

UNA FORMULACIÓN PETROV-GALERKIN PARA LA ECUACIÓN DE REACCIÓN-ADVECCIÓN-DIFUSIÓN

MARIO STORTI*
NORBERTO NIGRO**
y
SERGIO IDELSOHN***

*Grupo de Tecnología Mecánica del INTEC
Universidad Nacional del Litoral (UNL) y CONICET
Güemes 3450, 3000 - Santa Fe, Argentina
Phone/Fax: 54-42-55.66.73, Fax: 54-42-55.09.44
e-mail: rngtm@arcride.edu.ar*

RESUMEN

Presentamos un esquema de discretización basado en la formulación *Petrov-Galerkin* para problemas de reacción-advección-difusión. El esquema presentado exhibe superconvergencia (valores exactos en los nodos) para una cierta clase restringida de problemas unidimensionales, de la misma forma que ocurre con SUPG cuando el parámetro de upwind es elegido a través de la "función mágica". Estos resultados son extendidos a sistemas de ecuaciones. Como caso particular mostramos la aplicación a las ecuaciones simplificadas que rigen los flujos viscosos en sistemas en rotación (*capa límite de Eckman*). Se presentan ejemplos numéricos uni- y bidimensionales, con y sin fuente, y también en el contexto de la capa límite de Eckmann.

SUMMARY

A discretization scheme based on a *Petrov-Galerkin* formulation for the reaction-advection-diffusion problem is presented. The scheme exhibits superconvergence (exact nodal values) for a restricted class of one-dimensional problems, in the same way as SUPG does when the upwind parameter is chosen according to the "magic function". Moreover, these results are extended to systems of equations, as the equations governing the Eckmann layer, for instance. Numerical examples for one- and bidimensional scalar problems are presented, as well as for systems in the context of the Eckmann layer problem.

* Miembro de la carrera de investigador científico del CONICET

** Becario del CONICET

*** Miembro de la carrera de investigador científico del CONICET y profesor de la UNL

Recibido: Julio 1994

Palabras clave

Advección-difusión-reacción • *Advection-reaction-diffusion*
Elementos finitos • *Finite Elements*
Método de Petrov-Galerkin • *Petrov-Galerkin methods*
Capa límite de Eckman • *Eckman layer*

INTRODUCCIÓN

En este trabajo se estudia la resolución numérica mediante el método de los elementos finitos de la ecuación de convección-difusión-reacción. Entendemos por término *adectivo* aquel que involucra derivadas primeras del campo incógnita, *difusivo* al que involucra derivadas segundas y, finalmente, *reactivo* al que involucra al campo incógnita sin derivar. La palabra *reacción* proviene de las aplicaciones en ingeniería química, donde la reacción química produce, en el caso más simple, un término proporcional a una potencia de la concentración en el balance de la especie. Estas ecuaciones representan un modelo simplificado para muchos problemas industriales, por ejemplo en la simulación de procesos de separación por electroforesis y la operación de reactores químicos. En estos procesos tanto la concentración como la temperatura juegan el rol de la variable incógnita. Otra aplicación interesante es la simulación de fluidos en un marco de referencia no inercial que está rotando con velocidad angular constante. En este caso el modelo matemático es un sistema *adectivo-reactivo-difusivo*, en el cual las fuerzas inerciales están incluidas en el término *adectivo*, la fuerza de Coriolis en el término *reactivo* (i.e. son proporcionales a la velocidad), y finalmente los efectos viscosos se incluyen en el término *difusivo*. Los números adimensionales de Reynolds y de Rossby permiten evaluar en forma cuantitativa la importancia relativa de estos términos. Cuando el número de Reynolds es mucho más grande que el de Rossby, el fluido es dominado por la advección, mientras que en el caso opuesto el flujo es dominado por el término reactivo. Cada una de estas situaciones produce sus propias dificultades numéricas y físicas, especialmente en lo que concierne a la estabilidad del flujo y del esquema asociado. El desarrollo numérico presentado en este trabajo tiene como último objetivo la aplicación a *flujos en turbomaquinarias*, es decir, en sistemas rotantes con velocidad angular constante. En este trabajo trataremos el caso escalar n -dimensional y el caso de sistemas unidimensionales.

Tezduyar y Park¹ han extendido el clásico esquema SUPG de Brook y Hughes² a casos dominados por reacción. Sin embargo, el método no es "*unificador*" en el sentido de que no es aplicable en forma continua a toda la gama de posibilidades desde reacción dominante hasta advección dominante, sino que funciona como dos métodos separados para cada una de las situaciones mencionadas. Más aún, no es clara cuál debe ser la elección de los parámetros sensibles del esquema (la magnitud de los "aditivos" numéricos) en situaciones intermedias, ni mucho menos puede demostrarse que sea óptima. Otra crítica importante proviene de consideraciones de simetría ante inversión de coordenadas $x \rightarrow -x$. En el caso de advección nula, el operador diferencial es invariante bajo esta operación de simetría y es claro que la función de peso debería ser simétrica. Este no es el caso para el esquema de Tezduyar y Park¹, muy por el

contrario, la función de perturbación es antisimétrica. De hecho, es la misma que en el caso de advección-difusión, con la salvedad de que en este caso tal elección sí es justificada ya que el operador de advección es también antisimétrico.

Otra alternativa, introducida por Codina³, consiste en usar una formulación SUPG con operador de captura de discontinuidades ("*shock-capturing*"), incluyendo en este último término la estabilización de los efectos reactivos. En el mencionado trabajo se demuestra que la ecuación original puede ser transformada en una nueva ecuación de advección-difusión con una velocidad transformada, y entonces se aplican los esquemas bien conocidos apropiados para este tipo de problema. Un inconveniente de esta formulación es que transforma el problema lineal del continuo en un problema discreto no lineal, incluso en problemas unidimensionales.

En este trabajo, la idea subyacente del método SUPG es extendida al caso general de reacción-convección, sin limitaciones en cuanto a la importancia relativa de cada uno de los términos. Esta importancia relativa puede variar en el dominio, por ejemplo, cuando en una zona exista una fuerte contribución de los términos reactivos mientras que en otra primen los términos convectivos. Pueden formarse dos parámetros adimensionales libres para la ecuación discreta de advección-reacción-difusión. Uno es el conocido *número de Péclet* (Pe) que relaciona los términos convectivos con los difusivos. El otro relaciona los términos reactivos con los difusivos y será llamado de aquí en adelante *número de reacción* (r). En el trabajo de Hughes et-al se considera el caso $r = 0$, mientras que el trabajo de Tezduyar y Park considera los casos $r \gg Pe$. La contribución de este trabajo es lograr una formulación tipo *Petrov-Galerkin* que se adapte a cualquier situación introduciendo la perturbación necesaria en la función de peso de forma tal de estabilizar espacialmente el esquema numérico. El fenómeno de superconvergencia que presenta el esquema clásico SUPG es extendido para todas las condiciones de operación Pe, r mediante la inclusión de una segunda perturbación a la función de peso y una elección cuidadosa de los parámetros. En contraposición con el esquema propuesto por Codina³, el esquema discreto es lineal para problemas unidimensionales. Para problemas multidimensionales, puede aplicarse un operador de captura de discontinuidades al igual que en SUPG.

En 1. se describe la aplicación del esquema a problemas escalares. Después de encontrar el esquema numérico para una función de perturbación general, se deduce en 1.1. la cantidad de aditivos numéricos necesaria para estabilizar el esquema y obtener superconvergencia para cualquier condición de operación Pe, r . En 1.2. se estudia el comportamiento de las constantes de proporcionalidad en función de los parámetros geométricos de la función de perturbación. Veremos que, a menos que se satisfagan ciertas restricciones, éstos valores pueden no estar acotados. En 1.3. se elige la función de perturbación a fin de satisfacer estos requerimientos. En 1.4. se extiende el esquema al caso de varias dimensiones espaciales y en 1.5. presentamos varios ejemplos escalares uni-dimensionales. En 2. extendemos los resultados a sistemas de ecuaciones unidimensionales. En 2.1. mostramos que la característica de superconvergencia puede ser extendida en forma general a sistemas, mientras que en 2.2. mostramos la aplicación al caso específico de la capa límite de Eckman. Finalmente, en 2.3. presentamos ejemplo numéricos que involucran sistemas.

1. EL PROBLEMA ESCALAR UNIDIMENSIONAL

Consideremos la siguiente versión unidimensional simplificada de la ecuación de advección-difusión-reacción

$$-k\phi'' + u\phi' + c\phi = f, \quad \text{en } \Omega = \{x / 0 \leq x \leq 1\} \quad (1)$$

con condiciones de contorno tipo Dirichlet

$$\phi(x=0) = \phi_0, \quad \phi(x=1) = \phi_1 \quad (2)$$

ϕ es la concentración de la especie, k la constante de difusividad, u la velocidad del fluido, c la constante de reacción y f el término fuente. Esta ecuación es discretizada por el método de los elementos finitos dividiendo el intervalo en N elementos de igual tamaño $h = 1/N$, con funciones de interpolación $w_i, i = 0, \dots, N$ de primer orden (lineales) por elemento. Como es usual en el método de Petrov-Galerkin, las funciones de peso \tilde{w}_i no son iguales a las de interpolación sino que contienen una perturbación p_i

$$\tilde{w}_i = w_i + p_i, \quad p_i = \alpha h w_i' + \gamma P_{2i} \quad (3)$$

El primer término de la perturbación es el estándar en SUPG, mientras que el segundo será especialmente diseñado para estabilizar el esquema numérico en problemas con efectos reactivos importantes. α y γ son *constantes de proporcionalidad* que regulan la cantidad de aditivo numérico necesaria para estabilizar el sistema.

La formulación débil del problema discreto es

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (k w_i' \phi' + u w_i \phi' + c w_i \phi) d\Omega + \sum_{e=1}^N \int_{\Omega_e} (\alpha h w_i' + \gamma P_{2i}) (-k \phi'' + u \phi' + c \phi) d\Omega = \\ = \int_{\Omega} \tilde{w}_i f d\Omega, \quad i = 1, \dots, N-1 \end{aligned} \quad (4)$$

Los pasos a seguir para el diseño de este aditivo numérico son los siguientes. Primero, encontraremos el "stencil" numérico que se obtiene de (4) para una P_2 general. Veremos que este stencil depende sólo de tres parámetros geométricos de P_2 . A continuación, encontraremos expresiones para α y γ de manera de obtener "superconvergencia" (este término será explicado más adelante en 1.1.). Veremos que, para obtener valores acotados de las constantes de proporcionalidad surgen ciertas restricciones entre los parámetros geométricos de P_2 . Finalmente, elegiremos P_2 de manera de satisfacer estas restricciones.

Como fuera mencionado en la introducción, razones de simetría indican que P_{2i} debe ser simétrica con respecto al nodo i . Además, supondremos que se anula en los nodos vecinos $i \pm 1$, como puede verse en la Figura 1. Como se muestra en la figura, la función de peso debería reducirse a la de interpolación (Galerkin) cuando la reacción es despreciable (bajos números de reacción), y debe concentrarse en el nodos central para

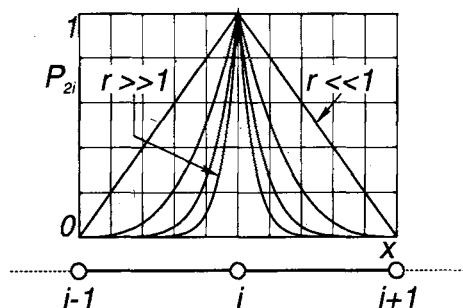


Figura 1. Funciones de peso "ideales" para el caso de reacción-difusión. Las funciones de peso siguen siendo simétricas con respecto al nodo central y se van concentrando en éste a medida que los efectos reactivos predominan

reacción dominante (altos números de reacción). Integrando los términos elementales en (4), llegamos al siguiente stencil numérico.

$$\begin{aligned} & \frac{k + u\alpha h + k\gamma P_{20}}{h} (-\phi_{i+1} + 2\phi_i - \phi_{i-1}) + \left(\frac{u - \alpha ch}{2} + u\gamma a \right) (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) + \\ & + \frac{ch}{6} (\phi_{i+1} + 4\phi_i + \phi_{i-1}) + c\gamma hm (\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}) + c\gamma ha 2\phi_i = f_i \end{aligned} \quad (5)$$

donde P_{20} es el valor que asume P_{2i} en el nodo i , a y m son el área y el primer momento de P_{2i} , calculados sobre el elemento $i + \frac{1}{2}$, respectivamente, convenientemente adimensionalizados

$$\begin{aligned} ha &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_2(x) dx \\ h^2 m &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i) P_2(x) dx \end{aligned} \quad (6)$$

Dos parámetros adimensionales independientes que relacionan los diferentes términos a nivel elemental pueden ser definidos, a saber el conocido número de Péclet Pe , y el número de reacción r definidos como sigue

$$Pe = uh/2k, \quad r = ch^2/k \quad (7)$$

1.1. Elección de las constantes de proporcionalidad

Las constantes de proporcionalidad son elegidas de manera de obtener la solución exacta para una cierta clase de problemas simplificados, a saber: paso de malla constante, ausencia de término fuente y parámetros físicos constantes. Este fenómeno es conocido como "superconvergencia". Para el problema advectivo-difusivo, esto es, sin reacción, este procedimiento lleva a la bien conocida "función mágica" que relaciona la

constante de proporcionalidad α con el número de Péclet

$$\alpha(\text{Pe}) = \coth \text{Pe} - \frac{1}{\text{Pe}} \quad (8)$$

Sin embargo, para problemas generales donde alguna de las mencionadas restricciones es violada, el fenómeno de superconvergencia se pierde y se obtienen, en el mejor de los casos, los órdenes de convergencia normales del método de los elementos finitos. Más aún, los mismos órdenes de convergencia pueden obtenerse con otras relaciones $\alpha(\text{Pe})$, mientras se respeten los límites para $\alpha \rightarrow 0$ y $\alpha \rightarrow \infty$. Esto muestra que el carácter "mágico" de (8) es más bien fortuito. Sin embargo, usaremos este procedimiento como una forma automática de calcular las constantes de proporcionalidad, sin perjuicio de que, a posteriori, puedan encontrarse expresiones asintóticas más simples para las mismas.

La solución general a (1) en la ausencia de término fuente es

$$\phi(x) = a e^{\lambda_1 x} + b e^{\lambda_2 x} \quad (9)$$

donde $\lambda_{1,2}$ son las raíces del polinomio característico

$$-k\lambda^2 + u\lambda + c = 0, \quad \lambda_{1,2}h = \text{Pe} \pm \sqrt{\text{Pe}^2 + r} \quad (10)$$

a y b son constantes de integración que deben ser obtenidas a posteriori, de manera de satisfacer las condiciones de contorno. Como deseamos que la solución a (1-2) con $f = 0$ sea también solución al problema discreto para ϕ_0, ϕ_1 arbitrarios, se deduce que ambas exponenciales en (9) deben ser soluciones al problema discreto por separado. Insertando ambas exponenciales en (5) y simplificando, llegamos a un sistema de ecuaciones lineales en α y γ de la forma

$$\begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{f}_1 \\ \hat{f}_2 \end{bmatrix} \quad (11)$$

donde

$$\begin{aligned} g_{j1} &= [4\text{Pe}(1 - \cosh(\lambda_j h) - r \sinh(\lambda_j h))] \\ g_{j2} &= 2[\cosh(\lambda_j h)(rm - P_{20}) + 2\text{Pe} a \sinh(\lambda_j h) + \\ &\quad + (P_{20} - mr + ar)] \\ \hat{f}_j &= -2[\cosh(\lambda_j h)(r/6 - 1) + \text{Pe} \sinh(\lambda_j h) + (1 + r/3)] \end{aligned} \quad (12)$$

1.2. Elección de los parámetros geométricos de P_2

Prácticamente para cualquier elección de P_2 , podemos calcular las constantes de proporcionalidad a partir de (11-12) resultando en un esquema que exhibirá superconvergencia. Sin embargo, en el caso más general, las constantes de proporcionalidad pueden llegar a tomar valores no acotados para ciertas condiciones de operación (Pe, r) , lo cual, a su vez, puede llevar a un esquema no convergente en los casos en que alguna de las restricciones que asegura superconvergencia es violada. Por

otra parte, también es deseable que se respeten ciertos límites, a saber, que el esquema se reduzca a SUPG con la función mágica (8) en el caso $r = 0$ y que α se anule para $u \rightarrow 0$. Esta última condición permite extender en forma bastante natural el esquema a más dimensiones y puede demostrarse que se cumple siempre que P_{2i} sea una función par con respecto al nodo i .

Como las expresiones involucradas son muy complejas es conveniente estudiar por separado las condiciones bajo las cuales las constantes de proporcionalidad se mantienen acotadas en los límites en que Pe y r tienden a cero. Posteriormente, se verifica por cálculo numérico directo que se mantienen acotadas para todas las condiciones de operación (Pe, r) .

1.1.1. El límite $r \rightarrow 0$

Haciendo un desarrollo para $r \rightarrow 0$ se puede ver que

$$\gamma = \frac{\hat{f}_2 g_{11} - \hat{f}_1 g_{21}}{g_{11} g_{22} - g_{12} g_{21}} = \frac{1}{4(2a - P_{20})} \left(\frac{1}{Pe} - \coth Pe \right) \frac{r}{Pe} + O(r^2) \quad (13)$$

Nótese que aparece un factor del tipo de la función mágica de SUPG. Este factor se anula para $Pe = 0$ y cancela la singularidad que podría producir el factor Pe que aparece en el denominador. Como consecuencia, podemos decir que γ tiene un comportamiento $O(r)$ si

$$2a - P_{20} \neq 0 \quad (14)$$

Puede verse que si este no es el caso, entonces $\gamma = O(1)$ y el segundo criterio no se satisface. Nótese que (14) es falso ciertamente para $P_2 = w$, la función de interpolación del nodo. Esto demuestra que esta condición está relacionada con una dependencia lineal de los términos en el stencil generados por la función de perturbación P_2 y aquellos generados por los términos de Galerkin cuando (14) no es satisfecho.

1.1.2. El límite $Pe \rightarrow 0$

En este límite el determinante del sistema (11) es

$$\det G = -4r \sinh(\sqrt{r}) [\cosh(\sqrt{r}) (rm - P_{20}) + (P_{20} - (m + a)r)] \quad (15)$$

Para evitar valores no acotados de α y γ buscaremos elegir los parámetros geométricos de forma que este determinante no se anule. Esta expresión se anula en

$$\cosh(\sqrt{r}) = \frac{mr - P_{20} - ar}{mr - P_{20}} = \text{rhs}(r) \quad (16)$$

Si $P_{20} \neq 0$ y P_2 es de signo definido (i.e. es no-negativa ($P_2(x) \geq 0, 0 < x < 1$) o no-positiva ($P_2(x) \leq 0, 0 < x < 1$)), entonces el denominador se anula para $r = P_{20}/m$ y el miembro derecho se aproxima arbitrariamente a $\pm\infty$ para $r = P_{20}/m \pm \epsilon$. Como consecuencia, en general hay una solución a la ecuación (13) a menos que P_{20}/m sea suficientemente pequeño.

Si tomamos $P_{20} = 0$ entonces el miembro derecho se hace independiente de r y toma el valor $(1 - a/m)$. Este valor es menor que la unidad si P_2 es de signo definido ($a/m > 0$), en cuyo caso la ecuación (16) no tiene solución y el determinante no se anula sobre todo el eje $Pe = 0, r > 0$. Por otra parte, nótese que, bajo estas hipótesis ($P_{20} = 0$ y P_2 de signo definida), entonces $a \neq 0$ y el criterio (14) también se satisface. Finalmente, nótese que, ya que P_2 está definida a menos de una constante multiplicativa la cual es absorbida en γ , el único parámetro geométrico de forma que resta por definir es el cociente a/m .

1.3. La función burbuja

La función polinómica de más bajo orden que satisface todas las condiciones requeridas es la función "burbuja" (ver Figura 2)

$$P_2(\xi) = -\frac{1}{4}(1 - \xi^2) \quad (17)$$

donde ξ es una coordenada sobre el elemento de referencia ("master element")

$$\xi = 2(x - x_i)/h - 1, \quad -1 \leq \xi \leq 1 \quad (18)$$

para el elemento $i + 1/2$ que comprende a los nodos i e $i + 1$. Los parámetros geométricos correspondientes son $P_{20} = 0$, $a = -1/6$ y $m = -1/12$, $a/m = 2$.

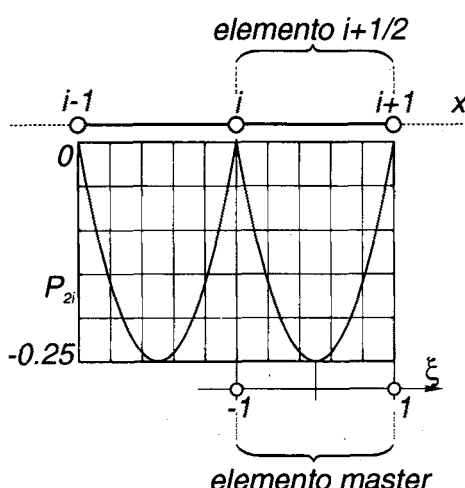


Figura 2. Segunda función de perturbación P_2 propuesta

En las Figuras 3-6 vemos la dependencia de α y γ con Pe y r . En algunos límites las expresiones involucradas son indeterminadas, pero en todos los casos esta

indeterminación es salvable, de la misma forma que ocurre con la función mágica de SUPG en $Pe = 0$. En la Figura 9 puede observarse el comportamiento de las constantes de proporcionalidad cuando $Pe, r \rightarrow \infty$, $Pe/r = \tan \mu = \text{cte.}$ De las figuras se desprende que tienen un comportamiento muy suave y se mantienen acotadas: $0 \leq 2\alpha, \gamma/2 \leq 1$ para todos Pe, r .

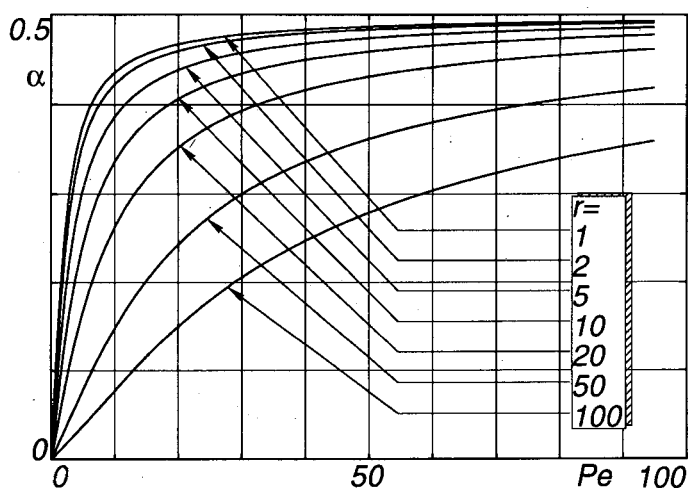


Figura 3. Constante de proporcionalidad α , correspondiente a la función de perturbación estándar como función de Pe para varios valores de r

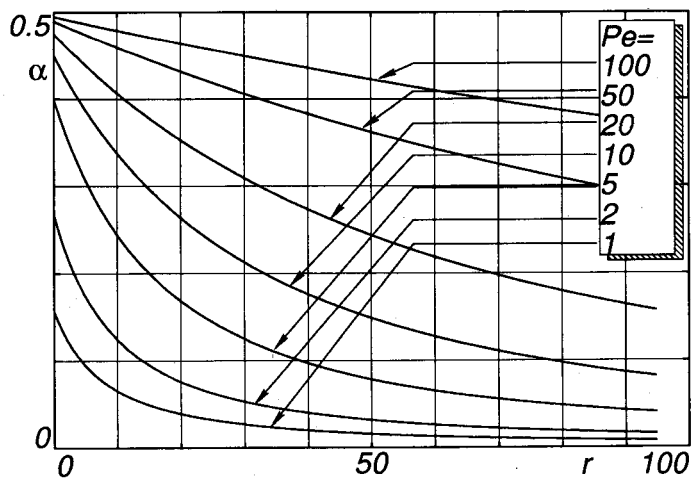


Figura 4. Constante de proporcionalidad α como función de r para varios valores de Pe

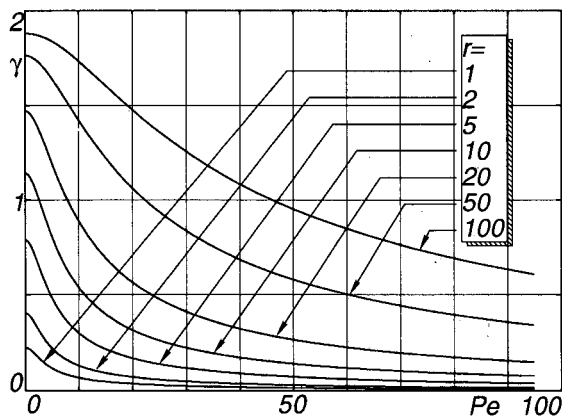


Figura 5. Constante de proporcionalidad γ , correspondiente a la segunda función de perturbación como función de Pe para varios valores de r

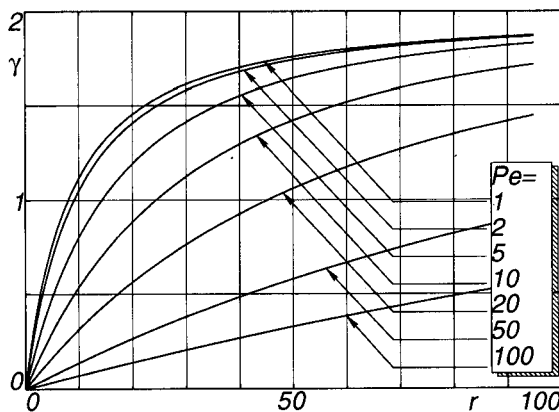


Figura 6. Constante de proporcionalidad γ como función de r para varios valores de Pe

Los límites deseados mencionados en 1.2. son satisfechos. Por ejemplo, la función mágica de SUPG es obtenida en el caso de reacción nula

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2} \left(\coth Pe - \frac{1}{Pe} \right) \\ \gamma &= 0 \end{aligned} \right\} \quad \text{para } r = 0 \quad (19)$$

Por otra parte, para advección nula

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= 0 \\ \gamma &= 12 \frac{\cosh(\sqrt{r})(r/6 - 1) + (1 + r/3)}{r [1 + \cosh(\sqrt{r})]} \end{aligned} \right\} \quad \text{para } Pe = 0 \quad (20)$$

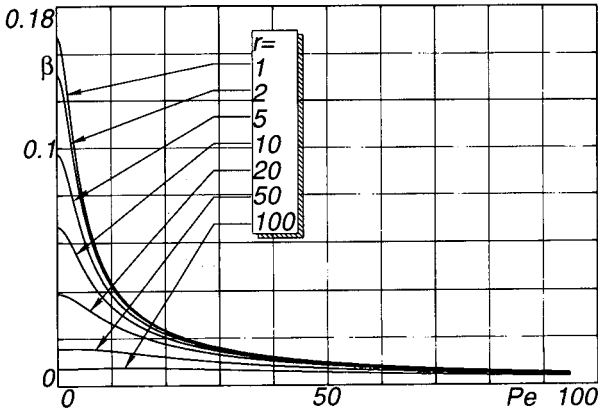


Figura 7. Constante de proporcionalidad β (ver 1.4.) como función de Pe para varios valores de r

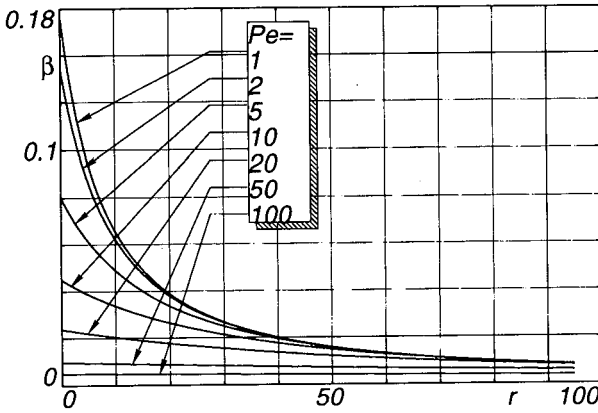


Figura 8. Constante de proporcionalidad β como función de r para varios valores de Pe

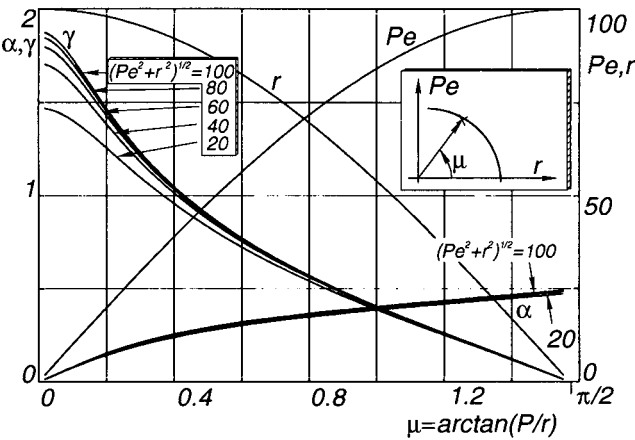


Figura 9. Comportamiento de α y γ para $Pe, r \rightarrow \infty$, con $Pe/r = \tan \mu = \text{cte}$

Esta última expresión ($\gamma(r)$ para $Pe = 0$) toma el valor $\gamma = 2$ para $r \rightarrow \infty$ y $\gamma = 0$ para $r = 0$. La familia completa de funciones de peso para el caso de advección nula es mostrado en la Figura 10 para $0 \leq \gamma \leq 2$. Estas se concentran alrededor del nodo central a medida que γ se incrementa. Para $\gamma = 2$ (reacción pura), la función de peso correspondiente toma valores negativos cerca de los nodos adyacentes y puede verificarse que el esquema discreto resultante corresponde a un esquema de *colocación* en los nodos.

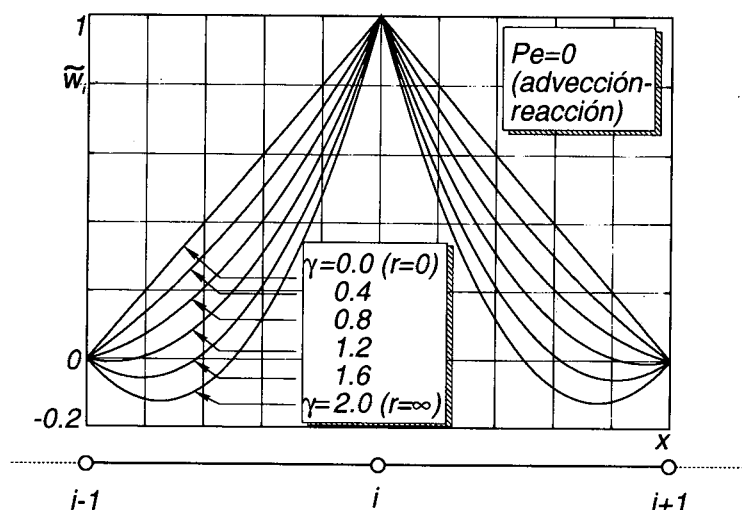


Figura 10. Familia de funciones de peso para el caso de reacción-difusión

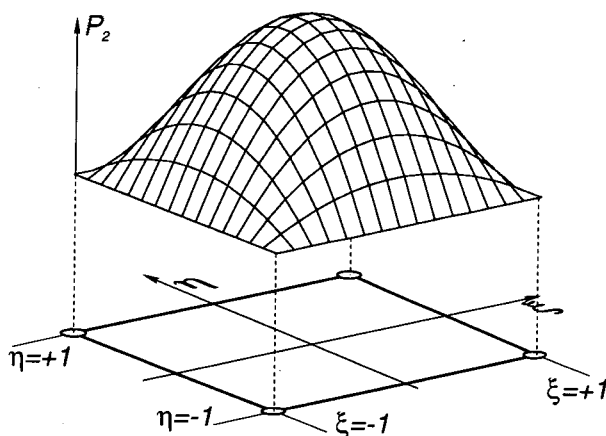


Figura 11. Segunda función de perturbación para el caso bidimensional

1.4. Extensión al caso bidimensional

P_2 es extendido a dos dimensiones como producto cartesiano de dos funciones P_2 según cada dirección. Primero el elemento es transformado sobre el elemento de referencia $-1 \leq \xi, \eta \leq 1$ y entonces P_2 se define como

$$P_2(\xi, \eta) = -(1/16)(1 - \xi^2)(1 - \eta^2) \quad (21)$$

Para calcular las constantes de proporcionalidad es necesario definir una "longitud del elemento", la cual hemos tomado como el valor según la línea de corriente

$$h_s = 2 \left(\sum_{i=1}^4 |\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla w_i| \right)^{-1} \quad (22)$$

donde $i = 1, \dots, 4$ son los nodos del elemento correspondiente. En base a h_s pueden calcularse valores Pe_s y r_s y las correspondientes constantes de proporcionalidad α y γ . Para extender el término SUPG en la función de perturbación, primero notamos que, en el caso unidimensional, éste puede ser puesto de la forma

$$\alpha(Pe, r)hw' = \beta \frac{uh^2}{2k} w', \quad \text{con } \beta(Pe, r) = \frac{\alpha(Pe, r)}{Pe} \quad (23)$$

Puede verse de la Figura 3 que $\alpha = O(Pe)$ para $Pe \rightarrow 0$ y $r = \text{cte}$, de manera que el cociente $\beta = \alpha/Pe$ es acotado y suave (ver Figuras 7-8). La extensión a 2D es, entonces

$$\beta(Pe_s, r_s) \frac{h_s^2}{2k} (\mathbf{u} \cdot \nabla w) \quad (24)$$

La inclusión de un término de captura de discontinuidades⁴ ("shock-capturing") es discutida en otro trabajo⁵.

1.5. Resultados numéricos

1.5.1 Ejemplos 1D sin término fuente

Empezamos con un ejemplo unidimensional que consiste en resolver (1-2) con $\phi(0) = 0$, $\phi(1) = 1$ para tres condiciones de operación. El primero corresponde a reacción nula y advección dominante ($Pe=25$), el segundo a reacción dominante ($r = 2.5$) y advección nula y el tercero a $Pe = r = 2.5$. La malla es uniforme y tiene 20 elementos. Los resultados numéricos pueden verse en las Figuras 12-14. En todos los casos se muestra en la parte superior la solución discreta con asteriscos y la exacta en trazo continuo. En la parte inferior de la figura se muestran los errores nodales. Se verifica que los valores numéricos coinciden con los exactos a precisión de la máquina.

1.5.2. Ejemplo 1D con término fuente

La malla y condiciones de contorno son como en 1.5.1. pero ahora con un término fuente $f = x$ y condición de contorno $\phi = 2$ en $x = 1$. Los parámetros adimensionales son $r = 2.5 \times 10^5$, $Pe = 0$ correspondiendo a reacción-difusión dominado por reacción, y los resultados se muestran en la Figura 15. Puede verse que, a pesar de que ya no se cumplen las condiciones de superconvergencia, se obtienen errores nodales muy bajos.

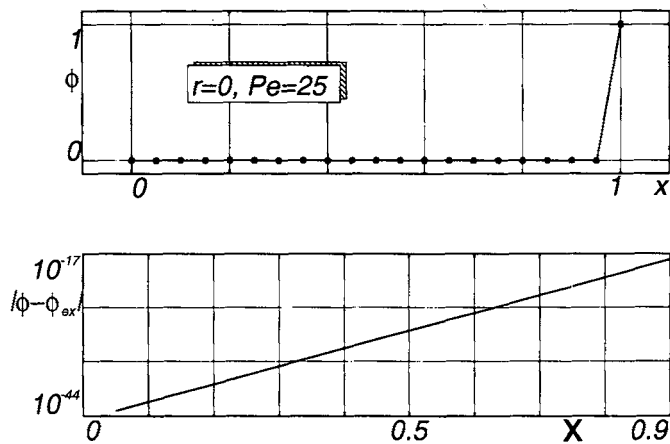


Figura 12. Ejemplo unidimensional sin fuente, dominado por advección. Arriba: solución numérica (*) y exacta (-). Abajo: errores nodales de la solución discreta

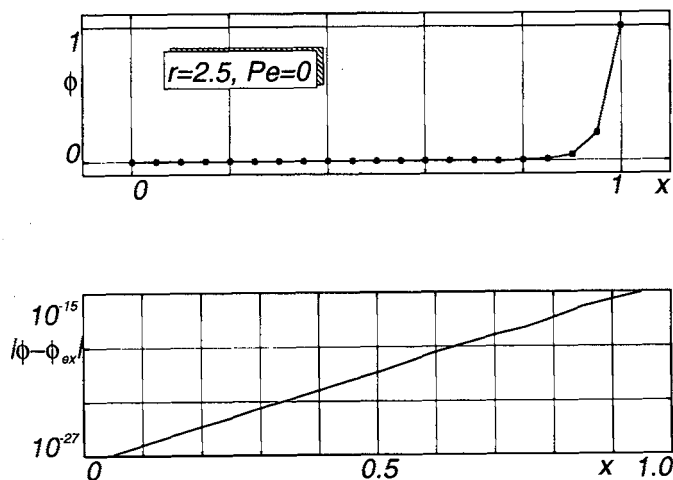


Figura 13. Ejemplo unidimensional sin fuente, dominado por reacción. Arriba: solución numérica (*) y exacta (-). Abajo: errores nodales de la solución discreta

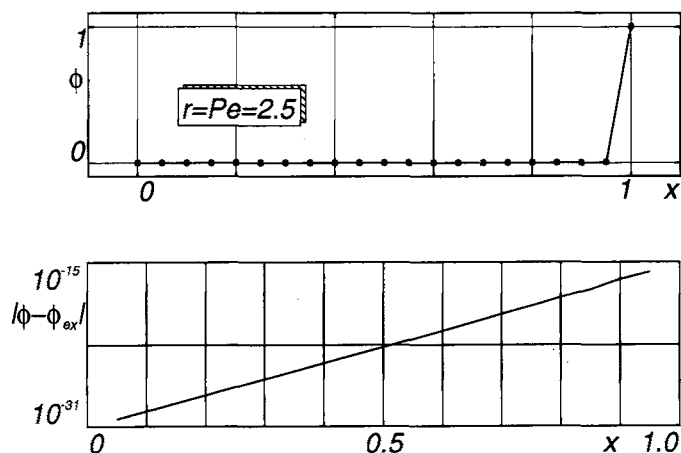


Figura 14. Ejemplo unidimensional sin fuente $Pe = r = 2.5$. Arriba: solución numérica (*) y exacta (-). Abajo: errores nodales de la solución discreta

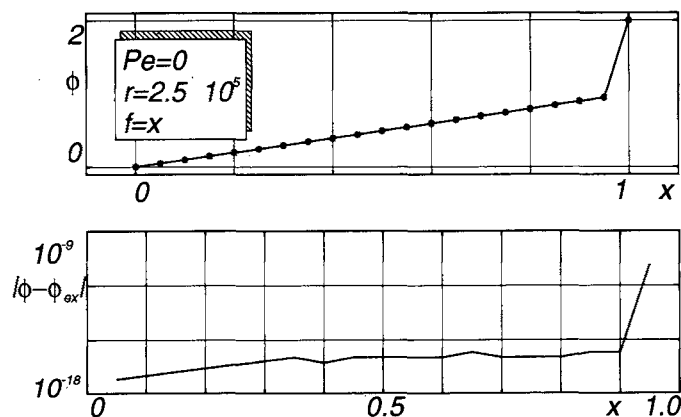


Figura 15. Ejemplo unidimensional con fuente dominado por reacción. Arriba: solución numérica (*) y exacta (-). Abajo: errores nodales de la solución discreta

1.5.3. Ejemplo 2D

El siguiente ejemplo consiste en un problema bidimensional con un campo de velocidades que no es constante propuesto por Codina³. El dominio es el cuadrado unitario $0 \leq x, y \leq 1$ y la velocidad $\mathbf{u} = (u, v)$ consiste en un perfil parabólico

$$u(y) = u_{\max} y^2, \quad v \equiv 0$$

Los parámetros físicos son $c = 5$, $k = 10^{-8}$ y $u_{\max} = 1$. La malla es uniforme de 20×20 elementos. Las condiciones de contorno son naturales (flujo nulo) en tres de los cuatro lados, y en el cuarto la concentración está fijada a 1 (véase el esquema descriptivo en la Figura 16.). Las Figuras 16,17 muestran los resultados numéricos obtenidos con

el esquema estabilizado y el clásico SUPG (sin la función P_2). Puede observarse que las oscilaciones obtenidas con el SUPG clásico cerca de la zona donde existe un alto número de reacción han desaparecido con el esquema estabilizado, mientras que, en el resto del dominio, ambas soluciones son equivalentes debido a que allí el problema está dominado por advección.

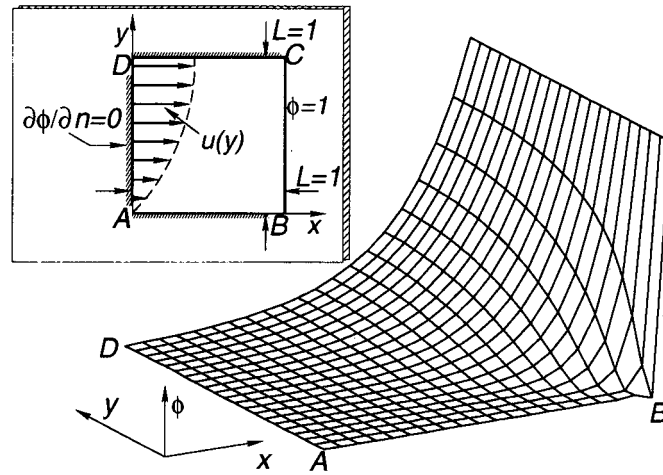


Figura 16. Problema bidimensional con fuente y campo de velocidades no uniforme. Descripción y solución numérica obtenida con el esquema propuesto

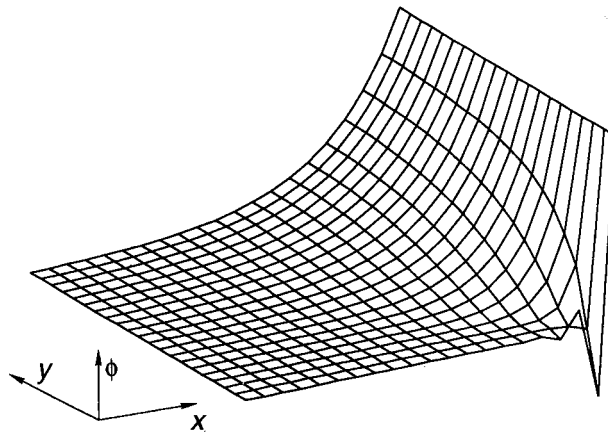


Figura 17. Idem Figura 16, resultados obtenidos con SUPG

2. EXTENSIÓN A SISTEMAS

2.1. El caso general

Consideremos ahora la extensión a sistemas de (1)

$$-\mathbf{K}\mathbf{U}'' + \mathbf{A}\mathbf{U}' + \mathbf{C}\mathbf{U} = \mathbf{F}, \quad \text{en } \Omega = \{x / 0 \leq x \leq 1\} \quad (25)$$

donde \mathbf{K} , \mathbf{A} y \mathbf{C} son matrices de $m \times m$ elementos, \mathbf{U} es el vector de estado de longitud m y \mathbf{F} es un vector término fuente. La extensión sigue bastante de cerca el caso escalar, con la única excepción de que la solución general no es más de la forma (9). Sin embargo, asumiendo que \mathbf{K} no es singular, podemos considerar a (25) como un sistema de ODE's y dados los valores de \mathbf{U}_i y \mathbf{U}'_i en un nodo dado x_i , éstos pueden ser tomados como valores iniciales para integrar la ecuación sobre el elemento $i + 1/2$. Como resultado, se obtienen los valores en el nodo siguiente \mathbf{U}_{i+1} , \mathbf{U}'_{i+1} . Por linealidad y en la ausencia de término fuente ($\mathbf{F} = 0$)

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{i+1} &= \mathbf{W}_{00}\mathbf{U}_i + \mathbf{W}_{01}\mathbf{U}'_i \\ \mathbf{U}'_{i+1} &= \mathbf{W}_{10}\mathbf{U}_i + \mathbf{W}_{11}\mathbf{U}'_i \end{aligned} \quad (26)$$

donde \mathbf{W}_{jk} son matrices de evolución de tamaño $m \times m$. Es importante notar que, como las matrices de coeficientes \mathbf{K} , \mathbf{A} y \mathbf{C} son constantes, las matrices de evolución \mathbf{W}_{jk} son las mismas para todos los elementos. El próximo paso es obtener una ecuación en diferencias para la solución exacta eliminando las derivadas. Para ello, escribimos conjuntamente el sistema de ecuaciones (26) para los elementos $i \pm 1/2$, obteniendo un sistema de $4m$ ecuaciones en $6m$ incógnitas \mathbf{U}_j y \mathbf{U}'_j para $j = i-1, i, i+1$. Eliminando las $3m$ incógnitas correspondientes a los valores nodales de las derivadas obtenemos un sistema de m ecuaciones donde no aparecen las derivadas

$$\mathbf{U}_{i+1} = \mathbf{B}\mathbf{U}_i + \mathbf{D}\mathbf{U}_{i-1} \quad (27)$$

con

$$\mathbf{B} = (\mathbf{W}_{00} + \mathbf{W}_{01}\mathbf{W}_{11}\mathbf{W}_{01}^{-1}), \quad \mathbf{D} = \mathbf{W}_{01}(\mathbf{W}_{10} - \mathbf{W}_{11}\mathbf{W}_{01}^{-1}\mathbf{W}_{00}) \quad (28)$$

Finalmente, reescribimos (27) de la siguiente forma

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{W}^+(\mathbf{U}_{i+1} + \mathbf{U}_{i-1}) + \mathbf{W}^-(\mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_{i-1}) \quad (29)$$

donde

$$\mathbf{W}^+ = \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{I} - \mathbf{D})/2, \quad \mathbf{W}^- = \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{I} + \mathbf{D})/2 \quad (30)$$

La forma (29) es más conveniente, ya que separa la parte impar de la par. Por ejemplo, en un problema sin advección \mathbf{W}^- debe ser nulo, ya que en ese caso el operador es par ante inversión de coordenadas $x \rightarrow -x$.

Reemplazando (29) en la forma matricial de (5) llegamos a un sistema de ecuaciones matricial en α y γ

$$\begin{aligned}\alpha \mathbf{F}_{11} + \gamma \mathbf{F}_{12} &= \mathbf{H}_1 \\ \alpha \mathbf{F}_{21} + \gamma \mathbf{F}_{22} &= \mathbf{H}_2\end{aligned}\quad (31)$$

donde

$$\begin{aligned}F_{11} &= (2\mathbf{W}^+ - 1)\mathbf{A} & F_{12} &= -(h\mathbf{C}/12)(1 + 2\mathbf{W}^+) \\ F_{21} &= (h\mathbf{C}/2) + 2\mathbf{A}\mathbf{W}^- & F_{22} &= (\mathbf{A} + h\mathbf{C}\mathbf{W}^-)/6 \\ H_1 &= (\mathbf{K}/h)(1 - 2\mathbf{W}^+) - & H_2 &= \mathbf{A}/2 + 2(\mathbf{K}/h + \mathbf{C}h/3)\mathbf{W}^- \\ & - (\mathbf{C}h/6)(1 + 4\mathbf{W}^+)\end{aligned}\quad (32)$$

La solución al sistema (31) se obtiene en forma análoga al caso escalar, pero recordando que, en este caso, el producto de matrices no es necesariamente conmutativo

$$\begin{aligned}\alpha &= (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1\mathbf{F}_{12}^{-1}\mathbf{F}_{22})(\mathbf{F}_{21} - \mathbf{F}_{11}\mathbf{F}_{12}^{-1}\mathbf{F}_{22})^{-1} \\ \gamma &= (\mathbf{H}_1 - \alpha\mathbf{F}_{11})\mathbf{F}_{12}^{-1}\end{aligned}\quad (33)$$

El camino seguido aquí es más general incluso aplicado al mismo caso escalar. Por ejemplo, para $Pe = 0$ y $r = 0$ (difusión pura) las dos raíces son iguales $\lambda_1 = \lambda_2$ y (9) ya no es la solución general de (1). Por el contrario, la relación (27) o (29) son siempre válidas, con la única condición de que \mathbf{K} sea no singular.

2.2. Ejemplo: la capa límite de Eckman ("Eckman layer")

Consideremos el caso de un flujo viscoso en un sistema no-inercial que está rotando con velocidad angular constante ω alrededor del eje z . u, v son las componentes de velocidad perpendiculares al eje de rotación y w la restante componente paralela al eje z , que consideraremos constante. Supondremos que el flujo es unidimensional según una coordenada paralela al eje de rotación $u = u(z)$, $v = v(z)$. Como el flujo está solicitado sólo por esfuerzos de corte, la presión resulta ser constante y u y v están regidos por un sistema como el (25) con

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \nu \mathbf{I}_{2 \times 2}, \quad \mathbf{A} = w \mathbf{I}_{2 \times 2}, \quad \mathbf{C} = \omega \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\quad (34)$$

donde ν es la viscosidad cinemática. Las condiciones de contorno son

$$\begin{aligned}u = v = 0, & \quad \text{en } z = 0, \\ \left. \begin{aligned}u &= 1 \\ v &= 0\end{aligned} \right\}, & \quad \text{en } z = 1\end{aligned}\quad (35)$$

Para construir las matrices de evolución es más simple reducir el sistema de ecuaciones a una sola ecuación escalar pero a valores complejos. Para ello, definimos $\phi = u + iv$ y verificamos que satisface la ecuación (1-2) con $k = \nu$, $u = w$, $c = i\omega$, $f = 0$, $\phi_0 = 0$ y $\phi_1 = 1$. La solución es de la forma (9-10), con la única diferencia que ahora

$r = ih^2\omega/\nu$ es un número imaginario puro y λ_{12} resultan ser, en general, complejos. Trabajando en base a la solución general (9), podemos encontrar la versión compleja de (29)

$$\phi_i = w^+(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) + w^-(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \quad (36)$$

con

$$\begin{aligned} w^+ &= [2 \sinh(-2wh/\nu)]^{-1} (\sinh(\lambda_1 h) - \sinh(\lambda_2 h)) \\ w^- &= -[2 \sinh(-2wh/\nu)]^{-1} (\cosh(\lambda_1 h) - \sinh(\lambda_2 h)) \end{aligned} \quad (37)$$

Las matrices de evolución se obtienen fácilmente de la siguiente asociación entre números complejos y matrices

$$z = a + ib \quad \rightarrow \quad \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix} \quad (38)$$

Una vez conocidas \mathbf{W}^+ y \mathbf{W}^- , las matrices α y γ pueden obtenerse a partir del sistema (31-32). Puede verse que todas las matrices involucradas son de la forma (38). Más aún esta forma es preservada por la multiplicación y adición de matrices y el complejo asociado a la suma (producto) de dos matrices de la forma (38) resulta ser el complejo resultante de la suma (producto) de los dos complejos correspondientes. Como corolario α y γ resultan ser de la forma (38) y por lo tanto basta con mostrar como se comportan las partes real e imaginaria de los complejos asociados α y γ . En las Figuras 18-21 puede observarse el comportamiento de las partes real e imaginaria de α y γ como función de Pe y $\text{Im}\{r\}$. En todos los casos puede verse que las funciones son acotadas y suaves. Tal como en el caso escalar, mostramos los valores de la parte real e imaginaria de las constantes α y γ para $Pe, \text{Im}\{r\} \rightarrow \infty$ con $Pe/\text{Im}\{r\} = \tan \mu = \text{cte}$ en la Figura 22.

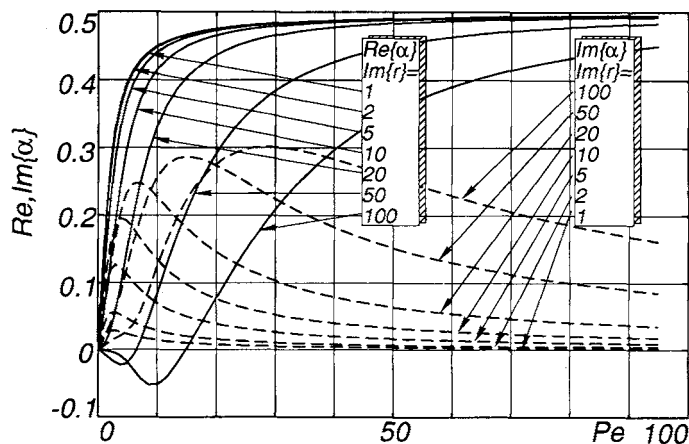


Figura 18. Partes real e imaginaria de la constante de proporcionalidad α para el problema de Eckman. Curvas en función de Pe a $\text{Im}\{r\} = \text{cte}$

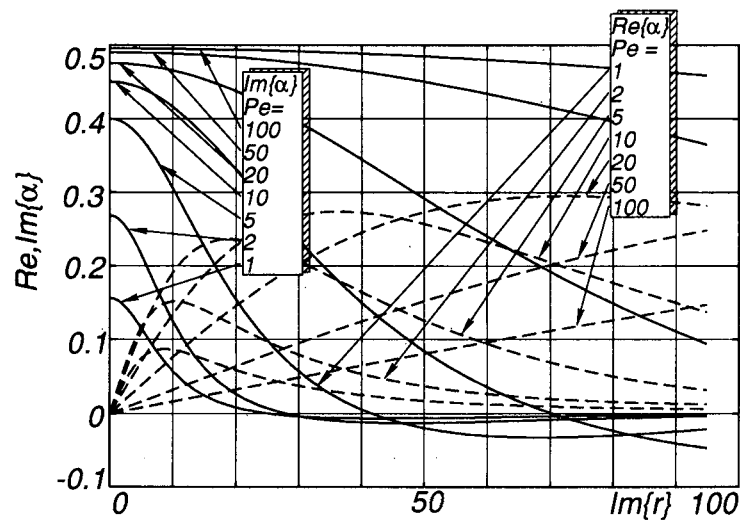


Figura 19. Idem Figura 18 pero como función de $\text{Im}\{r\}$ a $Pe = \text{cte}$

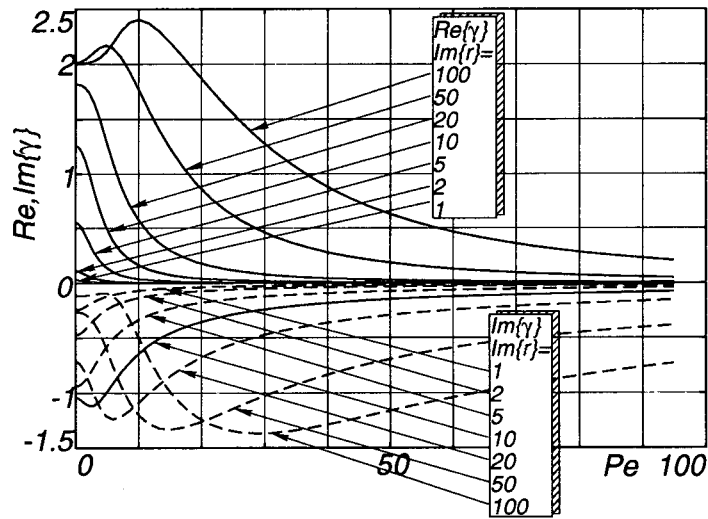


Figura 20. Idem Figura 18 pero para la constante de proporcionalidad γ

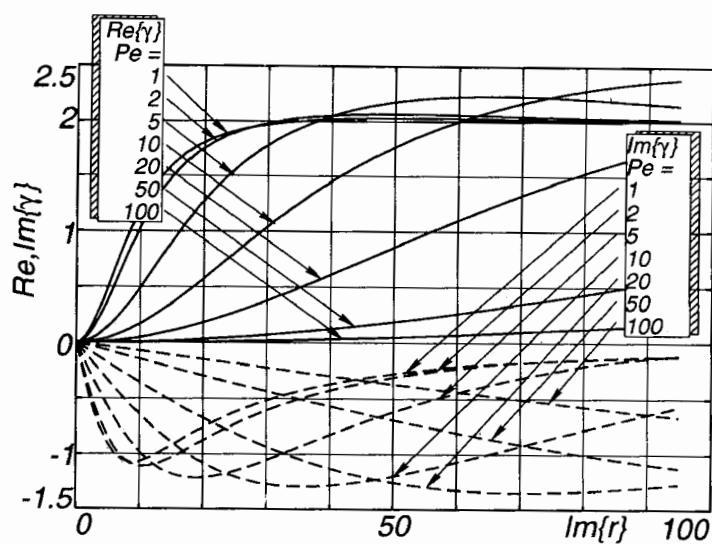


Figura 21. Idem Figura 19 pero para la constante de proporcionalidad γ

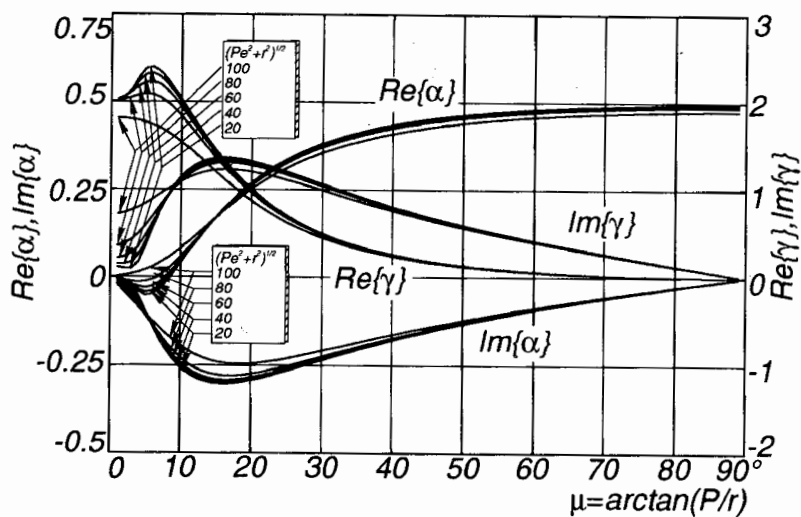


Figura 22. Comportamiento de la parte real e imaginaria de α y γ para $Pe, \text{Im}\{r\} \rightarrow \infty$, con $Pe/\text{Im}\{r\} = \tan \mu = \text{cte}$

2.3. Resultados numéricos

El objetivo de estos ejemplos numéricos es demostrar que el esquema propuesto exhibe superconvergencia mientras que Galerkin sufre de oscilaciones espurias. Consideramos 3 casos unidimensionales del problema de la capa límite de Eckman. Los parámetros físicos que se han variado son w y ω de la siguiente forma

<i>Figuras 23, 24 :</i>	$w = 0$	$\omega = 100$
<i>Figura 25 :</i>	$w = 0$	$\omega = 1000$
<i>Figura 26 :</i>	$w = -50$	$\omega = 100$

mientras que en todos los casos se ha mantenido $\nu = 1$, $h = 1/20$ (20 elementos en el intervalo). Nótese que este problema difiere ligeramente del problema de Eckman típico que corresponde a un medio infinito $z \geq 0$. Sin embargo, para altas velocidades de rotación ω el espesor de la capa límite es muy pequeño con respecto a la longitud del segmento y ambos casos coinciden.

En todos estos ejemplos, estamos en las condiciones de superconvergencia y se verifica que el método propuesto obtiene valores nodales exactos. Por el contrario, el método de Galerkin produce oscilaciones localizadas en el caso dominado por reacción (Figura 25), y las bien conocidas oscilaciones globales en el caso dominado por advección (Figura 26).

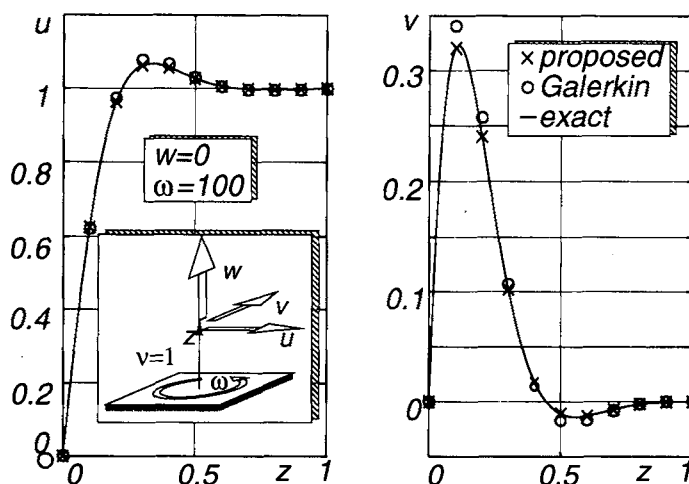


Figura 23. Problema unidimensional sin advección e índice de reacción moderado

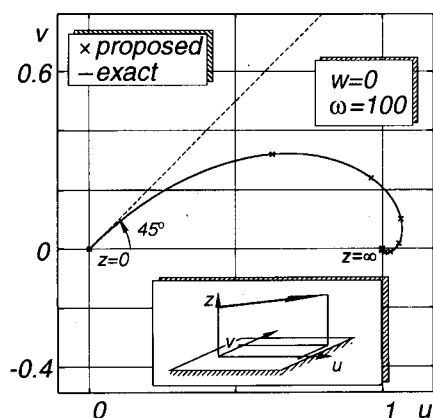


Figura 24. Gráfico polar de velocidades para el problema unidimensional de la Figura 23

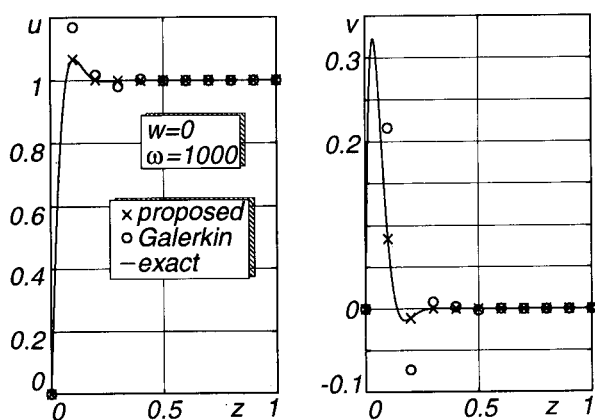


Figura 25. Problema unidimensional sin advección y alto índice de reacción

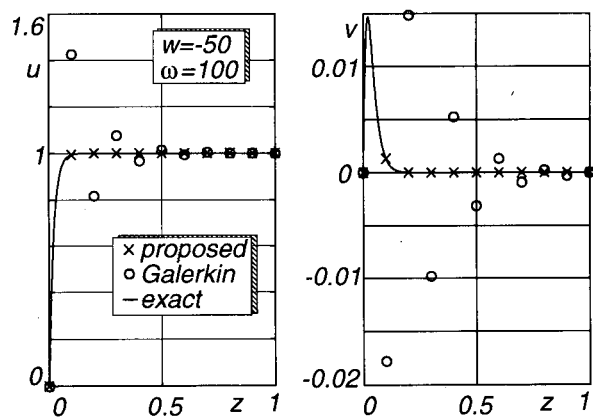


Figura 26. Problema unidimensional con advección y reacción

CONCLUSIONES

Se ha presentado un método de residuos ponderados de tipo *Petrov-Galerkin* para problemas de reacción-difusión con términos reactivos. El esquema se basa en la introducción de una función de perturbación simétrica, de tipo *burbuja* dentro de cada elemento y extiende el fenómeno de *superconvergencia* al caso reactivo. Se presenta varios ejemplos numéricos unidimensionales con solución exacta y también un ejemplo bidimensional. El esquema es extendido a sistemas de ecuaciones, presentándose como ejemplo, el caso de las ecuaciones de capa límite de Eckman que rigen el flujo de un fluido viscoso en un sistema no-inercial rotando con velocidad angular constante.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer al *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas* (CONICET, Argentina) por su apoyo financiero.

REFERENCIAS

1. T. Tezduyar, Y. Park, "Discontinuity capturing finite element formulations for nonlinear convection-difusion-reaction equations", *CMAME*, **59**, pp. 307–325, (1986).
2. A. Brooks and T. J. R. Hughes, "Streamline upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations", *CMAME*, **32**, pp. 199–259, (1982).
3. R. Codina, "A shock capturing anisotropic diffusion for the finite element solution of the diffusion-convection-reaction equation", *Numerical Methods in Engineering and Applied Sciences*, by E. Oñate (edt.), CIMNE, (Barcelona, Spain), (1993).
4. T. J. R. Hughes and M. Mallet, "A new finite element method for CFD: **IV**, A discontinuity-capturing operator for multidimensional advective-diffusive systems", *CMAME*, **58**, pp. 329–336, (1986).
5. S. Idelsohn, N. Nigro, M. Storti and G. Buscaglia, "A Petrov-Galerkin formulation for advection-reaction-diffusion problems", enviado a *CMAME*, (1994).