

UNA FORMULACIÓN ALTERNATIVA PARA EL PROBLEMA DEL TRANSPORTE POR CONVECCIÓN–DIFUSIÓN

H. Gómez, I. Colominas, F. Navarrina y M. Casteleiro*

* GMNI — Grupo de Métodos Numéricos en Ingeniería,
Depto. de Métodos Matemáticos y de Representación, Universidad de A Coruña,
E.T.S. de Ing. de Caminos, Canales y Puertos
Campus de Elviña, 15192, A Coruña, España
e-mail: {gomez, colominas, navarrina, casteleiro}@iccp.udc.es, web: <http://caminos.udc.es/gmni>

Palabras clave: Transporte por convección–difusión, Ecuación constitutiva, Inestabilidad numérica, Ecuación de Cattaneo.

Resumen. *La resolución numérica de problemas de dinámica de fluidos es muy compleja. En concreto, la resolución numérica de la ecuación del transporte por convección–difusión es tremendamente complicada a pesar de ser una ecuación lineal. A lo largo de los últimos años se han desarrollado multitud de técnicas de estabilización para este problema, pero ninguna de ellas es suficientemente versátil para ser aplicada a problemas multidimensionales transitorios. En este artículo se propone un método de estabilización diferente a los utilizados hasta el momento. Este método consiste en substituir la ecuación constitutiva clásica del problema — ecuación de Fick— por la ecuación de Cattaneo que se desarrolló en la década de los 50 para problemas termodinámicos y de difusión pura. El motivo para substituir la ecuación de Fick es que conduce a un resultado irracional, según el cual el transporte de masa por difusión se produce a velocidad no acotada. Al emplear como ecuación constitutiva la ecuación de Cattaneo se solventa este problema y se obtienen unas ecuaciones más estables desde un punto de vista numérico.*

1. INTRODUCCIÓN

La resolución numérica de los problemas de fluidos es muy compleja, especialmente cuando se trata de situaciones en las que la velocidad del fluido es elevada [1]. El Método de Elementos Finitos se ha aplicado con éxito en multitud de problemas prácticos de ingeniería, pero presenta grandes inconvenientes cuando se utiliza para tratar problemas de fluidos con convección elevada. En estas situaciones, la imprecisión de los resultados se debe fundamentalmente a dos motivos: el carácter no lineal y el carácter oscilatorio de las ecuaciones de Navier–Stokes. El carácter oscilatorio es inherente a la formulación del problema y no desaparece al resolver casos sencillos como, por ejemplo, un problema de flujo lento —donde se pueden despreciar los términos no lineales de las ecuaciones— en un dominio sencillo.

En cierto modo, el paradigma que resume este comportamiento es la ecuación del transporte por convección–difusión, que se puede considerar formalmente la versión lineal y escalar de las ecuaciones de Navier–Stokes para aguas someras [2]. Esta ecuación a pesar de su sencillez y linealidad presenta grandes dificultades a la hora de ser resuelta numéricamente [3]. Existen en la bibliografía multitud de técnicas de estabilización para el problema del transporte [4, 5, 6], pero no resultan prácticas a la hora de resolver problemas multidimensionales transitorios [7, 8, 9, 10].

En este artículo se presenta una justificación física de las oscilaciones que se producen en la resolución de los problemas de transporte y se propone un método de estabilización radicalmente diferente a los que se han empleado hasta el momento. Así, se demostrará que la naturaleza oscilatoria de la ecuación del transporte proviene directamente de la ecuación de Fick —ecuación constitutiva del problema— que predice una velocidad para el transporte de masa por difusión no acotada. La técnica de estabilización que se propone consiste en reformular el problema utilizando otra ecuación constitutiva que solventa este contrasentido [11]. La ecuación empleada es la ecuación de Cattaneo [12, 13] que hasta ahora se ha empleado para problemas termodinámicos y de difusión pura.

Por tanto, este artículo tiene, esencialmente, dos objetivos: demostrar que las oscilaciones que se producen en la solución numérica de la ecuación del transporte provienen del irracional resultado a que conduce la ecuación de Fick y comprobar que utilizando la ecuación de Cattaneo se obtiene una formulación numéricamente estable. Para ello seguiremos el esquema que a continuación se presenta: En primer lugar se repasará la formulación clásica del problema del transporte [1] y se demostrará que se producen propagaciones de masa a velocidades no acotadas. El paso siguiente es desarrollar la formulación del problema utilizando la ecuación de Cattaneo y analizar los cambios que se producen en las soluciones. Por último, se realizan ensayos numéricos para comprobar la estabilidad de la nueva ecuación.

2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

2.1. Consideraciones generales y notación

A lo largo de todo este artículo se considerará que se pueden desacoplar las ecuaciones hidrodinámicas de las ecuaciones del transporte, y así, calcular primero los campos de velocidades y

densidades que se utilizan luego para resolver las ecuaciones que nos dan los niveles de contaminación. Por tanto, en todo momento supondremos conocidos los campos de densidades y de velocidades, teniendo en cuenta que ambos deben verificar las ecuaciones de la hidrodinámica.

Se utilizará en todo el artículo una formulación Euleriana, por lo que todas las variables estarán definidas sobre la trayectoria del medio. Así, denominaremos $\mathbf{a}, \mathbf{q}, \mathbf{f}$ a las funciones vectoriales que asignan a cada punto de la trayectoria $(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$, la velocidad de la partícula que lo ocupa, el flujo de contaminante —masa que atraviesa la unidad de superficie en una unidad de tiempo— en ese punto, y la fuente de contaminante en ese punto respectivamente. Asimismo, denotaremos por ρ, u las funciones escalares que, definidas sobre la trayectoria del medio, se aplican en la densidad y concentración de contaminante en cada punto. Por último $\tilde{\mathbf{K}}$ denota la función tensorial que le asigna a cada punto de la trayectoria su tensor de difusividad. Supondremos que todas estas funciones tienen la regularidad necesaria.

2.2. Formulación clásica del problema

La formulación clásica del problema se basa en las dos siguientes ecuaciones:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho \mathbf{a} \cdot \text{gradu} + \text{div}(\rho \mathbf{q}) - \mathbf{f} = 0 \quad (1)$$

$$\mathbf{q} = -\rho \tilde{\mathbf{K}} \text{gradu} \quad (2)$$

donde (1) es la ecuación de equilibrio del problema —obtenida de imponer la conservación de masa de contaminante— y (2) es la ecuación de Fick o ecuación constitutiva. Además, hay que tener en cuenta que \mathbf{a} y ρ verifican las ecuaciones hidrodinámicas. Procedemos ahora a demostrar que esta formulación conduce a propagaciones de masa a velocidades no acotadas. Para ello resolveremos un problema sencillo en un medio incompresible, homogéneo, isótropo —por tanto si \mathbf{I} es el tensor identidad, $\tilde{\mathbf{K}} = \tilde{k}\mathbf{I}$ — y unidimensional. No consideraremos términos fuente. El problema que resolveremos será el de un vertido puntual en un medio sin convección, por tanto si denominamos $k = \rho \tilde{k}$, tenemos que resolver

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \\ u(x, t = 0) &= \delta(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}, \\ \lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x, t) &= 0, \quad t > 0. \end{aligned} \quad (3)$$

donde $\delta(x)$ es la distribución Delta de Dirac. El problema (3) se puede resolver mediante una transformada de Fourier [14] en la variable espacial, obteniéndose la siguiente solución:

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kt}} e^{-\frac{x^2}{4kt}}, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \quad (4)$$

Si fijamos un tiempo $t = \tau_0 > 0$, podemos definir

$$\tilde{u}(x) = u(x, \tau_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi k\tau_0}} e^{-\frac{x^2}{4k\tau_0}} \quad (5)$$

que es la función de Gauss y por lo tanto cumple $\tilde{u}(x) > 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$. Esto quiere decir que existe soluto en cualquier punto del dominio $\forall t > 0$. Además, como ya habíamos visto, en el instante inicial $u(x, 0) = 0 \quad \forall x \neq 0$, es decir, no hay contaminante en ningún punto que no sea el origen de coordenadas. Con todo esto podemos ver que si fijamos un punto cualquiera x_0 se cumple:

$$u(x_0, \tau_0) > 0 \quad \forall \tau_0 > 0 \quad (6)$$

y por lo tanto la velocidad media de las partículas que en el instante $t = \tau_0$ se encuentran en el punto $x = x_0$ es $v = x_0/\tau_0$ que no está acotada porque el razonamiento anterior es válido $\forall \tau_0 > 0$ y $\forall x_0 \in \mathbb{R}$. A continuación, en la figura 1 se muestra la solución de concentraciones para un instante posterior al inicial.

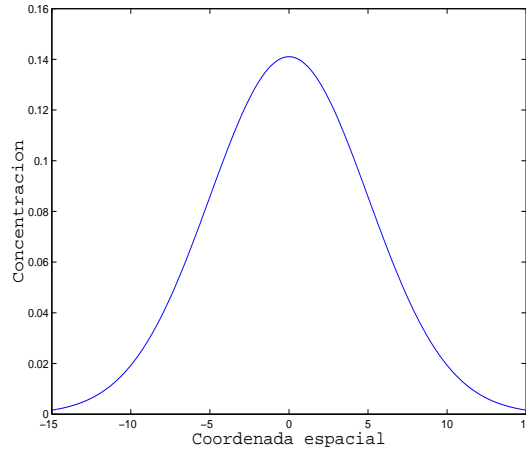


Figura 1. Solución de concentraciones para tiempo $t = 4$ y $k = 1$ empleando la formulación clásica.

2.3. Formulación del problema empleando la ecuación de Cattaneo

Esta formulación se obtiene substituyendo la ecuación (2) por la ecuación de Cattaneo. Esta ecuación constitutiva introduce una nueva función tensorial $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ que asigna a cada punto de la trayectoria su tensor de relajación asociado. Cabe destacar que las coordenadas del tensor de relajación en una base cualquiera tienen dimensiones de tiempo. Como se ha dicho con anterioridad, la ecuación de Cattaneo sólo se ha utilizado para problemas sin convección [12, 13], por lo que mediante un planteamiento Lagrangiano se ha obtenido su expresión para un problema con convección [11]. El resultado obtenido es el siguiente:

$$\mathbf{q} + \tilde{\boldsymbol{\tau}} \left(\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \text{grad} \mathbf{q} \mathbf{a} \right) = -\rho \tilde{\mathbf{K}} \text{grad} u \quad (7)$$

Si a esta ecuación unimos (1) y tenemos en cuenta que \mathbf{a} y ρ deben verificar las ecuaciones hidrodinámicas, tenemos desarrollada la formulación del problema del transporte utilizando la ecuación de Cattaneo. Para comparar los resultados que se obtienen empleando esta formulación resolveremos el mismo problema que se ha resuelto antes teniendo en cuenta que es

necesario imponer una condición inicial más, ya que el nuevo problema es de segundo orden en el tiempo. Por tanto, supondremos de nuevo que queremos resolver un problema en un medio incompresible, homogéneo, isótropo —por tanto $\tilde{\mathbf{K}} = \tilde{k}\mathbf{I}$ y $\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \tilde{\tau}\mathbf{I}$ — unidimensional y sin convección. No se considerarán términos fuente y denotaremos $k = \rho\tilde{k}$, $\tau = \rho\tilde{\tau}$. Con estas hipótesis el problema se puede formular en los siguientes términos [11]:

$$\begin{aligned} \tau \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial u}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \\ u(x, t = 0) &= \delta(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}, \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, t = 0) &= 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \\ \lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x, t) &= 0, \quad t > 0. \end{aligned} \tag{8}$$

La solución de (8) se puede obtener aplicando consecutivamente transformadas de Laplace y Fourier [15]. Procediendo de este modo obtenemos la solución requerida:

$$u(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{2} e^{-\frac{c^2}{2k}t} \left[\delta(|x| - ct) + \frac{c}{2k} I_0 \left(\frac{c}{2k} \sqrt{c^2 t^2 - x^2} \right) + \frac{c^2}{2k} t \frac{I_1 \left(\frac{c}{2k} \sqrt{c^2 t^2 - x^2} \right)}{\sqrt{c^2 t^2 - x^2}} \right], & |x| \leq ct \\ 0, & |x| > ct \end{cases}$$

donde c es la celeridad de la onda de masa definida por

$$c = \sqrt{\tilde{k}/\tilde{\tau}} = \sqrt{k/\tau}. \tag{9}$$

A continuación, en la figura 2 se comparan las soluciones obtenidas empleando cada una de las dos ecuaciones constitutivas que se han considerado. En esta figura se observa claramente como al emplear la ecuación de Cattaneo se produce un frente de onda que viaja con celeridad c .

3. ESTUDIO DEL PROBLEMA DEL TRANSPORTE QUE SE DERIVA DE LA ECUACIÓN DE CATTANEO

Hasta el momento hemos analizado las consecuencias de utilizar la ecuación de Cattaneo para problemas de difusión pura. En el resto del artículo estudiaremos las soluciones tanto analíticas como numéricas del problema del transporte por convección–difusión que se deriva de la ecuación de Cattaneo. Comenzaremos por un estudio teórico del problema unidimensional en un medio incompresible, homogéneo e isótropo. Estudiaremos el problema en un subdominio finito de \mathbb{R} . En estas condiciones, podemos estudiar el fenómeno físico analizando el problema

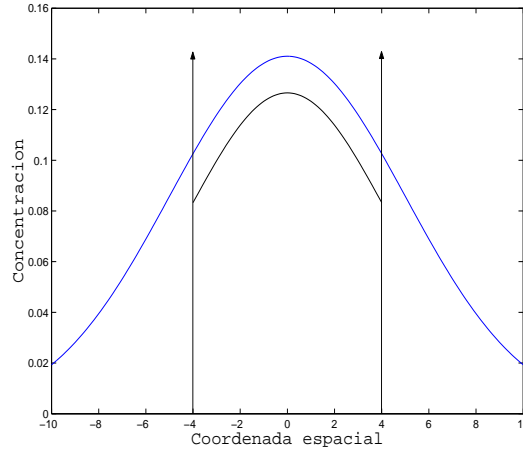


Figura 2. Comparación a tiempo $t = 4$ de las soluciones de las ecuaciones de difusión pura que se derivan de la ecuación de Fourier —azul— y de la ecuación de Cattaneo —negro—. Los parámetros k y τ tienen valor unitario.

de valores iniciales y de contorno:

$$\begin{aligned} \tau \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + 2\tau a \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} - (k - \tau a^2) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + a \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial t} &= 0, \quad \forall x \in [0, L], \quad t > 0, \\ u(x, 0) &= f(x), \quad \forall x \in [0, L], \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) &= g(x), \quad \forall x \in [0, L], \\ u(0, t) &= u_0(t), \quad t > 0, \\ u(L, t) &= u_L(t), \quad t > 0. \end{aligned} \tag{10}$$

Si en el problema (10) se introduce el cambio de coordenadas

$$\begin{aligned} \xi &= x - at \\ \eta &= t \end{aligned} \tag{11}$$

obtendremos el problema que da la solución de concentraciones que vería un observador que se moviese solidariamente con el fluido, i.e.,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} &= -\frac{1}{\tau} \frac{\partial u}{\partial \eta}, \quad \forall \xi \in [-a\eta, L - a\eta], \quad \eta > 0, \\ u(\xi, 0) &= f(\xi), \quad \forall \xi \in [-a\eta, L - a\eta], \quad \eta > 0, \\ \frac{\partial u}{\partial \eta}(\xi, 0) &= g(\xi) + a \frac{df}{d\xi}(\xi), \quad \forall \xi \in [-a\eta, L - a\eta], \quad \eta > 0 \\ u(\xi = -a\eta, \eta) &= u_0(\eta), \quad \eta > 0 \\ u(\xi = L - a\eta, \eta) &= u_L(\eta), \quad \eta > 0. \end{aligned} \tag{12}$$

En este sistema de referencia tenemos, por tanto, un contorno móvil definido por un par de rectas paralelas en el plano (ξ, η) , lo cual es equivalente a decir que el contorno, si bien es de tamaño

constante L , se desplaza con una velocidad a . En lo que sigue demostraremos que el problema (10) está mal planteado cuando $|a| \geq c$, siendo c la celeridad de la onda de masa definida en (9). Demostraremos esta proposición sólo para el caso en que la velocidad del fluido es positiva —el fluido se mueve en el sentido positivo de las coordenadas espaciales—. Si a fuese negativo la demostración sería similar. Hecha esta distinción, tenemos que demostrar que el problema (10) está mal planteado cuando $a \geq c$. Para ello razonaremos sobre dos figuras. En la primera de ellas —figura 3— presentamos un problema con $a < c$ y, por tanto, bien planteado. En el

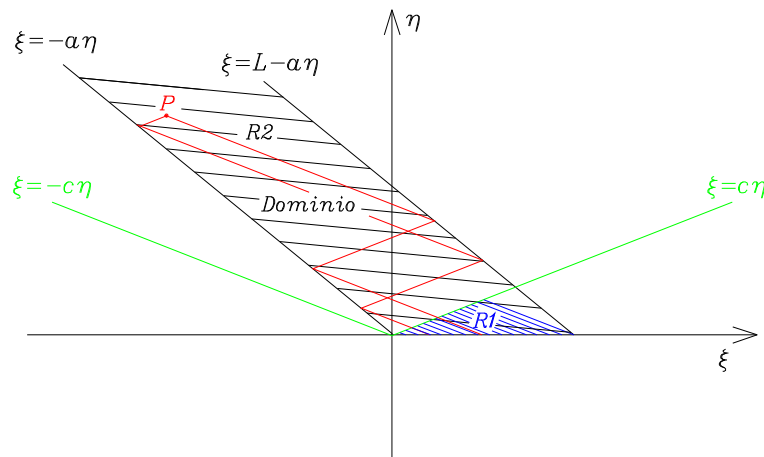


Figura 3. Ejemplo de problema de convección-difusión empleando la ley de Cattaneo. Este problema está bien planteado como problema de valores iniciales y de contorno ya que la velocidad del fluido es menor que la celeridad de la onda de masa c .

problema representado en la figura 3 se han considerado dos regiones R_1 y R_2 separadas por las características $\xi - c\eta = 0$ y $\xi + c\eta = L$. En la región R_1 es válida la solución para dominio indefinido que expresa $u(\xi, \eta)$ en términos de las condiciones iniciales. En los puntos de la región R_2 , la solución se ve afectada por las condiciones de contorno y por lo tanto no es válida la solución para dominio indefinido. La solución en un punto P de esta región se puede obtener en función de las condiciones iniciales y de los valores prescritos en los puntos del contorno que se intersectan con las características dibujadas a partir de P en color rojo en la figura 3. Si analizamos ahora la figura 4 en la que se presenta un problema con $a > c$, veremos que este problema está mal planteado como problema de valores iniciales y de contorno. Como se puede observar en la figura 4 existe un conjunto infinito de puntos del contorno $\xi = L - a\eta$ —entre los que se encuentra el punto P — en los cuales la solución está únicamente determinada por las condiciones iniciales. Así, a no ser que el valor prescrito en el contorno sea el mismo que se obtiene de las condiciones iniciales, el problema no tiene solución única y por lo tanto está mal planteado. Desde un punto de vista numérico, cuando nos acercamos a estas situaciones —es decir, cuando $a \approx c$, $a < c$ — obtenemos soluciones oscilatorias. Esta oscilación se produce precisamente, entre las dos soluciones del problema. Cabe destacar que el contorno en el que se obtiene una solución multivalorada es el contorno aguas abajo, lo cual es totalmente lógico,

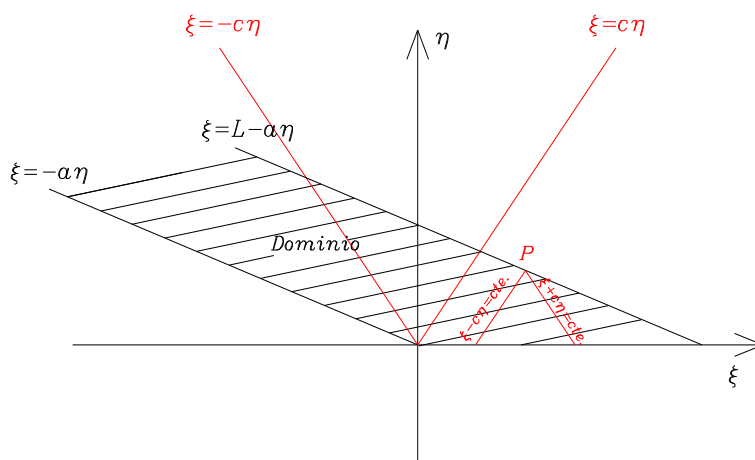


Figura 4. Ejemplo de problema de convección–difusión empleando la ley de Cattaneo. Este problema está mal planteado como problema de valores iniciales y de contorno ya que la velocidad del fluido es mayor que la celeridad de la onda de masa c .

pues esos puntos no son capaces de transmitir la información hacia aguas arriba y por lo tanto la solución en ellos está exclusivamente determinada por lo que sucede aguas arriba. Este hecho también concuerda con la distribución de las oscilaciones de la solución numérica del problema, que son mucho mayores en las proximidades del contorno aguas abajo.

Dado que la solución del problema del transporte utilizando la ecuación de Cattaneo es un par de ondas de contaminación con celeridades $a + c$ y $a - c$, podemos concluir que el problema está mal planteado como problema de contorno cuando ambas ondas se desplazan en la dirección del fluido —en cuyo caso $a > c$ — y, por tanto, ninguna partícula de contaminante es capaz de remontar el flujo. En esta situación en que no se transmite información de aguas abajo hacia aguas arriba, no tiene sentido imponer condiciones en el contorno aguas abajo ya que no condicionarán la solución del problema. En este caso resulta necesario formular el problema como un problema de valores iniciales.

La valoración de estos resultados es muy positiva ya que se pueden encontrar situaciones similares a ésta en la naturaleza. Por ejemplo, problemas de propagación de ondas gravitatorias en flujo en lámina libre o problemas de propagación de ondas sonoras en un fluido. En el primer caso el número adimensional que gobierna el fenómeno físico es el *número de Froude*, que relaciona la velocidad del fluido con la celeridad de las ondas gravitatorias, i.e.,

$$Fr = \frac{a}{\sqrt{gd}} \quad (13)$$

donde d es la altura de la lámina libre y g la aceleración de la gravedad. En el caso de propagación de ondas de sonido, el problema se rige por el *número de Mach*, a saber:

$$M = \frac{a}{c_s} \quad (14)$$

en donde c_s es la celeridad de la onda sonora en el fluido en cuestión.

Una vez visto esto, parece conveniente introducir un número adimensional que defina la

naturaleza del problema del transporte, indicando cuando se puede tratar como un problema de contorno y cuando es necesaria su resolución como problema de valores iniciales. Este número lo denotaremos por T y se define del siguiente modo:

$$T = \frac{a}{\sqrt{\tilde{k}/\tilde{\tau}}}. \quad (15)$$

Este número nos permite identificar la naturaleza de un problema determinado. Así, cuando $|T| < 1$ estamos ante un problema con velocidad inferior a c y siempre existe un problema de contorno equivalente al problema real que, desde un punto de vista conceptual, es siempre un problema de valores iniciales. Cuando $|T| \geq 1$ tenemos un problema con velocidad superior a c y no tiene sentido imponer una condición de contorno aguas abajo, por lo que es necesario tratarlo como un problema de valores iniciales. Una vez echas estas consideraciones parece justificado definir la *velocidad crítica del fluido* a_c como aquella velocidad a partir de la cual el problema está mal planteado como problema de contorno, por tanto,

$$a_c = c. \quad (16)$$

En virtud de los razonamientos anteriores se puede asegurar que, dado que el problema (10) está mal planteado como problema de contorno cuando $|a| \geq c$, su problema estacionario asociado, i.e.,

$$\begin{aligned} a \frac{du}{dx} - (k - \tau a^2) \frac{d^2u}{dx^2} &= 0; \quad x \in (0, L) \\ u(0) &= u_0 \\ u(L) &= u_L \end{aligned} \quad (17)$$

también estará mal planteado en dicha situación.

Finalizaremos este apartado adimensionalizando la ecuación diferencial del problema (10). Para ello, introduciremos las siguientes variables adimensionales:

$$\hat{x} = \frac{x}{x_0}, \quad \hat{t} = \frac{t}{t_0}, \quad \hat{a} = \frac{a}{a_0}. \quad (18)$$

donde x_0 , t_0 y $a_0 = x_0/t_0$ son, respectivamente, una longitud, un tiempo y una velocidad característicos del problema. Si se introducen las variables (18) en la ecuación diferencial de (10) y se opera convenientemente, se llega a la siguiente ecuación adimensionalizada:

$$\frac{\tau}{t_0} \frac{\partial^2 u}{\partial \hat{t}^2} + 2 \frac{\tau}{t_0} \frac{\partial^2 u}{\partial \hat{t} \partial \hat{x}} - \left(\frac{1}{Pe} - \frac{\tau}{t_0} \hat{a}^2 \right) \frac{\partial^2 u}{\partial \hat{x}^2} + \hat{a} \frac{\partial u}{\partial \hat{x}} + \frac{\partial u}{\partial \hat{t}} = 0 \quad (19)$$

donde Pe denota el *número de Péclet*, i.e.,

$$Pe = \frac{a_0 x_0}{k}. \quad (20)$$

Una simple inspección de la ecuación (19) es suficiente para observar que el problema va a estar gobernado por dos números adimensionales. El primero de ellos, τ/t_0 , relaciona las escalas de tiempo. El segundo de ellos es el coeficiente del término difusivo en (19). Puesto que τ/t_0 es el

número adimensional que relaciona las escalas de tiempo, intentaremos que el número adimensional que resta no involucre directamente el parámetro temporal t_0 . Así, se puede demostrar que

$$\frac{1}{Pe} - \frac{\tau}{t_0} \widehat{a}^2 = \frac{k - \tau a^2}{a_0 x_0}. \quad (21)$$

Al inverso de este número lo denotaremos por He , con lo que

$$He = \frac{a_0 x_0}{k - \tau a^2}. \quad (22)$$

Este número tiene un significado similar al del número de Péclet en el problema del transporte clásico, sin embargo el número He tiene un significado físico muy claro, ya que con una sencilla operación nos permite pensar en términos de velocidades en lugar de comparar una velocidad con la difusividad del medio. Así,

$$He = \frac{a_0 x_0}{k - \tau a^2} = \frac{a_0 x_0}{\tau(c - a)(c + a)} \quad (23)$$

siendo c la celeridad de la onda de difusión definida en (9). En esta última expresión del número He todos los parámetros son velocidades, tiempos, o distancias. En concreto, $c - a$ es la celeridad de la onda de contaminación que viaja hacia aguas arriba y $c + a$ la celeridad de la onda que viaja hacia aguas abajo. Este nuevo sentido que adquieren los parámetros del flujo al formular el problema con la ecuación de Cattaneo, nos permitirá desarrollar unas condiciones de estabilidad para el problema estacionario.

4. MODELO NUMÉRICO DEL PROBLEMA

En este apartado haremos un estudio numérico del problema del transporte en un medio unidimensional, estacionario, incompresible, homogéneo e isótropo. Si se utiliza la ecuación de Cattaneo este problema está gobernado por (17), mientras que si se emplea la ecuación de Fick el proceso físico queda descrito por el problema de contorno

$$\begin{aligned} a \frac{du}{dx} - k \frac{d^2u}{dx^2} &= 0; & x \in (0, L) \\ u(0) &= u_0 \\ u(L) &= u_L \end{aligned} \quad (24)$$

que es (17) particularizado para $\tau = 0$. Las inestabilidades de este problema y los métodos de estabilización clásicos están ampliamente estudiados en la bibliografía [3, 1, 9], por lo que nos centraremos en el estudio de (17). Obtendremos una aproximación $u^h(x)$ de la solución de (17) empleando una formulación de elementos finitos de dos nodos con funciones de interpolación lineales. En el caso que nos ocupa esta formulación resulta equivalente a la que se obtiene empleando un esquema en diferencias centradas y ambos procedimientos conducen a la siguiente ecuación nodal [3]:

$$(1 - \gamma_{He})u_{i+1} - 2u_i + (1 + \gamma_{He})u_{i-1} = 0 \quad (25)$$

En la ecuación (25) se ha usado la notación $u_i = u^h(x_i) \approx u(x_i)$, siendo x_i un nodo interior cualquiera de la partición uniforme \mathcal{P} de $[0, L]$ definida por los nodos $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = L$. Además, γ_{He} denota el número *He* elemental asociado a la partición \mathcal{P} , i.e.,

$$\gamma_{He} = \frac{ah}{2(k - \tau a^2)} \quad (26)$$

siendo h la distancia entre dos nodos consecutivos de la partición \mathcal{P} . Análogamente se define el número de Péclet elemental asociado a \mathcal{P} como

$$\gamma_{Pe} = \frac{ah}{2k} \quad (27)$$

que es (26) particularizado para $\tau = 0$.

4.1. Condiciones de estabilidad

En este apartado veremos como al introducir la ley de Cattaneo en el problema del transporte es posible obtener condiciones de estabilidad para (17) simplemente apelando a la naturaleza ondulatoria del problema. En primer lugar observemos que la ecuación en diferencias (25) se puede resolver analíticamente obteniéndose así, los siguientes valores nodales de $u^h(x)$ [3]:

$$u_i = C_1 + C_2 \left(\frac{1 + \gamma_{He}}{1 - \gamma_{He}} \right)^i \quad (28)$$

siendo C_1 y C_2 constantes que dependen de las condiciones de contorno. Observando la ecuación (28) se deduce fácilmente que la solución numérica de (17) será estable cuando

$$|\gamma_{He}| \leq 1. \quad (29)$$

La relación (29) constituye una condición de estabilidad para el problema (17). De igual modo, si particularizamos (29) para $\tau = 0$, tenemos que

$$|\gamma_{Pe}| \leq 1 \quad (30)$$

es una condición de estabilidad para el problema (24). Las ecuaciones (29) y (30) tal como las hemos deducido no parecen de gran utilidad ya que sólo se pueden aplicar a los problemas (17) y (24). Efectivamente esto es así en el caso de (30), sin embargo la ecuación (29) es —salvo un factor de escala— asintóticamente equivalente a imponer que el tamaño de malla del modelo sea menor que los espacios característicos asociados a las dos ondas solución del problema. Como se ha comentado anteriormente, estas dos ondas viajan con celeridades $c - a$ y $c + a$, por lo que los espacios característicos aguas arriba y aguas abajo de un punto cualquiera del dominio son, respectivamente, $\tau(c - a)$ y $\tau(c + a)$. En consecuencia, se puede demostrar [11] que la ecuación

$$h < \min(\tau(c - a), \tau(c + a)) \quad (31)$$

tiende a (29) cuando a tiende a la velocidad crítica a_c , definida en (16) salvo un factor de escala que denominaremos λ . La condición de estabilidad (31) sí es de gran importancia, ya que al tener un sentido físico claro se puede extender a problemas más complejos.

4.2. Ejemplos numéricos

En esta sección resolveremos el problema (17) para diferentes valores de los parámetros. Los ejemplos se presentarán en dos grupos de tres figuras. En cada uno de estos grupos el tiempo de relajación τ permanecerá constante —al igual que el tamaño de malla, la difusividad, la longitud del dominio y los valores prescritos en el contorno que son constantes para todos los ejemplos del artículo—, pero iremos aumentando el valor de la velocidad del fluido a hasta que se produzcan oscilaciones. En todos los ejemplos que se presentan en este artículo se utiliza una discretización en 20 elementos para un dominio de tamaño unitario —con lo que $h = 0,05$ — y se toma un valor unitario para k .

4.2.1. Primer grupo de figuras: Tiempo de relajación pequeño

El primer grupo de tres figuras viene definido por $\tau = 0,01$. Este valor del tiempo de relajación es muy pequeño, por lo que no nos hemos alejado mucho de la ley de Fick. Con estos valores de k y τ la velocidad crítica a_c a partir de la cual el problema (17) no tiene sentido es $a_c = \sqrt{k/\tau} = 10$. Conocidos estos parámetros, podemos calcular, mediante la condición de estabilidad (31) el valor de la velocidad a a partir del cual se producirán oscilaciones en la solución numérica si damos un valor adecuado al factor de escala λ . Este factor de escala no tiene ninguna importancia ya que las condiciones de estabilidad las hemos formulado en función de unos espacios característicos que se podrían redefinir, por ejemplo, como $\lambda(\tau - c)$ y $\lambda(\tau + c)$ con lo que el nuevo factor de escala pasaría a ser unitario. En cualquier caso se puede comprobar que el valor de λ para el cual las condiciones de estabilidad (31) tienden a las condiciones de estabilidad analíticas es $\lambda = 4$. Según esto se producirán oscilaciones cuando

$$h > \lambda\tau \left(\sqrt{k/\tau} - a \right) \quad (32)$$

ya que vamos a considerar valores de la velocidad a positivos. Si utilizamos el valor de λ comentado anteriormente y operamos, la condición (32), resulta ser equivalente a la condición $a > 8,75$. Por lo tanto este esquema numérico dejará de dar una solución estable cuando $a > 8,75$, es decir, cuando $a > 0,875a_c$. Con esto podemos ver que este método numérico permite resolver el problema del transporte para el 87.5 % de los valores del rango de definición de a , ya que el problema (17) está mal planteado cuando $a > a_c$. En el primer ejemplo —figura 5— se representa la solución numérica y analítica para una velocidad $a = 7$. Hay que notar que, aunque este es un problema con un γ_{He} pequeño, lo estamos resolviendo perfectamente para un valor de la velocidad relativamente grande ya que la velocidad crítica es $a_c = 10$.

A continuación, en la figura 6 se muestra la solución numérica y analítica para la velocidad límite a partir de la cual el esquema numérico empezará a fallar, es decir $a = 8,75$. En la figura 7 se muestra que la solución numérica de los problemas más convectivos que el representado en la figura 6 es oscilante. El valor elegido para la velocidad en este caso es $a = 9,75$.

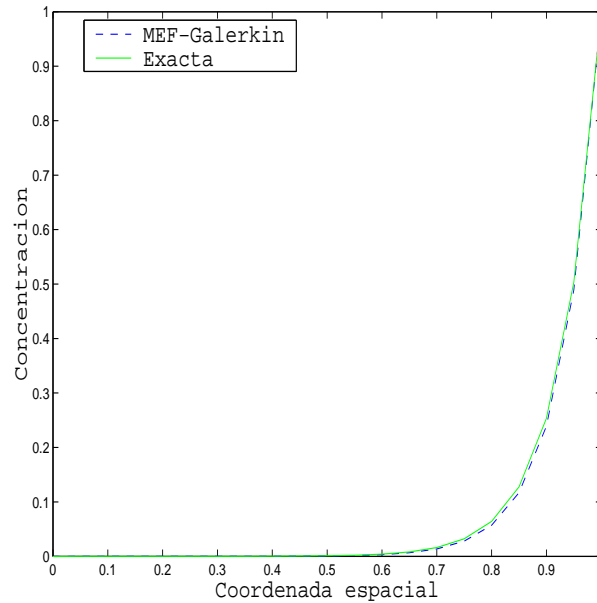


Figura 5. Problema de transporte empleando la ecuación de Cattaneo definido por $k = 1$, $\tau = 0,01$, $a = 0,7a_c$. Solución analítica frente a la numérica que proporciona el MEF con una ponderación tipo Galerkin y 20 elementos de dos nodos.

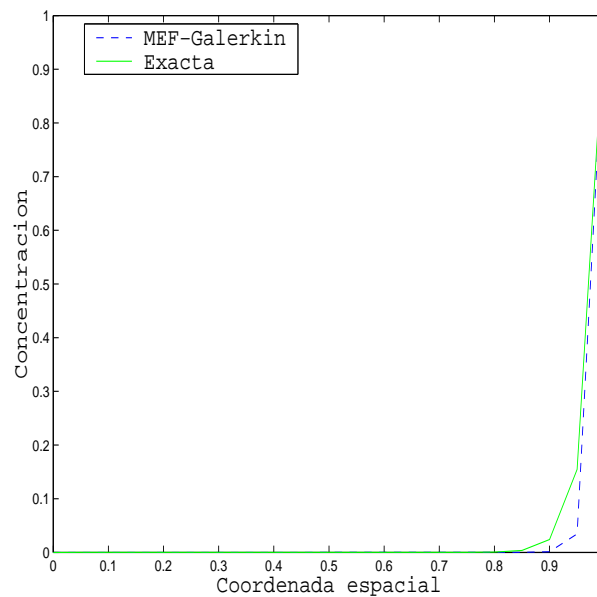


Figura 6. Problema de transporte empleando la ecuación de Cattaneo definido por $k = 1$, $\tau = 0,01$, $a = 0,875a_c$. Solución analítica frente a la numérica que proporciona el MEF con una ponderación tipo Galerkin y 20 elementos de dos nodos.

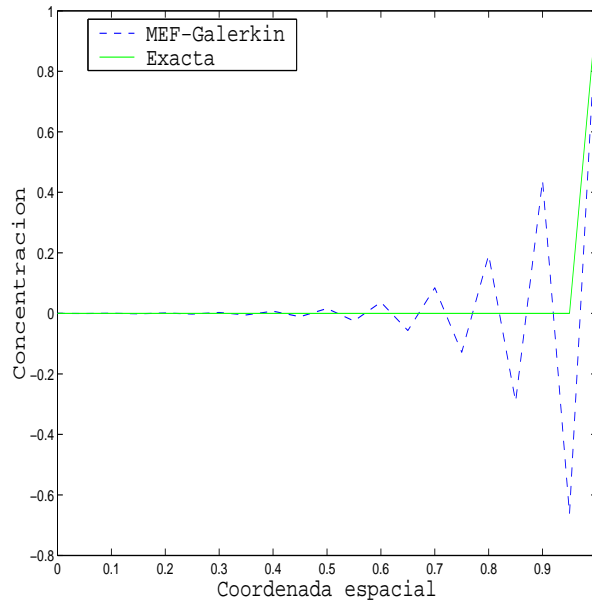


Figura 7. Problema de transporte empleando la ecuación de Cattaneo definido por $k = 1$, $\tau = 0,01$, $a = 0,975a_c$. Solución analítica frente a la numérica que proporciona el MEF con una ponderación tipo Galerkin y 20 elementos de dos nodos.

4.2.2. Segundo grupo de figuras: Tiempo de relajación medio

Este grupo de tres figuras viene caracterizado por $\tau = 1$. En consecuencia, la velocidad crítica será $a_c = \sqrt{k/\tau} = 1$ y la velocidad límite para la cual este esquema numérico proporciona una solución estable según los requerimientos (32) es $a = \sqrt{k/\tau} - h/(4\tau) = 0,9875$. Por lo tanto debe ser $a < 0,9875a_c$ y en consecuencia la solución que proporciona este esquema numérico será admisible para el 98.75 % de los valores posibles de a .

Al igual que en el grupo anterior se presentan tres figuras que se consideran representativas del comportamiento de la solución del problema. La primera de ellas —figura 8— será la solución del problema para una velocidad de $a = 0,97$. La figura 9 muestra el comportamiento de la solución para una velocidad $a = 0,9875$ que es el límite impuesto por la condición de estabilidad (32). Por último, se presenta la figura 10 donde la solución ya es oscilante. El valor de la velocidad elegida en este caso es $a = 0,995$.

4.2.3. Conclusiones extraídas de los ejemplos numéricos

La primera conclusión que podemos extraer a la vista de los resultados numéricos obtenidos es que alejarnos de la ley de Fick —es decir, aumentar τ — estabiliza el problema por el siguiente motivo: Aunque al aumentar τ estemos haciendo el problema más convectivo, a cambio surge una cota superior para la velocidad decreciente con τ . Además, hemos visto que al utilizar la ecuación de Cattaneo para el problema de convección-difusión podemos obtener la solución del problema de modo estable —incluso utilizando la ponderación más sencilla posible para el

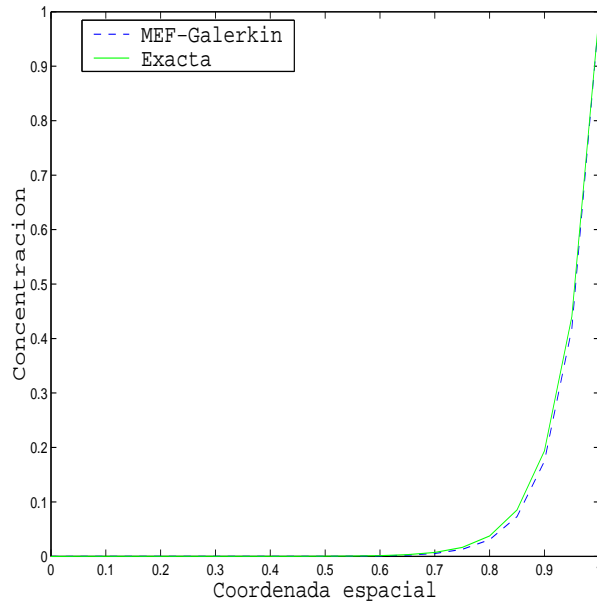


Figura 8. Problema de transporte empleando la ecuación de Cattaneo definido por $k = 1$, $\tau = 1$, $a = 0,97a_c$. Solución analítica frente a la numérica que proporciona el MEF con una ponderación tipo Galerkin y 20 elementos de dos nodos.

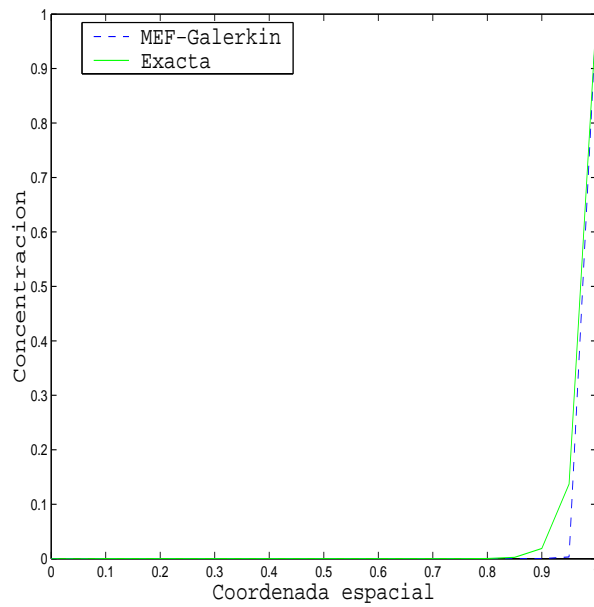


Figura 9. Problema de transporte empleando la ecuación de Cattaneo definido por $k = 1$, $\tau = 1$, $a = 0,9875a_c$. Solución analítica frente a la numérica que proporciona el MEF con una ponderación tipo Galerkin y 20 elementos de dos nodos.

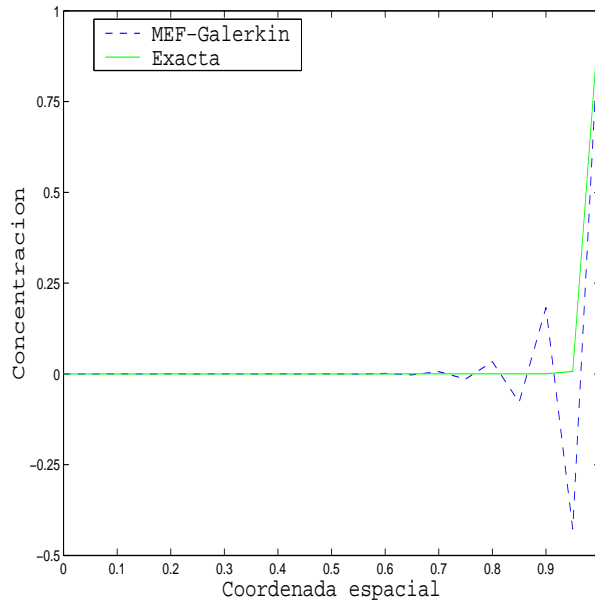


Figura 10. Problema de transporte empleando la ecuación de Cattaneo definido por $k = 1$, $\tau = 1$, $a = 0,995a_c$. Solución analítica frente a la numérica que proporciona el MEF con una ponderación tipo Galerkin y 20 elementos de dos nodos.

MEF, que es la formulación tipo Galerkin— prácticamente para todos los valores posibles de la velocidad. En consecuencia, desde un punto de vista práctico, hemos estabilizado el problema, pues el rango de valores de la velocidad para los cuales la solución de (17) es inestable es totalmente despreciable, aún para valores muy pequeños del tiempo de relajación τ .

Además, debemos tener en cuenta que lo realmente importante no es que el método numérico nos dé o no la solución correcta para cualquier valor de los parámetros. Lo realmente importante es que una vez introducida la ley de Cattaneo el problema tiene sentido porque la velocidad para el transporte de masa por difusión está acotada y que cuando un esquema numérico falla conocemos las causas de su mal funcionamiento. Estas causas provienen directamente de la naturaleza ondulatoria del problema y están relacionadas con la velocidad a la que se propagan las ondas de difusión. Para comprender esto podríamos decir —aunque abusando del lenguaje— que tenemos que emplear un esquema numérico que pueda “captar” las ondas de difusión.

5. CONCLUSIONES

En este artículo se propone un método de estabilización para la ecuación del transporte por convección–difusión esencialmente diferente a los empleados hasta el momento. La idea es substituir la ecuación constitutiva del problema, puesto que conduce a la paradoja del transporte por difusión a velocidad no acotada. La nueva ecuación que emplearemos será la ecuación de Cattaneo. Según esta ecuación, el proceso de difusión es de naturaleza ondulatoria y, por tanto, la masa se transporta a una velocidad acotada. A lo largo del artículo se analizan las consecuencias de emplear la ecuación de Cattaneo en lugar de la ecuación de Fick. En primer

lugar, observamos que, para cualquier problema, existe una velocidad a partir de la cual el problema de convección–difusión no se puede tratar como un problema de contorno y hay que formularlo como un problema de valores iniciales. Este resultado es también muy satisfactorio, ya que intuitivamente se comprende que el problema de convección–difusión es, en esencia, un problema de valores iniciales. Además, este cambio de naturaleza en el problema nos recuerda al que se produce en la propagación de ondas de gravedad en un fluido en lámina libre o en la transmisión de ondas sonoras en un fluido.

Otro aspecto que resulta esencial es el mencionado cambio de naturaleza del problema. Hemos pasado de un problema parabólico sin una interpretación clara, a un problema ondulatorio mucho más intuitivo. Esta capacidad para reflexionar sobre el problema en términos de ondas nos ha permitido desarrollar unas condiciones de estabilidad para el problema.

Finalmente, se ha dedicado la última sección del artículo al análisis de los resultados numéricos que se obtienen al introducir la ecuación de Cattaneo en el problema del transporte. Estos ejemplos han servido para constatar la validez de las condiciones de estabilidad desarrolladas y para demostrar que el tiempo de relajación es un parámetro estabilizador del problema.

En consecuencia, como conclusión final se puede decir que al substituir la ecuación de Fick por la ecuación de Cattaneo no sólo llegamos a un problema con un mayor sentido físico, sino que, además, es un problema estable prácticamente para cualquier valor de la velocidad. Además, tiene la ventaja de tener unas condiciones de estabilidad muy sencillas que nos permiten calcular el tamaño de malla que debemos emplear.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el proyecto SGPICT SXID de la Xunta de Galicia (Proyecto PGDIT01PXI11802PR) y el proyecto de Investigación Científica y Desarrollo Tecnológico del Ministerio de Ciencia y Tecnología (DPI2002-00297).

REFERENCIAS

- [1] O.C. Zienkiewicz y R.L. Taylor, *The finite element method: Fluid dynamics*, Butterworth–Heineman, Vol. III (2000).
- [2] A.N. Brooks y T.J.R. Hughes, Streamline–upwind/Petrov–Galerkin formulations for convective dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **32**, 199-259 (1982).
- [3] R. Codina, A comparison of some finite element methods for solving the diffusion–convection–reaction equation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **156**, 185-210 (1998).
- [4] J.C. Heinrich, On quadratic elements in finite element solutions of steady–state convection–diffusion equations, *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, **15**, 1041-1052 (1980).
- [5] J.C. Heinrich y O.C. Zienkiewicz, The finite element method and upwinding techniques in the numerical solution of convective dominated flow problems, *Finite Element Methods for*

- Convection Dominated Flows. American Society of Numerical Engineering*, **34**, 105-136 (1979).
- [6] T.J.R. Hughes, Multiscale phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **127**, 387-401 (1995).
- [7] J. Donea, B. Roig y A. Huerta, High-order accurate time-stepping schemes for convection-diffusion problems, *Computer Methods and Applied Mechanics in Engineering*, **182**, 249-275 (2000).
- [8] J.C. Heinrich y O.C. Ziekiewicz, Quadratic finite element schemes for two-dimensional convective transport problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **11**, 1831-1844 (1977).
- [9] E. Oñate, Derivation of stabilized equations for numerical solution of advective-diffusive transport and fluid flow problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **151**, 233-265 (1998).
- [10] E. Oñate y M. Manzan, A general procedure for deriving stabilized space-time finite element methods for advective-diffusive problems, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **31**, 203-221 (1999).
- [11] H. Gómez, Una nueva formulación para el problema del transporte por convección-difusión, *Proyecto Técnico ETSICCP de la Universidad de A Coruña*, (2003)
- [12] M.C. Cattaneo, Sur Une Forme de L'équation de la Chaleur Éliminant le Paradoxe D'une Propagation Instantanéé, *Comptes Rendus De L'Académie des Sciences-Series I-Mathematics*, **247**, 431-433 (1958).
- [13] P. Vernotte, Les paradoxes de la théorie continue de l'équation de la chaleur, *Comptes Rendus De L'Académie des Sciences-Series I-Mathematics*, **246**, 3154-3155, (1958).
- [14] R. Courant y D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, Jonh Wiley & Sons, Vol II, (1989).
- [15] E. Zauderer, *Partial differential equations of applied mathematics*, John Wiley & Sons (1989).