Un análisis de aplicación general para el cálculo del transporte y dispersión de un contaminante arrojado en una corriente de agua

Ariel Fraidenraich[1)],Maximiliano JesúsPérez[2], Adolfo Edgardo Altenberg[3].

Resumen

En la consideración del problema de la inyección de desechos contaminantes en una corriente de agua es importante el estudio de los mecanismos de transporte y reacción. En general, en los enfoques numéricos se realiza un análisis basado en la conservación de masa y de momento para el fluido y el contaminante. Dentro de esta perspectiva de análisis, se propone la aplicación de una metodología basada en una resolución de las ecuaciones de reacción difusión por el método de SUPG (Streamline Upwinding Petrov Galerkin). Estos resultados se aplicarán al desarrollo de prácticas de laboratorio en la materia Fluidotecnia UB y además se hace disponible un software libre para uso genérico en el ámbito de la ingeniería ambiental. Este software se aplica como ejemplo a un canal con velocidad de arrastre uniforme al cual se introduce una sustancia contaminante caracterizada por su coeficiente de dispersión.

Palabras clave

Método de los Elementos Finitos, SUPG, Transporte y Reacción de Contaminante, Crank-Nicolson.

Introducción

En la consideración del problema de la inyección de desechos contaminantes en una

1 Universidad de Belgrano, Departamento de Ingeniería.

2 Universidadde Belgrano, Departamento de Ingeniería.

3 Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional de Buenos Aires

Fraidenraich, A.:, Pérez, M. J,, Altenberg, A. E. Un análisis de aplicación general para el cálculo del transporte y dispersión de un contaminante arrojado en una corriente de agua. 100-106.

corriente de agua es necesario resolver esquemas numéricos no lineales.Con este objetivo, se inicia el estudio del método SUPG para su aplicación al transporte de contaminantes y su generalización aplicada a Burgers viscoso que serán validados experimentalmente en una etapa posterior.

Para cuantificarel efecto de un contaminante caracterizado por su coeficiente de difusión y de reacción aplicamos la resolución por medio del método de los elementos finitos en un régimen totalmente convectivo arrastrado por una corriente uniforme con el fin deextender la resolución anterior a una corriente no uniforme por medio de la solución del problema de Burgers.

Se puede validar la solución numérica del problema unidimensional de transporte de contaminantepor medios analíticos, mientras que la ecuación de Burgers(simplificación de Navier Stokes) no tiene solución analítica y requiere verificación experimental. Estas comprobaciones serán realizadas en una etapa posterior.

Para el problema de transporte de un contaminante se comparan las soluciones de Galerkin y de Petrov-Galerkin (explícita, Crank-Nicolson e implícita), donde se puede apreciar que, en régimen netamente convectivo la solución de Galerkin presenta soluciones no aceptables, mientras que las restantes son muy parecidas y coinciden con los resultados de la literatura.

Fundamentos y Metodología

En el esquema de PetrovGalerkin(SUPG), la resolución espacial se realiza con un procedimiento de residuos ponderados con las funciones de forma modificadas según valores proporcionales al gradiente de las mismas (adecuados al número de Peclet) y se realiza el avance temporal por medio de un desarrollo de Taylor[1],[2],[3].

Si se expresa el sistema diferencial de las ecuaciones de aguas poco profundas en forma conservativa

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} - k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0 \quad \textbf{en } \Omega \, x \, I \tag{1}$$

Donde *Ω= [0, L] en* R^1 .

Las condiciones iniciales y de borde utilizadas son

$$\varphi(\mathbf{x}, 0) = \varphi_I(x), \quad 0 \leq x \leq L, \tag{2}$$

$$\varphi(\mathbf{0}, t) = \varphi_0(\mathbf{t}), \; 0 \leq t \leq T, \tag{3}$$

$$\varphi(\mathbf{L}, t) = \varphi_1(\mathbf{t}), \; 0 \leq t \leq T. \tag{4}$$

Las condiciones de borde e iniciales utilizadas son

$$\varphi(\mathbf{0},\, t) = \mathbf{0} \quad \forall\, t \quad , \tag{5}$$

$$\varphi(\mathbf{1},\, t) = 1 \quad \forall\, t \quad , \tag{6}$$

$$\phi(x, 0) = x \quad 0 < x < 1 \tag{7}$$

Solución del problema numérico

La ecuación (1) con las condiciones de borde e iniciales dadas por la ecuaciones (2), (3) y (4) fue numéricamente resuelta utilizando la técnica de "Streamline Upwinding Petrov-Galerkin (SUPG)" [4], [5]. La solución numérica puede ser escrita de la siguiente forma matricial:

$$\underline{\underline{M}}\,\dot{\underline{\varphi}} + \underline{\underline{C}}\,\underline{\varphi} + \underline{\underline{K}}\,\underline{\varphi} = \underline{0} \quad , \tag{8}$$

donde $\underline{\underline{M}}$ es la matriz de masa global del sistema, $\underline{\underline{C}}$ es la matriz capacitiva global, $\underline{\underline{K}}$ es la matriz de rigidez global, $\underline{\varphi}$ es el vector de incógnitas globales del sistema y $\dot{\underline{\varphi}}$ es el vector de velocidades de incógnitas nodales. Integrando la ecuación diferencial ordinaria temporalmente y usando un esquema de aproximación en diferencias finitas se obtiene

$$\frac{\underline{\underline{M}}\left(\underline{\varphi}^{n+1} - \underline{\varphi}^{n}\right)}{\Delta t} + \left(\left(1-\theta\right)\left(\underline{\underline{C}} + \underline{\underline{K}}\right)\underline{\varphi}^{n} + \theta\left(\underline{\underline{C}} + \underline{\underline{K}}\right)\underline{\varphi}^{n+1}\right) = \underline{0} \quad . \tag{9}$$

Según θ sea 0.0,0.5 o 1.0 el método de resolución de las ecuaciones diferenciales ordinarias resulta explicito, Crank-Nicolson o implícito[4],[5].

Resultados

El método de SUPG simula correctamente un régimen netamente convectivo (en este caso, Pe = 5), lo cual no es posible usando solamente el método de Galerkinporque introduce oscilaciones espurias. Se observan en la Figura 1altos gradientes de la concentración del contaminante cerca del borde derecho, coherente con el régimen fluido-dinámico que arrastra al contaminante [5]. La alta velocidad de disipación del contaminante se debe a la dispersión introducida por la difusión numérica. Debido a que la interpolación fue realizada linealmente se producen las discontinuidades en las curvas graficadas. Las resoluciones numéricas presentadas son consistentes con las de la literatura existente, la forma en que se introduce viscosidad numérica mejora las aproximaciones asintóticas de las funciones de upwinding [4], [5].

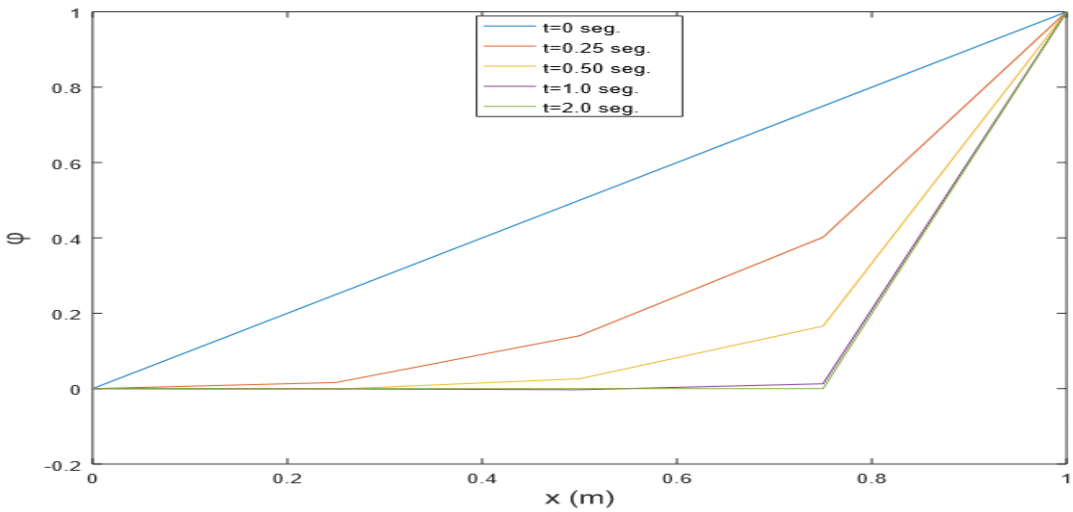

Figura 1: Distribución espacial y temporal del contaminante para una corriente uniforme(u = 1, k = 0.01, θ = 0.5; Crank-Nicolson).

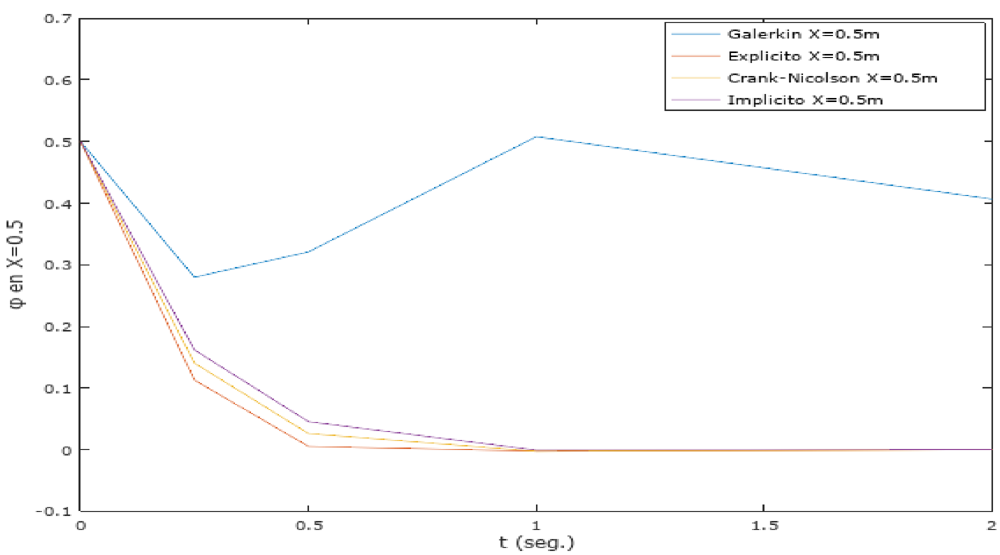

Figura 2: Evolución temporal de la concentración del contaminante en el punto medio del canal por diversos métodos. Se observan las oscilaciones numéricas introducidas por el método de Galerkin (decaimiento no monótono de la concentración).

Se demuestra por medio del método numérico de diferencias finitas que el proceso de Galerkin para resolver la ecuación (1) con las condiciones (2),(3) y (4) es infra difusivo, es decir que necesita de la introducción de viscosidad artificial numérica para que la ecuación diferencial sea más parabólica. Las oscilaciones numéricas introducidas por la aplicación del método de Galerkin se observan graficando la evolución temporal en el punto medio. Esto se evidencia en un decaimiento no monótono de la concentración del contaminante a lo largo del tiempo, debido a la dificultad de captar la capa límite numérica.

Implementación

El software fue desarrollado con el lenguaje de programación Julia con el objetivo de ensayar la implementación de programas computacionales de alto rendimiento. El lenguaje Julia ofrece ventajas respecto a la facilidad de desarrollo y facilidad de mantenimiento respecto a otros lenguajes más tradicionales en el ámbito científico como son C++ o Fortran[6]. Estos programas tienen el objetivo de ser utilizados en los cursos de modelación numérica de las ecuaciones diferenciales en Ingeniería dictado por uno de los autores en la UB. Se va a hacer énfasis en el entendimiento desde la perspectiva de las soluciones gráficas para hacer una conceptualización física del fenómeno.

Conclusiones

Se presenta un software desarrollado por la cátedra de Fluidotecnia el cual se pone libremente a disposición de la comunidad de ingeniería ambiental. Este software se aplica a un canal con velocidad de arrastre uniforme al cual se introduce una sustancia contaminante caracterizada por su coeficiente de dispersión que tiene en cuenta las reacciones químicas producidas.Las resoluciones numéricas presentadas son consistentes con las de la literatura existente, la forma en que se introduce viscosidad numérica mejora las aproximaciones asintóticas de las funciones de upwinding.

Bibliografía

[1] Grundy, E. R.; Van Dujin, C. J., Dawson, C. J. (1994). Asymptotic Profiles with Finite Massinone-dimensional Contaminant Transport through Porous Media: The Fast Reaction Case. J. Mech. Appl. Math, 47, 69-106.

[2] Roig, B. (2007). One-Step Taylor Galerkin Methods for convection diffusion problems, Computational and Applied Mathematics, 204, 95-101.

[3] Zienkiewicz, O. C.; Taylor, R. L. (2005). *The Finite Element Method*. 6th Ed., Vol. 3, Oxford: Butterworth-Heinemann.

[4] Brooks, T. R.; Huges, J. (1982). Streamline Upwinding/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations. Computer Methods in Applied Mechanichs and Engineering, 32, 199-259.

[5] Codina, R. *A. (1993). Finite Element Formulation for the Numerical Solution of the Convection-Diffusion Equation.* Monografía CIMNE Nº 14, International Center for Numerical Methods in Engineering.

[6]Pérez, M. J., Fraidenraich, A. “Implementación de la dispersión y arrastrede contaminante en lenguaje Julia”.
https://drive.google.com/drive/folders/1pGXmDRtUMr0zTr8HA6ZIE8tUqHQVCMK6