

Preprint of the paper

"Desarrollo de una Formulación Numérica basada en el M.E.F. para la Estabilización de Problemas de Transporte por Convección-Difusión"

C. A. Figueroa, I. Colominas, G. Mosqueira, F. Navarrina, M. Casteleiro (1999)

En "Métodos Numéricos en Ingeniería" (en CD-ROM), Parte III: "Convección-Difusión".

R. Abascal, J. Domínguez, G. Bugada (Editores); Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería CIMNE, Barcelona. (ISBN: 84-89925 45-3)

<http://caminos.udc.es/gmni>

DESARROLLO DE UNA FORMULACIÓN NUMÉRICA BASADA EN EL M.E.F. PARA LA ESTABILIZACIÓN DE PROBLEMAS DE TRANSPORTE POR CONVECCIÓN-DIFUSIÓN

C. Alberto Figueroa, Ignasi Colominas, Gonzalo Mosqueira, Fermín
Navarrina y Manuel Casteleiro

E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos
Universidad de La Coruña

Campus de Elviña. 15192 La Coruña, España

e-mail: colominas@iccp.udc.es, página web: <http://www.udc.es/caminos/dmmr/>

Palabras clave: Transporte por convección-difusión, Ponderación Petrov-Galerkin, Parámetros de estabilización

Resumen. *La modelización de problemas en mecánica de fluidos cuando la velocidad del fluido es elevada resulta complicada debido a la aparición de inestabilidades en la solución numérica al emplear esquemas convencionales basados en el Método de Elementos Finitos con ponderación de tipo Galerkin. En este artículo se revisan brevemente las causas que originan la aparición de estas oscilaciones en la solución numérica, se revisan las técnicas de estabilización para problemas de transporte con convección dominante, y se presenta una formulación numérica basada en el método de elementos finitos con un esquema de tipo Petrov-Galerkin, proponiéndose una técnica para la determinación de los parámetros de estabilización para problemas en una, dos y tres dimensiones.*

1 INTRODUCCIÓN

La resolución numérica de problemas en mecánica de fluidos presenta grandes dificultades especialmente cuando la velocidad con la que se mueve el fluido es elevada. El empleo de una de las técnicas más potentes y más ampliamente extendidas para la resolución de problemas en mecánica computacional como es el Método de los Elementos Finitos, que ha sido aplicado con éxito a una innumerable cantidad de problemas prácticos en ingeniería, presenta sin embargo serios inconvenientes cuando se resuelven problemas de fluidos con convección importante^{1,2}. Estos problemas se manifiestan sobre todo en la aparición de fuertes oscilaciones en la solución numérica en ciertas zonas del dominio.

Para iniciar el estudio de las claves que determinan este comportamiento, se aborda el análisis de la ecuación del transporte por convección-difusión, que puede interpretarse como la *versión lineal* de las ecuaciones que rigen el movimiento de un fluido (ecuaciones de Navier-Stokes). De esta forma, es posible estudiar de forma más sencilla las razones que desde un punto de vista numérico dificultan la resolución de este tipo de problemas, puesto que se separan el carácter no lineal de la ecuación y el carácter oscilatorio. Es precisamente este último el aspecto que más complica la resolución de las ecuaciones de Navier Stokes.

En este artículo se revisan en primer lugar las causas que motivan la aparición de este tipo de oscilaciones en la solución numérica de la ecuación del transporte, y se repasan las distintas formulaciones alternativas a la de Galerkin para tratar este tipo de problemas. Además, se propondrá una metodología para la evaluación de los parámetros de estabilización que precisan estas formulaciones alternativas^{3,4}.

2 MODELO MATEMÁTICO DEL PROBLEMA FÍSICO

2.1 Planteamiento del problema general

En los fenómenos de transporte en un medio fluido están presentes dos mecanismos físicos claramente diferenciados. El primero de estos mecanismos se puede constatar fácilmente realizando un sencillo experimento consistente en introducir unas gotas de tinta en un fluido en reposo, en el que se puede observar cómo la tinta se expande a través del líquido como resultado del movimiento intermolecular de las partículas de ambas sustancias. Este fenómeno se denomina *difusión*, y está descrito por la ecuación parabólica

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla \phi) \quad (1)$$

donde ϕ es la incógnita transportada y \mathbf{K} es el tensor de difusividades del medio.

El segundo mecanismo que interviene en los fenómenos de transporte aparece cuando el fluido está en movimiento: cualquier sustancia que se introduzca en el líquido es arrastrada por éste en un proceso que se denomina *convección*.

En ausencia de difusión, el cuerpo introducido en el fluido será arrastrado por el flujo (ver fig. 1), pudiendo caracterizarse este movimiento para un problema unidimensional mediante la ecuación de ondas (problema hiperbólico):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

donde c es la *celeridad* o velocidad del movimiento del fluido.

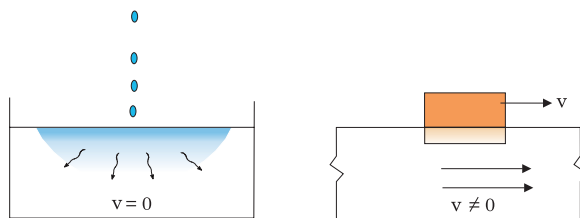


Fig. 1.- Naturaleza difusiva y convectiva del transporte

Se entiende por tanto la importancia de ambos mecanismos en los procesos de transporte de cualquier sustancia. La preeminencia de uno u otro será la que definirá las características del proceso.

Procedemos a continuación a obtener la expresión que rige ambos procesos conjuntamente y que define por tanto la ecuación diferencial empleada para el estudio de problemas de transporte. Para ello es necesario obtener primeramente la *ecuación de equilibrio* o *principio de conservación*. Según este principio, la disminución (o incremento) de una determinada sustancia en el interior de un dominio Ω es igual al flujo neto \mathbf{q} afluente (o efluente) de dicha sustancia a través del contorno Γ . De esta forma, se tiene

$$\int_{\Omega} \frac{d}{dt}(\rho\phi)d\Omega + \int_{\Gamma} \rho\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}d\Gamma = 0 . \quad (3)$$

Como se puede observar, la primera de las integrales de (3) contiene la *derivada total* de la magnitud $\rho\phi$. En un sistema de referencia *euleriano*, esta derivada total se puede expresar, (asumiendo ρ constante) como

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi . \quad (4)$$

El término $\mathbf{u} \cdot \nabla \phi$ representa la convección de la concentración de una determinada sustancia (o de cualquier otra magnitud escalar) a través de la corriente de un fluido de velocidad \mathbf{u} y constituirá la componente convectiva en la ecuación diferencial que rige los fenómenos de transporte.

Por otra parte, la aplicación del Teorema de Gauss de la divergencia a la segunda de las integrales de (3) conduce a

$$\int_{\Omega} \left(\frac{d\phi}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{q} \right) d\Omega = 0 . \quad (5)$$

La ecuación constitutiva que relaciona el flujo con la concentración viene dada⁵ por

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla\phi . \quad (6)$$

En el caso de que el medio se pueda considerar *isótropo*, este tensor se expresa en términos de una difusividad escalar k de forma que

$$\mathbf{K} = k\mathbf{I} . \quad (7)$$

Si se sustituye (6) en (5) y se acepta que el integrando definido en (5) es continuo para todos los puntos del dominio Ω , se obtiene finalmente la ecuación general que rige los procesos de transporte por convección-difusión

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = \nabla \cdot (k\nabla\phi) . \quad (8)$$

2.2 Tratamiento dimensional del problema

Para ilustrar la doble naturaleza del fenómeno desde un punto de vista matemático, analizaremos la ecuación (8) para el caso de un problema unidimensional en el que el medio es isótropo y homogéneo:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + u \frac{\partial\phi}{\partial x} = k \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} . \quad (9)$$

Si se denomina l y u_0 a una longitud y velocidad características del dominio, entonces $\tau = l/u_0$ es una escala de tiempo característica del problema. De esta forma, se pueden definir las magnitudes adimensionales

$$\hat{x} = \frac{x}{l} , \quad \hat{t} = \frac{t}{\tau} , \quad \hat{u} = \frac{u}{u_0} , \quad \hat{\phi} = \frac{\phi}{\tau} . \quad (10)$$

Sustituyendo estas relaciones en la ecuación (9) y simplificando, se obtiene

$$\frac{\partial\hat{\phi}}{\partial\hat{t}} + \hat{u} \frac{\partial\hat{\phi}}{\partial\hat{x}} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2\hat{\phi}}{\partial\hat{x}^2} , \quad (11)$$

donde Pe es el número de Péclet ($Pe = \frac{u_0 l}{k}$).

Los valores del número de Péclet para un problema dado determinan el comportamiento del proceso. Así, para valores elevados del número de Péclet, la ecuación (11) tiende asintóticamente a la ecuación de ondas en tanto que a medida que el número de Péclet se hace menor, (i.e., a medida que los fenómenos difusivos van adquiriendo más importancia frente a los convectivos) llegamos al otro extremo del comportamiento del fenómeno.

Como veremos más adelante, esta doble naturaleza del transporte, esta *competición* entre los términos convectivos y difusivos es la verdadera causa del mal funcionamiento de los esquemas convencionales de resolución numérica de la ecuación del transporte⁶.

3 FORMULACIÓN VARIACIONAL DEL PROBLEMA

3.1 Aproximación numérica mediante el Método de Elementos Finitos con ponderación tipo Galerkin

A continuación se obtendrá la expresión variacional del problema de transporte definido por la ecuación (8) y por unas condiciones iniciales y de contorno:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi &= \nabla \cdot (k \nabla \phi) \quad \text{en } \Omega, \quad t > 0; \\ \phi &= \phi_0 \quad \text{en } \Gamma_1; \quad \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = \gamma - a\phi \quad \text{en } \Gamma_2; \end{aligned} \tag{12}$$

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega,$$

siendo Ω el dominio en el que se estudia el fenómeno, Γ_1 la parte del contorno del dominio en donde se prescriben valores de la función ϕ , y Γ_2 la parte del contorno en donde se prescriben valores de flujo, verificándose necesariamente que

$$\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma, \quad \Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset, \tag{13}$$

donde Γ es el contorno de Ω . En el problema planteado en (12), ϕ_0 , a y γ son en general funciones o datos conocidos que pueden depender de la posición y del tiempo.

Una formulación variacional del problema (12) puede formularse del modo siguiente: determinar la función ϕ tal que el problema de contorno (12) se satisfaga en el sentido de residuos ponderados, es decir, que se verifique

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (k \nabla \phi) \right\} w d\Omega + \int_{\Gamma_2} \{ \nabla \phi \cdot \mathbf{n} - \gamma + a\phi \} w_{\Gamma_2} d\Gamma_2 = 0, \tag{14}$$

para todas las funciones w y w_{Γ_2} de una determinada clase definidas en Ω y Γ_2 ⁸. La aplicación del teorema de la divergencia⁷ permite obtener una forma débil de esta

expresión variacional:

$$\int_{\Omega} \left\{ w \frac{\partial \phi}{\partial t} + w \mathbf{u} \cdot \nabla \phi + k \nabla \phi \cdot \nabla w \right\} d\Omega + \int_{\Gamma_2} a \phi k w d\Gamma_2 = \int_{\Gamma_2} \gamma k w d\Gamma_2. \quad (15)$$

Una vez obtenida la forma débil, se define una aproximación discreta a la solución del problema. Para ello, se realiza una partición del dominio Ω en e elementos $\Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3 \cup \dots \cup \Omega_e$ de forma que $\Omega_i \cap \Omega_j = 0$; si $i \neq j$. De este modo, se obtiene una aproximación Ω_h al dominio Ω . A continuación se define una aproximación a la solución mediante una base de funciones de forma p_j de carácter local de modo que

$$\phi \approx \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^n \phi_j(t) p_j(\mathbf{x}). \quad (16)$$

Por último, la elección de n funciones de test w_i permite obtener un sistema de n ecuaciones con n incógnitas, que constituye la aproximación discreta al problema (12). En ponderaciones de tipo Galerkin, el espacio funcional de las funciones de test es el mismo que el de las funciones de forma, es decir, $p_j = w_j$, $j = 1, n$. De este modo, la discretización del dominio, de su contorno y de la función incógnita ϕ reduce la forma variacional (15) al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales lineales:

$$\mathbf{B} \frac{d\boldsymbol{\phi}}{dt} + \mathbf{A} \boldsymbol{\phi} = \mathbf{c}, \quad (17)$$

siendo

$$\begin{aligned} B_{ij} &= \left[\int_{\Omega_h} p_i p_j d\Omega_h \right], \\ A_{ij} &= \left[\int_{\Omega_h} (\mathbf{u} \cdot \nabla p_j) p_i d\Omega_h \right] + \left[k \int_{\Omega_h} \nabla p_j \cdot \nabla p_i d\Omega_h \right] + \left[a k \int_{\Gamma_{2h}} p_i p_j d\Gamma_{2h} \right], \\ c_i &= \left[\gamma k \int_{\Gamma_{2h}} p_i d\Gamma_{2h} \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

para $i, j = 1, 2, \dots, n$

Las expresiones (17) y (18) definen la aproximación a un problema de transporte mediante el Método de los Elementos Finitos empleando una ponderación convencional de tipo Galerkin. Como se verá es precisamente esta ponderación la que hace que, en presencia de convección importante, se obtengan aproximaciones a la solución de tipo oscilatorio.

3.2 Causas del comportamiento oscilatorio

En la bibliografía^{7,8} se demuestra que en presencia de convección elevada, el esquema numérico obtenido mediante una ponderación de Galerkin es incapaz de reproducir con exactitud tanto la *frecuencia* como la *amplitud* de una determinada función propia de la solución analítica conocida de un problema dado. Al hablar de amplitud y de fase, parece claro que algún momento deben aparecer una serie de *valores propios complejos* que son los causantes de estas distorsiones. A continuación se presenta un ejemplo⁸ con el fin de explicar la aparición de estos autovalores complejos y su repercusión en la resolución del problema.

Si se plantea la integración del sistema definido en (17) mediante un esquema de integración temporal de diferencias hacia delante, se obtiene:

$$\mathbf{B} \left(\frac{\boldsymbol{\phi}(t + \Delta t) - \boldsymbol{\phi}(t)}{\Delta t} \right) + \mathbf{A}\boldsymbol{\phi}(t) = \mathbf{c}(t) + \theta(\Delta t), \quad (19)$$

que, denominando $t^j = t$ y $t^{j+1} = t + \Delta t$, se puede reescribir de la forma siguiente:

$$\boldsymbol{\phi}^{j+1} = (\mathbf{I} - \Delta t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}) \boldsymbol{\phi}^j + \Delta t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{c}^j. \quad (20)$$

Para simplificar el análisis se considerará la ecuación diferencial homogénea, haciendo $\mathbf{c} = \mathbf{0}$. De esta forma, se puede constatar que la solución en un tiempo $j + 1$ se obtiene a partir de la solución en un tiempo j escalada por el factor

$$(\mathbf{I} - \Delta t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}). \quad (21)$$

Con el fin de analizar la evolución temporal de la solución ϕ es preciso definir una norma para dicho factor, que puede hacerse a partir de los autovalores de la matriz $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}$ ⁸. El estudio y el desarrollo completo de este análisis es bastante complejo por lo que no se presentará en este artículo (puede encontrarse en las referencias^{7,8} de la bibliografía); no obstante, a continuación se mostrará en un ejemplo que, en condiciones de convección elevada, los autovalores de esta matriz pueden llegar a ser complejos, por lo que la solución numérica obtenida mediante la ponderación de Galerkin presentará oscilaciones espúreas. Para ello, consideraremos un problema unidimensional en el que se discretiza el dominio con elementos lineales de dos nodos de tamaño h , obteniéndose las siguientes expresiones para las matrices elementales definidas en (18):

$$\mathbf{B} = \frac{h}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}; \quad (22)$$

$$\mathbf{A} = \frac{u}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{k}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Si se prescinde del cálculo de estados transitorios y se plantea directamente el estado estacionario, las matrices elementales definidas en (22) conducen al siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\left[\frac{u}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & & & & \\ -1 & 0 & 1 & & & & \\ 0 & -1 & 0 & & & & \\ & & & \dots & & & \\ & & & & 0 & 1 & 0 \\ & & & & -1 & 0 & 1 \\ & & & & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{k}{h} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & \\ 0 & -1 & 2 & & & & \\ & & & \dots & & & \\ & & & & 2 & -1 & 0 \\ & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \dots \\ \phi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_n \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Como se aprecia, la matriz de rigidez del sistema (23) es el resultado de ensamblar las componentes convectiva y difusiva de la matriz elemental \mathbf{A} definida en (22). La componente convectiva proporciona una matriz antimétrica, con muchos elementos nulos en la diagonal principal, que es la responsable de la aparición de autovalores complejos en la matriz de rigidez del sistema si es importante la convección frente a la difusión. Esta circunstancia se ilustra en los siguientes casos correspondientes a una malla de 7 elementos lineales, determinando los valores propios para dos números de Péclet distintos:

1. *Difusión dominante.*

2. *Convección dominante*

$$u=2, \quad k=5, \quad h=1, \quad Pe = 0.4$$

$$u=12, \quad k=5, \quad h=1, \quad Pe = 2.5$$

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \lambda_4 \\ \lambda_5 \\ \lambda_6 \\ \lambda_7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 18.828 \\ 16.109 \\ 12.180 \\ 7.820 \\ 3.891 \\ 1.172 \\ 0.000 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \lambda_4 \\ \lambda_5 \\ \lambda_6 \\ \lambda_7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 00.0 + 0.00i \\ 10.0 - 4.14i \\ 10.0 - 1.48i \\ 10.0 + 1.48i \\ 10.0 - 5.98i \\ 10.0 + 5.98i \\ 10.0 + 4.14i \end{bmatrix}$$

Nótese que, a la vista de la expresión (23), una forma de estabilizar el problema (i.e., dar más peso a la componente difusiva frente a la convectiva) es realizar un mallado más fino, obteniéndose de este modo un tamaño de elemento h más pequeño que aumentará la importancia de la componente simétrica de la matriz de rigidez global. En problemas en dos y tres dimensiones es obvio que esta operación representaría un enorme incremento del coste computacional. Por ello, se han propuesto diversas formulaciones que tratan de obtener esquemas numéricos más estables, planteando ponderaciones distintas a las de tipo Galerkin con el fin de dar más peso a la parte difusiva de las matrices elementales.

4 FORMULACIONES ALTERNATIVAS A LA DE GALERKIN PARA LA ESTABILIZACIÓN DEL PROBLEMA

La vía para intentar solucionar los problemas que se han visto hasta ahora es la de utilizar formulaciones variacionales distintas a la de Galerkin para la resolución de la ecuación del transporte. Muchos autores han investigado sobre este aspecto en los últimos años y se han enunciado varias formulaciones alternativas, que en realidad presentan grandes similitudes entre sí. Entre algunas de estas formulaciones se encuentran las de *Streamline Upwind / Petrov-Galerkin (SUPG)*⁹, *Space-time Galerkin/least-squares (ST-GLS)*¹⁰, *Characteristic Galerkin Method (CG)*¹¹, *Subgrid Scale Method (SGS)*¹² y *Taylor-Galerkin Method (TG)*¹³. Esencialmente, todos estos métodos consisten en la adición de un término estabilizador a la formulación de tipo Galerkin. De esta forma, a la expresión variacional del problema definida en (15)

$$\int_{\Omega_h} \left\{ w_h \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} + w_h \mathbf{u} \cdot \nabla \tilde{\phi} + k \nabla \tilde{\phi} \cdot \nabla w_h \right\} d\Omega_h + \int_{\Gamma_{2h}} a \tilde{\phi} k w_h d\Gamma_{2h} = \int_{\Gamma_{2h}} \gamma k w_h d\Gamma_{2h}, \quad (24)$$

se le añade¹⁴ un término de la forma:

$$\int_{\Omega_h} \mathcal{P}(w_h) \tau \mathcal{R}(p_h) d\Omega, \quad (25)$$

siendo $\mathcal{P}(w_h)$ un operador aplicado al espacio funcional w_h de las funciones de test, τ un parámetro con dimensiones temporales y $\mathcal{R}(p_h)$ el residuo de la ecuación diferencial a resolver al aproximar la solución ϕ mediante un conjunto de funciones de prueba p_h

$$\mathcal{R}(p_h) = \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \tilde{\phi} - \nabla \cdot (k \nabla \tilde{\phi}). \quad (26)$$

Este planteamiento es el punto de partida de los métodos antes enunciados. En el caso de las formulaciones de Petrov-Galerkin, se introduce este término estabilizador mediante la adición de un sesgo a las funciones de test en el sentido contrario al de las líneas de corriente. Así, para un elemento unidimensional de 2 nodos, se definen las funciones de test $w_i(\xi)$ a partir de las de forma $p_i(\xi)$ de la siguiente manera (ver figura 2):

$$p_i(\xi) = \begin{cases} p_1(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi) \\ p_2(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi) \end{cases} \quad (27)$$

$$w_i(\xi) = \begin{cases} w_1(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi) - \frac{\alpha}{4}(1 + \xi)(1 - \xi) \\ w_2(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi) + \frac{\alpha}{4}(1 + \xi)(1 - \xi) \end{cases} \quad (28)$$

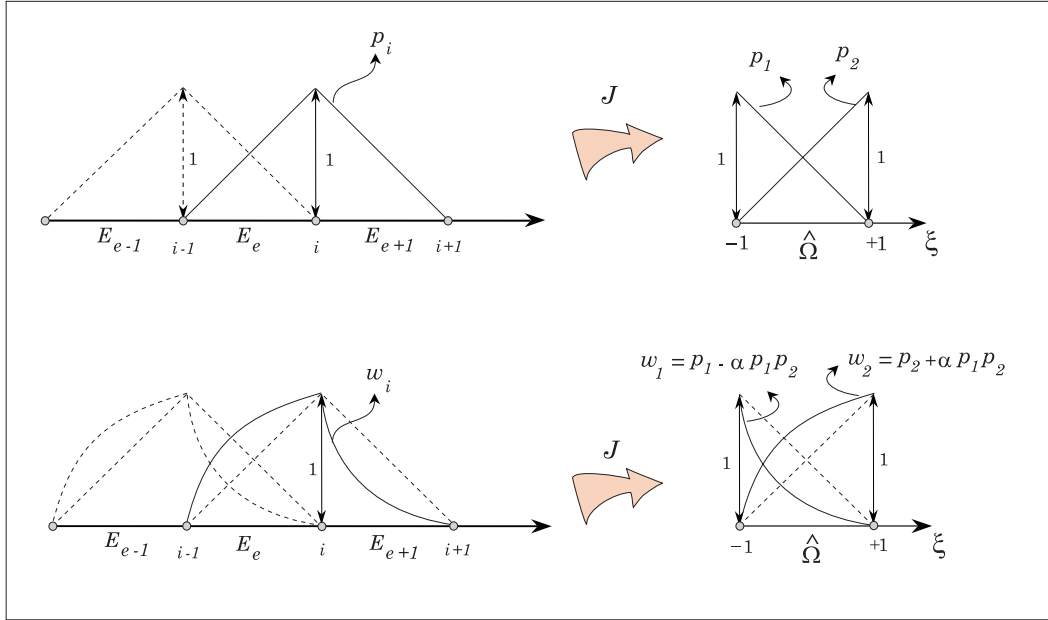


Fig. 2.- Funciones de prueba lineales a trozos y funciones de test *sesgadas* cuadráticas empleadas en formulaciones Petrov-Galerkin

donde α es un factor de escala que determina la magnitud del sesgo aplicada (*parámetro upwind*).

La determinación de los valores que tienen que adoptar estos parámetros en función de la velocidad del fluido es precisamente una de las cuestiones abiertas dentro de este ámbito. Así, los métodos propuestos para su evaluación consisten entre otras en técnicas tan distintas como la imposición de soluciones nodales exactas a partir del conocimiento de soluciones analíticas^{6,3,4}, o bien en la imposición de una reducción en las oscilaciones al comparar los resultados obtenidos con una malla pobre y una malla mejorada o una solución suavizada¹⁵.

A continuación presentaremos una nueva metodología para la determinación de este tipo de parámetros de estabilización basándonos en un análisis de autovalores de las matrices elementales, según las ideas expuestas anteriormente. Antes de pasar al desarrollo de la metodología propuesta, comprobaremos cómo introducir un sesgo en las funciones de test en el sentido contrario al de las líneas de corriente produce un efecto estabilizador en las matrices de rigidez elementales. Así, si se analiza por simplicidad el caso de elementos unidimensionales lineales, empleando las funciones de test definidas en (28), se obtiene una expresión para el sistema de ecuaciones diferenciales resultante de discretizar el problema mediante el M.E.F. de la forma⁸:

$$\left(\mathbf{B} \frac{d\boldsymbol{\phi}}{dt} + u \mathbf{A}_1 \boldsymbol{\phi} + k \mathbf{A}_2 \boldsymbol{\phi} \right) + \alpha \left(\hat{\mathbf{B}} \frac{d\boldsymbol{\phi}}{dt} + u \hat{\mathbf{A}}_1 \boldsymbol{\phi} + k \hat{\mathbf{A}}_2 \boldsymbol{\phi} \right) = \mathbf{c}. \quad (29)$$

El análisis de las matrices elementales asociadas a la contribución cuadrática $\widehat{\mathbf{B}}$, $\widehat{\mathbf{A}}_1$ y $\widehat{\mathbf{A}}_2$ es de especial interés para comprender cómo este método estabiliza el problema. Las expresiones de estas matrices elementales son

$$\widehat{\mathbf{B}}^e \equiv [\widehat{b}_{ij}]_e = \frac{h}{12} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (30)$$

$$\widehat{\mathbf{A}}_1^e \equiv [\widehat{a}_{1ij}]_e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (31)$$

$$\widehat{\mathbf{A}}_2^e \equiv [\widehat{a}_{2ij}]_e = \mathbf{0}. \quad (32)$$

Obsérvese que la matriz elemental (31) es una nueva aportación convectiva al término recogido en (22), y es una matriz simétrica, que tenderá a estabilizar la matriz antimétrica (22) cuanto más alto sea el valor del parámetro α . Asimismo, la nueva aportación difusiva dada por (32) es nula, lo cual también resulta ventajoso, puesto que no se modifica la matriz simétrica que ya aparecía en (22). Es conveniente resaltar que este análisis se puede realizar también^{3,4} para elementos de orden superior y en dos y tres dimensiones, obteniéndose conclusiones análogas. Por ello, nuestro objetivo va a consistir en el desarrollo de formulaciones numéricas que conduzcan a esquemas numéricos estables mediante la conveniente ponderación de las matrices elementales difusivas y convectivas, y concretamente en la determinación de estos parámetros de estabilización.

5 FUNDAMENTO DEL MÉTODO DE DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS DE ESTABILIZACIÓN QUE SE PROPONE

Los elementos A_{ij} de la matriz de rigidez (18) prescindiendo de las integrales asociadas a la imposición de un flujo en los contornos, son

$$A_{ij} = \left[\int_{\Omega_h} (\mathbf{u} \cdot \nabla p_j) p_i \, d\Omega_h \right] + \left[\int_{\Omega_h} k \nabla p_j \cdot \nabla p_i \, d\Omega_h \right]. \quad (33)$$

Como se puede apreciar, cada matriz de rigidez elemental está compuesta por la aportación de un término de naturaleza convectiva, que proporciona matrices elementales antimétricas; y de un término de naturaleza difusiva, que proporciona matrices elementales simétricas. Se ha visto que cuando la aportación convectiva es muy importante (asociada a números de Péclet elevados), la matriz de rigidez elemental puede presentar autovalores complejos, que se irán ensamblando en la matriz de rigidez global, originando de este modo un problema mal condicionado que tendrá con seguridad un carácter oscilatorio.

Para solucionar este problema se recurre a formulaciones como la de Petrov-Galerkin, que modifican el espacio funcional de las funciones de test, introduciéndoles un sesgo

contracorriente para estabilizar estas matrices antimétricas asociadas a la convección, tal y como se ha visto en las ecuaciones (29)-(32). La cuestión es ahora determinar la cuantía de este sesgo.

El fundamento del método que proponemos es el siguiente: en una primera aproximación el cálculo de las matrices elementales se realiza asignando un valor nulo al parámetro o parámetros de estabilización, con lo que en realidad se está aplicando un método de Galerkin. Una vez hecho esto, se realiza el cálculo o la estimación del conjunto de autovalores $\{\lambda_i\}$ de cada matriz de rigidez elemental \mathbf{A}_e y se comprueba si son complejos. En tal caso, para los elementos en los que todos los valores propios sean reales, el valor de los parámetros de estabilización será nulo. Por el contrario, si esto no se verifica entonces se determina un valor de los parámetros de estabilización tal que haga que los autovalores de dichas matrices de rigidez elementales dejen de ser complejos. Es decir, se pretende encontrar:

$$\{\alpha_e\} / Im\{\lambda_i [\mathbf{A}_e]\} = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad \forall e, \quad (34)$$

siendo $\{\alpha_e\}$ el conjunto de los parámetros de estabilización de un determinado elemento.

En este punto es conveniente resaltar una característica importante de esta metodología de cálculo: resulta totalmente general para problemas en una, dos e incluso tres dimensiones. No calcula los parámetros mediante procedimientos de tipo heurístico, y no depende de si en el problema que se pretende resolver existen fuentes internas, términos reactivos, etc. Es por tanto una metodología general, conceptualmente sencilla, que conduce a la estabilización del esquema numérico a partir del análisis de las matrices elementales de la discretización en elementos finitos del problema.

En la actualidad los autores estamos desarrollando una metodología para la determinación, a partir de la información de los valores propios, de los parámetros de estabilización para problemas bidimensionales y tridimensionales, habiendo obtenido ya resultados muy prometedores en problemas unidimensionales, y en los bidimensionales estudiados hasta el momento⁸. A continuación se presenta un ejemplo de aplicación en el que se ofrecen los resultados obtenidos para la resolución de un problema de transporte unidimensional convectivamente dominante.

6 EJEMPLO DE APLICACIÓN

A continuación presentamos los resultados obtenidos para la solución del problema unidimensional definido por (ver figura 3):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = k \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L \quad (35)$$

$$\phi(0) = \phi_0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial x}(L) = h[\phi_L - \phi(L)] \quad (36)$$

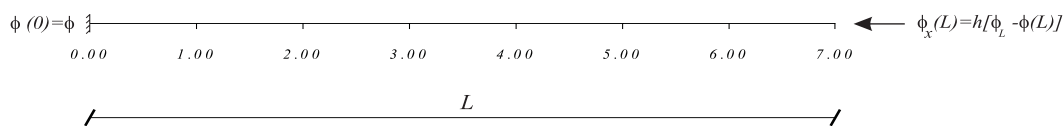


Fig. 3.- Dominio y condiciones de contorno del problema unidimensional resuelto

Los parámetros de la discretización elegida para la solución de este problema son:

Número de elementos = 10 Número de nodos por elemento = 3
 $\phi_0 = 0.001$ $\phi_L = 0.005$ $h = 1.0$ Difusividad $k = 0.002$

Asimismo, en el dominio se considera un campo de velocidades cuyo perfil se representa a continuación:

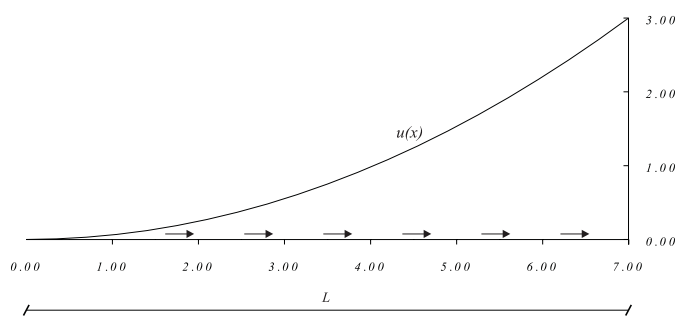


Fig. 4.- Perfil de velocidades para el problema definido en (34) y (35)

Este perfil de velocidades proporciona la siguiente distribución de números de Péclet elementales, que, como se puede apreciar, resultan al final del dominio muy elevados:

Elemento	Velocidad elemental	Numero de Péclet
1	0.01250	2.18750
2	0.07250	12.68750
3	0.19250	33.68750
4	0.37250	65.18750
5	0.61250	107.18750
6	0.91250	159.68750
7	1.27250	222.68750
8	1.69250	296.18750
9	2.17250	380.18750
10	2.71250	474.68750

Tabla 1. Distribución de números de Péclet para el dominio de la Fig. 3

A continuación presentamos los resultados obtenidos con distintas formulaciones, comparándolos con la solución 'exacta' del problema. Para obtener la solución 'exacta' se ha utilizado una malla muy fina (1000 elementos), con ponderación convencional tipo Galerkin.

1.- *Ponderación de Galerkin. Malla de 20 elementos lineales.*

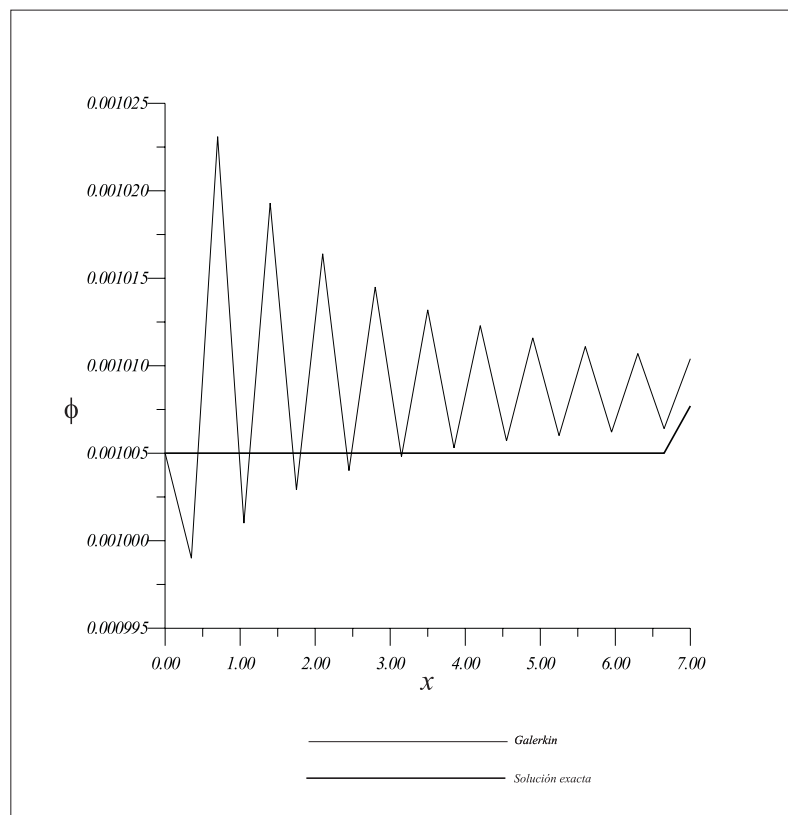


Fig. 5.- Solución exacta *versus* solución tipo Galerkin

Como se puede apreciar, las oscilaciones en la solución de tipo Galerkin son muy elevadas, tal y como era de esperar. La aproximación a la solución resulta tremendamente pobre.

2.- *Ponderación de Petrov-Galerkin con determinación clásica de parámetros. Malla de 20 elementos lineales.*

A continuación presentamos los resultados obtenidos empleando una formulación de tipo Petrov Galerkin, para elementos lineales de dos nodos según las expresiones (27) y (28). Un parámetro de estabilización clásico recogido en la bibliografía⁶ para este tipo

de elementos es

$$\alpha = \coth(\gamma) - \frac{1}{\gamma}, \quad (37)$$

en donde

$$\gamma = \frac{uh}{2k} = \frac{Pe}{2}. \quad (38)$$

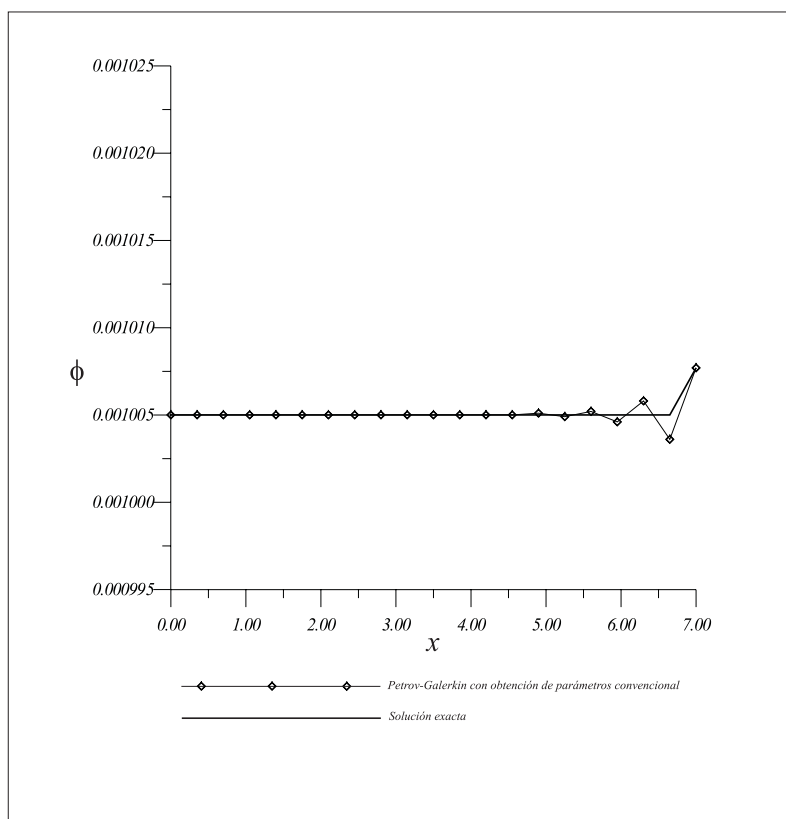


Fig. 6.- Solución exacta *versus* solución tipo Petrov Galerkin con determinación convencional de parámetros

Se puede apreciar que la mejoría de resultados con respecto a la formulación de Galerkin es muy considerable. El parámetro de estabilización definido en (37) se obtiene como resultado de imponer que las ecuaciones nodales que proporciona el esquema discreto obtenido mediante el método de elementos finitos tengan error de truncamiento nulo en los nodos⁶.

Pasamos a continuación a estabilizar el problema mediante el método aquí propuesto.

3.- *Ponderación de Petrov-Galerkin con determinación de parámetros propuesta. Malla de 10 elementos cuadráticos.*

La estabilización se ha realizado en este caso empleando elementos cuadráticos de tres nodos. Se han definido sólo 10 elementos para disponer del mismo número total de nodos en la malla para poder comparar resultados. Las funciones de forma y de test empleadas en este caso son:

$$p_i(\xi) = \begin{cases} p_1(\xi) = \frac{\xi(\xi - 1)}{2} \\ p_2(\xi) = \frac{\xi(\xi + 1)}{2} \\ p_3(\xi) = (1 - \xi^2) \end{cases} \quad (39)$$

$$w_i(\xi) = \begin{cases} w_1(\xi) = \frac{\xi(\xi - 1)}{2} - \alpha(\xi^3 - \xi) \\ w_2(\xi) = \frac{\xi(\xi + 1)}{2} - \alpha(\xi^3 - \xi) \\ w_3(\xi) = (1 - \xi^2) + \alpha(\xi^3 - \xi) \end{cases} \quad (40)$$

A continuación se muestran los valores del coeficiente α de estabilización (figura 7) calculado según el método propuesto en cada elemento del dominio, así como la solución numérica obtenida con esta técnica (figura 8).

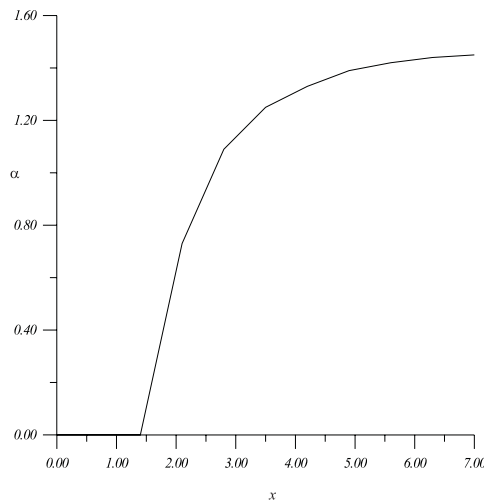


Fig. 7.- Parámetro estabilizado α para cada elemento del dominio

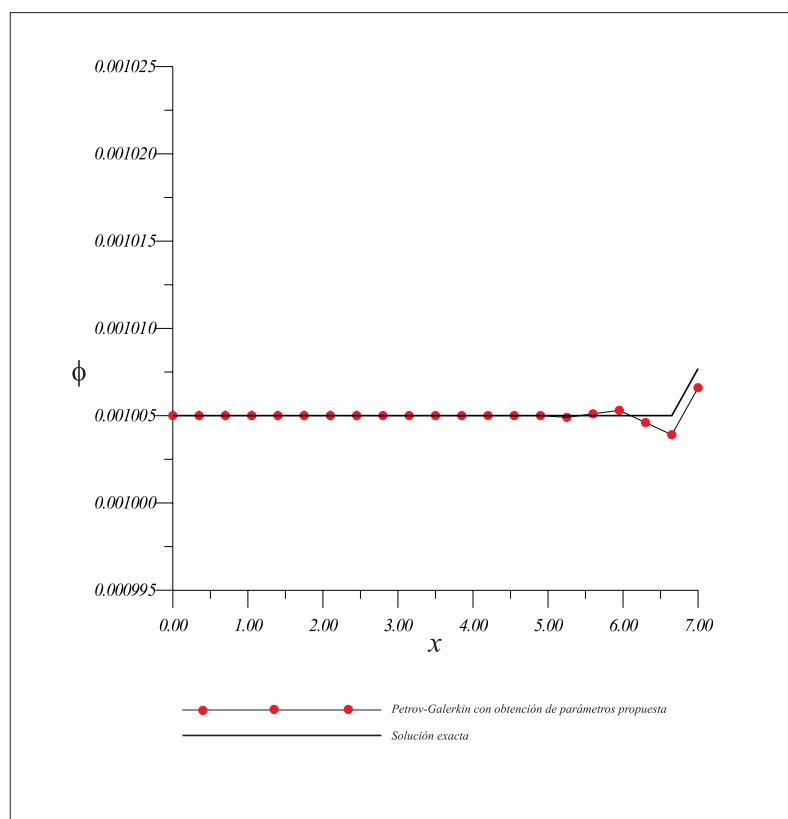


Fig. 8.- Solución exacta *versus* solución tipo Petrov Galerkin con determinación de parámetros propuesta

Como se puede observar, los resultados obtenidos son iguales o mejores que los calculados con la formulación convencional de Petrov-Galerkin (figura 6). El grado de amortiguamiento de las oscilaciones es notable, y se puede comprobar en la figura 7 que el valor del parámetro de estabilización α es más elevado a medida que la velocidad en el dominio es mayor, como era de esperar. La ventaja de esta propuesta es que la determinación de los parámetros de estabilización no depende de ningún método heurístico ni de los términos que componen la ecuación diferencial del problema, sino que se obtienen del análisis de las matrices elementales de la discretización.

7 CONCLUSIONES

En este artículo se ha presentado una nueva metodología para el cálculo de los parámetros de estabilización que intervienen en formulaciones de Petrov-Galerkin. La determinación de estos parámetros se realiza a partir de un análisis de los autovalores de las matrices elementales de la malla de elementos finitos. De esta forma, partiendo únicamente de la información que aportan estas matrices, se busca el parámetro o parámetros de estabilización que consigan que no existan autovalores complejos.

Esta forma de evaluar los parámetros resulta totalmente general y es aplicable por

tanto a elementos de distinto orden y a problemas en una, dos y tres dimensiones. Pensamos que por este motivo puede resultar un método interesante para la estimación de estos parámetros, puesto que no parte de ningún razonamiento de tipo heurístico ni precisa de un suavizado externo de la solución independiente del propio proceso de cálculo. En este método, el valor de los parámetros se determina a medida que se calcula y ensambla cada matriz de rigidez elemental.

Los resultados obtenidos en problemas unidimensionales son excelentes y permiten esperar un buen funcionamiento del método para problemas en un número mayor de dimensiones¹⁶. En la actualidad, para problemas en dos y tres dimensiones el coste computacional del método propuesto puede ser elevado, dado que se requiere el análisis de los autovalores de todas las matrices elementales de la discretización. No obstante, es posible conseguir reducciones importantes del esfuerzo de cálculo mediante el empleo de técnicas (en estos momentos en fase de desarrollo) de obtención de los parámetros de estabilización a partir de la información obtenida previamente en zonas del dominio del problema en las que exista una convección del mismo orden de magnitud, y a partir de la estimación de los valores propios de las matrices elementales.

REFERENCIAS

- [1] Heinrich J.C. and Ziekiewicz O.C. (1979): *The Finite Element Method and 'upwinding' techniques in the numerical solution of convective dominated flow problems*, Finite Element Methods for Convection Dominated Flows. Hughes, T.J.R. (Ed.), The American Society of Mechanical Engineers. pp 105-136.
- [2] Carey C.F. (1979): *An analysis of stability and oscillations in convection-diffusion computations*, Finite Element Methods for Convection Dominated Flows. Hughes, T.J.R. (Ed.), The American Society of Mechanical Engineers. pp 63-72.
- [3] Heinrich J.C. and Ziekiewicz O.C. (1977): *Quadratic Finite Element Schemes for two-dimensional Convective-Transport Problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 11, 1831-1844.
- [4] Heinrich J.C. (1980): *On Quadratic Elements in Finite Element Solutions of Steady-State Convection-Diffusion Equation*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 15, 1041-1052.
- [5] Fritz J. (1982): *Partial Differential Equations*, Springer-Verlag.
- [6] Codina R. (1989): *Dues formulacions numèriques per al problema de flux incompressible*, Tesina de Especialidad. Universitat Politècnica de Catalunya.
- [7] Carey G. F. and Oden J. T. (1986): *Finite Elements. Fluid Mechanics. Volume VI*, Prentice-Hall.
- [8] Figueroa C.A., Colominas I. (1998): *Aplicación del Método de los Elementos Finitos en problemas de mecánica de fluidos: estudio, resolución y técnicas de estabilización de la ecuación del transporte por convección-difusión*, Research Report. ETSICCP. Universidad de La Coruña.

- [9] Brooks A.N. and Hughes T.J.R. (1982): *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.
- [10] Hughes T.J.R., Franca L.P. and Hulbert G.M. (1989): *A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The Galerkin/least squares method for advective-diffusive equations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 73, 173-189.
- [11] Ziekiewicz O.C. and Codina R. (1995): *A general algorithm for compressible and incompressible flow. Part I: the split, characteristic based scheme*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 20, 869-885.
- [12] T.J.R. Hughes (1995): *Multiscale Phenomena: Green's function, the Dirichlet-to-Neuman formulation, subgrid scale models, bubbles, and the origins of stabilized formulations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 127, 387-401.
- [13] Donea J. (1984): *A Taylor-Galerkin Method for Convection Transport Problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 20, 101-119.
- [14] Codina R. (1996): *Comparison of Some Finite Element Methods for Solving the Diffusion-Convection-Reaction Equation*, Publication CIMNE No. 101.
- [15] Oñate E. (1998): *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.
- [16] Figueroa C.A., Colominas I., Iglesias G., Acinas J., Navarrina F. y Casteleiro M. (1999): *Aplicación de una formulación numérica de elementos finitos para el estudio de transporte convectivo en zonas portuarias*, Actas del "IV Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones", SEMNI, Sevilla.