Un método numérico conservativo para la ecuación de convección-difusión en un dominio bidimensional.

Ángel Balaguer(1), Carlos Conde(2), José A. López(1), Vicent Martínez(1).

(1) Departament de Matemàtiques, Universitat Jaume I, Campus Penyeta Roja, 12071 Castellón.
(2) Dep. de Matemática Aplicada y Métodos informáticos, Univ. Politécnica de Madrid, ETSI Minas, C/. Rios Rosas, 21, 28003 Madrid.

ABSTRACT.

La precisión de las aproximaciones numéricas basadas en el método de volúmenes finitos para la resolución de la ecuación de convección-difusión en un dominio bidimensional se encuentra directamente relacionada con el tipo de aproximación integral utilizada en la superficie y en el contorno de los volúmenes de control. En este trabajo se analizan los resultados obtenidos con distintas fórmulas numéricas de integración, en un mallado rectangular, y se propone una técnica que mejora la precisión de las soluciones obtenidas con una cuadratura gaussiana.

1. INTRODUCCIÓN.

La ecuación de convección-difusión es usada en distintos campos científicos, permitiendo por ejemplo la simulación de problemas de transporte de contaminantes por medio del agua (vease [1]) o el movimiento de algunos gases en la atmósfera. Sin embargo los métodos numéricos de resolución se enfrentan con el problema de una inaceptable difusión numérica y/o falsas oscilaciones que pueden aparecer en la solución cuando el número de Peclet del problema es elevado. La difusión numérica es común en los esquemas de primer orden basados en los métodos de elementos finitos y diferencias finitas mientras que las oscilaciones numéricas suelen aparecer en esquemas de segundo orden (vease [4]).

Recientemente se ha extendido la aplicación del método de volúmenes finitos en la resolución de la ecuación de convección-difusión en un dominio bidimensional. Dichos esquemas numéricos presentan como principal ventaja el hecho de ser conservativos. Sin embargo su nivel de precisión depende de las técnicas de interpolación e integración utilizadas en cada volumen de control. En [3] se muestran los errores numéricos que aparecen en una aproximación centrada con un único nodo de integración y en un mallado triangular, cuando se elige un número de Peclet superior a 5 y se escoge un paso de tiempo adecuado para que el número de Courant sea igual a 1. Por otro lado esquemas de tipo upwind de primer orden conducen a resultados poco satisfactorios (vease [2]).

En este trabajo se presentan los detalles de un método de resolución de la ecuación de convección-difusión en un dominio bidimensional, basado en un esquema conservativo que utiliza el método de volúmenes finitos para la discretización espacial y temporal. Se utiliza un mallado formado por rectángulos y se comparan los resultados obtenidos con distintas fórmulas numéricas de integración en un ejemplo con condición inicial no nula.

2. DISCRETIZACIÓN ESPACIAL Y TEMPORAL.

Se trata de obtener una aproximación numérica a la solución del problema asociado con la ecuación de convección-diffusión en un dominio bidimensional:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot u) - \vec{\nabla} \cdot \left(\mathbf{K} \cdot \vec{\nabla} u \right) = 0 \quad \text{en} \quad \Omega \times]0, T[\tag{1}$$

$$u(x, y, 0) = c_0(x, y) \quad \text{en} \quad int(\Omega) \tag{2}$$

$$u(x, y, t) = c^D(x, y, t) \quad \text{en} \quad \delta\Omega_1 \times]0, T[\tag{3}$$

$$\mathbf{K} \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{en} \quad \delta\Omega_2 \times]0, T[\tag{4}$$

donde $u(x, y, t)$ es la función desconocida, $\vec{v}(x, y, t)$ se define para modelizar el transporte por convección, $\mathbf{K}(x, y, t)$ es representación matemática del tensor de dispersión:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix}$$

$\Omega \subset \mathcal{R}^2$ es el dominio espacial siendo $\delta\Omega = \delta\Omega_1 \cup \delta\Omega_2$ su frontera, $\vec{n}$ el vector normal exterior a $\delta\Omega$, $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$ y c_0, c^D son conocidos y dados por las condiciones inicial y frontera de tipo Dirichlet respectivamente.

En este trabajo se supone que Ω es un rectángulo. Sobre Ω se define entonces un mallado formado por rectángulos cuyos lados tienen una longitud igual a $\triangle x$ en sentido horizontal y $\triangle y$ en vertical (vease la figura I). Cada rectángulo se divide en cuatro sub-rectángulos utilizando las lineas que unen el punto medio de cada uno de sus lados con el centro del rectángulo. A cada vértice $\mathbf{x}_i$ de cada rectángulo, que a su vez es un nodo de los métodos numéricos, se le asocia entonces un volumen de control definido como la unión de los sub-rectángulos que lo tienen como vértice (figura II.).

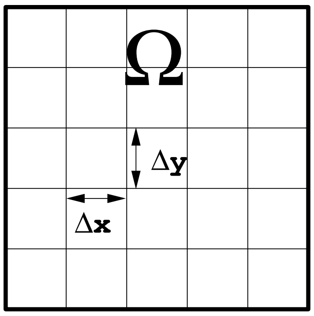

Figura I. Mallado utilizado

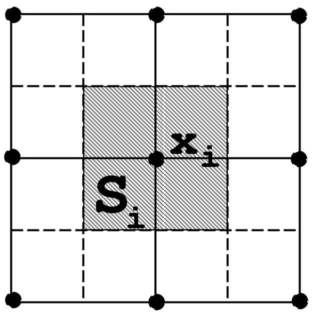

Figura II. Volumen de control

Sobre el dominio temporal, $]0, T[$, se definen una serie de valores discretos $t^n = n \cdot \triangle t$ $n = 0, \ldots, NT$ con $t^{NT} = T$. Los esquemas numéricos se basan en la integración de (1) en cada volumen de control y en cada intervalo de tiempo delimitado por dos valores distintos de la discretización temporal. El uso del teorema de la divergencia posibilita la transformación de integrales sobre todo el volumen de control que integran los términos convectivo y difusivo de la ecuación, en integrales sobre la frontera de cada volumen:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{S_i} \frac{\partial u}{\partial t}\, d\Omega\ dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\delta S_i} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{v}) \cdot u\ d(\delta\Omega)\ dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\delta S_i} (\vec{\mu}_i \cdot \mathbf{K}) \cdot \vec{\nabla} u\ d(\delta\Omega)\ dt = 0 \quad (5)$$
$$\forall i = 1, \ldots N, \quad \forall n = 0, \ldots, NT-1$$

S_i representa el volumen de control asociado a un vértice $\mathbf{x}_i$, δS_i la frontera de S_i, $\vec{\mu}_i(x,y)$ es el vector normal exterior unitario en δS_i y N es el número de vértices en los cuales no se considera una condición de frontera de tipo Dirichlet. La integración en volúmenes de control asociados a vértices $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i)$ incluidos en $\delta\Omega_1$ se omite y sus ecuaciones resultantes son remplazadas por:

$$u(x_i, y_i, t^{n+1}) \ = \ c^D(x_i, y_i, t^{n+1})$$

En este trabajo las integrales respecto a la variable t se aproximan por medio de una regla del trapecio simple. De este modo (5) queda expresado como:

$$\int_{S_i} u^{n+1}\ d\Omega \ + \ \frac{1}{2} \triangle t\ \Delta_i^{n+1} \ = \int_{S_i} u^n\ d\Omega \ - \ \frac{1}{2} \triangle t\ \Delta_i^n \quad (6)$$
$$\forall i = 1, \ldots, N, \qquad n = 0, \ldots, NT-1$$

siendo:

$$\Delta_i^n \ = \ \int_{\delta S_i} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{v}^n) \cdot u^n\ d(\delta\Omega) \ - \ \int_{\delta S_i} (\vec{\mu}_i \cdot \mathbf{K}^n) \cdot \vec{\nabla} u^n\ d(\delta\Omega) \quad (7)$$

Los superíndices "n" denotan los valores de cada función en el instante t^n. Faltan por aproximar las integrales espaciales que aparecen en (6) y (7) en función del valor de la solución en los nodos. Estas integrales son de dos tipos:
1) Integrales sobre toda la superficie del volumen de control.
2) Integrales sobre la frontera de cada S_i.

Las dos secciones que siguen muestran las técnica numérica utilizada para estas aproximaciones.

3. INTEGRALES SOBRE LA SUPERFICIE.

Si se sigue el procedimiento desarrollado en [5] las integrales sobre la superficie de S_i se aproximan de esta forma:

$$\int_{S_i} u^n\ d\Omega \ \approx \ Area(S_i) \cdot u^n(x_i, y_i) \quad \forall i = 1, \ldots, N, \quad \forall n = 0, \ldots, NT \quad (8)$$

siendo (x_i, y_i) las coordenadas del nodo $\mathbf{x}_i$.

Los resultados obtenidos con este tipo de aproximación se muestran sin embargo bastante imprecisos, provocando la presencia de falsas oscilaciones en la solución numérica obtenida. Para evitar este problema, en [3] y para el caso de un mallado triangular, se consideran los subdominios resultantes de la intersección del volumen de control con cada elemento del mallado y se utilizan aproximaciones en cada uno de estos subdominios. Trasladado el procedimiento a un mallado rectangular, en cada S_i se definen los subdominios
$S_{i,j}$ $j = 1, \ldots, NS$ ($NS = 1$ o $NS = 2$ si S_i intersecta con la frontera de Ω en un lado o en dos, y $NS = 4$ en otro caso) formados por la intersección de S_i con cada uno de los rectángulos que contienen a $\mathbf{x}_i$. De este modo $S_i = S_{i,1} \cup \ldots \cup S_{i,NS}$ y

$$\int_{S_i} u^n \; d\Omega = \sum_{j=1}^{NS} \left(\int_{S_{i,j}} u^n \; d\Omega \right) \; \approx \; \sum_{j=1}^{NS} \; (\text{Area}(S_{i,j}) \cdot u^n(\psi_{i,j}, \eta_{i,j})) \tag{9}$$

siendo $(\psi_{i,j}, \eta_{i,j})$ el punto medio $S_{i,j}$. El valor de u^n en dicho punto se calcula mediante una simple interpolación, en función de los valores de u^n en cada uno de los vértices del rectángulo al que pertenece. Dado que el polinomio interpolante es de la forma:
$a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot y + a_3 \cdot x \cdot y$, con a_i $i = 0, \ldots, 3$ constantes, la fórmula de cuadratura utilizada en (9) es exacta y hace innecesario el uso de fórmulas de cuadratura gaussiana con mas nodos de integración.

En los ejemplos numéricos de la última sección de este trabajo se puede comprobar la mejora experimentada con este tipo de aproximación respecto a (8). Sin embargo todavía no se alcanza el nivel de precisión deseado para problemas con números de Peclet en la dirección del eje x superiores a 5.

Con el fin de evitar falsas oscilaciones y mejorar la precisión obtenida con (9), manteniendo el tipo de interpolación descrita anteriormente en cada uno de los rectángulos que contienen al vértice al que se le asocia S_i, se propone utilizar una fórmula de cuadratura gaussiana sobre todo el volumen de control con cuatro nodos de integración:

$$\int_{S_i} \; u^n \; d\Omega \; \approx \; \sum_{l=1}^{4} \; \gamma_{i,l} \cdot u^n(\alpha_{i,l}, \beta_{i,l}) \tag{10}$$

donde $\gamma_{i,l}$ son los coeficientes de la cuadratura numérica y $(\alpha_{i,l}, \beta_{i,l})$ las coordenadas de los nodos de integración. Estos nodos pertenecen al interior del volumen de control.

Los resultados numéricos obtenidos con la aproximación (10) se comparan en la última sección del presente trabajo con los obtenidos mediante la siguiente aproximación:

$$\int_{S_i} \; u^n \; d\Omega \; \approx \; \sum_{l=1}^{4} \; \gamma_{i,l} \cdot u^n(\sigma_{i,l}, \omega_{i,l}) \tag{11}$$

donde $\gamma_{i,l}$ son los coeficientes de la fórmula de cuadratura gaussiana (10) y $(\sigma_{i,l}, \omega_{i,l})$ las coordenadas de los cuatro vértices del volumen de control S_i.

4. INTEGRALES SOBRE LA FRONTERA.

Se tienen que aproximar dos tipos de integrales sobre la frontera del volumen de control, las cuales se corresponden con la integración respectiva de los términos convectivo y difusivo. Dicha frontera esta formada por cuatro lados en cada uno de los cuales el vector normal exterior es constante. A continuación se van a analizar las técnicas de integración utilizadas en cada uno de dichos segmentos, denotados por $\delta S_i^j \; j = 1, \ldots, 4$.

La integración del término convectivo se efectua con una fórmula de cuadratura gaussiana con uno o dos nodos de integración:

$$\int_{\delta S_i^j} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{v}^n) \cdot u^n \; d(\delta\Omega) \; \approx \; \sum_{l=1}^{NN} \rho_{i,l}^j \cdot \left(\vec{\mu}_i^j \cdot \vec{v}^n(\varphi_{i,l}^j, \xi_{i,l}^j)\right) \cdot u^n(\varphi_{i,l}^j, \xi_{i,l}^j) \tag{12}$$

($NN = 1$ o $NN = 2$), siendo $\rho_{i,l}^j$ los coeficientes, $(\varphi_{i,l}^j, \xi_{i,l}^j)$ los nodos de la fórmula de cuadratura y $\vec{\mu}_i^j$ la normal exterior unitaria a δS_i^j. La evaluación de u^n en dichos nodos se efectua mediante una interpolación basada en el valor de u^n en los cuatro vértices del rectángulo al que pertenece el nodo.

Siguiendo el procedimiento de la sección precedente, la aproximación (12) puede ser sustituida por la que sigue:

$$\int_{\delta S_i^j} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{v}^n) \cdot u^n \; d(\delta\Omega) \; \approx \; \sum_{l=1}^{2} \rho_{i,l}^j \cdot \left(\vec{\mu}_i^j \cdot \vec{v}^n(\chi_{i,l}^j, \nu_{i,l}^j)\right) \cdot u^n(\chi_{i,l}^j, \nu_{i,l}^j) \tag{13}$$

siendo $(\chi_{i,l}^j, \nu_{i,l}^j)$ las coordenadas de cada uno de los dos extremos del segmento δS_i^j.

En la aproximación del término difusivo debe distinguirse entre lados que pertenecen al interior y a la frontera de Ω. La integración en estos últimos puede omitirse debido a la condición de tipo Neumann homogénea supuesta. De esta forma el estudio que se realiza se limita al caso en que $\delta S_i^j \subset int(\Omega)$. A su vez se puede expresar:

$$\begin{aligned}
\int_{\delta S_i^j} (\vec{\mu}_i \cdot \mathbf{K}^n) \cdot \vec{\nabla} u^n \; d(\delta\Omega) \; &\approx \; \int_{\delta S_i^j} (\mu_{i,1} \cdot K_{11}^n + \mu_{i,2} \cdot K_{21}^n) \; \frac{\partial u^n}{\partial x} \; d(\delta\Omega) \\
&+ \; \int_{\delta S_i^j} (\mu_{i,1} \cdot K_{12}^n + \mu_{i,2} \cdot K_{22}^n) \; \frac{\partial u^n}{\partial y} \; d(\delta\Omega)
\end{aligned}$$

Donde $\vec{\mu}_i = (\mu_{i,1}, \mu_{i,2})$. Estas dos integrales se aproximan por fórmulas de cuadratura gaussiana similares a (12) y (13). En este caso la evaluación de $\frac{\partial u^n}{\partial x}$ y $\frac{\partial u^n}{\partial y}$ en los nodos de la fórmula de cuadratura se aproxima mediante el valor de la derivada del polinomio interpolante, basado en el valor de u^n en los cuatro vértices del rectángulo de la malla, al que pertenece el nodo.

5. EJEMPLOS.

En los ejemplos se supone un transporte convectivo horizontal y a lo largo del eje x, con velocidad constante. De este modo $\vec{v}(x,y) = (v_x, 0)\ \forall (x,y) \in \Omega$, siendo v_x una constante. Además se considera un tensor de dispersión diagonal, es decir con $K_{12} = K_{21} = 0$. La condición inicial se basa en una curva gaussiana que puede ser expresada de esta forma:

$$c_{T^{in}}(x,y) \;=\; \frac{1}{4\cdot\pi\cdot T^{in}\cdot\sqrt{K_{11}\cdot K_{22}}}\ \exp\left(-\frac{(x - v_x\cdot T^{in})^2}{4\cdot K_{11}\cdot T^{in}} - \frac{y^2}{4\cdot K_{22}\cdot T^{in}}\right)$$
$$0 < T^{in} < T$$

En este trabajo se considera $T^{in} = 2$. Además se suponen condiciones de tipo Neumann homogéneas en toda la frontera de Ω.

Las soluciones numéricas que a continuación se presentan han sido obtenidas para un valor de $t = 10$. La solución analítica es de este modo conocida y está dada por $u(x,y,10) = c_{12}(x,y)$. Por simplicidad se elige $\triangle y = \triangle x$.

En la figura 1. se comparan los resultados obtenidos con las fórmulas de integración (8) y (12) con $NN = 1$, para distintos números de Peclet, $Pe_x = \frac{v_x\cdot\triangle x}{K_{11}}$, del problema. Las soluciones se muestran en los puntos con $y = 0$. Puede observarse la presencia de falsas oscilaciones numéricas, las cuales van disminuyendo a medida que Pe_x se hace más pequeño, aunque sin alcanzar el nivel de precisión deseado cuando Pe_x es superior a 5. En esta figura se ha considerado un número de Courant, $Cr_x = \frac{v_x\cdot\triangle t}{\triangle x}$, igual a $\frac{2}{5}$ dado que las oscilaciones numéricas se incrementan a medida que Cr_x aumenta y se acerca a 1. Si se utilizan más nodos en la integración sobre la frontera manteniendo (8) los resultados no presentan importantes variaciones.

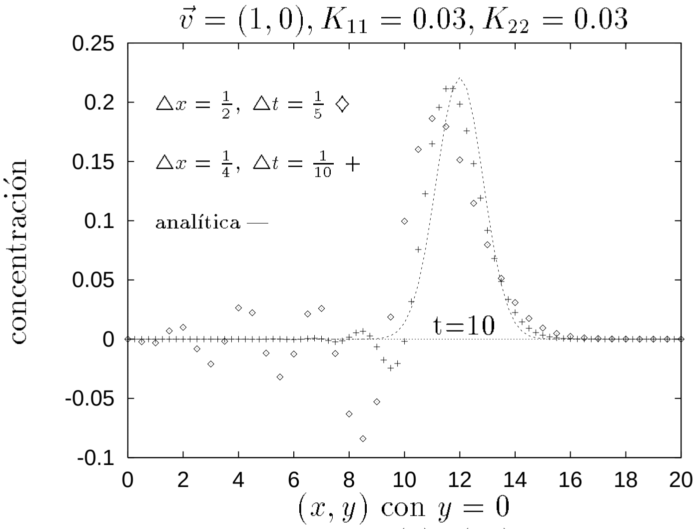

figura 1. Aproximaciones (8)+(12) con NN=1

Si se usan las fórmulas de integración (9) + (12) con $NN = 1$ se mejora el grado de precisión de las soluciones aunque las oscilaciones numéricas se siguen manifestanto con una especial importancia cuando $Pe_x > 10$, alcanzando una mayor significación cuando se reemplaza (12) con $NN = 1$ por (13) o (12) con dos nodos. Este es el motivo de la utilización de (12) con un único nodo de integración en la frontera de cada volumen de control. En los casos en que $Pe_x \leq 10$ pero $Cr_x = 1$ pueden también aparecer oscilaciones en la solución tal y como se aprecia en la figura 2. Eligiendo $\triangle t$ tal que $Cr_x < 0.5$ con Pe_x cercano a 10 se pueden evitar las oscilaciones, aunque todavía no se alcanza el grado de precisión deseado (figura 2.).

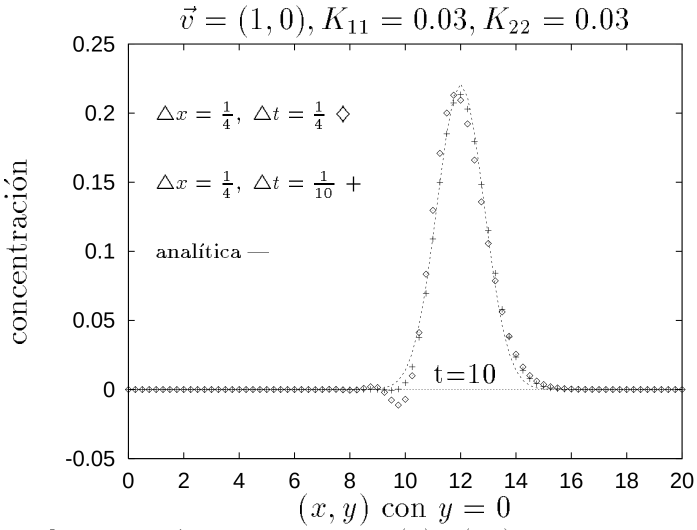

figura 2. Aproximaciones (9)+(12) con NN=1

Si se utiliza (10) para la integración sobre la superficie, el comportamiento de las soluciones numéricas es el mismo que el analizado en el esquema anterior. Sin embargo con este tipo de integración el grado de precisión de las soluciones numéricas experimenta una sustancial mejoría, puesta en relieve al efectuar un análisis de los valores en el pico de la curva gaussiana para distintos valores de y (vease figura 3.). A diferencia del caso anterior en este caso es necesario el uso de 2 nodos de integración en (12) para mejorar los resultados obtenidos.

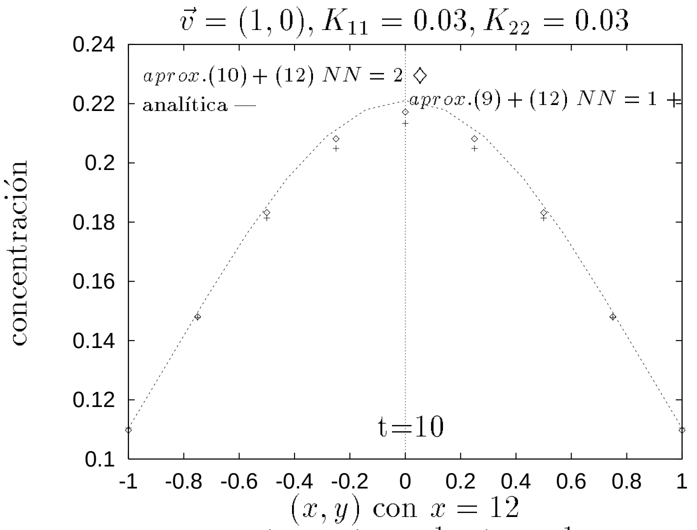

figura 3. $\triangle x = \triangle y = \frac{1}{4},\ \triangle t = \frac{1}{10}$

Lo comentado para las anteriores aproximaciones integrales de superficie, en cambio, no es valido para las soluciones obtenidas con (11). Los mejores resultados se obtienen ahora para valores de $Cr_x = 1$ y las oscilaciones numéricas son menos significativas que con las anteriores aproximaciones. Además el nivel de precisión del método es aceptable, especialmente si se observa el valor en el pico de la curva cuando el número de Peclet se encuentra cercano a 10, tal y como se aprecia en la figura 4, en la cual se ha utilizado la aproximación (13) para integrar en la frontera. En este caso se pierde bastante precisión si se usa (12) con 1 o 2 nodos de integración.

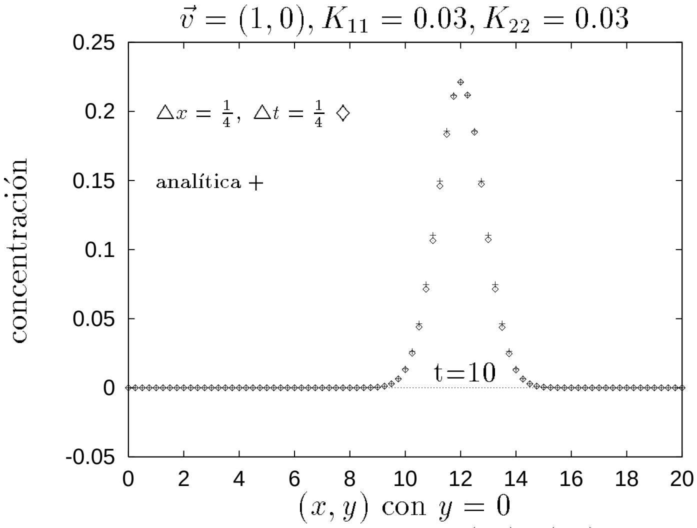

figura 4. Aproximaciones (11)+(13)

6. CONCLUSIONES.

Un esquema numérico conservativo basado en el método de volúmenes finitos ha sido diseñado para resolver la ecuación de convección-difusión en un dominio bidimensional. Los volúmenes de control han sido definidos sobre un mallado formado por rectángulos. Una regla del trapecio simple ha permitido la aproximación de las integrales de tiempo. Para las integrales espaciales se han propuesto distintas técnicas de integración sobre la superficie de cada volumen de control y sobre la frontera. Experimentos numéricos, con una condición inicial basada en una curva gaussiana, permiten concluir que el mejor esquema en términos de precisión y oscilaciones menos significativas con números de Peclet cercanos a 10, es el que combina una fórmula de cuadratura que tiene por nodos los extremos de las aristas del volumen de control para las integrales sobre su frontera, y los cuatro vértices del volumen para integrar sobre su superficie. Se puede también destacar la posibidad de tomar con este esquema elegido, números de Courant iguales a la unidad, lo cual permite elegir incrementos de tiempo mayores.

Agradecimientos.

Ángel Balaguer Beser agradece a la Consellería de Cultura, Educació y Ciencia de la Generalitat Valenciana la concesión de una beca FPI. Carlos Conde Lázaro agradece a ENRESA el apoyo recibido a través del contrato núm. 0700442, dentro del cual se enmarca su participación en este trabajo.

Bibliografía.

[1] Balaguer A., Conde C., López J.A., Martínez V. Implementación de un método C.N. trapezoidal de volúmenes finitos para la simulación numérica del proceso de migración unidimensional de una cadena radiactiva. En Métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería. Vol 11, N°1, pp 71-90 (1995)
[2] Balaguer A., Conde C., López J.A., Martínez V. Un modelo numérico bidimensional de transporte de residuos radiactivos. En Proceedings of XX reunión anual SNE. Córdoba, Spain, (en prensa).
[3] Balaguer A., Conde C., Hidalgo A., López J.A., Martínez V. Finite Volume methods for two-dimensional groundwater pollutant transport. En Water Pollution III: Modelling, Measuring and Prediction. (L.C. Wrobel y P. Latinopoulos eds.) Computational Mechanics Publications. (1995).
[4] Gray W.G., Pinder G.F. An analysis of the numerical solution of the transport equation. Water resources research, 12(3), pp. 547-555 (1976).
[5] Larrouturou B. Numerical simulation of combustion phenomena. En Simulación Numérica en Física e Ingeniería, (M. Bernadou y F. Michavila eds.) Ed. ETSI Minas de Madrid (1988).