

# Código P4\_Adveccion\_Difusion2D

## Solución numérica de la ecuación de advección-difusión en dos dimensiones

Saúl Piedra y James Pérez

Considere una función  $\phi(x, y)$  definida en el dominio  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 \leq y \leq 1$  que satisface la ecuación

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S, \quad (1)$$

sujeta a las condiciones de frontera

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(0, y) = \frac{\partial \phi}{\partial x}(1, y) = 0, \quad 0 \leq y \leq 1, \quad (2)$$

$$\phi(x, 0) = 0, \quad \phi(x, 1) = 1, \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (3)$$

Considere que el campo de velocidades corresponde a un vórtice cuyas componentes están definidas por

$$u(x, y) = -\sin(\pi x) \cos(\pi y), \quad v(x, y) = \cos(\pi x) \sin(\pi y), \quad (4)$$

y que se muestra en la Figura 1.

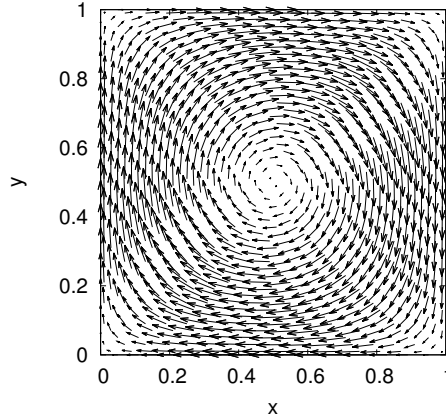


Figure 1: Campo de velocidades impuesto para resolver advección-difusión en dos dimensiones.

Para la solución del presente problema, se requiere revisar la discretización mediante el método de volumen finito de la ecuación general de advección difusión:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S, \quad (5)$$

Recordando que el método de Volumen Finito consiste en aproximar la solución de la Ecuación Diferencial integrándola en cada uno de los volúmenes de control del dominio numérico. Para

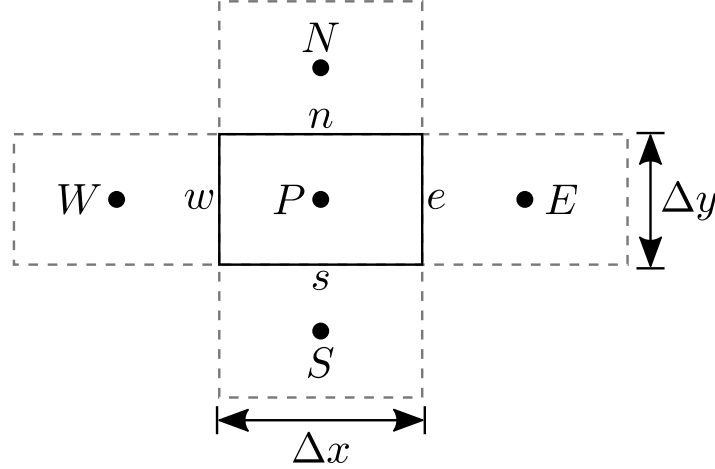


Figure 2: Notación empleada para los volúmenes de control del dominio numérico.

realizar dicho análisis se considerará la notación mostrada en la Figura 2 para cada uno de los volúmenes de control.

Las letras  $N$ ,  $S$ ,  $E$  y  $W$  (mayúsculas) representan los centros de los volúmenes norte, sur, este y oeste, respectivamente, del volumen central  $P$ ; las letras minúsculas se emplean para denotar el punto central de las respectivas fronteras del volumen central, cuyo tamaño es  $\Delta V = \Delta x \Delta y$ .

Con la notación anterior se procederá a integrar cada uno de los términos de la ecuación general de advección-difusión.

Término temporal:

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV \approx \frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \Delta V, \quad (6)$$

donde  $\phi_P$  es el valor de la variable dependiente en el punto  $P$  en el instante de tiempo actual, en tanto  $\phi_P^0$  se refiere al instante de tiempo anterior. Una notación similar se usará en las siguientes aproximaciones.

Para el término convectivo, la integral de volumen puede convertirse en una integral de superficie mediante la aplicación del *Teorema de Gauss*:

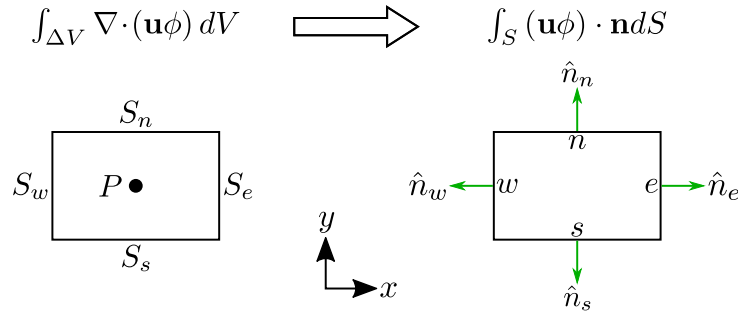


Figure 3: Aplicación del teorema de Gauss para el término convectivo.

En la Figura 3,  $S_n$ ,  $S_s$ ,  $S_e$  y  $S_w$  son las áreas superficiales de las respectivas fronteras del volumen de control de interés. Elijiendo que el vector normal  $\mathbf{n}$  *siempre apunta hacia afuera* del volumen de control, es fácil notar que

$$\hat{n}_e = \hat{\mathbf{i}}, \quad \hat{n}_w = -\hat{\mathbf{i}}, \quad \hat{n}_n = \hat{\mathbf{j}}, \quad \hat{n}_s = -\hat{\mathbf{j}}. \quad (7)$$

Para un flujo bidimensional  $\mathbf{u} = u\hat{\mathbf{i}} + v\hat{\mathbf{j}}$ , el término convectivo puede aproximarse mediante

$$\begin{aligned}\int_S (\mathbf{u}\phi) \cdot \mathbf{n} dS &\approx (u\phi\hat{\mathbf{i}} + v\phi\hat{\mathbf{j}})_e \cdot \hat{n}_e S_e + (u\phi\hat{\mathbf{i}} + v\phi\hat{\mathbf{j}})_w \cdot \hat{n}_w S_w \\ &\quad + (u\phi\hat{\mathbf{i}} + v\phi\hat{\mathbf{j}})_n \cdot \hat{n}_n S_n + (u\phi\hat{\mathbf{i}} + v\phi\hat{\mathbf{j}})_s \cdot \hat{n}_s S_s \\ &= (u\phi\hat{\mathbf{i}} + v\phi\hat{\mathbf{j}})_e \cdot (\hat{\mathbf{i}}) S_e + (u\phi\hat{\mathbf{i}} + v\phi\hat{\mathbf{j}})_w \cdot (-\hat{\mathbf{i}}) S_w \\ &\quad + (u\phi\hat{\mathbf{i}} + v\phi\hat{\mathbf{j}})_n \cdot (\hat{\mathbf{j}}) S_n + (u\phi\hat{\mathbf{i}} + v\phi\hat{\mathbf{j}})_s \cdot (-\hat{\mathbf{j}}) S_s,\end{aligned}$$

que puede escribirse como

$$\int_S (\mathbf{u}\phi) \cdot \mathbf{n} dS \approx u_e \phi_e S_e - u_w \phi_w S_w + v_n \phi_n S_n - v_s \phi_s S_s. \quad (8)$$

En la ecuación anterior, los valores de la variable dependiente se encuentran localizados en las fronteras del volumen de control, pero a nosotros nos interesa conocer  $\phi$  en los centros del volumen central y sus vecinos, para lo cual se emplea el *esquema central*:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2}, \quad \phi_w = \frac{\phi_P + \phi_W}{2}, \quad \phi_n = \frac{\phi_N + \phi_P}{2}, \quad \phi_s = \frac{\phi_P + \phi_S}{2}, \quad (9)$$

con lo cual la Ecuación 8 puede reescribirse como

$$\begin{aligned}&u_e S_e \left( \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \right) - u_w S_w \left( \frac{\phi_P + \phi_W}{2} \right) + v_n S_n \left( \frac{\phi_N + \phi_P}{2} \right) - v_s S_s \left( \frac{\phi_P + \phi_S}{2} \right) \\ &= \frac{u_e S_e}{2} \phi_E - \frac{u_w S_w}{2} \phi_W + \frac{v_n S_n}{2} \phi_N - \frac{v_s S_s}{2} \phi_S + \frac{\phi_P}{2} (u_e S_e - u_w S_w + v_n S_n - v_s S_s).\end{aligned} \quad (10)$$

Si el fluido de interés es *incompresible*, la forma discreta de la ecuación de continuidad será

$$\int_{\Delta V} (\nabla \cdot \mathbf{u}) dV = \int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS \approx u_e S_e - u_w S_w + v_n S_n - v_s S_s = 0, \quad (11)$$

con lo cual, el término convectivo se aproxima mediante la ecuación

$$\int_S (\mathbf{u}\phi) \cdot \mathbf{n} dS \approx \frac{u_e S_e}{2} \phi_E - \frac{u_w S_w}{2} \phi_W + \frac{v_n S_n}{2} \phi_N - \frac{v_s S_s}{2} \phi_S. \quad (12)$$

La integral del término difusivo también se puede expresar como una integral de superficie mediante el teorema de Gauss:

$$\int_{\Delta V} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) dV = \int_S (\Gamma \nabla \phi) \cdot \mathbf{n} dS \approx \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e S_e - \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w S_w + \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n S_n - \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s S_s,$$

donde las derivadas de  $\phi$  en las fronteras del volumen de control se pueden calcular mediante *diferencias centrales*:

$$\begin{aligned}\left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e &\approx \Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x}, & \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w &\approx \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x}, \\ \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n &\approx \Gamma_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y}, & \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s &\approx \Gamma_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y}.\end{aligned}$$

Sustituyendo lo anterior en el término difusivo se obtiene

$$\int_S (\Gamma \nabla \phi) \cdot \mathbf{n} dS \approx \Gamma_e S_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - \Gamma_w S_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} + \Gamma_n S_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y} - \Gamma_s S_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y}. \quad (13)$$

Finalmente, el término fuente se puede aproximar considerando el valor promediado en el volumen de control

$$\int_{\Delta V} S dV \approx \bar{S}_P \Delta V. \quad (14)$$

Sustituyendo las Ecuaciones (6), (12), (13) y (14) en la Ecuación general (5) se obtiene la *forma discreta* de la ecuación de advección-difusión:

$$\begin{aligned} & \underbrace{\frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} \Delta V}_{\text{Término temporal}} + \underbrace{\frac{u_e S_e}{2} \phi_E - \frac{u_w S_w}{2} \phi_W + \frac{v_n S_n}{2} \phi_N - \frac{v_s S_s}{2} \phi_S}_{\text{Término convectivo}} = \\ & \underbrace{\Gamma_e S_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - \Gamma_w S_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} + \Gamma_n S_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y} - \Gamma_s S_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y}}_{\text{Término difusivo}} + \underbrace{\bar{S}_P \Delta V}_{\text{Término fuente}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Agrupando los términos que contienen a la variable dependiente, y luego de un poco de álgebra es posible expresar la ecuación anterior en una forma más condensada:

$$*a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_P, \quad (16)$$

donde los coeficientes en dicha ecuación son

$$*a_E = \frac{\Gamma_e S_e}{\Delta x} - \frac{u_e S_e}{2}; \quad a_W = \frac{\Gamma_w S_w}{\Delta x} + \frac{u_w S_w}{2}, \quad (17)$$

$$*a_N = \frac{\Gamma_n S_n}{\Delta y} - \frac{v_n S_n}{2}; \quad a_S = \frac{\Gamma_s S_s}{\Delta y} + \frac{v_s S_s}{2}, \quad (18)$$

$$*a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + \frac{\Delta V}{\Delta t}; \quad S_P = \bar{S}_P \Delta V + \phi_P^0 \frac{\Delta V}{\Delta t}. \quad (19)$$

Nótese que el sistema anterior es un *sistema de ecuaciones lineales*, de lo cual podemos decir que los métodos de bajo orden (volumen finito, diferencial finitas, elemento finito) consisten en convertir la ecuación diferencial parcial original (sea ésta lineal o no lineal) en un sistema de ecuaciones lineales cuyas variables son los valores de  $\phi$  en los puntos correspondientes al mallado elegido.

Para poder resolver la ecuación general de advección-difusión de manera aproximada, solamente hace falta implementar las condiciones de frontera de interés para nuestro problema particular, mismas que pueden corresponder a diferentes situaciones físicas, pero que pueden modelarse, de manera general, mediante tres distintos tipos, a saber, *Dirichlet*, *Neumann* o *Robin*. Por ahora solamente se describirán las primeras dos.

La Figura 4 muestra un volumen de control adyacente a la frontera este de un dominio numérico. Como se puede apreciar, debido al mallado, la variable  $\phi_E$  (en rojo) se encuentra fuera de nuestro dominio de interés, por lo cual debemos aproximar su valor utilizando la información conocida debida a las condiciones de frontera del problema.

### Condición del primer tipo o Dirichlet

La condición de frontera más sencilla, denominada del primer tipo, consiste en conocer el valor de la variable dependiente en la frontera, esto es,  $\phi_e$  es conocida de antemano. Viendo la Figura 4, es fácil notar que el valor en la frontera se puede calcular mediante un promedio

$$\phi_e \approx \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \Rightarrow \phi_E \approx 2\phi_e - \phi_P. \quad (20)$$

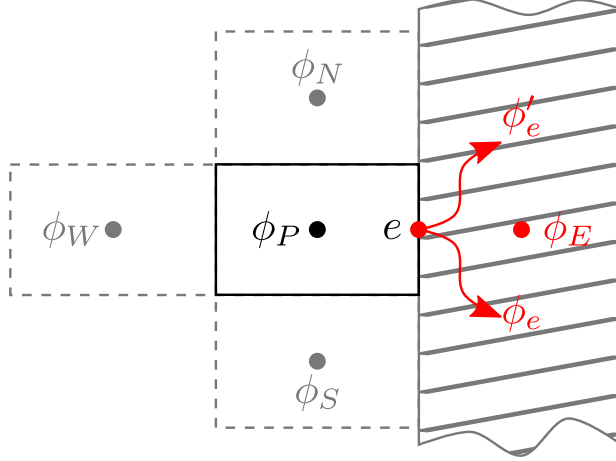


Figure 4: Volumen de control adyacente a la frontera este.

Sustituyendo la ecuación anterior en la Ecuación (16) se llega a

$$a_P \phi_P = a_E (2\phi_e - \phi_P) + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_P, \quad (21)$$

Simplificando es posible reescribir lo anterior como

$$(a_P + a_E) \phi_P = a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_P + 2a_E \phi_e. \quad (22)$$

Para efectos prácticos, la ecuación anterior se puede expresar de la forma

$$a_P^* \phi_P = a_E^* \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_P^*, \quad (23)$$

donde

$$a_P^* = a_P + a_E, \quad S_P^* = S_P + 2a_E \phi_e, \quad a_E^* = 0. \quad (24)$$

Nótese que la Ecuación (23) es estructuralmente igual a la Ecuación (16), con lo cual, la manera en la que se implementarán las condiciones de frontera será simplemente haciendo modificaciones a ciertos coeficientes de los volúmenes de control adyacentes a alguna frontera del dominio.

### Condición del segundo tipo o Neumann

Esta condición consiste en que se conoce el valor de la derivada de la variable dependiente en la frontera del dominio ( $\phi'_e$  es conocida). De la Figura 4 y empleando diferencias centrales, la aproximación de esta condición será

$$\phi'_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \Rightarrow \phi_E \approx \phi_P + \phi'_e \Delta x. \quad (25)$$

Sustituyendo en la Ecuación (16) se obtiene

$$a_P \phi_P = a_E (\phi_P + \phi'_e \Delta x) + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_P. \quad (26)$$

Luego de simplificar se llega a

$$(a_P - a_E) \phi_P = a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_P + a_E \phi'_e \Delta x, \quad (27)$$

que puede reescribirse en la forma de la Ecuación (23):

$$a_P^* \phi_P = a_E^* \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_P^*,$$

siendo

$$a_P^* = a_P - a_E, \quad S_P^* = S_P + a_E \phi'_e \Delta x, \quad a_E^* = 0. \quad (28)$$

Dado el sistema de ecuaciones resultante de la discretización por el método de volumen finito y la implementación de las condiciones de frontera, podemos regresar a la solución de la ecuación . Para este caso, el coeficiente de difusión viene dado por  $\Gamma = 1/Pe$ . Nótese que la parte advectiva debe incluirse en los coeficientes del sistema de ecuaciones lineales de acuerdo a las Ecuaciones (17) y (18).

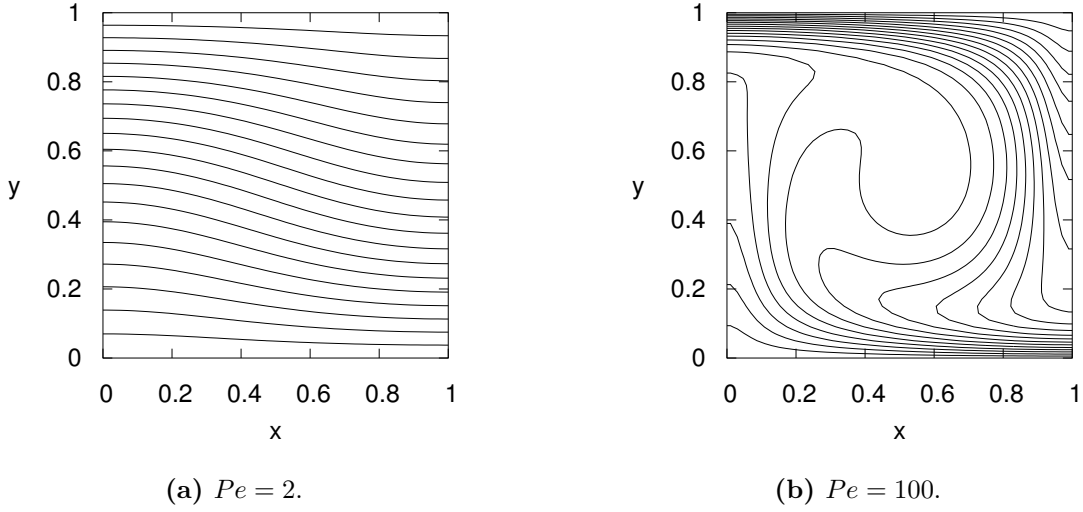


Figure 5: Isolíneas de  $\phi$  para el problema de advección-difusión 2D.

Al igual que en el caso unidimensional, el valor del número de Péclet indica el mecanismo principal de transferencia: para  $Pe$  pequeños domina la difusión, en tanto que para  $Pe$  domina el mecanismo advectivo. Este comportamiento puede observarse en la Figura 5, donde se muestran isolíneas de temperatura para dos números de Péclet distintos.