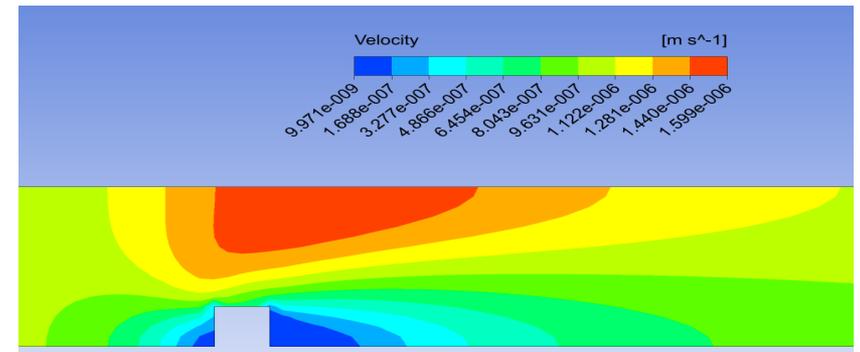
$7,78E-7$

Upwind

Ejemplo de flujo sobre un obstáculo



Diferencia Central



Upwind

A medida que se refina la malla los resultados se vuelven independientes del esquema de discretización