

ALGORITMO PARA RESOLVER LA ECUACION DE
TRANSPORTE BASADO EN VOLUMENES DE CONTROL

Axel E. Larreteguy

Jose Converti

Sección Termohidráulica. Centro Atómico Bariloche.
Comisión Nacional de Energía Atómica.
San Carlos de Bariloche - Argentina

RESUMEN

Se describe un método de elementos finitos basado en volúmenes de control (CVFEM) orientado a la resolución de la ecuación general de transporte. Se propone una nueva función interpolante con mejor fundamentación física que las propuestas hasta la fecha por otros autores.

Se aplica el método a algunos problemas sencillos para poder comparar los resultados con soluciones analíticas. Se concluye que la nueva función interpolante da resultados mas precisos que las precedentes en todos los casos probados.

ABSTRACT

A control volume based finite element method (CVFEM) for the solution of the general transport equation is described. A new shape function, with better physical fundamentation than its predecessors, is proposed.

The method is applied to a number of simple test problems in order to compare results with analytical solutions. In all cases the results obtained using the new shape function are found to be more accurate than those obtained by the earlier ones.

INTRODUCCION

Los métodos basados en volúmenes de control para la resolución de problemas de fluidos y transferencia de calor tienen la ventaja de poseer una interpretación física clara y directa. La idea de usar elementos finitos basados en volúmenes de control es bastante nueva. Baliga y Patankar [1-2] fueron los primeros en introducir dicho procedimiento. El método se basa en una discretización del dominio en elementos triangulares de tres nodos, y en la definición de volúmenes de control alrededor de cada nodo de la red como se muestra en la figura 1. El dominio se considera de profundidad unitaria.

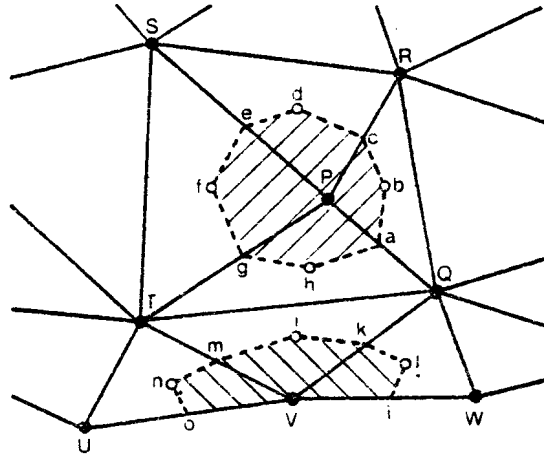


Fig. 1 Discretización del dominio

En adelante indicaremos volumen de control por su abreviatura V.C. por simplicidad. La zona rayada alrededor del nodo P es el V.C. asociado a dicho nodo. En cada elemento el V.C. de P está definido por los segmentos que van desde el centroide del elemento a los puntos medios de los lados que convergen a P. Con esta definición no hay solapamiento y además cada elemento tiene un tercio de su volumen contenido en los V.C. de cada uno de los tres nodos del mismo.

El sistema de ecuaciones discretas se obtiene entonces de un balance entre la fuente en el interior de los V.C. y el flujo a través de la superficie exterior del mismo. Para calcular este flujo se necesita hacer alguna suposición acerca del perfil que tiene la función incógnita ϕ dentro de cada elemento, como se verá en el apartado correspondiente. La proposición de un nuevo perfil interpolante es el núcleo central del presente trabajo.

VOLUMENES DE CONTROL APLICADOS A UN PROBLEMA DE TRANSPORTE

Antes de introducir el concepto de función interpolante es importante describir con mas detalle el método de [2] para la resolución de la ecuación general de convección y difusión de un escalar ϕ , que tiene la forma

$$\nabla \cdot (\rho \bar{U} \phi) = S + \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) \quad (1)$$

Esta ecuación determina la distribución espacial del escalar ϕ cuando es arrastrado por un campo de velocidades \bar{U} , difunde de acuerdo a la ley de Fick con el coeficiente de difusión Γ y es generado por la fuente por unidad de volumen S . La ecuación (1) representa muchos fenómenos de mecánica de fluidos y transferencia de calor y materia, además de analogías eléctricas. Nuestro objetivo es resolver (1) y obtener la distribución de ϕ sobre el dominio.

El primer paso es discretizar el dominio en un conjunto de elementos triangulares de tres nodos. El objetivo del cálculo numérico es predecir los valores de ϕ en dichos nodos. Si se toma como referencia la figura 1, se observa un volumen de control alrededor de P , que se denominará V_p , con una superficie exterior S_p determinada por las uniones a-b-...-h. Los nodos Q, R, S y T pertenecen a elementos que convergen a P por lo que se los llamará vecinos de P .

El segundo paso es reescribir (1) en su forma integral

$$\iint_{S_p} \bar{J} \cdot \bar{n} \, ds = \iiint_{V_p} S \, dv \quad (2)$$

donde el flujo total J es

$$\bar{J} = \rho \bar{U} \phi - \Gamma \nabla \phi \quad (3)$$

La ecuación discretizada para cada nodo se obtiene aplicando (2) al V.C. asociado a dicho nodo. Para evaluar estas integrales es necesario conocer o estimar la variación de ρ , Γ , S , ϕ y \bar{U} en el dominio. El campo de velocidades \bar{U} es un dato del problema y por lo tanto conocido en todos los nodos, mientras que dentro de cada elemento se utiliza interpolación lineal. El caso de ρ , Γ y S es mas sencillo ya que se los supone constantes dentro de cada elemento. El flujo J se calcula a partir de suponer que ϕ esta dado en cada uno de los tres nodos del elemento y utilizar ciertas funciones interpolantes criteriosamente elegidas dentro del mismo.

Después de expresada la ecuación (2), queda un conjunto de relaciones algebraicas donde las ϕ en los nodos son las únicas incógnitas. Se puede ordenar este conjunto como un sistema de ecuaciones discretizadas que, por ejemplo para el nodo P, toman la forma

$$(\sum \text{Anb}) \phi_p = \sum \text{Anb} \phi_{nb} + D_p \quad (4)$$

donde la sumatoria se extiende sobre todos los nodos vecinos de P, siendo ϕ_p el valor de ϕ en el nodo P y ϕ_{nb} los valores de ϕ en los nodos vecinos. El término D_p contiene la integración del término fuente en el volumen V_p . Cada punto del dominio tiene su ecuación discretizada como la (4). Estas ecuaciones deben ser resueltas simultáneamente para obtener ϕ en todo el dominio.

Si el nodo en cuestión se encuentra en el borde del dominio, como por ejemplo el nodo V en la figura 1, la ecuación (4) debe ser completada de la siguiente forma

$$(\sum \text{Anb}) \phi_v = \sum \text{Anb} \phi_{nb} + D_v - F_v - M_v \phi_v \quad (5)$$

donde F_v y M_v son respectivamente el flujo por difusión y el flujo másico que salen del dominio en los alrededores del nodo V (unión o-V-i). Si la condición de borde es de ϕ_v dado (Dirichlet), se puede usar (5) para determinar F_v . Si la condición es de F_v dado (Newmann), la ecuación (5) debe ser resuelta junto con el resto del sistema para obtener ϕ_v .

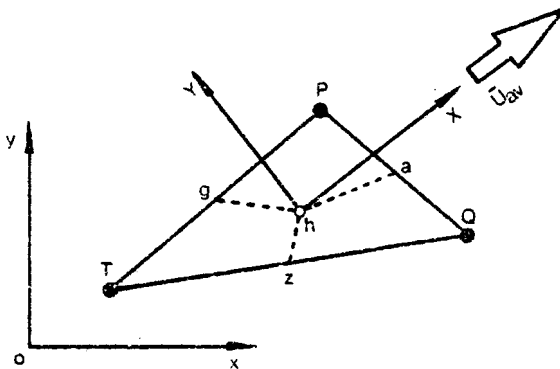


Fig. 2 Un elemento y su sistema rotado de coordenadas

PERFIL INTERPOLANTE PARA EL CALCULO DEL FLUJO J

Hasta ahora solo se ha descrito el método presentado en [2] para la resolución de problemas de transporte por elementos finitos basados en volúmenes de control y utilizado en [3-5]. Como se dijo anteriormente, y teniendo en cuenta el elemento PIQ de la figura 2, hace falta suponer un perfil interpolante para ϕ en el elemento para calcular el flujo J sobre las superficies de volúmenes de control a-h, z-h y g-h. Ya se ha mencionado que el presente trabajo propone una nueva función interpolante para ser usada en el cálculo de este flujo J. Es conveniente entonces describir las funciones que se han usado hasta la fecha y las motivaciones y características de nuestro nuevo perfil interpolante.

Perfil lineal

La elección mas simple es suponer un perfil lineal de ϕ en cada elemento, motivo por el cual este perfil fue el primero en ser utilizado

$$\phi = A X + B Y + C \quad (6)$$

En este caso se obtiene un sistema similar al de diferencias centradas, con la consiguiente limitación en el número de Peclet que es propia de los mismos, además de requerir una discretización fina en zonas donde la variación de ϕ no es suave. El número de Peclet relevante en este caso es el que se relaciona con el ancho máximo DX del elemento en la dirección rotada X, por lo tanto se define $Pe = \rho U_{av} DX / \Gamma$.

En la ecuación (6), al igual que en los casos siguientes, A, B y C son constantes a determinar requiriendo que $\phi = \phi_p, \phi_t, \phi_q$ en los nodos P, T y Q respectivamente.

Perfil propuesto por Baliga y Patankar

Consideremos el elemento PIQ que se muestra en la figura 2. Se denominará \bar{U}_{av} a la velocidad promedio sobre el elemento. El sistema de coordenadas X-Y esta rotado con respecto al original x-y, de manera que el eje X apunta en la dirección de \bar{U}_{av} . U_{av} es la magnitud de \bar{U}_{av} , y ρ, Γ , y S son los valores uniformes de densidad, coeficiente de difusión y fuente sobre el elemento en cuestión. Si planteamos en estas condiciones la ecuación (1) en el sistema X-Y rotado, considerando la velocidad del fluido uniforme e igual a U_{av} en elemento, tendremos

$$\rho U_{av} \partial\phi/\partial X - \Gamma (\partial^2\phi/\partial X^2 + \partial^2\phi/\partial Y^2) = S \quad (7)$$

Baliga y Patankar [2] propusieron un perfil interpolante que fuera solución de la ecuación (7) para el caso homogéneo ($S=0$)

$$\phi = A \exp(\text{Pe } X/\text{DX}) + B Y + C \quad (8)$$

Este perfil tiene en cuenta la naturaleza direccional de la convección, con la ventaja de no sufrir limitaciones en el número de Peclet y de reducir considerablemente la difusión cruzada [2], debido a la rotación en la dirección del flujo.

Perfil propuesto por Prakash

Una mejora del perfil anterior fue propuesta por Prakash [6], introduciendo un término debido a la fuente, para que fuera una solución particular de la (7) no homogénea

$$\phi = A \exp(\text{Pe } X/\text{DX}) + B Y + C + (S \text{ DX}/\text{TPe}) X \quad (9)$$

Esta solución particular se eligió de manera de obtener resultados exactos en ciertos casos unidimensionales. Por ejemplo, en un caso unidimensional, a medida que el Peclet tiende a cero el perfil tiende correctamente a un perfil cuadrático, mientras que el de Patankar tendía a uno lineal.

Nuevo perfil interpolante

Si bien el perfil propuesto por Prakash representa una mejora al método, la solución particular que él elige para la fuente no es por supuesto la única posible, como él mismo lo expresa en [6]. Es interesante notar que en el perfil (9) la fuente afecta solo la dirección X, manteniendo en Y un perfil lineal. Esta observación nos llevó a proponer un nuevo perfil en donde el efecto de la fuente se hace presente en ambas direcciones. Esto se logró con la introducción de un perfil cuadrático en Y y la disminución del efecto de la fuente sobre la dirección X. Se propone entonces el siguiente perfil, que es otra solución particular de (7), el cual brinda resultados exactos en ciertos casos bidimensionales (a diferencia de los unidimensionales del perfil de Prakash).

$$\phi = A \exp(\text{Pe } X/\text{DX}) + B Y + C + (S \text{ DX}/2\text{TPe}) X - (S/4\Gamma) Y^2 \quad (10)$$

Cuando el Peclet tiende a cero, el perfil (10) tiende a

$$\phi = -(S/4\Gamma) (X^2+Y^2) + A X + B Y + C \quad (11)$$

Este perfil, a diferencia de los anteriores, representa en forma realista una dependencia cuadrática de ϕ con respecto a la distancia al centroide del elemento.

Con una pequeña modificación adicional se tiene la posibilidad de tratar problemas en medios anisotrópicos con fuente. Si se tiene un elemento representando un medio anisotrópico en reposo y se efectúa la rotación del sistema x-y de manera de que X-Y coincida con el sistema de ejes principales de anisotropía, la ecuación (7) queda

$$\Gamma_x \partial^2 \phi / \partial X^2 + \Gamma_y \partial^2 \phi / \partial Y^2 = S \quad (12)$$

Si se hace aparecer en (10) el coeficiente difusivo Γ correspondiente a cada dirección principal en los dos términos que involucran la fuente se obtiene el siguiente perfil

$$\phi = A \exp(Pe X/DX) + B Y + C + (S DX/2\Gamma_x Pe) X - (S/4\Gamma_y) Y^2 \quad (13)$$

que es solución de la (12), siempre y cuando el medio esté en reposo (Peclet=0), y de la (10) en los casos isotrópicos con o sin flujo.

Resumiendo, se propone el perfil (13) como función interpolante. Este perfil considera una rotación en la dirección del flujo si se trata de un medio isotrópico en movimiento, o en la dirección de los ejes principales de anisotropía en el caso de medios anisotrópicos en reposo.

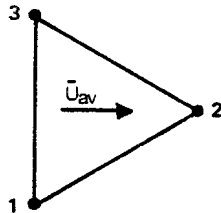


Fig. 3 Elemento equilátero y dirección del flujo

En la figura 3 se ve un elemento triangular equilátero sometido a un flujo en la dirección mostrada. Se ha realizado un gráfico comparativo de la forma de los distintos perfiles interpolantes para el caso en que exista una fuente ($S=30$) en el elemento, considerando tres Peclet diferentes ($Pe=0, 5$ y 15), el cual se puede ver en la figura 4. La función ϕ ha sido fijada en los tres nodos del elemento de la siguiente manera: $\phi(1)=0$, $\phi(2)=2$ y $\phi(3)=1$. Se han graficado los perfiles interpolantes propuestos por: Patankar a) $Pe=0$, b) $Pe=5$, c) $Pe=15$ // Prakash d) $Pe=0$, e) $Pe=5$, f) $Pe=15$ // Nuevo Perfil g) $Pe=0$,

h)Pe=5, i)Pe=15. Se puede observar claramente la diferencia entre el perfil de Prakash y el nuevo en la dirección Y.

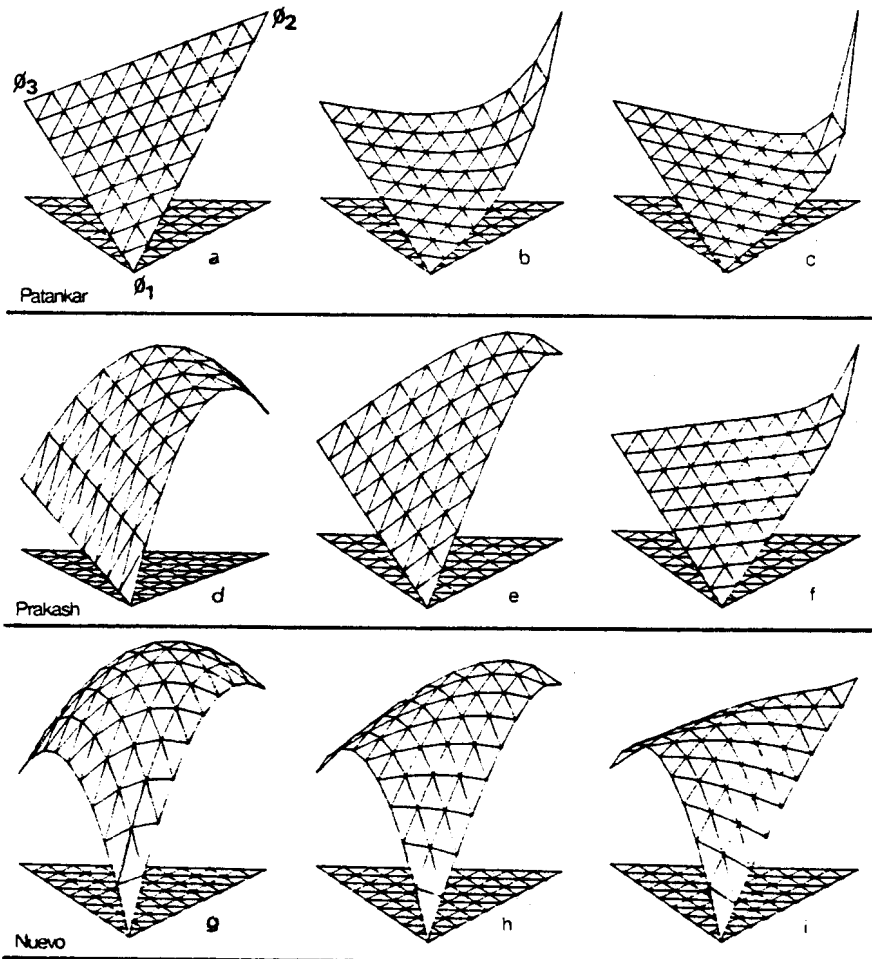


Fig. 4 Perfiles comparados para $S=30$, $Pe=0, 5$ y 15

EXTENSION DEL METODO PARA NAVIER STOKES

El método anterior es aplicable a la resolución del problema del movimiento del fluido, descrito para un caso 2-D por las ecuaciones de Navier Stokes para el momento en ambas direcciones y la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot (\rho \bar{U} u) = (Su - \partial P / \partial x) + \nabla \cdot (\mu \nabla u) \quad (14-a)$$

$$\nabla \cdot (\rho \bar{U} v) = (Sv - \partial P / \partial y) + \nabla \cdot (\mu \nabla v) \quad (14-b)$$

$$\nabla \cdot (\rho \bar{U}) = 0 \quad (14-c)$$

Si se compara (14-a) o (14-b) con (1) se ve que son equivalentes. Solo ~~hace~~ falta cambiar Γ por μ e incluir el gradiente de P en la ~~fuerza~~ S. Si se hace una interpolación lineal de P en cada elemento, se obtiene que el gradiente de P es constante en él. Se está entonces en condiciones de reemplazar S por $Su - \partial P / \partial x$ o $Sv - \partial P / \partial y$ según corresponda, manteniendo la suposición de $S = \text{cte}$ en el elemento.

La parte nueva del problema está relacionada con la resolución de la ecuación de continuidad, y es en este punto donde se pone de manifiesto una importantísima ventaja derivada de la inclusión del efecto de la fuente en el perfil interpolante. Como ha sido probado por Prakash en [6], esta inclusión permite calcular presiones y velocidades en los mismos nodos, sin necesidad de utilizar grillas diferentes o desplazadas. Con estos perfiles no aparece el conocido efecto de tablero de ajedrez en las presiones. Es de esperar que el mismo efecto se logre con la nueva función interpolante, ya que lo importante parece ser el acoplamiento entre presiones y velocidades que se consigue al incluir el gradiente de P en el perfil de velocidades. Para probar esto se está desarrollando un código 2-D para la resolución de la ecuación de Navier Stokes, el cual se encuentra ya en la etapa de prueba, y será el motivo de una próxima publicación.

PROBLEMAS DE PRUEBA Y COMPARACION

Se implementó un código de elementos finitos basados en volúmenes de control para casos lineales bidimensionales, a los efectos de comparar resultados entre el nuevo perfil y el perfil de Prakash.

Se consideraron tres problemas. Los dos primeros fueron elegidos por ser simples y posibilitar la comparación contra la solución analítica. El tercero es el modelo de un dispositivo experimental usado en nuestro laboratorio, y fue elegido a efectos de mostrar las posibilidades del código, ya que combina materiales distintos, fuentes y fluidos en un solo problema.

Problema 1 - Cilindro compuesto con generación de calor

Consideremos un problema térmico en un cilindro compuesto de tres capas de materiales distintos. La zona interna posee una fuente de calor uniforme. La superficie externa del cilindro es mantenida a una temperatura uniforme T_e . Se modeló solo el cuadrante superior del cilindro, como se ve en la figura 5, con condiciones adiabáticas sobre los eje coordenados. Este es realmente un problema unidimensional con simetría de revolución, y fue elegido con el propósito de poner de manifiesto la medida en que los distintos perfiles interpolantes respetan esa simetría. La red utilizada se ve también en la figura 5. Las conductividades de los tres materiales son $K_1=1$, $K_2=0.1$ y $K_3=10$. La fuente en la zona 1 es $S=1$ y la temperatura $T_e=0$.

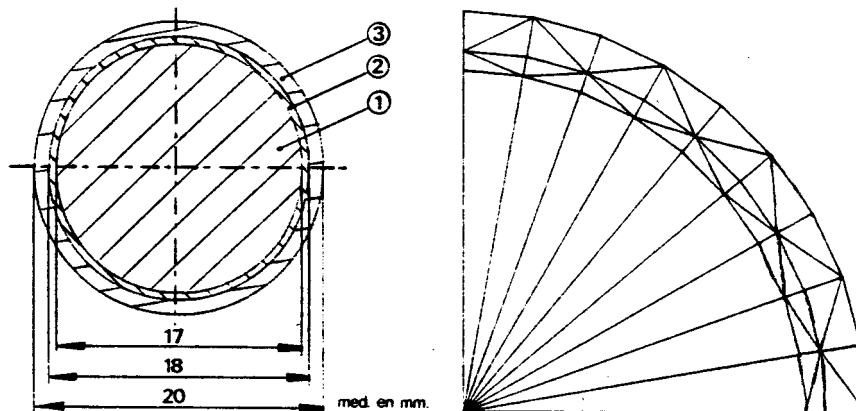


Fig. 5 Problema 1: Dominio y red utilizada

Se graficaron temperaturas adimensionalizadas $T-T_e/T_c-T_e$, donde T_e es la temperatura central, sobre líneas radiales a distintos ángulos, versus el radio adimensionalizado con el radio exterior. En la figura 6-a se observan los resultados obtenidos con los perfiles de Prakash y nuevo, junto con la solución analítica. En la figura 6-b se graficaron los errores porcentuales relativos a la temperatura central $100(T-T_{exacta})/T_c$. Es interesante notar que el nuevo perfil entrega una solución con simetría radial, lo que no es cierto para el otro perfil. El máximo error porcentual es -0.6% para el nuevo perfil comparado con 6% del perfil de Prakash. Se observa claramente que este último sobreestima la curvatura de la solución en el sentido horizontal y la subestima en el sentido vertical, tal como habíamos predicho en nuestro análisis de las distintas funciones interpolantes. El hecho de que el perfil de Prakash entregue correctamente la temperatura central en este caso se debe a que, por las características del problema, ambos efectos se promedian.

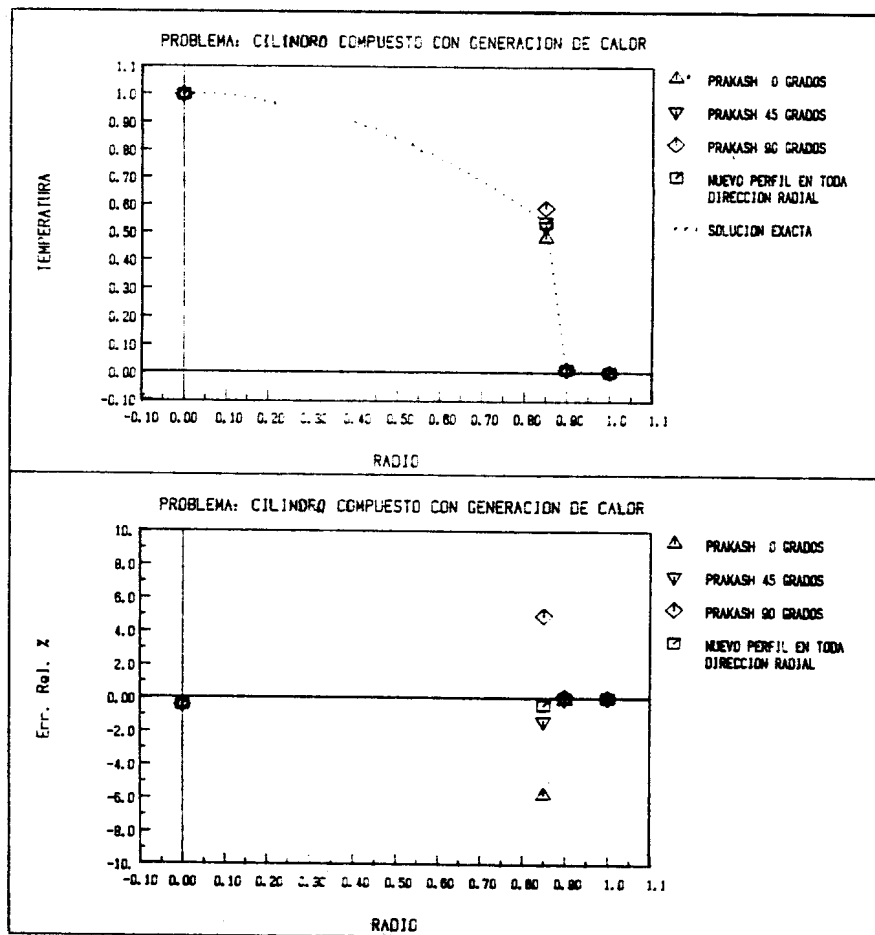


Fig. 6 Problema 1: a) Temperaturas, b) Errores relativos %

El error que presenta el perfil nuevo se debe en su mayor parte a que el cuarto de círculo, al ser aproximado por triángulos, pierde un 0.4% de su área, afectando en igual porcentaje a la fuente. Esto afecta el resultado del nuevo perfil, que de otro modo sería exacto a menos del error de redondeo.

Problema 2 - Elipse anisotrópica con generación de calor

Consideremos un material anisotrópico con sus ejes principales de anisotropía coincidentes con x-y, de conductividad $K_x=4$ y $K_y=1$. Se ha definido un dominio de forma elíptica, que es la forma de las isoterma en este problema. Se ha fijado como condición de borde el flujo exterior normal Fe correspondiente a la solución analítica con $Te=0$. Existe una fuente uniforme unitaria en el interior. El dominio y la red se observan en la figura 7.

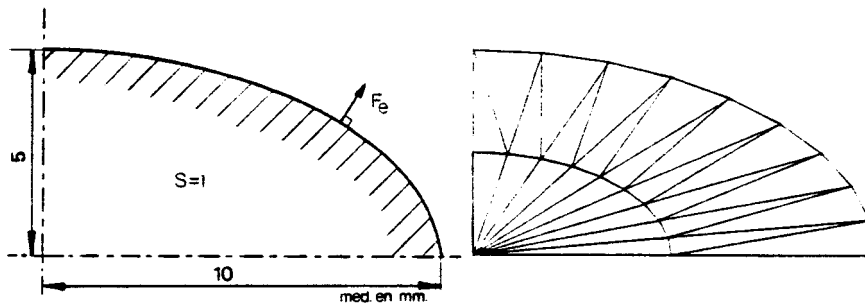


Fig. 7 Problema 2: Dominio y red utilizada

Al igual que en el problema anterior se graficaron temperaturas y errores relativos porcentuales para ambos perfiles, sobre los ejes horizontal y vertical, versus el radio adimensionalizado con el eje mayor. Se observan en las figuras 8-a y 8-b.

En este caso se obtuvieron errores máximos del -2% para el nuevo perfil y del +9% para el de Prakash. Los errores del nuevo perfil se deben en gran parte a que la condición de borde Fe fue interpolada linealmente entre nodos contiguos, y por lo tanto no se pudieron obtener resultados exactos.

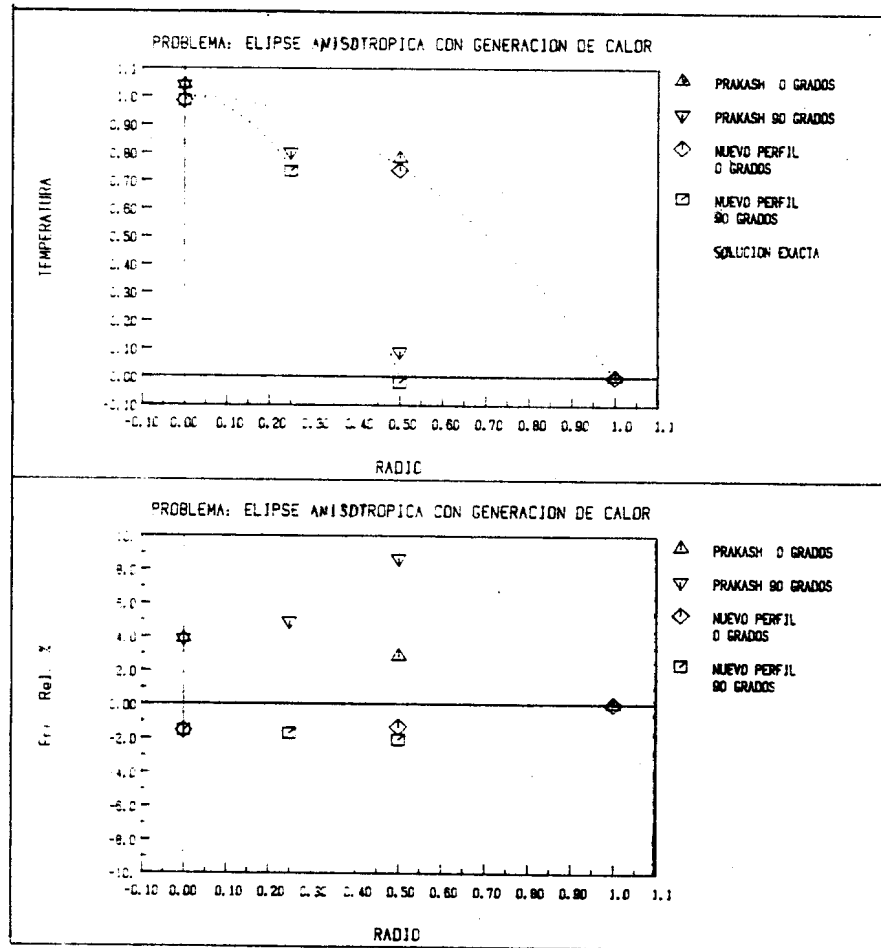


Fig. 8 Problema 2: a) Temperaturas, b) Errores relativos %

Problema 3 - Sección de prueba de loop experimental

Se ha modelado la sección de prueba de un loop experimental orientado a la investigación de mecanismos de transferencia de calor. Se muestra este caso solo a efectos de demostrar las posibilidades del método de elementos finitos por volúmenes de control, ya que reúne en un solo problema fuentes, conductividad pura y fluidos en movimiento. No se han comparado en este caso los distintos perfiles ya que por supuesto no se cuenta con la solución analítica del problema, y todavía no hay mediciones experimentales disponibles. La sección de prueba y su red asociada se muestran en la figura 9. Las proporciones

no han sido respetadas en el gráfico, pues las dimensiones en la dirección Y aparecen duplicadas.

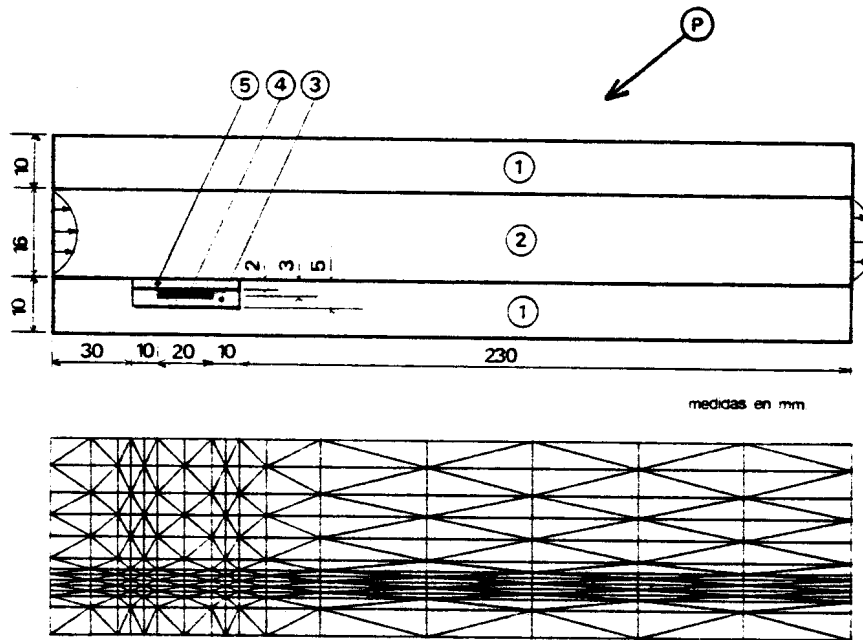


Fig. 9 Problema 3: Dominio y red utilizada

La sección esta compuesta por dos placas de material acrílico transparente (1) que limitan un conducto plano por el que circula agua (2) en flujo laminar. Se ha supuesto un perfil de velocidades tipo Couette ya que la sección se extiende aguas arriba mucho mas allá del punto en donde termina la discretización. En la placa inferior hay una lámina calefactora (4) aislada termicamente del acrílico por una pieza de material tipo baquelita (3), resistente al calor. Sobre el calefactor hay una lámina de acero inoxidable en contacto con el agua. Las características de cada material se ven en la tabla I.

Tabla I Características de Materiales
unidades c.g.s. y caloría

MATERIAL	K	$\rho \cdot C_p$	Fuente por unidad de volumen (S)
1	0.001	0.3	-
2	0.00144	1.0	-
3	0.0002	0.3	-
4	0.11	0.9263	10.
5	0.11	0.9263	-

Se ha utilizado una red rectangular densificada en la zona del calefactor. La red no esta en absoluto optimizada pues existen elementos muy distorsionados aguas abajo del calefactor, pero en este caso demostrativo se ha optado por la sencillez.

Las condiciones de borde son $T=10^{\circ}\text{C}$ en el fluido a la entrada de la sección y condiciones de derivada nula (adiabáticas) en el resto del perímetro. El perfil de velocidades tiene 1 cm/s de velocidad máxima. En la figura 10 se puede observar el perfil de temperaturas visto en perspectiva desde el punto de vista P de la figura 9. Existen fuertes gradientes de temperatura cerca de la fuente. Es interesante notar que el número de Peclet toma valores desde 30 hasta 3000 en los distintos elementos de la red en la zona de fluido. Un intento de utilizar diferencias centradas en este problema dió por resultado fuertes oscilaciones en el campo de temperaturas, como era de esperar.

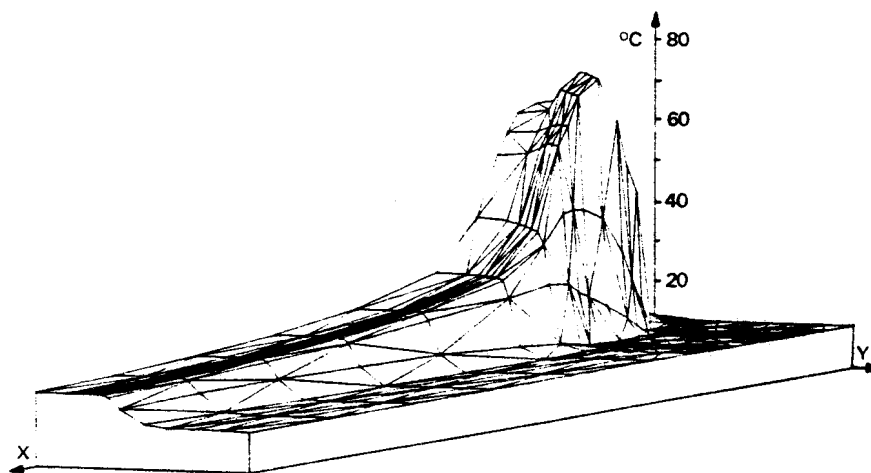


Fig. 10 Problema 3: Perfil de temperaturas

CONCLUSIONES

Se ha descrito un método de elementos finitos basado en volúmenes de control (CVFEM). Se explicitó el procedimiento a seguir para la resolución por este método de la ecuación general de transporte y se incluyó un comentario sobre la extensión al problema de Navier Stokes. Se propusieron nuevas funciones interpolantes, con mayor fundamentación física que las usadas anteriormente. Se programó un código 2-D estacionario lineal para probar el nuevo perfil propuesto. Se probó la nueva función interpolante en dos casos de prueba, obteniéndose resultados con errores de hasta un orden de

magnitud menores que los obtenidos por sus predecesoras. Por lo anterior se concluye que la nueva función interpolante es un aporte positivo al desarrollo del método CVFEM, por lo menos en lo que respecta a la ecuación de transporte. Un código 2-D estacionario para resolver la ecuación de Navier Stokes se encuentra ya en desarrollo avanzado. El objeto del mismo es probar el comportamiento de la nueva función para observar si elimina el efecto de tablero de ajedrez al calcular presiones y velocidades en los mismos nodos, tal y como lo hace la función propuesta por Prakash.

REFERENCIAS

- [1] Patankar S.V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere, Washington D.C., 1980.
- [2] Baliga B.R. and Patankar S.V., "A New Finite Element Formulation for Convection Diffusion Problems", Numer. Heat Transfer, Vol. 3, pp 393-410, 1980.
- [3] Baliga B.R. and Patankar S.V., "A Control Volume Based Finite Element Method for Two-dimensional Fluid Flow and Heat Transfer", Numer. Heat Transfer, Vol. 6, pp 245-262, 1983.
- [4] Baliga B.R., Pham T.T. and Patankar S.V., "Solution of some Two-dimensional Fluid Flow and Heat Transfer Problems", Numer. Heat Transfer, Vol. 6, pp 263-282, 1983.
- [5] Prakash C. and Patankar S.V., "A Control Volume Based Finite Element Method for Solving the Navier Stokes Equation using Equal-Order Variable Interpolation", Numer. Heat Transfer, Vol. 8, pp 259-280, 1985.
- [6] Prakash C., "An Improved Control Volume Based Finite Element Method for Heat and Mass Transfer using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation", Numer. Heat Transfer, Vol. 9, pp 253-276, 1986.