

INIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

01199 115

b13WHOXYIYEEBDAD NACIONAL AVFNMA DE MEXICO

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO FACULTAD DE INGENIERÍA

ΤΕSΙS

Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa

que como requisito para obtener el grado de

Maestro en Ingeniería (Ingeniería Civil - Hidráulica)

Presenta

ROBERTO URIBE ROMERO

DIRECTOR DE TESIS

DR. RODOLFO SILVA CASARÍN

MÉXICO, D.F. OCTUBRE 2002







Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor. Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa

A mis padres

ł

.....

A mis hermanos

A Martha



Agradecimientos

A la Universidad Nacional Autónoma de México por otorgarme la oportunidad de ser parte de ella.

A los profesores de la División de Estudios de Posgrado por sus excelentes conocimientos.

Al Dr. Rodolfo Silva por todas sus enseñanzas y amistad durante estos años.

A la Comisión Federal de Electricidad por apoyarme para la realización de éste trabajo.

A mis amigos del Grupo de Ingeniería de Costas y Puertos, a los que están aquí; Georges Govaere, Juan Carlos Espinal, Berenice Aguilar, Gregorio Posada, Edgar Mendoza, Paco, Erick (Gustavo), Alberto, Diana, Evelyn, Megumi, Dulce, a los exiliados; Gabriel (España), Adolfo (Alemania), Adrián (Francia), Alba (España).

A mis amigos de la Facultad de Ingeniería, Reynaldo Cruz, Vicente Quezada y Porfirio Peña.

Y especialmente a Martha Campos Ortiz por darle sentido a mi vida con su amor y cariño.



CONTENIDO

Resumen	6
Importancia general de la tesis	7
Objetivos	8
Metodología	8
Contenido de la tesis	8
Lista de figuras	10
Lista de tablas	13
Lista de símbolos	14
1 Ecuaciones fundamentales del modelo hidrodinámico	15
1.1 Nota histórica	15
1.2 Principios básicos de la Mecánica de Fluidos	15
1.3 Propiedades de importancia en dinámica de fluidos	
1.4 Cinemática de fluidos	
1.4.1 Campo de velocidades	20
1.4.2 Flujo permanente y uniforme	22
1.4.3 Trayectorias y líneas de corriente	22
1.4.4 Gradientes de velocidad y esfuerzos tangenciales	24
1.5 Comportamiento dinámico y métodos de análisis	
1.5.1 Fenómenos de transferencia	24
1.5.1.1 Transferencia de masa	
1.5.1.2 Transferencia de calor	
1.5.1.3 Transferencia de cantidad de movimiento	
1.6 Relaciones entre esfuerzos y deformaciones	
1.6.1 Sistema general de esfuerzos y deformaciones	28
1.6.1.1 Esfuerzos sobre superficies	
1.6.1.2 Componentes de la deformación	30
1.6.1.3 Relaciones entre el esfuerzo y la deformación para sólidos elásticos	32
1.6.1.4 Relaciones entre el esfuerzo y la rapidez de deformación para fluidos newtonianos	34
1.7 Ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento	
1.7.1 Ecuación de continuidad	37
1.7.2 Ecuaciones de movimiento	39
1.7.2.1 Ecuaciones de Navier-Stokes	40
Resumen	44
2 Ecuaciones fundamentales del modelo de advección dispersión	46
2.1 Introducción	46
2.1.1 Difusión molecular en un sistema binario	46
2.1.2 Ecuación de transporte de masa	49
Resumen	53

ł

Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa

•

-

ġ,

3 M	lecánica computacional de fluidos	54
3.1	Introducción	54
3.2	Visión General de la Dinámica Computacional de Fluidos	56
3.3	Clasificación de las ecuaciones diferenciales parciales	57
3.1	3.1 Ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas	58
3.	3.2 Ecuaciones diferenciales parciales parabólicas	59
3.	3.3 Ecuaciones diferenciales parciales elípticas	59
3.4	Técnicas preliminares en la dinámica de fluidos computacional	60
3.4	4.1 Discretización de ecuaciones diferenciales parciales	61
	3.4.1.1 Discretización de derivadas en el espacio	62
	3.4.1.2 Discretización de derivadas en el tiempo	63
3.5	Expansión en series de Taylor	
3.1	5.1 Técnica General	66
3.6	Precisión en el proceso de discretización	
3.7	Método de diferencias finitas	
3.1	7.1 Implementación conceptual	
3.8	Fundamento teórico	
3.0	8.1 Convergencia	
	3.8.1.1 Teorema de equivalencia de Lax	
	3.8.1.2 Convergencia numerica	
3.0	8.2 Consistencia	
3.0	8.3 Estabilidad	
	3.8.3.1 Método de Von Neumann	
3.9	Esquemas explicitos e implicitos para la ecuación de difusión unidimensional	
3.9	9.1 Metodos explicitos	
	3.9.1.1 Esquema FICS	
2	3.9.1.2 Esquema de Richardson y DuFort-Frankel	
3.9	9.2 Metodos implicitos	
	3.9.2.1 Esquema totalmente implicito	
2.10	3.9.2.2 Esquema Crank-Nicoison	
3.10	Ecuacion multidimensional de difusion	
3.	10.1 Ecuacion bidimensional de difusion	83
	3.10.1.1 Metodos explicitos	
2	3.10.1.2 Metodos implicitos	
3.	10.2 Metodos multidimensionales en dos pasos de liempo	
2	3.10.2.1 Metodo ADI	
3	10.3 Metodo del elemento finito	88
0.11	3.10.3.1 Elemento finito, construcciones en dos pasos de tiempo	
3.11	Problemas donde domina la convección lineal	
3	11.1 Ecuacion uniaimensional lineal de conveccion	
	3.11.1.1 Esquema FICS	
	3.11.1.2 Esquema Upwind y la condición CFL	
2	3.11.1.3 Esquema Crank-Nicolson	
3.	2.11.2 Ecuación de la convección alfusión en estado permanente	
2	5.11.2.1 Electos del numero de Reynolds	
5.	11.5 Ecuacion uniaimensional ae transporte	100
	2.11.2.2 Esquemas Explicitos	100
n	5.11.5.2 Esquemas implicitos	101
Kesu	men	104
4 M	lodelo numérico hidrodinámico	106
4.1	Introducción	106
4.2	Formulación del modelo matemático hidrodinámico	106

4

,

ų

<u>{</u>(

4.2.1 Modelo hidrodinámico bidimensional	109
4.2.1.1 Condiciones iniciales y de contorno	111
4.2.1.2 Integración de las ecuaciones	113
4.2.1.3 Datos y resultados del modelo hidrodinámico	115
4.2.1.4 Calibración y validación del modelo	116
Resumen	118
5 Modelo numérico de transporte de masa	. 119
5.1 Formulación del modelo numérico de transporte de masa	119
5.1.1 Escalas en los procesos de dispersión	119
5.1.2 Modelo de transporte de masa bidimensional	121
5.1.2.1 Experiencias de campo	124
5.1.3 Integración de las ecuaciones de transporte de masa	126
5.1.3.1 Datos y resultados del modelo de transporte de masa	127
5.1.3.2 Calibración y verificación del modelo	128
Resumen	129
6 Casos de aplicación de los modelos numéricos; hidrodinámico y de	
transporte de masa	. 130
6.1 Prueba de sensitividad del modelo hidrodinámico y de transporte de masa	130
6.1.1 Modelo hidrodinámico	131
6.1.2 Modelo de transporte de masa	134
6.2 Aplicación de los modelos hidrodinámico y de advección-dispersión en el río Tecolutla, Ver.	139
6.2.1 Introducción	139
6.2.2 Especificaciones del problema	141
6.2.3 Información de campo	141
6.2.3.1 Batimetría	141
6.2.3.2 Medición de los niveles de marea en el cauce	141
6.2.4 Información de Gabinete	144
6.2.5 Descripción del escenario y condiciones de frontera hidrodinámicas	145
6.2.6 Condiciones iniciales y de frontera para el modelo de advección dispersión	147
6.2.7. Discretización espacial y temporal	147
6.2.8 Resultados hidrodinámicos	147
6.2.9 Resultados de advección - dispersión	152
Resumen	155
CONCLUSIONES GENERALES	. 156
EUTURAS LÍNEAS DE TRABA IO	158
ANEXO 1. Método de Thomas para resolver sistemas tridiagonales	. 159

Resumen

En este trabajo se describen los llamados fenómenos de transferencia y, en particular, se analizan los fenómenos de transferencia de masa y de cantidad de movimiento. En cada caso se menciona en que consisten y los fundamentos en los cuales están basados

Se explica en que consiste la dinámica computacional de fluidos y las ventajas sobre la dinámica experimental y tradicional de fluidos. Se describen los tipos de ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan los fenómenos de movimiento y de transporte de masa.

Se presentan algunas técnicas para la discretización de ecuaciones diferenciales parciales y sus especificaciones para su utilización, y se aplican a las ecuaciones de difusión y de transporte de masa.

Se utilizan los métodos explícito e implícito, los cuales se aplican para discretizar las ecuaciones diferenciales parciales mencionadas. Se describe en que consiste el método ADI y se aplica junto con una técnica de elemento finito al caso bidimensional de la ecuación de transporte de masa.

Para el caso del fenómeno de transferencia de cantidad de movimiento se aplica también el método del ADI, y los parámetros que se necesitan para la correcta ejecución del modelo hidrodinámico.

Para ambos modelos numéricos se explica la manera en que se calibran y con que parámetros se lleva a cabo esto.

Finalmente, se emplean ambos modelos numéricos para utilizarse en dos casos de aplicación, el primero consiste en una prueba de sensitividad de los coeficientes de dispersión de la ecuación de transporte de masa y el segundo es un estudio de dispersión de contaminantes, en este caso temperatura, en el río Tecolutla, ubicado en Veracruz.

Importancia general de la tesis

La permanente mejora en la velocidad y en el almacenamiento en memoria de las computadoras desde los años 50's, ha permitido el surgimiento de la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD). Esta rama de la Mecánica de Fluidos complementa la parte teórica y experimental de esta, proporcionando una alternativa para la simulación de flujos reales.

El desarrollo de computadoras más eficientes ha generado un notable interés en CFD, además de que ha producido una mejora en la eficiencia de las técnicas computacionales, por lo que CFD es el medio preferido de diseñadores en muchas ramas de la aviación, de la industria automovilística, de ingeniería hidráulica, ambiental, etc. Dentro de las ventajas que ofrece CFD sobre la dinámica de fluidos experimental se encuentran las siguientes:

- i) El tiempo en diseño y desarrollo es reducido
- ii) CFD puede simular condiciones de flujo no reproducibles en pruebas experimentales
- iii) CFD proporciona información más detallada
- iv) CFD incrementa la relación costo-beneficio

El usar un código optimizado de CFD permite elaborar diseños alternos (configuraciones geométricas distintas), los cuales son estudiados bajo diferentes valores de los parámetros del flujo, por ejemplo, número de Reynolds, número de Mach, orientación del flujo etc. En la práctica CFD es una herramienta muy efectiva para la selección del diseño óptimo.

Como se aprecia la CFD es una herramienta muy útil para la solución de problemas relacionados con la Hidráulica, sin embargo para el caso de México la dinámica computacional de fluidos no se ha desarrollado totalmente, ya que las grandes empresas de ingeniería hidráulica existentes en el país generalmente adquieren el software de empresas extranjeras que han invertido recursos humanos y económicos en su investigación y desarrollo.

Por lo anterior y con la finalidad de coadyuvar en el desarrollo de herramientas para resolver problemas de ingeniería hidráulica y ambiental en el país se presenta este trabajo.

Objetivos

Elaborar un algoritmo numérico utilizando esquemas en diferencias finitas y en elementofinito para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes y de transferencia de masa, e implantarlo en un programa de computadora.

- Presentar el uso y aplicación de lo anterior a problemas prácticos y teóricos.
- Desarrollar y utilizar software para la solución de problemas de ingeniería hidráulica, en específico a las áreas de hidráulica marítima y fluvial.

Metodología

Se realizaron las actividades siguientes para la elaboración de este trabajo.

a) Recopilación exhaustíva de la información referente al tema, es decir se consultaron trabajos relacionados con modelos hidrodinámicos promediados en la vertical y con modelos bidimensionales de transporte de masa.

b) Se estudiaron métodos para discretizar ecuaciones diferenciales parciales, una vez determinado el mejor método se construyó el algoritmo de cálculo para después implantarlo en un programa de computadora.

c) Finalmente se realizaron casos de aplicación en los cuales se comprendieron los fenómenos físicos de movimiento de flujo y de transporte de masa. Se elaboraron gráficos en los cuales se muestran campos de velocidades y de temperatura.

d) Se obtuvieron las principales conclusiones del estudio.

Contenido de la tesis

Capítulo 1

Se describen brevemente los principios básicos de la Mecánica de Fluidos, se deducen las ecuaciones de continuidad y de movimiento de Navier-Stokes. Se mencionan los fenómenos de transferencia de masa, calor y cantidad de movimiento. Se analizan las ecuaciones fundamentales del modelo hidrodinámico,

Objetivos

Elaborar un algoritmo numérico utilizando esquemas en diferencias finitas y en elementofinito para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes y de transferencia de masa, e implantarlo en un programa de computadora.

- Presentar el uso y aplicación de lo anterior a problemas prácticos y teóricos.
- Desarrollar y utilizar software para la solución de problemas de ingeniería hidráulica, en específico a las áreas de hidráulica marítima y fluvial.

Metodología

Se realizaron las actividades siguientes para la elaboración de este trabajo.

a) Recopilación exhaustíva de la información referente al tema, es decir se consultaron trabajos relacionados con modelos hidrodinámicos promediados en la vertical y con modelos bidimensionales de transporte de masa.

b) Se estudiaron métodos para discretizar ecuaciones diferenciales parciales, una vez determinado el mejor método se construyó el algoritmo de cálculo para después implantarlo en un programa de computadora.

c) Finalmente se realizaron casos de aplicación en los cuales se comprendieron los fenómenos físicos de movimiento de flujo y de transporte de masa. Se elaboraron gráficos en los cuales se muestran campos de velocidades y de temperatura.

d) Se obtuvieron las principales conclusiones del estudio.

Contenido de la tesis

Capítulo 1

Se describen brevemente los principios básicos de la Mecánica de Fluidos, se deducen las ecuaciones de continuidad y de movimiento de Navier-Stokes. Se mencionan los fenómenos de transferencia de masa, calor y cantidad de movimiento. Se analizan las ecuaciones fundamentales del modelo hidrodinámico,

Capítulo 2

2

Se describen las ecuaciones fundamentales de transporte de masa, se realiza la deducción de las mismas, y se mencionan las áreas de aplicación.

Capítulo 3

Se estudian las ecuaciones diferenciales parciales parabólicas, hiperbólicas y elípticas mencionando la aplicación de cada una de ellas. Se concentra la atención en estudiar las de tipo parabólico e hiperbólico, que son las que gobiernan la ecuación de transporte de masa.

Se plantean técnicas para discretizar ecuaciones diferenciales, tomando en cuenta cual es el mejor algoritmo para evitar en lo posible los errores producto de la discretización. Se analizan las ventajas y desventajas de los esquemas explícitos e implícitos y sus principales restricciones de uso para evitar en lo posible la disipación y dispersión numérica

Capítulo 4

Se plantea el proceso para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes numéricamente a través del método ADI, también se mencionan las principales consideraciones realizadas para dicha solución, se plantea un modelo bidimensional en diferencias finitas para resolver de manera aproximada las corrientes de marea en zonas próximas al litoral de profundidad reducida.

Capítulo 5

Se plantea el algoritmo de cálculo híbrido, es decir, utilizando un esquema en diferencias finitas y en elemento finito para resolver numéricamente la ecuación bidimensional de transporte de masa a través del método ADI, se mencionan las ventajas de dicho algoritmo. Se presentan diferentes formulaciones para calcular los coeficientes de dispersión, ya sea en ríos o en medios marinos.

Capítulo 6

Se presentan dos casos de aplicación para mostrar los modelos hidrodinámico y de transporte de masa,. El primero consiste en una prueba de sensitividad de los coeficientes de dispersión y el segundo es un modelo hidrodinámico del río Tecolutla, en el cual se prueba el modelo de advección dispersión.

K.

Lista de figuras

CAPÍTULO 1

Figura 1.1 Esfuerzo cortante en un sólido y en un fluido

Figura 1.2 Tipos de fluidos

Figura 1.3 Líneas de corriente y trayectoria. (a) Vectores de velocidad tangentes a una línea de corriente, (b) Línea de corriente y trayectoria, (c) Longitud de un elemento de arco a lo largo de una línea de corriente

Figura 1.4 Transferencia de la cantidad de movimiento transversal

Figura 1.5 Esfuerzos sobre las caras de un elemento

Figura 1.6 Estado de deformación plana

Figura 1.7 Volumen de control diferencial para la conservación de la materia

CAPÍTULO 2

Figura 2.1 Difusión molecular relativa al movimiento convectivo del fluido

Figura 2.2 Flujo neto de masa de la componente A en la dirección x

CAPÍTULO 3

Figura 3.1 Distribución unidimensional de temperatura en un tubo

Figura 3.2 Diagrama de flujo general para la solución de las ecuaciones de gobierno

Figura 3.3 Diagrama de flujo para resolver ecuaciones diferenciales con métodos computacionales

Figura 3.4 Representación gráfica de un malla discretizada

Figura 3.5 Representación en diferencias finitas de $\partial T / \partial x$

Figura 3.6 Diagrama de flujo para el método de diferencia finitas

Figura 3.7 Conducción de calor no permanente en una varilla

Figura 3.8 Solución de la ecuación de difusión de calor unidimensional con s=0.5; comportamiento estable.

Figura 3.9 Relación conceptual entre consistencia, estabilidad y convergencia

Figura 3.10 Solución de la ecuación unidimensional de difusión para s = 0.6

Figura 3.11 Dominio de cálculo bidimensional con condiciones de frontera de Dirichlet

Figura 3.12 Implementación del método ADI

Figura 3.13 Nodos activos para esquemas en dos pasos de tiempo

Figura 3.14 Dependencia de la solución con datos iniciales

Figura 3.15 Influencia del número de Reynolds (Peclet) en la solución de la ecuación de difusión convección.

CAPÍTULO 5

. Z:

Figura 5.1 Transporte de las partículas en un fluido

CAPÍTULO 6

Figura 6.1 Vista en planta del canal utilizado para la prueba de sensitividad

Figura 6.2 Vista tridimensional del canal utilizado para la prueba de sensitividad

Figura 6.3 Campo hidrodinámico obtenido después de seis horas de simulación

Figura 6.4 Nivel del agua en dos puntos del canal durante la simulación

Figura 6.5 Evolución de la velocidad de la corriente para dos puntos durante la simulación

Figura 6.6 Isotermas a 1.5 horas de comenzada la simulación. Coeficiente de dispersión D = 10

Figura 6.7 Isotermas 2:45 horas después de comenzada la simulación. Coeficiente de dispersión D = 10

Figura 6.8 Evolución de la temperatura en el tiempo durante la simulación. Coeficiente de dispersión D =10

Figura 6.9 Isotermas a 1.5 horas de comenzada la simulación. Coeficiente de dispersión D = 25

Figura 6.10 Isotermas a 2:45 horas de comenzada la simulación. Coeficiente de dispersión D = 25

(C

Q.

Figura 6.11 Evolución de la temperatura en el tiempo durante la simulación. Coeficiente de dispersión D =25

Figura 6.12 Fotografía aérea del río Tecolutla 1999 en la desembocadura.

Figura 6.13 Batimetría del río Tecolutla. Septiembre de 2001

Figura 6.14 Resultados de las mediciones con limnígrafo en el río Tecolutla

Figura 6.15 Curva de marea utilizada como condición de frontera aguas abajo.

Figura 6.16 Curva de marea medida en el río Tecolutla, Veracruz.

Figura 6.17 Evolución de los niveles del agua durante toda la simulación

Figura 6.18 Comparación de los niveles medidos y calculados

.

Figura 6.19 Evolución de las velocidades del flujo durante toda la simulación

Figura 6.20 Campo de velocidades después de 12 horas de simulación

Figura 6.21 Campo de velocidades después de 24 horas de simulación

Figura 6.22 Isotermas 3:30 horas después de iniciada la simulación hidrodinámica. Coeficiente de dispersión D = 10

Figura 6.23 Isotermas 6:00 horas después de iniciada la simulación hidrodinámica. Coeficiente de dispersión D = 10

Figura 6.24 Isotermas 12:00 horas después de comenzada la simulación hidrodinámica. Coeficiente de dispersión D = 10

Lista de tablas

<u>CAPÍTULO 1</u>

Tabla 1.1 Procesos de transferencia

CAPÍTULO 2

Tabla 3.1 Comparación de fórmulas en diferencias finitas para evaluar dT / dx en x=1

Tabla 3.2 Error de truncamiento del término principal (algebraico): $d\overline{T}/dx$

 Tabla 3.3 Error cuadrático medio (rms) para diferentes condiciones iniciales

Tabla 3.4 Reducción del error (rms) en la solución con refinamientos de malla

Tabla 3.5 Esquemas algebraicos discretizados para la ecuación de difusión

Tabla 3.6 Esquemas algebraicos para la ecuación de convección lineal

Tabla 3.7 Esquemas algebraicos para la ecuación de transporte

CAPÍTULO 4

Tabla 4.1 Esquema en diferencias finitas en el espacio

CAPÍTULO 5

Tabla 5.1 Comparación entre el coeficiente de Elder y coeficientes calibradosTabla 5.2 Coeficientes de dispersión para procesos en la escala 4

CAPÍTULO 6

Tabla 6.1 Lecturas tomadas por una regla ubicada aguas abajo de la isla
Tabla 6.2 Gastos medios registrados en la estación hidrométrica, El Remolino
Tabla 6.3 Gastos medidos el día 4 de octubre de 1962 a 1998

.. -

Lista de símbolos

.

....

Ì

P _{atm}	Presión atmosférica
P	Presión
Т	Temperatura
ρ	Densidad
γ	Peso específico
μ	Viscosidad dinámica
σχ	Esfuerzo normal en la dirección x
τ _{vx}	Esfuerzo tangencial actuando en la dirección x
u	Velocidad en la dirección x
v	Velocidad en la dirección y
W	Velocidad en la dirección z
ν	Viscosidad cinemática
Ev	Módulo de elasticidad volumétrica
x, y, z	Coordenada en la dirección x, y, z
t	Tiempo
i, j, k	Vectores de magnitud unitaria
a _x , a _y a _z	Aceleración local en la dirección x, y, z
K	Constante de difusividad
G	Módulo de elasticidad tangencial
δ	Vector desplazamiento
е	Dilatación volumétrica
3	Deformación
ν	Módulo de Poisson
Δx, Δy, Δz	Espaciamiento espacial x, y, z respectivamente
g	Constante de atracción gravitacional
q	Vector velocidad
С	Concentración de una sustancia
NA	Vector flujo
D	Coeficienté de difusion
n	
β	Grado de implicites
Ο(Δx)	Error de truncamiento
M _x , M _y	Operadores direccionales de masa en x, y respectivamente
L _{xx} , L _{yy}	Operadores diferenciales en x, y respectivamente
I, J, K	NOGOS
RCELL	Numero de Peclet
C	Numero de Courant
	Profundidad
	Cooficiente de friecién per viente
C _w	Coeficiente de dispersión de Elder
INE O	Gaeto
Y V	00310

1 Ecuaciones fundamentales del modelo hidrodinámico

1.1 Nota histórica

Hasta principios del presente siglo el estudio de los fluidos fue desarrollado esencialmente por dos grupos: los ingenieros hidráulicos y los matemáticos. Los ingenieros hidráulicos trabajaron desde el punto de vista empírico, mientras que los matemáticos se centraron en enfoques analíticos. La gran cantidad y usualmente ingeniosa experimentación del primer grupo produjo mucha información con valor incalculable para los ingenieros practicantes de entonces; sin embargo, debido a la carencia de los beneficios de la generalización propios de una teoría practicable, estos resultados eran restringidos y de valor limitado en nuevas situaciones. Mientras tanto, los matemáticos por el hecho de no aprovechar la información experimental, se vieron forzados a establecer hipótesis tan simplificadas que produjeron resultados a veces completamente opuestos a la realidad.

Fue evidente para investigadores eminentes, como Reynolds, Froude, Prandtl y Von Kármán, que el estudio de los fluidos debe ser una mezcla de teoría y experimentación. Con ellos nace la ciencia de la Mecánica de Fluidos, tal como se conoce actualmente. Los modernos centros de investigación y ensayos emplean matemáticos, físicos, ingenieros y técnicos calificados quienes, trabajando en equipo, mezclan estos puntos de vista con grados diferentes según su trabajo

1.2 Principios básicos de la Mecánica de Fluidos

En general, la materia puede clasificarse por las formas físicas en que se presenta. Estas formas, conocidas como fases, son la sólida, la líquida y la de gas o vapor. Los fluidos comprenden las fases líquida y gaseosa de la materia. Al discutir la dinámica de fluidos, el interés se centra en el estudio del comportamiento de los fluidos en movimiento y la forma en que este comportamiento se relaciona con los momentos y fuerzas aplicadas. Tanto los líquidos como los gases tienen en común una forma distinta de reaccionar cuando están sometidos a esfuerzos tangenciales, lo cual explica su fluidez y proporciona la clave básica para desarrollar los principios de la dinámica de los fluidos, este rasgo común y distintivo se puede establecer como sigue:

Un fluido se define como una sustancia que cambia su forma continuamente siempre que esté sometida a un esfuerzo cortante, sin importar qué tan pequeño sea. En contraste un sólido experimenta un desplazamiento definido (o se rompe completamente) cuando se somete a un esfuerzo cortante. Por ejemplo, el bloque sólido que se muestra a la izquierda de la **Figura 1.1** cambia su forma de una manera caracterizada por el ángulo $\Delta \alpha$ cuando se somete a un esfuerzo cortante τ sí éste fuera un elemento de fluido (**Figura 1.1**, parte derecha), no existiría un $\Delta \alpha$ fijo, ni aun para un esfuerzo cortante infinitesimal. En lugar de esto, persiste una deformación continua siempre que se aplique el esfuerzo cortante τ ; a esta deformación se le denomina rapidez de deformación angular. En materiales que se conocen como plásticos, p.e. la parafina, cualquiera de estos tipos de

deformación al corte pueden presentarse dependiendo de la magnitud del esfuerzo cortante.

Los esfuerzos cortantes por debajo de un cierto valor inducen desplazamientos definidos, similares a los de un cuerpo sólido, mientras que esfuerzos cortantes por encima de este valor causan deformaciones continuas similares a las de un fluido.





Figura 1.1 Esfuerzo cortante en un sólido y en un fluido

No todos los fluidos muestran exactamente la misma relación entre el esfuerzo y la rapidez de deformación. Un fluido se llama newtoniano, si el esfuerzo tangencial es directamente proporcional a la rapidez de deformación angular, partiendo de esfuerzo cero y deformación cero. En este caso la constante de proporcionalidad es definida como la viscosidad absoluta o dinámica, denotada con la letra griega μ . Así los fluidos newtonianos tienen la propiedad de poseer una viscosidad dinámica independiente del movimiento al que está sometido el fluido. Los fluidos más comunes como el aire y el agua son newtonianos. Hay una analogía entre los fluidos newtonianos que tienen una viscosidad constante la cual relaciona al esfuerzo con la rapidez de deformación y los sólidos que obedecen a la ley de Hooke, con un módulo de elasticidad constante, el cual relaciona al esfuerzo con la magnitud de la deformación.

Los fluidos que manifiestan una proporcionalidad variable entre esfuerzos y rapidez de deformación se conocen como no-newtonianos. En tales casos la proporcionalidad puede depender del intervalo de tiempo durante el cual el fluido está sujeto al esfuerzo, así como la magnitud del mismo. Un gran número de fluidos, de uso poco común, pero que son sumamente importantes, son no-newtonianos, tales como algunos plásticos, éstos tienen un esfuerzo de fluencia por debajo del cual se comportan como un sólido, pero más allá de éste se comportan como un fluido. En la **Figura 1.2** se muestran los comportamientos de fluidos y plásticos, en los llamados diagramas de rapidez de deformación, esfuerzo tangencial.

C

(L

Figura 1.2 Tipos de fluidos

Se puede hacer una subdivisión de los fluidos en dos clases principales, compresibles e incompresibles, sobre la base de su reacción a esfuerzos de presión (normales), por ejemplo todos los gases y vapores son altamente compresibles, los líquidos por el contrario son sólo ligeramente compresibles. La compresibilidad introduce consideraciones termodinámicas a los problemas de fluidos que en ocasiones son de difícil solución. Por otro lado, si se supone que este tipo de fluidos son incompresibles, la descripción del estado del fluido y su comportamiento cuando está en movimiento será mucho más fácil; con algunas excepciones importantes para los líquidos, para todo propósito práctico, se consideran generalmente como fluidos incompresibles.

Todos los fluidos están compuestos por moléculas discretamente espaciadas y en movimiento continuo, en las definiciones y diferenciaciones usadas antes para describir a los fluidos, esta estructura molecular fue ignorada y el fluido se consideró como un medio continuo. Esto significa que todas las dimensiones en el espacio del fluido se consideran grandes, comparadas con el espacio molecular, suposición que se hará a lo largo de todo este trabajo. Esto también significa que todas las propiedades del fluido, tales como la densidad y viscosidad serán continuas, de punto a punto, a través de la región que se encuentre en el fluido.

Finalmente, un comportamiento importante de los fluidos viscosos es la condición de nodeslizamiento en las fronteras rígidas. Experimentalmente se observa que los fluidos reales tienden a adherirse a las fronteras, lo cual da como resultado una velocidad cero con respecto a ellas. De este modo, analizando movimientos de fluidos con viscosidad, se ve que esta condición física siempre debe ser satisfecha.

1.3 Propiedades de importancia en dinámica de fluidos

Presión, p. Presión es fuerza / área. Si un volumen de materia es aislado como un cuerpo libre, el sistema de fuerzas que actúa sobre el volumen incluye a las *fuerzas de superficie* ejercidas sobre cada elemento del área que encierra el volumen. En general, una fuerza superficial tendrá componentes perpendiculares y paralelas a la superficie. En cualquier punto, la componente perpendicular por unidad de área es llamada *esfuerzo normal.* Sí éste es un esfuerzo de compresión, es llamado intensidad de presión o simplemente presión. La presión es una cantidad escalar, y la fuerza asociada a una presión dada, actuando sobre una unidad de área es ρ dA, y tiene la dirección de la normal al área dA. Así en un punto en el interior de una masa de fluido, la dirección de la fuerza de presión depende de la orientación del plano.

La presión puede medirse con respecto a un valor cero absoluto (presión absoluta) o con respecto a la presión atmosférica en la localidad en que se mide (presión manométrica)

p (manométrica) = p (absoluta) - p_{atm} (absoluta).

· *

Temperatura, T. Dos cuerpos en equilibrio térmico muestran el mismo valor para la propiedad que se conoce como temperatura. Los cambios en la temperatura causan cambios en otras propiedades de la materia y proporcionan métodos de medida. Un ejemplo, es la expansión del mercurio con el incremento de la temperatura, mientras otro es el incremento en la presión en un gas con volumen constante al incrementarse su temperatura.

Densidad, *ρ*. Densidad es masa / volumen. Se dice que una cantidad dada de materia tiene cierta masa la cual es tratada como invariante, por tanto, la densidad será una constante mientras que el volumen de una cantidad dada de materia permanezca sin cambios.

Peso específico, γ . El peso específico es peso / volumen. El peso depende del campo gravitacional, (en el campo de la Tierra, es la fuerza de gravedad actuando sobre una masa dada, en una localidad determinada). Consecuentemente, el peso específico, en contraste con la densidad, depende del campo gravitacional.

Viscosidad (molecular dinámica), μ . Debido a la movilidad molecular, una propiedad llamada viscosidad se hace evidente siempre que un fluido se mueva de forma tal que exista movimiento relativo entre volúmenes adyacentes. Esto lleva al método común de definir la magnitud de la viscosidad para mediciones en términos de un flujo simple. Considerando el campo bidimensional de esfuerzos tangenciales paralelos, descrito por la velocidad **u** en la dirección del eje x, cuya magnitud es una función solamente de la normal en la dirección del eje y; para este caso, la relación entre el esfuerzo tangencial y rapidez de deformación angular del fluido es:

1

1.1

1.2

$$\tau_{yx} = \mu \frac{du}{dy}$$

donde

 τ_{yx} : Esfuerzo tangencial actuando en la dirección del eje **x**, sobre un plano cuya normal es la dirección **y** (kg/m²)

 $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{y})$: velocidad, m/s

du/dy : rapidez de deformación angular, 1/s

μ: viscosidad molecular dinámica, kg s/m²

El factor μ es llamado viscosidad molecular dinámica, sus unidades contienen la cantidad dinámica de fuerza. Para fluidos newtonianos, μ tiene un valor único que depende solamente del estado del fluido, y por lo tanto ésta es una de las propiedades del fluido. Como se indicó, muchos fluidos reales se aproximan a esta suposición newtoniana, no obstante existen excepciones importantes.

Viscosidad (molecular cinemática), v. La relación μ/ρ aparece frecuentemente cuando se trabaja con dinámica de fluidos. Tiene dimensiones y unidades cinemáticas, las cuales explican la razón de su nombre.

$$\upsilon = \frac{\mu}{\rho}$$

Módulo de elasticidad volumétrico, E_v **y compresibilidad**. La compresibilidad es una medida del cambio de volumen y densidad, cuando una sustancia está sujeta a presiones normales, y está definida por

Compresibilidad = % de cambio de volumen (o densidad) para un cambio de presión dado

Compresibilidad = $-\frac{dV}{V}\frac{1}{dp} = +\frac{d\rho}{\rho}\frac{1}{d\rho}$ 1.3

Donde el signo negativo indica una disminución en el volumen, V, debido a un incremento en la presión.

El recíproco de la compresibilidad es conocido como el módulo de elasticidad volumétrico.

$$E_{v} = -\frac{dp}{dV/V} = +\frac{dp}{d\rho/\rho}$$
 1.4

1.4 Cinemática de fluidos

¢;

1.4.1 Campo de velocidades

Generalmente las diferentes partes de un fluido en movimiento tienen distintas velocidades y aceleraciones. Entonces el campo en movimiento deberá de ser descrito en términos de las velocidades y aceleraciones de las partículas en los diversos puntos de la región del espacio tridimensional. Ambas, velocidades y aceleraciones, son cantidades vectoriales. En coordenadas cartesianas las componentes de la velocidad según los ejes x, y, z, son **u**, **v**, **w**, en particular estas componentes son funciones del tiempo y dependen de la posición en el espacio en cualquier instante.

Existen dos métodos para describir el movimiento de un grupo de partículas en un medio continuo. En el primero, o método lagrangiano, las coordenadas de las partículas en movimiento son representadas como funciones del tiempo. Esto implica que en algún tiempo arbitrario t_o , las coordenadas de una partícula (a, b, c), se identifican, y a partir de este momento se sigue al movimiento de esa partícula a través del campo de flujo. La posición de la partícula en cualquier otro instante está dada por un conjunto de ecuaciones de la siguiente forma:

$$x = f_1 (a, b, c, t),$$
 $y = f_2 (a, b, c, t),$ $z = f_3 (a, b, c, t)$ 1.5

Las correspondientes velocidades están dadas por:

$$\mathbf{u} = \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}\right)_0, \qquad \mathbf{v} = \left(\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t}\right)_0, \qquad \mathbf{w} = \left(\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial t}\right)_0$$
 1.6

El subíndice cero, que se encuentra en las derivadas parciales, sirve para recordar que se debe mantener constantes las coordenadas originales a, b y c. Este enfoque se utiliza comúnmente en la dinámica de sólidos, donde es conveniente identificar una partícula discreta, por ejemplo, el centro de masa de un sistema resorte-masa para determinar la historia subsiguiente de su movimiento en función del tiempo.

Cuando se considera a las partículas de un medio continuo, el enfoque lagrangiano se hace extremadamente incómodo, ya que la descripción del campo de flujo requiere tres veces el número de parámetros utilizados en las ecuaciones (1.5). Más aún, debido a la naturaleza deformable del medio fluido, en general no tiene interés la historia detallada de una partícula individual, sino más bien la interrelación de las propiedades del flujo en los puntos individuales del campo.

El segundo método para describir el movimiento de un fluido, el cual se utilizará en adelante, permite fijar la atención en puntos discretos, sin preocuparnos por identificar las partículas que se encuentran en dichos puntos. Cuando se utiliza este enfoque, conocido como método de Euler, el observador nota las características del flujo cerca de un punto fijo cuando las partículas pasan por él. La descripción de todo el campo de flujo es una

Ľ,

Ŷ,

fotografía instantánea de las velocidades y aceleraciones de cada partícula. La diferencia entre los dos métodos estriba en el hecho que en el método lagrangiano las coordenadas de las partículas se representan como funciones del tiempo, mientras que en el método de Euler son las velocidades de las partículas en varios puntos las que están dadas como funciones en el tiempo. De aquí que x, y, z, sean variables independientes, mientras que en el método de Lagrange son dependientes. De acuerdo con Euler, el campo de velocidades está dado por:

$$\vec{V} = iu + jv + kw$$

1.7

donde

 $u = f_1 (x, y, z, t)$ $v = f_2 (x, y, z, t)$ $w = f_3 (x, y, z, t)$

i, j, k, son vectores de magnitud unitaria, dirigidos en las direcciones positivas de los ejes x, y, z. Utilizando éste método es posible expresar el cambio de la velocidad en la vecindad de un punto, en términos de las derivadas parciales con respecto a las cuatro variables independientes, por ejemplo el cambio de la velocidad en la dirección x es:

$$du = \frac{\partial u}{\partial t} dt + \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy + \frac{\partial u}{\partial z} dz$$
 1.8

Cuando una partícula experimenta un pequeño desplazamiento en la vecindad del punto en el tiempo dt, las componentes de la distancia recorrida no son independientes, sino que tienen la siguiente forma; dx = u dt, dy = v dt y dz = w dt. Sustituyendo estos valores en la ecuación anterior se obtiene la aceleración en la dirección del eje x, la cual es:

 $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z}$ 1.9

Esta es la derivada total que representa la rapidez de variación de la velocidad de una partícula que ocupa un punto en particular en el espacio en un cierto tiempo. Esta derivada total está expresada como la suma de un cambio **local** como una función del tiempo $(\partial u/\partial t)$ y un cambio **convectivo** dependiente del movimiento de la partícula en el espacio, (u $(\partial u/\partial x) + v (\partial u/\partial y) + w (\partial u/\partial z)$).

Cualquier otra propiedad del fluido o su movimiento pueden ser tratados en esta forma. Por ejemplo la ley de variación total de la densidad de un fluido compresible puede expresarse como:

$\frac{d\rho}{d\rho}$	<u>∂pu</u> +	$u\frac{\partial \rho}{\partial r} +$	$v \frac{\partial \rho}{\partial r} +$	w ^{∂ρ}	1.10
dt	∂t	∂x́	∂y	∂z	

1.4.2 Flujo permanente y uniforme

De las reglas para la derivación total se obtiene que los tres componentes de la aceleración son:

$$a_{x} = \frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z}$$

$$a_{y} = \frac{dv}{dt} = \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z}$$
1.11
$$a_{x} = \frac{dw}{dt} = \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z}$$

Si todas las aceleraciones locales son nulas, el movimiento es *permanente*. La velocidad puede cambiar de punto a punto en el espacio, pero en un punto fijo no ocurrirán cambios con el tiempo.

Si todas las aceleraciones convectivas son nulas, el movimiento es *uniforme*. Las aceleraciones convectivas nulas implican flujo paralelo, como puede verse mediante un análisis de las ecuaciones anteriores. Esto permite establecer la definición de que el movimiento es uniforme si los vectores velocidad son paralelos en cualquier parte del fluido.

1.4.3 Trayectorias y líneas de corriente

Una línea de corriente es una curva imaginaria que conecta una serie de puntos en el espacio en un instante dado, de tal forma que todas las partículas que están sobre la curva en ese instante tienen velocidades cuyos vectores son tangentes a la misma, como se indica en la **Figura 1.3a.** De aquí que las líneas de corriente indican la dirección del movimiento de las partículas que se encuentran a lo largo de ellas, en un instante dado.

Un tubo de corriente de flujo es un tubo imaginario o conducto pequeño, cuya frontera está formada por líneas de corriente. Las líneas de corriente son fronteras en el mismo sentido que las paredes son fronteras de los conductos reales. Recíprocamente, las fronteras de un conducto real o de cualquier sólido inmerso en el fluido son líneas de corriente. Si las fronteras son paredes sólidas no hay componente normal de la velocidad en las mismas.

En el movimiento permanente, las líneas de flujo se conservan fijas con respecto al sistema de referencia. Más aún, las líneas de flujo permanente coinciden con las trayectorias de las partículas móviles. En el movimiento variable o no permanente, una partícula del fluido no permanecerá, en general, sobre la misma línea de flujo; por lo tanto las trayectorias de las partículas y las líneas de corriente no coinciden. El flujo uniforme variable es una excepción de esta regla.

 \mathcal{X}

(

La **Figura 1.3b** muestra una línea de corriente y la trayectoria de una partícula para un fluido no uniforme y variable. Se muestran los vectores velocidad de las partículas a, b y c sobre la línea de corriente en el tiempo t_1 , para los tiempos t_2 y t_3 , se muestra la partícula a, ocupando sucesivas posiciones sobre su trayectoria, apartándose de la línea de corriente.



Figura 1.3 Líneas de corriente y trayectoria. (a) Vectores de velocidad tangentes a una línea de corriente, (b) Línea de corriente y trayectoria, (c) Longitud de un elemento de arco a lo largo de una línea de corriente

Para una línea de corriente bidimensional, xy por ejemplo, la ecuación diferencial de la línea de corriente es:

$$u = \frac{dx}{dt}$$
, $v = \frac{dy}{dt}$

de donde

١,

$$\frac{dx}{u} = \frac{dy}{v}$$
 1.12

De otra forma, debido a que el vector velocidad es tangente a una línea de corriente, para los puntos de ésta se tendrá que



 $\mathbf{V} \times \mathbf{d}\mathbf{r} = 0$

1.13

1.14

ľ,

ł

En general, para el espacio en tres dimensiones, en coordenadas cartesianas.

v dx = u dyw dx = u dzw dy = v dz

1.4.4 Gradientes de velocidad y esfuerzos tangenciales

Como se ha mencionado anteriormente los gradientes de la velocidad son una medida de la rapidez de deformación, y cómo los esfuerzos tangenciales pueden aparecer en un fluido viscoso, como una consecuencia de su resistencia a la deformación. La deformación es un elemento del estado cinemático del fluido, mientras que el esfuerzo tangencial lo es del dinámico (implica fuerza). De aquí que la viscosidad sea un mecanismo que junto con la masa de un fluido (inercia), relacione los estados cinématicos y dinámicos de éste.

1.5 Comportamiento dinámico y métodos de análisis

1.5.1 Fenómenos de transferencia

Cuando se estudia el comportamiento dinámico de los fluidos, generalmente son de interés algunos aspectos de los llamados fenómenos de transferencia esto es, la capacidad de los fluidos en movimiento de llevar materiales y propiedades de un lugar a otro, y del mecanismo por medio del cual estos materiales y propiedades se difunden y se transmiten a través de un medio fluido. Resulta ventajoso clasificar los métodos de análisis que existen, en términos de los diversos procesos de transferencia. En otras palabras, los métodos de análisis deberán elegirse en tal forma que se puedan aplicar las leyes físicas pertinentes al problema que se desea resolver. Los procesos fundamentales de transferencia están asociados con el movimiento de un fluido, éstos son; transferencia de masa, calor y de cantidad de movimiento. Cada uno de estos procesos, a su vez, está asociado con una ley física básica la cual ha sido formulada como un resultado de la observación y la experiencia. Los procesos y leyes pueden sintetizarse en la **Tabla 1.1**.

Proceso	Ley que sigue
Transferencia de masa	Conservación de la materia
Transferencia de calor	Conservación de la energía (Primera Ley de la Termodinámica)
Transferencia de cantidad	Segunda Ley de Newton
de movimiento	(Ecuación de movimiento)

Tabla 1.1 Procesos de transferencia

Existen numerosas leyes complementarias a las anteriores, respecto a las propiedades de un medio continuo que permiten describir los fenómenos moleculares en términos de cantidades macroscópicas. Las leyes que rigen a los procesos que relacionan esfuerzos y deformaciones, por ejemplo la ecuación clásica de Hooke para sólidos y la ecuación de fluidos viscosos, debida a Newton, y la ecuación de estado para un gas perfecto, son ejemplos de leyes complementarias.

El alcance y la complejidad de los problemas tecnológicos que se presentan en todas las ramas de la ingeniería han dado como resultado que en ninguna de ellas pueda dejarse de lado el estudio de los procesos de transferencia. Al tratar con fluidos en movimiento, se deberá pensar en los métodos de análisis en términos de los fenómenos fundamentales de transferencia.

1.5.1.1 Transferencia de masa

Con excepción de los efectos cuánticos y relativistas, todos los movimientos de los fluidos deberán satisfacer el principio de conservación de materia. Si se analiza el movimiento de un fluido, es evidente que se tendrá que tratar con transferencia de masa. Una discusión más detallada, requiere que se realice una distinción entre fluidos homogéneos y no homogéneos. Un fluido homogéneo es aquel que existe a todo lo largo de la región que se está considerando como una sola especie. Por ejemplo, el aire puede sufrir cambios en su densidad, velocidad y temperatura, sin embargo, permanece identificable como una mezcla estable de gases que se llama aire. El agua, el benceno o el mercurio pueden ser comprimidos, calentados y acelerados, pero a menos que un cambio de fase ocurra, estos líquidos podrán ser considerados como homogéneos.

Un fluido no homogéneo es aquel que en el que dos o más especies identificables existen dentro de la región de interés. Los fluidos no homogéneos están caracterizados por las variaciones que hay en la cantidad de sustancia con respecto a otra, de punto a punto en el sistema. Las especies pueden estar en fases iguales o diferentes; por ejemplo, si un chorro de bióxido de carbono es descargado dentro de la atmósfera, la concentración de CO_2 en el aire variará de punto a punto y el fluido será no homogéneo, pero de una sola fase. Un fenómeno similar ocurre cuando un chorro de agua dulce es descargado en el océano.

Una corriente que lleva partículas de sedimentos sólidos en suspensión es un ejemplo de un flujo no homogéneo de dos fases. Una mezcla de burbujas de aire y agua es otro ejemplo de fluido no homogéneo en dos fases.

En los fluidos homogéneos, la ley de conservación de materia lleva a una expresión, conocida como la ecuación de continuidad, la cual relaciona el tiempo y las variaciones espaciales de la densidad y velocidad. Si el fluido homogéneo es considerado también incompresible, la ecuación de continuidad se reduce a una expresión en las derivadas de la velocidad, con respecto a las variables de posición.

Para un fluido no homogéneo, el principio de conservación de la materia deberá ser satisfecho para cada componente o especie de la mezcla de fluidos. En este caso, además de la transferencia de masa debida a la velocidad local del flujo de la mezcla, hay un proceso independiente de transferencia de masa, debido a la tendencia de una

componente de la mezcla a moverse en la dirección en que decrece la concentración de esa componente. De aquí que las especies individuales se muevan con una velocidad relativa a la velocidad local de la mezcla. Esto se puede visualizar fácilmente si se considera un vaso de precipitado con la mitad inferior llena con una solución de cloruro de sodio y la de arriba con agua fresca. En este caso, la velocidad local del sistema es cero, sin embargo, después de un cierto tiempo, el cloruro de sodio se podrá detectar en la mitad superior, arriba de la frontera original entre las dos fases, este proceso es conocido como difusión molecular.

Las múltiples aplicaciones de la teoría de difusión y transferencia de masa se pueden aplicar a las siguientes áreas: la contaminación del aire, de las aguas superficiales y subterráneas, la evaporación de los océanos, lagos y depósitos y la intrusión del agua salina de mar en los estuarios.

1.5.1.2 Transferencia de calor

. 4

Los conceptos fundamentales relativos al fenómeno macroscópico conocido como calor, forman las bases de la ciencia de la termodinámica. En dinámica de fluidos se está fundamentalmente interesado en conocer la transferencia de calor ocasionada por el movimiento de un fluido, mientras que en la termodinámica clásica lo que importa es encontrar relaciones entre estados de equilibrio de la materia en volúmenes grandes; que son los llamados procesos sin flujo.

Aplicando el principio de conservación de la energía, también conocido como la primera ley de la termodinámica, a un proceso de flujo, se deduce una ecuación, la cual da una relación útil entre la presión, la densidad, la temperatura, la velocidad, la energía potencial, el trabajo mecánico y el calor que entra o sale del sistema.

Las expresiones más generales, basadas en las ecuaciones de la conservación de la energía, implican variaciones de la temperatura de punto a punto del flujo. De aquí que, además de la transferencia de calor por convección, debida a la velocidad del flujo, se tenga la presencia de una transferencia de calor por conducción, debida a la tendencia del calor a moverse en la dirección en que decrece la temperatura. Esta observación es análoga a la mencionada previamente de que la masa se transfiere en la dirección en que decrece la concentración.

1.5.1.3 Transferencia de cantidad de movimiento

La cantidad de movimiento se define como el producto de la masa de una partícula y su vector velocidad. La segunda ley de Newton aporta una relación fundamental norelativista entre la suma de fuerzas que actúan sobre una partícula y la rapidez de variación de su cantidad de movimiento. Las expresiones resultantes se conocen como ecuaciones de movimiento. El fenómeno de transferencia de cantidad de movimiento es de interés primario en mecánica de fluidos ya que engloba los conceptos que describen la resistencia interna de un fluido, esfuerzos tangenciales internos y esfuerzos en la frontera, así como la propulsión y fuerzas sobre cuerpos inmersos. 1

Como un ejemplo, considérese el movimiento producido en el fluido que ocupa el espacio entre dos grandes placas paralelas, **Figura 1.4**. La placa superior está en movimiento y la placa inferior esta fija. El fluido que está en contacto inmediato con las fronteras, toma la velocidad de éstas de acuerdo con la condición de no-deslizamiento. El fluido adyacente a la placa superior adquiere una cantidad de movimiento longitudinal, que causa a su vez, un movimiento longitudinal en la capa adyacente. Para satisfacer la condición de que la capa adyacente a la placa inferior tenga velocidad nula, la velocidad de cada capa subsiguiente, a partir de la que está pegada a la placa superior, deberá disminuirse, hasta llegar a cero en la placa inferior. Las masas de fluido individuales adquieren, por lo tanto, cantidad de movimiento longitudinal, merced a la transferencia, en dirección transversal de cantidades de movimiento.



Placa estacionaria

Figura 1.4 Transferencia de la cantidad de movimiento transversal

La transferencia transversal de cantidad de movimiento es una cantidad del tipo gradiente, y es proporcional al gradiente transversal de la cantidad de movimiento longitudinal, por unidad de volumen del fluido. Nótese que la transferencia de cantidad de movimiento transversal se realiza en al dirección en que disminuye la cantidad de movimiento longitudinal y este fenómeno es entonces análogo a la transferencia de calor en la dirección de disminución de la temperatura y a la transferencia de masa, en la dirección de disminución de la concentración.

Hasta ahora se ha enfatizado que los procesos de transferencia se realizan por dos mecanismos; el primero de los cuales es la convección, o sea, el proceso directo en el cual un fluido o cualquiera de sus propiedades, se mueve de un lugar a otro, a través del sistema de flujo. El segundo es la conducción o difusión, o sea, el proceso de movimiento de masa, calor o cantidad de movimiento en la dirección de disminución. Este comportamiento común de los procesos de transferencia es debido a una fuerza de conducción que proviene de un gradiente y que ofrece expresiones análogas que

relacionan la rapidez de transferencia y la magnitud del gradiente; esto puede establecerse generalmente como:

$$\frac{dA / dt}{\text{área}} = K \frac{dA / V}{ds}$$
 1.15

÷

donde

- \$

dA / dt área	Transferencia por unidad de tiempo, de la cantidad A, por unidad de área
	normal a la dirección de transferencia

- K Constante de difusividad
- $\frac{dA/V}{ds}$ Gradiente de A, por unidad de volumen de fluido, en la dirección de transferencia

En lugar de A se puede sustituir la masa, calor o cantidad de movimiento. En esta formulación, la constante de difusividad depende de la forma de movimiento del fluido, según se trate de flujo laminar o turbulento, se debe notar que si el flujo es laminar entonces el proceso de transferencia es debido a la difusividad molecular, por otra parte, si existen corrientes turbulentas con la consecuente mezcla de las partículas del fluido, entonces el proceso de transferencia es debido a difusividad turbulenta.

1.6 Relaciones entre esfuerzos y deformaciones

Una condición necesaria para trabajar en la Física y la Mecánica de los sólidos es poseer una cierta familiaridad con los conceptos básicos que relacionan a los esfuerzos con las deformaciones.

1.6.1 Sistema general de esfuerzos y deformaciones

1.6.1.1 Esfuerzos sobre superficies

Cuando un sistema de fuerzas actúa sobre un cuerpo, las componentes de los esfuerzos actúan sobre las seis caras de un pequeño elemento dentro del cuerpo, de aristas Δx , Δy , Δz y que puede ser representado como se indica en la **Figura 1.5**. El esfuerzo sobre la cara perpendicular al eje x en el punto O, puede expresarse en términos de un esfuerzo normal y dos esfuerzos normales tangenciales ortogonales.

$$\sigma_{x} = \lim \frac{\Delta F_{x}}{\Delta A_{x}}, \qquad \tau_{xy} = \lim \frac{\Delta F_{y}}{\Delta A_{x}} \qquad \tau_{xz} = \lim \frac{\Delta F_{z}}{\Delta A_{x}} \qquad 1.16$$

28

ć

En las definiciones anteriores, ΔF_x , ΔF_y , y ΔF_z son las componentes del vector fuerza ΔF , actuando sobre la cara y ΔA es el área de la cara x del elemento. El subíndice para el esfuerzo normal indica la dirección de éste. La convención de subíndices para las componentes del esfuerzo tangencial, indica el plano en el cual actúa éste esfuerzo. En todos los casos, una componente de esfuerzo es positiva cuando actúa sobre una cara positiva y tiene la dirección de uno de los ejes coordenados; e inversamente, cuando actúa sobre una cara negativa, tiene la dirección opuesta al eje coordenado.

El sistema general de esfuerzos requiere nueve componentes escalares (una normal y dos tangenciales para cada cara). Sin embargo, puede mostrarse que los pares de esfuerzos tangenciales cuyos subíndices difieren sólo en el orden en que están colocados, son iguales. En mecánica elemental de sólidos, se acostumbra considerar que el elemento sometido a esfuerzos está en un estado de equilibrio estático, lo cual es equivalente a especificar que la suma de todos los momentos y la suma de todas las fuerzas son iguales a cero para el elemento.

$\sigma'_{x} = \sigma_{x} + \frac{\partial \sigma_{x}}{\partial x} \Delta x$	$\sigma'_{y} = \sigma_{y} + \frac{\partial \sigma_{y}}{\partial y} \Delta y$	$\sigma'_{z} = \sigma_{z} + \frac{\partial \sigma_{z}}{\partial z} \Delta z$
$\tau'_{xy} = \tau_{xy} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} \Delta x$	$\tau'_{yx} = \tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \Delta y$	$\tau'_{zx} = \tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \Delta z$
$\tau'_{xz} = \tau_{xz} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} \Delta x$	$\tau'_{yz} = \tau_{yz} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} \Delta y$	$\tau'_{zy} = \tau_{zy} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \Delta z$

Figura 1.5 Esfuerzos sobre las caras de un elemento

Sin embargo, se desea tratar el caso más general en el cual el elemento se encuentra en un estado arbitrario de movimiento. Considérese la suma de los momentos, por ejemplo, alrededor de un eje centroidal en la dirección z, lo cual conduce a:

 ΣM_z = (elemento de masa) (radio de giro)² (aceleración angular)

De lo cual se deduce lo siguiente.

÷,

$$\tau_{xy} - \tau_{yx} = \lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ \Delta y \to 0 \\ \Delta z \to 0}} \left[\rho \text{ (radio de giro)}^2 \text{ (aceleración angular)} \right] = 0$$

En el límite cuando Δx , $\Delta y \Delta z$ tienden a cero, el segundo miembro tiende también a cero debido a que el radio de giro es una cantidad de orden superior.

Aplicando este procedimiento a las tres direcciones se obtiene

 $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ $\tau_{zx} = \tau_{xz}$

Que es la misma conclusión a la que se llega para equilibrio estático. Por lo tanto el sistema general de esfuerzos se reduce a seis componentes escalares. El siguiente objetivo es considerar las componentes de deformación del elemento cuando éste se deforma bajo los esfuerzos aplicados.

1.6.1.2 Componentes de la deformación

La deformación de cualquier medio continuo, sólido, líquido o gas, puede describirse en términos de componentes de deformación normal y tangencial. Estas componentes a su vez pueden expresarse en función de las velocidades de deformación angular y lineal. Para pequeñas deformaciones, hay relaciones válidas dentro de una buena aproximación, las cuales pueden definirse usando el principio de deformaciones infinitesimales del elemento del material, en la siguiente forma.

Considérese un pequeño elemento OABC de un cuerpo no deformado que está en el plano xy, como se muestra en la **Figura 1.6**. Si el cuerpo está sujeto a la acción de un sistema de fuerzas externas, el elemento puede deformarse hasta O' A' B' C', como se muestra en dicha figura. Las coordenadas del punto O antes de la deformación son x, y, z y después de la deformación se transforman en x+ ξ , y+ η , z+ ζ . La componente de la deformación normal, es por definición, igual al cambio en la longitud de un lado del elemento, dividido entre la longitud original. El símbolo ε se emplea para designar la deformación normal, con un subíndice el cual indica la dirección en la cual ocurre la deformación. Entonces en el punto O para la dirección x se tiene lo siguiente:

$$\varepsilon_{x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{O'C' - OC}{OC} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\left\{ \Delta x - \xi \right\} + \left[\xi + \left(\partial \xi / \partial x \right) \Delta x \right] \right\} - \Delta x}{\Delta x} = \frac{\partial \xi}{\partial x}$$
 1.18

Aplicando el mismo procedimiento para las otras dos direcciones se obtienen las tres deformaciones normales.

 $\langle \cdot \rangle$

8

1.17

$$\tau_{zy} = \tau_{yz} = G\left[\frac{\partial\zeta}{\partial y} + \frac{\partial\eta}{\partial z}\right] \qquad \qquad \epsilon_{y} = \frac{\partial\eta}{\partial y} \qquad \qquad \epsilon_{z} = \frac{\partial\zeta}{\partial z} \qquad \qquad 1.19$$

Donde G, es el módulo de elasticidad tangencial

La deformación normal es positiva cuando el elemento se alarga bajo la deformación.

La deformación tangencial se define como el cambio que tiene lugar en el ángulo que hay entre dos elementos originalmente perpendiculares, cuando ocurre la deformación. La deformación tangencial se representa mediante el símbolo γ con dos subíndices que indican la dirección de los ejes perpendiculares en el plano de la deformación. Por lo tanto, para el plano xy, en la **Figura 1.6** se tiene:

Figura 1.6 Estado de deformación plana

$$\gamma_{xz} = \lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ \Delta y \to 0}} (\theta_c + \theta_A)$$

$$\gamma_{xz} = \lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ \Delta y \to 0}} \left[\frac{(\partial \eta / \partial x) \Delta x}{\Delta x} + \frac{(\partial \xi / \partial y) \Delta y}{\Delta y} \right] = \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \xi}{\partial y}$$

$$1.21$$

Repitiendo el mismo procedimiento para las otras direcciones, se obtienen las tres deformaciones tangenciales.

$$\gamma_{xy} = \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \xi}{\partial y}, \qquad \qquad \gamma_{yz} = \frac{\partial \zeta}{\partial y} + \frac{\partial \eta}{\partial z}, \qquad \qquad \gamma_{zx} = \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \qquad 1.22$$

Con la notación anterior, el desplazamiento de un punto (tal como O), bajo una deformación, puede escribirse como el vector de desplazamiento, δ donde

$$\delta = \xi \mathbf{i} + \eta \mathbf{j} + \zeta \mathbf{k}$$
 1.23

e i, j, k son los vectores unitarios en las direcciones x, y, z.

El cambio de volumen del elemento deformado, dividido entre el volumen original es conocido como la dilatación volumétrica, *e*.

$$e = \text{dilatación volumétrica} = \frac{d(\Delta V)}{\Delta V} = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$$
 1.24

ó utilizando las ecuaciones (1.19) se tiene

$$\mathbf{e} = \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial \zeta}{\partial z} = \nabla \cdot \overline{\delta}$$
 1.25

1.6.1.3 Relaciones entre el esfuerzo y la deformación para sólidos elásticos

La materia sólida que compone un elemento deformable se supone que tiene propiedades elásticas, las cuales son independientes de la orientación de los ejes coordenados (propiedad de isotropía). Sí, además, se supone que este sólido es idealmente elástico, se puede utilizar la Ley de Hooke, la cual expresa la proporcionalidad lineal que hay entre esfuerzo y la deformación, teniéndose lo siguiente.

$$\varepsilon_x^0 = \frac{\sigma_x}{E}$$
 $\varepsilon_y^0 = \frac{\sigma_y}{E}$ $\varepsilon_z^0 = \frac{\sigma_z}{E}$ 1.26

donde E, es el módulo de elasticidad de Young para el sólido y ε_x^0 es la deformación normal en la dirección x, debida al esfuerzo normal, σ_x . La ley de Hooke la cual establece que la deformación varía linealmente con el esfuerzo, es una aproximación empírica del comportamiento de muchos sólidos reales bajo pequeñas deformaciones. Debido a que con fuerzas de tensión se tienen contracciones laterales de la materia, los esfuerzos normales, σ_y y σ_z causarán deformaciones en la dirección x. Por ejemplo, la deformación ε_x' en la dirección x debida a σ_y está dada en función del módulo de Poison v, como:

$$\varepsilon'_{x} = -\upsilon \varepsilon_{y}^{0} = -\frac{\upsilon \sigma_{y}}{E}$$
 1.27

32

15

岔

similarmente ϵ_x " debida a σ_z es

$$\varepsilon_{x}^{"} = -\upsilon \varepsilon_{z}^{0} = -\frac{\upsilon \sigma_{z}}{E}$$
 1.28

De aquí que

$$\varepsilon_{x} = \varepsilon_{x}^{0} + \varepsilon_{x}^{'} + \varepsilon_{x}^{'} = \frac{\sigma_{x}}{E} - \frac{\upsilon}{E} \left(\sigma_{y} + \sigma_{z} \right)$$
 1.29

Para las tres direcciones se tiene

$$\varepsilon_{x} = \frac{1}{E} \left[\sigma_{x} - \upsilon \left(\sigma_{y} + \sigma_{z} \right) \right]$$
 1.30a

$$\varepsilon_{y} = \frac{1}{E} \left[\sigma_{y} - \upsilon \left(\sigma_{z} + \sigma_{x} \right) \right]$$
 1.30b

$$\varepsilon_{z} = \frac{1}{E} \left[\sigma_{z} - \upsilon \left(\sigma_{x} + \sigma_{y} \right) \right]$$
 1.30c

Los esfuerzos tangenciales están relacionados con las deformaciones tangenciales o angulares por el módulo de elasticidad tangencial, G, donde otra vez se supone la proporcionalidad lineal de acuerdo con la ley de Hooke.

$$\gamma_{xy} = \frac{\tau_{xy}}{G}$$
 $\gamma_{yz} = \frac{\tau_{zy}}{G}$ $\gamma_{zx} = \frac{\tau_{zx}}{G}$ 1.31

Las ecuaciones (1.30) y (1.31) son la forma generalizada de la ley de Hooke para un sólido elástico. Contienen el módulo de Young y el módulo de elasticidad tangencial, como estas cantidades están relacionadas, es deseable agrupar algebraicamente las ecuaciones (1.30) para expresar la relación que existe entre los esfuerzos y las deformaciones normales en función del módulo tangencial.

El módulo de Young, el módulo de elasticidad tangencial y el módulo de Poisson están relacionados por medio de la siguiente ecuación:

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}$$
 1.32

De la ecuación (1.30), la dilatación volumétrica expresada por la ecuación (1.24) puede escribirse de la siguiente manera

$$e = \frac{1 - 2\upsilon}{E} \left(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z \right)$$
 1.33
Se define ahora $\overline{\sigma}$ como la media aritmética de los tres esfuerzos normales

$$\vec{\sigma} = \frac{1}{3} \left(\sigma_{x} + \sigma_{y} + \sigma_{z} \right)$$
 1.34

De las ecuaciones (1.30a), (1.32) y (1.33), se tiene

$$\sigma_{x} = 2G\left[\varepsilon_{x} + \frac{\upsilon e}{1 - 2\upsilon}\right]$$
 1.35

El módulo de Poisson puede ser eliminado sumando la siguiente cantidad nula

$$\overline{\sigma} - \frac{1}{3} \left(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z \right) = 0$$

. A:

a la ecuación (1.35) y simplificando. Efectuando estos pasos para las tres direcciones, se tiene:

$$\sigma_{x} - \overline{\sigma} = 2G\left[\varepsilon_{x} - \frac{e}{3}\right] \qquad \sigma_{y} - \overline{\sigma} = 2G\left[\varepsilon_{y} - \frac{e}{3}\right] \qquad \sigma_{z} - \overline{\sigma} = 2G\left[\varepsilon_{z} - \frac{e}{3}\right] \quad 1.36$$

Para completar la lista de los nueve términos de esfuerzos para un sólido elástico, se utilizan las ecuaciones (1.22) y (1.31).

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = G\left[\frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \xi}{\partial y}\right], \qquad \tau_{zy} = \tau_{yz} = G\left[\frac{\partial \zeta}{\partial y} + \frac{\partial \eta}{\partial z}\right]$$
$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = G\left[\frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial \zeta}{\partial x}\right]$$
1.37

1.6.1.4 Relaciones entre el esfuerzo y la rapidez de deformación para fluidos newtonianos

Las evidencias experimentales sugieren que los esfuerzos en un fluido están relacionados con la rapidez de deformación, más que a la deformación en sí; como ocurre para los esfuerzos en el estado sólido. Entonces, en lugar de suponer que los esfuerzos varían linealmente con respecto a las deformaciones, se asumirá que hay una relación lineal entre el esfuerzo y la rapidez de deformación. Como sé indico anteriormente, los fluidos que satisfacen esta condición son llamados fluidos newtonianos, y la constante de proporcionalidad es la viscosidad dinámica.

Las relaciones apropiadas de esfuerzo-deformación para un fluido newtoniano pueden obtenerse de forma análoga a las ecuaciones (1.36) y (1.37). Por ejemplo, considérese la componente x de la ecuación (1.36) y reemplácese él modulo de elasticidad tangencial por una cantidad que exprese sus dimensiones, se tendrá lo siguiente.

 $\langle g \rangle$

ŝ

Į.

Sólido elástico de Hooke:

Por analogía, se puede escribir una ecuación similar para los fluidos, que relacione los esfuerzos en el primer miembro con las velocidades de deformación en el segundo, entonces.

 $\sigma_{x} - \overline{\sigma} = 2\left(\frac{F}{\Gamma^{2}}\right)\left(\epsilon - \frac{e}{3}\right)$

Fluido newtoniano:

$$\sigma_{x} - \overline{\sigma} = 2 \left(\frac{FT}{L^{2}} \right) \frac{\partial}{\partial t} \left(\varepsilon - \frac{e}{3} \right)$$
 1.38

Nótese que para conservar las dimensiones, la nueva constante de proporcionalidad deberá contener al tiempo. Por lo tanto, la viscosidad dinámica µ para un fluido es análoga al módulo tangencial de elasticidad para un sólido. La relación esfuerzo deformación para fluidos puede escribirse como:

$$\sigma_{x} - \overline{\sigma} = 2\mu \frac{\partial \varepsilon_{x}}{\partial t} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial e}{\partial t}$$
 1.39

El término $\partial \varepsilon_x / \partial t$ es la rapidez de variación con respecto al tiempo de la deformación normal, deducida de la ecuación (1.19). La cantidad $\partial e / \partial t$ expresa la rapidez de variación con respecto al tiempo de la dilatación volumétrica del elemento de fluido. De la ecuación (1.25) se tiene que.

$$\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} = \nabla \cdot \frac{\partial \bar{\delta}}{\partial t} = \nabla \cdot \bar{\mathbf{q}}$$
 1.40

Por definición un fluido incompresible es aquel en el cual la derivada con respecto al tiempo de la dilatación volumétrica de un elemento de fluido es cero. Por lo que se puede expresar matemáticamente lo siguiente.

$$\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{q} = \mathbf{0}$$
 1.41

La cual es una condición de incompresibilidad.

Como se ha mencionado, los líquidos son casi incompresibles y, por lo tanto, puede suponerse que cumplen con la ecuación (1.41). Después de realizar las substituciones adecuadas en la ecuación (1.39), los esfuerzos normales toman se transforman en:

$$\sigma_{x} = \overline{\sigma} + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left(\nabla \cdot \overline{q}\right)$$
 1.42

Siguiendo la misma analogía, los esfuerzos tangenciales de las ecuaciones (1.37) se transforman para el caso de fluidos en:

1.36a

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left[\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right]$$
 1.43

.

Con la finalidad de encontrar el valor del esfuerzo normal medio de la ecuación (1.42) se introduce el concepto de presión que existe en un fluido.

Se acostumbra identificar una presión media del fluido con la presión termodinámica. La cuestión es ¿Cómo pueden relacionarse la presión termodinámica p y el esfuerzo normal medio $\overline{\sigma}$?. Existen dos posibilidades, la primera es utilizar la suposición, la cual es comprobada con experimentos hechos con líquidos incompresibles, de que los efectos viscosos dependen únicamente de la viscosidad μ , la cual relaciona los esfuerzos tangenciales y la rapidez de deformación. Este es un caso de completa analogía con las ecuaciones de los sólidos elásticos basadas en la Ley de Hooke.

$$\overline{\sigma} = -p = \frac{1}{3} \left(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z \right)$$
 1.44

El signo negativo de la ecuación anterior se debe a la convención de que una compresión se considera positiva, al tratarse de fluidos. La ecuación (1.44) se aplica a un fluido incompresible, o a cualquier otro caso de dilatación volumétrica nula.

La segunda posibilidad es utilizar la evidencia experimental que se refiere a efectos de dilatación en líquidos compresibles y gases. Para tomar en cuenta estos efectos, el $\overline{\sigma}$ de la ecuación (1.42) puede representarse como la suma de la presión termodinámica y una cantidad dependiente de un segundo coeficiente de viscosidad. Para un fluido isotrópico, la relación puede establecerse de la manera siguiente.

$$\overline{\sigma} = -p + \mu' \left(\nabla \cdot \overline{q} \right)$$

donde μ' es un coeficiente de viscosidad asociado exclusivamente con la dilatación, tal que

$$-p = \overline{\sigma} - \mu' \left(\nabla \cdot \overline{q} \right) = \frac{1}{3} \left(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z \right) - \mu' \left(\nabla \cdot \overline{q} \right)$$
 1.45

El último término es importante sólo cuando la rapidez de variación del volumen $\nabla \cdot \vec{q}$ es muy grande. Para la mayoría de los casos es pequeña por lo que se iguala $\overline{\sigma}$ a –p.

Haciendo la suposición de que los efectos de dilatación por viscosidad son nulos, y substituyendo la ecuación (1.44) en la (1.42) para obtener los esfuerzos en función de las velocidades de deformación, como se hace usualmente para fluidos, se tiene

$$\sigma_{x} = -p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left(\nabla \cdot \tilde{q}\right)$$

36

 \mathcal{C}

ŝ

$$\sigma_{y} = -p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left(\nabla \cdot \overline{q}\right)$$

$$\sigma_{z} = -p + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu \left(\nabla \cdot \overline{q}\right)$$
1.46

Los esfuerzos tangenciales se expresan de la siguiente manera.

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left[\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right], \qquad \tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left[\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right]$$
$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right] \qquad 1.47$$

Las ecuaciones (1.46) muestran que, en general, el esfuerzo normal en una dirección dada, no es igual a la media de los esfuerzos normales a menos que los efectos viscosos sean nulos o que el fluido esté en reposo. Más aún, para efectos viscosos nulos, los tres esfuerzos normales son iguales y los esfuerzos tangenciales son nulos. Estos permiten concluír que, para fluidos no viscosos en movimiento, o de cualquier otra naturaleza, pero en reposo se tiene:

$$\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = \sigma$$
 y $\tau_{xy} = \tau_{yz} = \tau_{zx} = 0$ 1.48

El fluido en reposo corresponde al estado de equilibrio hidrostático. Se concluye que si los esfuerzos tangenciales están presentes en un fluido real, éste está en movimiento.

1.7 Ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento

A continuación se deducen las expresiones tridimensionales para la conservación de la materia y las ecuaciones para la cantidad de movimiento, en cierto sentido, estas deducciones completarán la formulación de los métodos de análisis de la dinámica de fluidos fundamental.

1.7.1 Ecuación de continuidad

Considérese un volumen de control diferencial Δx , Δy , Δz en una región cuya densidad y velocidad son funciones de la posición en el espacio y el tiempo.

37

Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa



Flujo neto a través de la cara perpendicular al eje x = $-\left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x}\Delta x\Delta z\right]$

Figura 1.7 Volumen de control diferencial para la conservación de la materia

Con respecto a la **Figura 1.7**, se puede calcular el flujo de masa por segundo que circula a través de cada cara del cubo; obteniéndose para las tres direcciones.

$$-\left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x}\Delta x\right]\Delta y \Delta z \qquad 1.49$$
$$-\left[\frac{\partial(\rho v)}{\partial y}\Delta y\right]\Delta x \Delta z \qquad 1.50$$
$$-\left[\frac{\partial(\rho w)}{\partial z}\Delta z\right]\Delta x \Delta y \qquad 1.51$$

Del principio de conservación de la materia, la suma de estas tres componentes deberá ser igual a la rapidez de variación, con respecto al tiempo, de la masa que hay dentro del volumen del cubo, esto es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \big(\rho \, \Delta x \, \Delta y \, \Delta z \big)$$

1.52

ų,

Aquí Δx , Δy , Δz son independientes del tiempo ya que el volumen de control es fijo. Después de realizar operaciones y combinar las ecuaciones (1.49) a (1.52) se obtiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho w)}{\partial z} = 0$$
 1.53

o bien:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \, \vec{\mathbf{V}} = \mathbf{0} \tag{1.54}$$

La ecuación (1.53) o (1.54) es la ecuación general de continuidad para un fluido que se encuentra en flujo variado. Para condiciones de estado permanente, donde $\partial \rho / \partial t = 0$, se tiene:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \nabla \cdot \rho \, \vec{\nabla} = 0$$
1.55

La condición de continuidad para un fluido incompresible está dada por la ecuación siguiente:

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{q}} = \mathbf{0} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{y}} + \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial z}$$
 1.56

La ecuación (1.56) es la forma más común de la ecuación de continuidad, para flujos permanentes y variados de fluidos incompresibles. Substituyendo la ecuación (1.56) en la ecuación (1.55), se determina que para un fluido incompresible

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 = \frac{\partial\rho}{\partial t} + u\frac{\partial\rho}{\partial x} + v\frac{\partial\rho}{\partial y} + w\frac{\partial\rho}{\partial z}$$
1.57

Para un fluido incompresible de densidad uniforme, cada término individual de la ecuación (1.57) es independientemente nulo. Para un fluido de densidad no uniforme, la ecuación (1.57) expresa las relaciones que hay entre los gradientes de densidad que deben existir si las partículas del fluido son incompresibles.

1.7.2 Ecuaciones de movimiento

Para encontrar las relaciones que describen las ecuaciones de movimiento, ahora se aplica la segunda ley de Newton en la forma vectorial y se suman las fuerzas que se ejercen sobre la partícula material de masa fija Δm , **Figura 1.5**.

Para describir la suma de las fuerzas sobre las partículas del fluido, además de las fuerzas superficiales discutidas en el apartado 1.6, las fuerzas de cuerpo se deben entre

otros fenómenos a influencias de campos gravitacionales o electromagnéticos y en cada caso las fuerzas actúan en el centroide del elemento. Otras fuerzas centroidales tienen la misma naturaleza que las fuerzas de cuerpo, pero pueden ser debidas a la elección de un sistema de referencia rotatorio o acelerado, con respecto al espacio inercial como por ejemplo la fuerza de Coriolis es de este tipo. Por ahora, únicamente se consideran las fuerzas debidas al campo gravitacional, cuando se refiera a fuerzas de cuerpo. La fuerza gravitacional por unidad de masa es la aceleración de la gravedad g, cuyas componentes están dadas por

 $g = i g_x + j g_y + j g_y$

La suma de las componentes x de las fuerzas activas en el elemento de la **Figura 1.5**, de acuerdo con la segunda ley de Newton, es:

$$\Delta F_{x} = \Delta m \cdot a_{x} = (\rho \, \Delta x \, \Delta y \, \Delta z) a_{x}$$
1.58

con

$$\begin{split} \Delta \mathsf{F}_{\mathsf{x}} &= \left(\rho \, \Delta \mathsf{x} \, \Delta \mathsf{y} \, \Delta \mathsf{z} \right) \mathsf{g}_{\mathsf{x}} - \sigma_{\mathsf{x}} \, \Delta \mathsf{y} \, \Delta \mathsf{z} + \left(\sigma_{\mathsf{x}} + \frac{\partial \sigma_{\mathsf{x}}}{\partial \mathsf{x}} \, \Delta \mathsf{x} \right) \Delta \mathsf{y} \, \Delta \mathsf{z} \\ &- \tau_{\mathsf{y}\mathsf{x}} \, \Delta \mathsf{x} \, \Delta \mathsf{z} + \left(\tau_{\mathsf{y}\mathsf{x}} + \frac{\partial \tau_{\mathsf{y}\mathsf{x}}}{\partial \mathsf{y}} \, \Delta \mathsf{y} \right) \Delta \mathsf{x} \, \Delta \mathsf{z} - \tau_{\mathsf{z}\mathsf{x}} \, \Delta \mathsf{x} \, \Delta \mathsf{y} + \left(\tau_{\mathsf{z}\mathsf{x}} + \frac{\partial \tau_{\mathsf{z}\mathsf{x}}}{\partial \mathsf{z}} \, \Delta \mathsf{z} \right) \Delta \mathsf{x} \, \Delta \mathsf{y} \end{split}$$

Dividiendo entre el volumen del elemento se obtiene

$$\rho g_{x} + \frac{\partial \sigma_{x}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = \rho a_{x}$$
 1.59

De manera similar para las direcciones y y z, se tiene:

$$\rho g_{y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{y}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} = \rho a_{y}$$
 1.60

$$\rho g_{z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{z}}{\partial z} = \rho a_{z}$$
 1.61

1.7.2.1 Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones (1.59) a (1.61) son generales y se aplican a cualquier fluido sobre el cual actúan fuerzas del campo gravitacional. Para fluido newtonianos con un solo coeficiente de viscosidad, se hará uso de las relaciones esfuerzos deformación del apartado **1.6**, dadas por las ecuaciones (1.46) y (1.47). Substituyendo estos esfuerzos normales y

(C

¢

tangenciales en las ecuaciones (1.59) a (1.61), se obtiene para la componente x de la ecuación de movimiento.

$$\rho g_{x} - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2 \mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left(\nabla \cdot \vec{q} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] = \rho a_{x}$$

$$1.62$$

Esta ecuación es válida para un fluido newtoniano de densidad y viscosidad variables, en un campo gravitacional. Las medidas de la viscosidad indican que μ es una función de la temperatura y muy ligeramente una función de la presión. Este último efecto es casi siempre despreciable, y si los cambios en la temperatura no son muy grandes, la suposición de una viscosidad constante y correspondiente a la temperatura media del fluido, es justificada. Entonces la ecuación (1.62) se transforma en

$$\rho g_{x} - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \frac{\partial}{\partial x} \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left(\nabla \cdot \overline{q} \right) \right]$$
$$+ \mu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \mu \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) = \rho a_{x}$$
1.63

Después de desarrollar y simplificar se tiene

$$\rho g_{x} - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^{2} u}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2} u}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} u}{\partial y^{2}} \right] + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\nabla \cdot \vec{q} \right) = \rho a_{x}$$
 1.64

y similarmente para las direcciones y, z.

$$\rho g_{y} - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^{2} v}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2} v}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} v}{\partial z^{2}} \right] + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\nabla \cdot \overline{q} \right) = \rho a_{y}$$
 1.65

$$\rho g_{z} - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial^{2} w}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2} w}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} w}{\partial z^{2}} \right] + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\nabla \cdot \overline{q} \right) = \rho a_{z}$$
 1.66

Las ecuaciones (1.64) a (1.66) son la forma cartesiana de las ecuaciones de Navier-Stokes, para fluido compresible de viscosidad constante. En notación vectorial y desarrollando el término de la aceleración, las ecuaciones (1.64) a (1.66) se pueden escribir de la siguiente manera.

$$\rho g - \nabla p + \mu \cdot \nabla^2 \overline{q} + \frac{\mu}{3} \nabla \left(\nabla \cdot \overline{q} \right) = \rho \frac{\partial q}{\partial t} + \rho \left(\overline{q} \cdot \nabla \right) \overline{q}$$
 1.67

Para fluidos incompresibles $\nabla \cdot \mathbf{q} = 0$, las ecuaciones de Navier-Stokes quedan de la siguiente forma.

$$\rho \,\overline{\mathbf{g}} - \nabla \mathbf{p} + \boldsymbol{\mu} \cdot \nabla^2 \,\overline{\mathbf{q}} = \rho \,\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \rho \,(\overline{\mathbf{q}} \cdot \nabla) \overline{\mathbf{q}}$$
 1.68

Los fluidos densos, como los líquidos, tienen una gran capacidad térmica y por ende los cambios de temperatura, debido a fricciones internas, son despreciables. En estos casos la densidad y viscosidad varían poco y pueden considerarse constantes. Por lo tanto, la ecuación (1.68) puede utilizarse aún cuando el sistema no éste completamente en condiciones isotérmicas.

Si la profundidad h se mide en dirección vertical (positiva hacia arriba), las componentes de la aceleración debida a la gravedad son:

$$g_z = -g \frac{\partial h}{\partial x}$$
, $g_y = -g \frac{\partial h}{\partial y}$, $g_z = -g \frac{\partial h}{\partial z}$ 1.69

Ó

$$\bar{\mathbf{g}} = -\mathbf{g}\nabla\mathbf{h} \tag{1.70}$$

Por ejemplo, si los ejes cartesianos están orientados de tal forma que h y z coincidan, entonces $g_x = g_y = 0$ y

$$g_z = -g$$
 1.71

El signo menos que aparece en la ecuación anterior se debe a que la aceleración de la gravedad actúa en la dirección negativa de h. Otra forma de expresar las ecuaciones (1.68), con las aceleraciones expresadas en forma cartesiana es la siguiente.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -g \frac{\partial h}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right]$$
1.72

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -g \frac{\partial h}{\partial y} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right]$$
1.73

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -g \frac{\partial h}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right]$$
 1.74

Para fluidos incompresibles y flujos isotérmicos en un campo gravitacional, hay cuatro variables de flujo, u, v, w y p, las cuales aparecen en las ecuaciones de movimiento. Entonces, en principio, las tres ecuaciones de movimiento más la de conservación de

(

ý

43

masa para fluidos incompresibles, ecuación (1.56), son suficientes para obtener una solución cuando se especifican las condiciones iniciales y de frontera. El sistema completo de ecuaciones (1.72) a (1.74) y (1.56) deberá satisfacer las condiciones de frontera, tanto cinemáticas como físicas (paredes en los conductos, por ejemplo). Las condiciones cinemáticas son aquellas que especifican que las velocidades normales a cualquier frontera o pared rígida, deberán ser iguales a la velocidad en la frontera (esto es cero para fronteras estacionarias).

La condición física es una consecuencia de la propiedad de cualquier fluido real, que puede ser tratado como un medio continuo, que debe adherirse a una frontera rígida; esto equivale a que el fluido no tenga velocidad tangencial relativa a las paredes de la frontera. Consecuentemente ambas, las componentes normal y tangencial de la velocidad, tomadas con respecto a las paredes, se anularán en la superficie de la frontera.

Resumen

₹:

Existen dos métodos para describir el movimiento de un grupo de partículas en un medio continuo. En el primero, método lagrangiano, las coordenadas de las partículas en movimiento son representadas como funciones del tiempo.

El segundo método para describir el movimiento de un fluido, el cual se utilizará en adelante, permite fijar la atención en puntos discretos, sin la necesidad de identificar las partículas que se encuentran en dichos puntos. Cuando se utiliza este enfoque, conocido como método de Euler, el observador nota las características del flujo cerca de un punto fijo cuando las partículas pasan por él.

Si todas las aceleraciones locales son nulas en las ecuaciones de Navier-Stokes, el movimiento es *permanente*. La velocidad puede cambiar de punto en punto en el espacio, pero en un punto fijo no ocurrirán cambios con el tiempo. Por otra parte si todas las aceleraciones convectivas son nulas, el movimiento es *uniforme*. Las aceleraciones convectivas nulas implican flujo paralelo, como puede verse mediante un análisis de las ecuaciones anteriores. Esto permite establecer la definición de que el movimiento es uniforme si los vectores velocidad son paralelos en cualquier parte del fluido.

Cuando se estudia el comportamiento dinámico de los fluidos, generalmente son de interés algunos aspectos de los llamados fenómenos de transferencia, esto es, la capacidad de los fluidos en movimiento, de llevar materiales y propiedades de un lugar a otro, y del mecanismo por medio del cual estos materiales y propiedades se difunden y se transmiten a través de un medio fluido.

Con excepción de los efectos cuánticos y relativistas, todos los movimientos de los fluidos deberán satisfacer el principio de conservación de materia. Si se analiza el movimiento de un fluido, es evidente que se tendrá que tratar con transferencia de masa. Las múltiples aplicaciones de la teoría de difusión y transferencia de masa se pueden aplicar a las siguientes áreas: la contaminación del aire, de las aguas superficiales y subterráneas por contaminantes, la evaporación de los océanos, lagos y depósitos, la intrusión del agua salina de mar en los estuarios.

Los conceptos fundamentales relativos al fenómeno macroscópico conocido como calor, forman las bases de la ciencia de la termodinámica. En dinámica de fluidos se interesa fundamentalmente en conocer la transferencia de calor ocasionada por el movimiento de un fluido, mientras que la termodinámica clásica se interesa sobre todo en encontrar relaciones entre estados de equilibrio de la materia en volúmenes grandes; que son los llamados procesos sin flujo.

La cantidad de movimiento se define como el producto de la masa de una partícula y su vector velocidad. La segunda ley de Newton aporta una relación fundamental norelativista entre la suma de fuerzas que actúan sobre una partícula y la rapidez de variación de su cantidad de movimiento. Las expresiones resultantes se conocen como ecuaciones de movimiento. El fenómeno de transferencia de cantidad de movimiento es 4

í,

45

de interés primario en mecánica de fluidos ya que engloba los conceptos que describen la resistencia interna de un fluido, esfuerzos tangenciales internos y esfuerzos en la frontera, así como la propulsión y fuerzas sobre cuerpos inmersos.

Las ecuaciones de Navier-Stokes son generales y se aplican a cualquier fluido sobre el cual actúan fuerzas del campo gravitacional. Los fluidos densos como los líquidos, tienen una gran capacidad térmica, por lo que los cambios de temperatura debido a fricciones internas, son despreciables. En estos casos la densidad y viscosidad varían poco y pueden considerarse constantes.

Para fluidos incompresibles y flujos isotérmicos en un campo gravitacional, hay cuatro variables de flujo, u, v, w y p, las cuales aparecen en las ecuaciones de movimiento. Entonces, en principio, las tres ecuaciones de movimiento más la de conservación de masa para fluidos incompresibles, son suficientes para obtener una solución cuando se especifican las condiciones iniciales y de frontera. El sistema completo de ecuaciones deberá satisfacer las condiciones de frontera, tanto cinemáticas como físicas.

2 Ecuaciones fundamentales del modelo de advección dispersión

2.1 Introducción

El análisis se basa en las ecuaciones de cantidad de movimiento y de continuidad. En las situaciones en las que dos fluidos son diferentes, pero aproximadamente de la misma densidad, se pueden utilizar relaciones para el flujo volumétrico obtenidas anteriormente, para determinar la dilución media de un fluido, que descarga en otro. Sin embargo en el gran grupo de problemas tecnológicos relacionados con la mezcla de fluidos, es necesario en general, determinar la cantidad relativa de una sustancia en un punto, para cualquier tiempo. Por lo tanto, una nueva variable, la concentración se introduce en el análisis. Esto requiere que la ecuación de conservación de masa (continuidad, en un fluido homogéneo) sea reformulada para un fluido no homogéneo.

Como se estableció en el capítulo anterior, el principio de conservación de masa debe verificarse para cada componente o especie en un fluido heterogéneo. Por simplicidad, las discusiones siguientes se referirán siempre a un sistema binario, esto es, de dos componentes. Por lo tanto, si se está interesado en la mezcla de dos fluidos diferentes, un gas deberá ser designado como la especie A y el otro como la especie B. Casos más complejos, tales como la mezcla de agua de mar y agua dulce pueden tratarse también, dentro de una aproximación razonable, como sistemas binarios, aunque el agua sea un líquido multicompuesto. Por ejemplo, si se supone que la concentración de cloruro de sodio es representativa de la concentración relativa de agua de mar, el proceso de mezcla puede considerarse como un proceso binario, donde el cloruro de sodio es la componente A y el agua dulce es la componente B.

2.1.1 Difusión molecular en un sistema binario

La difusión molecular es el proceso mediante el cual la materia se transporta por la movilidad molecular. La confusión gradual de una frontera de separación entre líquidos diferentes, originalmente bien definida, es un ejemplo común de difusión ordinaria o molecular. Se reconoce que los gradientes de temperatura, de presión y los campos de fuerza externas pueden contribuir también al flujo de masa en una escala molecular. Estos efectos son generalmente pequeños, aunque es fácil encontrar ejemplos en los cuales éste no sea el caso. Por citar alguno, en la separación de compuestos por centrífugas de alta velocidad y la sedimentación de las partículas sólidas en suspensión, donde el campo gravitacional produce una velocidad de caída de los sólidos con respecto a la fase líquida.

Si el fluido está en un estado de movimiento convectivo, se debe tener cuidado en distinguir de movimientos laminares y turbulentos. Por ejemplo, si el fluido es turbulento, el intercambio macroscópico de partículas de fluido generalmente "eclipsará" al proceso de intercambio molecular. La difusión molecular ordinaria se llama a menudo gradiente de difusión, porque puede describirse por una ley observacional, en la cual la rapidez de

K

transferencia de masa de una sustancia, por unidad de área, es proporcional al gradiente de concentración de la sustancia. Esto es conocido como la primera ley de Fick, y es análoga a la ley de Newton para la viscosidad.

Antes de continuar con una discusión cuantitativa del proceso de difusión, es necesario definir ciertas propiedades del fluido, y algunos parámetros cinemáticos propios del sistema binario.

Densidad:

masa de la componente A	masa de la componente B	~ 4
$\rho_{\rm A} = \frac{1}{\rm volumen} de la mezcla de A v B$	$\rho_{\rm B} = \frac{1}{v_{\rm O}}$	2.1
volumen de la mercea de rivy B		

 $\rho = \frac{\text{masa de A} + \text{masa de B}}{\text{volumen de la mezcla de A y B}} = \rho_A + \rho_B$

Concentración:

 $c_{A} = \frac{\text{masa de la componente A}}{\text{masa de la mezcla de A y B}} = \frac{\rho_{A}}{\rho}$

$$c_{B} = \frac{\text{masa de la componente B}}{\text{masa de la mezcla de A y B}} = \frac{\rho_{B}}{\rho}$$

de lo cual se concluye que

$$c_{A} + c_{B} = 1$$

En una mezcla, las diversas componentes se mueven con diferentes velocidades. Sin embargo, no se refiere a las velocidades particulares de cada molécula, sino más bien a la velocidad media de todas las moléculas de una componente dada, dentro de un volumen pequeño. Para la componente A, se llamará a esta velocidad V_A, cuando se mide con respecto a un sistema de coordenadas fijo. El flujo de masa de la componente A, por unidad de área (masa por segundo, por unidad de área), es entonces un vector igual al producto $_{PA}$ V_A. El área unitaria es normal a la dirección del vector velocidad.

Denotando al vector flujo (relativo a las coordenadas fijas) por N_A, se tiene.

$$N_A = \rho_A V_A$$

El flujo de masa **N**_A puede interpretarse también como una cantidad de movimiento de la componente A, por unidad de volumen de la mezcla. En forma similar para la componente B, se tiene

47

2.5

2.3

2.4

2.2

$N_B = \rho_B V_B$

ŧ

Ahora, se está en posición de definir la velocidad hidrodinámica local V, como la que se mediría con un tubo de Pitot. Ésta velocidad deberá ser igual a la cantidad de movimiento total por unidad de masa, y por lo tanto.

 $\frac{Cantidad \ de \ movimiento \ total}{Volumen \ de \ la \ mezcla} = N_A + N_B$

Entonces

$$\mathbf{V} = \frac{\mathbf{N}_{A} + \mathbf{N}_{B}}{\rho_{A} + \rho_{B}} = \frac{\rho_{A}\mathbf{V}_{A} + \rho_{B}\mathbf{V}_{B}}{\rho}$$

Utilizando la ecuación (2.3) se tiene que

$$V = c_{\Delta}V_{\Delta} + c_{B}V_{B}$$

Al tratar con procesos de difusión, se está interesado en la transferencia de masa con respecto a la velocidad hidrodinámica o convección del fluido. Por ejemplo, considérese un pequeño glóbulo de solución de cloruro de sodio inyectado en un fiujo de agua, la cual fluye uniformemente en un canal, como se muestra en la **Figura 2.1**. El centro de la masa del glóbulo se mueve aguas abajo con la velocidad hidrodinámica V. Debido a la difusión molecular, la sal tiende a dispersarse, y por lo tanto, la velocidad V_A de la sal difiere de la velocidad hidrodinámica V. Denotando el flujo de masa por unidad de área, de la componente A (con respecto a la velocidad hidrodinámica), por J_A, se tiene



Figura 2.1 Difusión molecular relativa al movimiento convectivo del fluido

2.6

¢

2.7



$\mathbf{J}_{\mathsf{A}} = \rho_{\mathsf{A}} \left(\mathbf{V}_{\mathsf{A}} - \mathbf{V} \right)$

Este flujo es proporcional al gradiente de concentración local.

Por otra parte la primera ley de Fick puede enunciarse en forma vectorial, como:

$$\mathbf{J}_{\mathsf{A}} = -\rho \, \mathsf{D}_{\mathsf{A}\mathsf{B}} \, \nabla \, \mathsf{C}_{\mathsf{A}}$$

2.10

2.9

Donde D_{AB} es el coeficiente de difusión molecular, o de difusividad, para el sistema binario. Como en el caso de la viscosidad molecular, D_{2B} es una propiedad del fluido, la cual depende de las componentes A y B, su concentración relativa, y de la temperatura y presión del sistema.

2.1.2 Ecuación de transporte de masa

La expresión para la conservación de masa de una componente en un sistema binario se obtiene sumando los flujos de la masa en el volumen de control diferencial, y una expresión conveniente para el flujo de masa con respecto a un sistema fijo de coordenadas, ésta expresión se encuentra combinando las ecuaciones (2.5) y (2.9), con lo que se tiene lo siguiente.

$$N_A = J_A + \rho_A V$$

Al utilizar la primera ley de Fick (ecuación (2.10)), y emplear la concentración por medio de la ecuación (2.3), el flujo de masa se transforma en:

$$N_A = -\rho D_{AB} \nabla c_A + \rho c_A V$$

2.11

Esta última expresión tiene una ventaja obvia sobre la ecuación original (2.5), porque N_A está ahora en términos de cantidades fácilmente medibles: la densidad local ρ , la concentración c_A y la velocidad hidrodinámica V.

Ahora se puede formar la expresión para la conservación de masa para la componente A, en coordenadas cartesianas, refiriéndose a la **Figura 2.2**. Esto se puede establecer de la manera siguiente a través del siguiente diagrama de flujo:

Flujo neto de masa A, a través del elemento de fluido (flujo neto de entrada menos flujo de salida)	Rapidez de producción de la masa del elemento A por reacción química o biológica, dentro del elemento del fluido.	=	Rapidez de acumulación de masa del elemento A, dentro del elemento del fluido.
--	--	---	---



Figura 2.2 Flujo neto de masa de la componente A en la dirección x

En forma matemática, se tiene

$$-\frac{\partial (N_{A})_{x}}{\partial x} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z - \frac{\partial (N_{A})_{y}}{\partial y} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z - \frac{\partial (N_{A})_{z}}{\partial z} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z + r_{A} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z =$$
$$= \frac{\partial \rho_{A}}{\partial t} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \qquad 2.12$$

Dividiendo entre el elemento de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$, y agrupando términos, se obtiene

$$\frac{\partial \rho_{A}}{\partial t} + \frac{\partial (N_{A})_{x}}{\partial x} + \frac{\partial (N_{A})_{x}}{\partial x} + \frac{\partial (N_{A})_{x}}{\partial x} = r_{A}$$
2.13

o en forma vectorial

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_A = \mathbf{r}_A$$
 2.14

En las ecuaciones anteriores, r_A representa la masa de A producida por unidad de volumen y por unidad de tiempo. Sí la componente desaparece en un proceso de reacción, r_A será negativa. En forma similar, la conservación de la masa de la sustancia B puede escribirse como:

$$\frac{\partial \rho_{\rm B}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_{\rm B} = \mathbf{r}_{\rm B}$$
 2.15

En un sistema binario, la producción de A puede sólo ocurrir a expensas de B, ya que la masa total del sistema debe conservarse. Entonces.

Al sumar las ecuaciones (2.14) y (2.15) se tiene lo siguiente.

$$\frac{\partial \rho_{A}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{B}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_{A} + \nabla \cdot \mathbf{N}_{B} = 0$$
 2.17

Sustituyendo las ecuaciones (2.1) y (2.7) en la ecuación (2.17) se tiene en forma vectorial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \cdot \mathbf{V} \right) = 0$$
 (2.18)

la cual es la ecuación general de continuidad para la mezcla de fluidos.

Volviendo a la ecuación de conservación de masa, para una sola componente (2.14), reemplazando al vector flujo N_A, por su equivalente de la ecuación (2.11), y $\rho_A = \rho c_A$.

$$\frac{\partial(\rho c_{A})}{\partial t} + \nabla \cdot \left(-\rho D_{AB} \nabla c_{A} + \rho c_{A} V\right) = r_{A}$$

Desarrollando y agrupando términos, se obtiene.

$$\frac{\partial(\rho c_{A})}{\partial t} + \rho c_{A} \nabla \cdot \mathbf{V} + \mathbf{V} \cdot \nabla c_{A} = \rho D_{AB} \nabla^{2} c_{A} + (\nabla c_{A}) \cdot (\nabla \rho D_{AB}) + r_{A}$$
 2.19

Si el fluído considerado es incompresible $\nabla \cdot \mathbf{q} = 0$. Sí además, la solución es diluida, tanto la densidad total de la mezcla ρ , como el coeficiente de difusión, son esencialmente constantes. Así, después de dividir entre ρ , la ecuación (2.19) se transforma en:

$$\frac{\partial \mathbf{c}_{A}}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{c}_{A} = \mathbf{D}_{AB} \nabla^{2} \mathbf{c}_{A} + \frac{\mathbf{r}_{A}}{\rho}$$
 2.20

en forma cartesiana se tiene:

$$\frac{\partial c_{A}}{\partial t} + u \frac{\partial c_{A}}{\partial x} + v \frac{\partial c_{A}}{\partial x} + w \frac{\partial c_{A}}{\partial z} = D_{AB} \left[\frac{\partial^{2} c_{A}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2} c_{A}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} c_{A}}{\partial z^{2}} \right] + \frac{r_{A}}{\rho}$$
 2.21

51

Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa

6

52

Esta ecuación es conocida como la ecuación de difusión convectiva ó de transporte de masa; y es la expresión para la conservación de masa de la sustancia A, la cual sufre una difusión ordinaria, en un flujo laminar incompresible.

ŝ.

\$;

Si la velocidad convectiva y la rapidez de producción son cero, la ecuación (2.21) se reduce a.

$$\frac{\partial c_{A}}{\partial t} = D_{AB} \left[\frac{\partial^{2} c_{A}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2} c_{A}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} c_{A}}{\partial z^{2}} \right] + \frac{r_{A}}{\rho}$$
 2.22

Esta forma es denominada a menudo como la segunda ley de Fick, y es una ecuación diferencial de segundo orden. Si la concentración se reemplaza por la temperatura T y D_{AB} se reemplaza por la difusividad térmica α , se llega a la ecuación de calor.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]$$
 2.23

la cual es una de las ecuaciones básicas de la teoría de la transferencia de calor. Se han obtenido un gran número de soluciones de estas ecuaciones, para varias condiciones de frontera.

Resumen

La difusión molecular es el proceso mediante el cual la materia se transporta por la movilidad molecular. Si el fluido está en un estado de movimiento convectivo, se debe tener cuidado en distinguir de movimientos laminares y turbulentos. Por ejemplo, si el fluido es turbulento, el intercambio macroscópico de partículas de fluido generalmente "eclipsará" al proceso de intercambio molecular.

La difusión molecular ordinaria se llama a menudo gradiente de difusión, porque puede describirse por una ley observacional, en la cual la rapidez de transferencia de masa de una sustancia, por unidad de área, es proporcional al gradiente de concentración de la sustancia. Esto es conocido como la primera ley de Fick, y es análoga a la ley de Newton para la viscosidad.

La ecuación de transferencia de masa es una de las ecuaciones básicas de la teoría de la transferencia de calor. Se han obtenido un gran número de soluciones para esta ecuación, variándose solamente las condiciones de frontera.

3 Mecánica computacional de fluidos

3.1 Introducción

ł;

Las ecuaciones de gobierno para la dinámica de fluidos Newtoniana, y las de flujo no permanente de Navier-Stokes, se conocen desde hace 150 años o más, sin embargo, la solución de estas ecuaciones, es todavía un área activa de la investigación, como es el caso del problema de la turbulencia a través de la descomposición que utiliza Reynolds.

La dinámica de fluidos experimental tiene un papel muy importante en la validación y delimitación de las aproximaciones a las soluciones de estas ecuaciones de gobierno. Por ejemplo el túnel de viento, como una pieza de equipo experimental, proporciona un medio efectivo de simulación de flujos reales.

La permanente mejora en la velocidad y en el almacenamiento en memoria de las computadoras desde los años 50's, ha permitido el surgimiento de la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD). Esta rama de la mecánica de fluidos complementa la parte teórica y experimental de la mecánica de fluidos, proporcionando una alternativa para la simulación de flujos reales.

El desarrollo de computadoras más eficientes ha generado un notable interés en CFD, además de que ha producido una mejora en la de eficiencia de las técnicas computacionales, por lo que CFD es el medio preferido de diseñadores en muchas ramas de la aviación, y de la industria automovilística.

Chapman proporcionó 4 ventajas significativas de CFD respecto de la dinámica de fluidos experimental, estas son:

- El tiempo en diseño y desarrollo es reducido
- CFD puede simular condiciones de flujo no reproducibles en pruebas experimentales
- CFD proporciona información más detallada
- CFD incrementa la relación costo-beneficio

El usar un código optimizado de CFD permiten diseños alternos (configuraciones geométricas distintas) los cuales son estudiados bajo diferentes valores de los parámetros del flujo, por ejemplo, número de Reynolds, número de Mach, orientación del flujo etc. En la práctica CFD es una herramienta muy efectiva para la selección del diseño óptimo.

El comportamiento de un fluido puede ser descrito a través de la velocidad y de las propiedades termodinámicas del mismo, como una función continua en el tiempo y en el espacio. La aplicación de los principios de conservación de masa, momentum y energía producen sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, para las variables termodinámicas y de velocidad como una función del tiempo y posición. Con condiciones iniciales y de frontera para un flujo dado y la ecuación diferencial parcial apropiada, la descripción matemática del problema puede ser establecida.

4

R

Muchos problemas de mecánica de fluidos involucran la interacción entre la convección y difusión. Un ejemplo se indica en la Figura 3.1, en la cual se muestra la distribución de la temperatura de un fluido en un tubo en diferentes instantes. Se considera que el fluido está en movimiento hacia la derecha con una velocidad constante u y que la temperatura es constante a través del tubo.



Figura 3.1 Distribución unidimensional de temperatura en un tubo

La distribución de temperatura como una función de x y t es gobernada por la ecuación:

 $\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial^2 T}{\partial x} = 0 \qquad \text{Para } x_{L} \le x \le x_{R} \qquad \text{y} \qquad t > 0 \qquad 3.1$

Las condiciones de frontera e iniciales son:

$T(x_{L}, t) = T(x_{R}, t) = 0$				3.2
$T(x, 0) = \cos \pi x,$	$-0.5 \le x \le 0$.5		
T (x, 0) = 0.0	x < -0.5	У	x > 0.5	3.3

Las ecuaciones (3.1-3.3) describen matemáticamente el problema, el término $\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x}$ es la dispersión térmica y α es la constante de dispersión o término dispersivo. Éste coeficiente es el responsable del esparcimiento de la temperatura a la derecha e izquierda, sí α es

es el responsable del esparcimiento de la temperatura a la derecha e izquierda, sí α es pequeño la dispersión es pequeña.

TE	SIS	CON
FALLA	DE	ORIGEN

El término u $\frac{\partial T}{\partial x}$ es la convección y es el causante de que la distribución de la temperatura

se comience a mover a la derecha con una velocidad u. Hasta ahora la velocidad u, es conocida y lineal en T, sin embargo, cuando se requiere encontrar la solución para un campo de velocidades, es necesario considerar ecuaciones con términos no lineales convectivos. Un ejemplo de una ecuación no lineal está dada por la ecuación de Burger.

 $\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x} = 0$

3.4

El término convectivo no lineal $u \frac{\partial u}{\partial x}$ se puede representar numéricamente si α es muy

pequeño, por lo que requiere mallas muy finas y la presencia de la no-linealidad a menudo necesita un nivel adicional de iteración en el algoritmo computacional.

3.2 Visión General de la Dinámica Computacional de Fluidos

El procedimiento que se utiliza para determinar las variables en problemas que involucran movimiento de flujo se puede representar esquemáticamente en la Figura 3.2

Para cada e	elemento del fluido	
Conservación de masaEcuación de continuidadSegunda ley de NewtonEcuaciones de EulerConservación de energíaEcuación de la energía		-
	Solución de las ecuaciones con condiciones iniciales y de fronte	era
Distribución de velocidades: Presión Densidad Temperatura	u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t) p(x, y, z, t) p(x, y, z, t) T(x, y, z, t)	

Figura 3.2 Diagrama de flujo general para la solución de las ecuaciones de gobierno

Las ecuaciones de gobierno para flujos de interés práctico son usualmente demasiado complicadas para resolverse analíticamente, por lo que es necesario resolver este problema por medio de una solución numérica computacional. Las técnicas numéricas reemplazan las ecuaciones diferenciales parciales de gobierno con sistemas de ecuaciones algebraicas, por lo que la solución puede ser obtenida a través de una

3.6

computadora. Para algunos métodos como las diferencias finitas, elemento finito y volumen finito, las ecuaciones algebraicas ligan los valores de las variables dependientes a puntos adyacentes de una malla. Como se verá más adelante, un punto de la malla está distribuido a través de todo el dominio de cálculo, en el tiempo y en el espacio. Por ejemplo una representación típica en diferencias finitas de la ecuación (3.1) es:

$$\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}}{\Delta t} = \frac{u\left(T_{j+1}^{n} - T_{j-1}^{n}\right)}{2\Delta x} = \frac{\alpha \alpha \left(T_{j-1}^{n} - 2T_{j}^{n} + T_{j+1}^{n}\right)}{\Delta x^{2}}$$
3.5

Donde $x = j \Delta x y t = n \Delta t$

Si la solución es conocida en todos los puntos de la malla x_j en el tiempo n, puede usarse el siguiente algoritmo para T_i^{n+1}

$$\mathsf{T}_{j}^{n+1} = \mathsf{T}_{j}^{n} - \left(\frac{\mathsf{ut}}{2\,\Delta \mathsf{x}}\right) \left(\mathsf{T}_{j+1}^{n} - \mathsf{T}_{j-1}^{n}\right) + \left(\frac{\alpha\,\Delta \mathsf{t}}{\Delta \mathsf{x}^{2}}\right) \left(\mathsf{T}_{j-1}^{n} - 2\,\mathsf{T}_{j}^{n} + \mathsf{T}_{j+1}^{n}\right)$$

Al usar repetidamente la ecuación (3.6), esta genera la solución en todos los puntos internos de la malla x_j , en el tiempo n+1. Incrementando n y sustituyendo los valores de T^{n+1} en el lado derecho de (3.6) se encuentra la solución.

Para el método de las diferencias finitas, del elemento finito o volumen finito, el número de puntos requerido de la malla para una solución precisa, depende de la complejidad de la geometría. Por ejemplo el flujo de aire en un avión requiere por lo menos 10 millones de puntos. Para el flujo turbulento tridimensional se llegan a requerir entre 5 y 30 variables dependientes por punto de la malla. Dado que las ecuaciones de gobierno para muchas clases de fluidos son no lineales, para llegar a la solución, usualmente se procede de manera iterativa. Esto es, la solución para cada variable dependiente en cada punto de la malla es corregida secuencialmente usando las ecuaciones discretizadas. El proceso iterativo consiste en avanzar en el tiempo para encontrar la solución. El número de iteraciones o pasos de tiempo pueden variar de unos cientos hasta miles.

El proceso de discretización introduce un error que puede ser reducido, en principio, refinando la malla. Por lo que sí el algoritmo numérico que lleva a cabo las iteraciones avanza en el tiempo de manera estable, entonces la solución numérica puede acercarse a la solución real de las ecuaciones de gobierno, siempre y cuando la capacidad de cálculo de la computadora sea suficiente.

3.3 Clasificación de las ecuaciones diferenciales parciales

Las ecuaciones de gobierno de la dinámica de fluidos son ecuaciones diferenciales parciales con primera y segunda derivada en las coordenadas espaciales y primera derivada en el tiempo. Las derivadas con respecto al tiempo son lineales, pero las derivadas espaciales en las ecuaciones de gobierno a menudo son no lineales.

A DE ORIGEN

57

Para visualizar lo anterior se analizará la siguiente ecuación, la cual es de segundo orden con dos variables independientes.

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D \frac{\partial u}{\partial x} + E \frac{\partial u}{\partial y} + F u + G = 0$$
3.7

Donde de A a G son coeficientes constantes, de esta ecuación se desprenden tres categorías las cuales son:

2.

Por ejemplo considérese la siguiente ecuación diferencial para flujo potencial, bidimensional, permanente y compresible:

$$\left(1 - \mathbf{M}_{\infty}^{2}\right)\frac{\partial^{2} \varphi}{\partial \mathbf{x}_{\perp}^{2}} + \frac{\partial^{2} \varphi}{\partial \mathbf{y}^{2}} = 0$$
3.8

Aplicando el criterio anterior, indica que (3.8) es elíptica sí $M_{\infty} < 1$ e hiperbólica sí $M_{\infty} > 1$. Sí los coeficientes, A a G en (3.7), son función de x, y, u, $\partial u/\partial x$ o $\partial u/\partial y$, el criterio puede ser usado siempre que A, B y C estén interpretadas localmente. Esto implica que la clasificación de las ecuaciones de gobierno puede cambiar en diferentes partes del dominio de cálculo. Las ecuaciones de gobierno de la mecánica de fluidos tienen la característica de cambiar su tipo en el dominio de cálculo, por lo que esto representa una de las mayores complicaciones en la solución de las mismas.

3.3.1 Ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas

El ejemplo más simple de una ecuación diferencial parcial hiperbólica es la siguiente.

 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$ 3.9

Para condiciones iniciales dadas por u(x,0) = sin πx , $\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = 0$.

Y condiciones de frontera u(0, t) = u(1, t)=0 dicha ecuación tiene solución exacta, la cual es la siguiente

3.1**0**

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

 $U(x, t) = \sin \pi x \cos \pi t$

58

£

La carencia de una atenuación es una característica de las ecuaciones diferenciales parciales lineales. Un ejemplo de esto es la ecuación de convección. Las ecuaciones diferenciales parabólicas están asociadas a problemas de propagación donde no existe disipación.

3.3.2 Ecuaciones diferenciales parciales parabólicas

Este tipo de ecuaciones ocurren cuando en los problemas de propagación se incluyen mecanismos disipativos tales como la viscosidad o la conducción de calor. El ejemplo clásico de una ecuación diferencial parabólica es la ecuación de difusión o conducción de calor.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

para condiciones iniciales u = sin πx y condiciones de frontera u(0,t) = u(1,t) = 0 tiene la siguiente solución exacta.

U (x, t) = sin
$$\pi x \exp(-\pi^2 t)$$

3.12

3.11

El decaimiento exponencial en el tiempo mostrado por la ecuación anterior, puede contrastarse con la solución oscilatoria de (3.10).

Un ejemplo de este tipo de ecuaciones es la de transporte la cual es lineal, otro ejemplo es la ecuación de Burger's, sin embargo es no lineal.

Los problemas de ecuaciones diferenciales parabólicas son tipificados por soluciones en las cuales se avanza hacia delante en el tiempo pero se dispersa en el espacio. La magnitud de la dispersión se atenúa rápidamente conforme se aleja de la fuente. La incorporación de un mecanismo disipativo también implica que, aun si las condiciones iniciales o de frontera incluyen una discontinuidad, la solución en el interior del dominio de cálculo siempre será continua.

3.3.3 Ecuaciones diferenciales parciales elípticas

Para la dinámica de fluidos, las ecuaciones diferenciales elípticas, están asociadas con problemas de flujo en estado permanente. El ejemplo más simple de una ecuación diferencial elíptica es la ecuación de Laplace.

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0$$

3.13

59

La cual gobierna el flujo potencial incompresible. Para las condiciones de frontera



 $\phi(\mathbf{x}, 0) = \sin \pi \mathbf{x}, \qquad \phi(\mathbf{x}, 1) = \sin \pi \mathbf{x} \exp(-\pi)$

$$\phi(0, y) \coloneqq \phi(1, y) = 0$$

3.14

ť.

tiene la siguiente solución

 $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sin \pi \mathbf{x} \exp(-\pi \mathbf{y})$

en el dominio

 $0 \le x \le 1$, $0 \le y \le 1$

La ecuación de Poisson, bidimensional para flujo irrotacional es una ecuación diferencial elíptica. La ecuación de Navier-Stokes para estado permanente lo es también.

La característica más importante concerniente a las ecuaciones diferenciales elípticas es que la perturbación introducida en un punto del dominio de cálculo, influye en todos los demás puntos. A medida que se aleja del punto perturbado la influencia disminuye.

3.4 Técnicas preliminares en la dinámica de fluidos computacional

A continuación se discuten las técnicas básicas numéricas, que se requieren para resolver problemas que involucren a la mecánica de fluidos, en específico la ecuación de transporte de masa. El procedimiento para resolver ecuaciones diferenciales es muy parecido de un problema a otro, por ejemplo, para calcular el campo de velocidades de un flujo incompresible no permanente tridimensional se puede plantear el siguiente diagrama de flujo, el cual se muestra esquemáticamente en la Figura 3.3. El primer paso consiste en convertir una ecuación diferencial parcial continua y sus condiciones auxiliares (condiciones de frontera e iniciales) en un sistema de ecuaciones algebraicas. Este primer paso se denomina discretización y se puede identificar fácilmente si se utiliza el método en diferencias finitas.



Figura 3.3 Diagrama de flujo para resolver ecuaciones diferenciales con métodos computacionales

El reemplazar cada uno de los términos de una ecuación diferencial parcial, por expresiones algebraicas introduce un error en la solución del problema planteado, la adecuada selección de éstas expresiones algebraicas pueden minimizar ese error.

El segundo paso en el proceso de solución consiste en resolver ese sistema de ecuaciones algebraicas, este paso también introduce un error pero es despreciable



comparado con el error provocado por la discretización. Existen varios métodos para resolver sistemas de ecuaciones algebraicas los cuales se discutirán más adelante.

3.4.1 Discretización de ecuaciones diferenciales parciales

Para convertir una ecuación diferencial parcial en un sistema de ecuaciones algebraicas, existen varios métodos, los más comunes son; diferencias finitas, elemento finito, volumen finito y métodos espectrales.

La manera de discretizar depende de sí existen derivadas con respecto al tiempo o si sólo se tienen derivadas con respecto al espacio. En la práctica, las derivadas con respecto al tiempo son discretizadas casi exclusivamente usando el método de diferencias finitas, mientras que las derivadas espaciales se pueden discretizar con cualquiera de los métodos mencionados anteriormente.

A continuación se muestra el proceso de discretización considerando la siguiente ecuación, la cual es la ecuación de difusión no permanente unidimensional.

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial y^2}$$
 3.15

Donde \overline{T} es la temperatura y α es el coeficiente de difusión térmica, las condiciones iniciales y de frontera están dadas a continuación:

$$\overline{T}(0,t) = b, \quad \overline{T}(1,t) = d$$

$$\overline{T}(x,0) = T_0(x) \quad 0 \le x \le 1$$

La forma más directa para discretizar una ecuación diferencial parcial es reemplazar las derivadas por expresiones equivalentes en diferencias finitas, por lo que la ecuación resultante es:

$$\frac{\mathsf{T}_{j}^{\mathsf{n}+1}-\mathsf{T}_{j}^{\mathsf{n}}}{\Delta t}=\frac{\alpha\left(\mathsf{T}_{j-1}^{\mathsf{n}}-2\,\mathsf{T}_{j}^{\mathsf{n}}+\mathsf{T}_{j+1}^{\mathsf{n}}\right)}{\Delta \,\mathsf{x}^{\,2}}$$

El tamaño de los pasos Δx y Δt y el significado del subíndice j y superíndice n, se indican en la Figura 3.4. En (3.17) \overline{T}_i^n es el valor de T en (j, n) nodo.

TES	SIS	CON
FALLA	DE	ORIGEN

61

3.16

3.17

Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa



Figura 3.4 Representación gráfica de un malla discretizada

La ecuación (3.17) es el resultado de un proceso de discretización de (3.15), esto implica que el problema de encontrar la solución exacta (continua) de T(x,t)se ha remplazado

con el problema de encontrar valores discretos de T_iⁿ. Como se mencionó anteriormente

existen dos errores al efectuar el proceso de discretización, uno es el error de truncamiento y el otro el error en la solución. El primer error es provocado por la discretización de la ecuación diferencial, y el segundo es el correspondiente al error entre la solución aproximada y la solución exacta, ambos errores serán examinados en las secciones siguientes.

3.4.1.1 Discretización de derivadas en el espacio

Hasta ahora se ha descrito de manera breve como el método de diferencias finitas discretiza espacialmente las derivadas, de la forma $\partial^2 \overline{T} / \partial x^2$. El método del elemento finito realiza la discretización asumiendo que la solución local para T, puede ser interpolada. Después la solución local es substituida en una integral de la ecuación de gobierno y finalmente integrada. Un resultado típico (usando elementos lineales en una malla uniforme) es:



Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa

$$\frac{\left(\frac{\Delta x}{6}\right)\left(T_{j-1}^{n+1} - T_{j-1}^{n}\right)}{\Delta t} + \frac{\left(\frac{2\Delta x}{3}\right)\left(T_{j-1}^{n+1} - T_{j}^{n}\right)}{\Delta t} + \frac{\left(\frac{\Delta x}{6}\right)\left(T_{j+1}^{n+1} - T_{j+1}^{n}\right)}{\Delta t} = \frac{\alpha\left(T_{j-1}^{n} - 2T_{j}^{n} + T_{j+1}^{n}\right)}{\Delta x} 3.18$$

Dividiendo ambos lados de (3.18) por Δx , se tiene un resultado similar en estructura a la ecuación (3.17).

EL método espectral procede de una manera similar al del elemento finito, excepto que la solución para T es de la forma:

$$T = \sum_{j=1}^{J} a_j(t) \phi(x)$$

Donde a_J (t) son los coeficientes desconocidos a ser determinados como parte de la solución y ϕ_J (t) son funciones conocidas de x. La forma final de la ecuación discretizada usando el método espectral se puede escribir de la siguiente manera

 $\frac{a_j^{n+1}-a_j^n}{\Delta t}=\sum_{i=1}^J p_j\,a_j^n$

Donde pi son los coeficientes algebraicos conocidos.

3.4.1.2 Discretización de derivadas en el tiempo

Si se utiliza un esquema hacia adelante en diferencias finitas para discretizar al tiempo de la ecuación (3.15), sólo se usa información en los niveles n y n+1. Dado que sólo se avanza en la dirección positiva, la información en niveles de tiempo n+2 y mayores no se toman en cuenta. En la ecuación (3.17), la representación en diferencias finitas de las derivadas con respecto al espacio se han evaluado en el nivel de tiempo n, proporcionado así un algoritmo explícito para Tⁿ⁺¹.

$$\frac{\left(\mathsf{T}_{j}^{n+1}-\mathsf{T}_{j}^{n}\right)}{\Delta t}$$
3.16

Por otra parte, sí los términos espaciales se evaluaran en el nivel n+1 se obtendría el siguiente algoritmo implícito.

$$-sT_{i-1}^{n+1} + (1+2s)T_i^{n+1} - -sT_{i-1}^{n+1} = T_i^n$$

donde



63

3.17

3.20

3,19

$$\mathbf{s} = \frac{\alpha \, \Delta t}{\Delta x^2}$$

La ecuación (3.17) puede resolverse únicamente como un sistema de ecuaciones, el cual se forma al evaluar todos los nodos j =2, ..., J-1. Si se utilizará una fórmula en diferencias centradas (3.18) para evaluar el término temporal de la ecuación (3.15) se obtendría el algoritmo explícito para T_i^{n+1} de la ecuación (3.19)

$$\frac{\left(T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n-1}\right)}{2\Delta t}$$
3.18

$$T_{j-1}^{n+1} = T_{j}^{n-1} + \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \left(T_{j-1}^n + 2T_j^n + T_{j+1}^n \right)$$
3.19

La ecuación (3.19) es más precisa, pero más complicada para resolver, dado que involucra tres niveles en el tiempo, n-1, n y n+1. Este esquema en particular no es práctico, además de que es inestable, sin embargo el uso de diferencias centradas en el tiempo con otras ecuaciones, por ejemplo la ecuación de convección, resultan estables.

3.5 Expansión en series de Taylor

En la sección anterior se presentaron las fórmulas típicas algebraicas para mostrar los mecanismos de discretización de derivadas tales como $\partial^2 T / \partial x^2$, ahora se presentará como se deducen, a partir de expansiones en series de Taylor.

Como primer paso para desarrollar un algoritmo para calcular los valores de T de la ecuación (3.15), las derivadas en el tiempo y en el espacio de los nodos (j, n) son expresadas en términos de los valores de T en los nodos adyacentes.

La expansión en series de Taylor para los términos espaciales se expresa de la siguiente manera:

$$\overline{T}_{j+1}^{n} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Delta x^{m}}{m!} \left[\frac{\partial^{m} \overline{T}}{\partial x^{m}} \right]_{j}^{n}$$
3.20

y para las derivadas en función del tiempo se tiene:

 $\overline{\mathsf{T}}_{j}^{\mathsf{n}+1} = \sum_{\mathsf{m}=0}^{\infty} \frac{\Delta \mathsf{t}^{\mathsf{m}}}{\mathsf{m}!} \left[\frac{\partial^{\mathsf{m}} \overline{\mathsf{T}}}{\partial \mathsf{t}^{\mathsf{m}}} \right]_{\mathsf{t}}^{\mathsf{n}}$



64

3.21

ć

Estas series pueden ser truncadas después de un cierto número de términos, el error resultante (truncamiento) es dominado por el término siguiente en la expansión si $\Delta x < 1$, en (3.20) ó si $\Delta t < 1$ en (3.21). Por lo que se puede escribir lo siguiente.

$$\overline{\mathsf{T}}_{j+1}^{n} = \overline{\mathsf{T}}_{j}^{n} + \Delta x \left[\frac{\partial \overline{\mathsf{T}}}{\partial x} \right]_{j}^{n} + \frac{\Delta x^{2}}{2} \left[\frac{\partial^{2} \overline{\mathsf{T}}}{\partial x^{2}} \right]_{j}^{n} + O(\Delta x^{3})$$
3.22

El término $O(\Delta x^3)$ se puede interpretar como que existe una constante positiva K, que depende de \overline{T} , tal que la diferencia entre \overline{T} en el nodo (j+1, n) y los primeros tres términos del lado derecho de la ecuación (3.22), evaluados todos en el nodo (j, n), es numéricamente menor que K Δx^3 para todo Δx suficientemente pequeño. Se aprecia claramente que el error involucrado en ésta aproximación se reduce en magnitud de manera significativa tanto como el tamaño de Δx decrece.

Dada la consideración anterior la expresión en diferencias finitas para $\partial T / \partial x$ podría obtenerse directamente, así al reordenar (3.22) se tiene:

$\left[\partial \overline{T}\right]^{n}$	$\left(T_{j+1}^{n}-T_{j}^{n}\right)$	Δx	$\partial^2 \overline{T}$	n 上
$\begin{bmatrix} \partial \mathbf{x} \end{bmatrix}_{j}$	Δx	2	∂x^2	.т і

Lo cual es aproximadamente igual a:

$ = = = n (\pi n \pi n) $	
$\left \frac{\partial T}{\partial T}\right \approx \frac{(\Gamma_{j+1} - \Gamma_j)}{(\Gamma_{j+1} - \Gamma_j)}$	3.24
$\left[\partial \mathbf{x} \right]_{\mathbf{j}} \qquad \Delta \mathbf{x}$	

Los términos adicionales que aparecen en la ecuación (3.23) son conocidos como el error de truncamiento. La ecuación (3.24) es una aproximación en diferencias finitas hacia delante. De manera similar expandiendo \overline{T}_{j-1}^n en series de Taylor alrededor del nodo (j, n) y después de efectuar las operaciones correspondientes, se obtiene la ecuación (3.25) la cual es una aproximación en diferencias finitas hacia atrás.



3.25

3.23

El error generado por las últimas dos ecuaciones es de $O(\Delta x)$. La interpretación geométrica de las ecuaciones (3.24) y (3.25) se presenta en la **Figura 3.5**, en dicha figura la ecuación (3.24) representa la pendiente BC, mientras que la pendiente AB está representada por la ecuación (3.25).

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

Figura 3.5 Representación en diferencias finitas de $\partial T / \partial x$

Las ecuaciones (3.24) y (3.25) se obtuvieron a través de series de Taylor en el espacio. Para la variable del tiempo se utiliza la misma técnica, por lo que después de operaciones se obtiene la aproximación en diferencias finitas hacia delante para el tiempo.

$$\left[\frac{\partial \overline{T}}{\partial t}\right]_{i}^{n} \approx \frac{\left(T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}\right)}{\Delta t}$$
3.26

El esquema anterior al igual que los otros genera un error de $O(\Delta t)$.

3.5.1 Técnica General

Las expresiones en diferencias finitas presentadas en la sección anterior se generaron a partir de una manipulación simple de una expansión en series de Taylor. Una técnica más metódica para construir aproximaciones en diferencias finitas es comenzar a partir de una expresión general como la siguiente.

$$\left[\frac{\partial \overline{T}}{\partial x}\right]_{j}^{"} = a\overline{T}_{j-1}^{n} + b\overline{T}_{j}^{n} + c\overline{T}_{j+1}^{n} + O(\Delta x^{m})$$

$$3.27$$

Donde a, b y c son coeficientes a determinar y or termino $O(\Delta x^m)$ indica la precisión de la aproximación resultante. Usando (3.20) se puede escribir



66

۲,

3.28

$$\mathbf{a}\overline{\mathbf{T}}_{j-1}^{n} + \mathbf{b}\overline{\mathbf{T}}_{j}^{n} + \mathbf{c}\overline{\mathbf{T}}_{j+1}^{n} = (\mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c})\overline{\mathbf{T}}_{j}^{n} + (-\mathbf{a} + \mathbf{c})\Delta x \left[\frac{\partial\overline{\mathbf{T}}}{\partial x}\right]_{j}^{n} + (a + c)\frac{\Delta x^{2}}{2} + \left[\frac{\partial^{2}\overline{T}}{\partial x^{2}}\right]_{i}^{n} + (-a + c)\frac{\Delta x^{3}}{6} \left[\frac{\partial^{3}\overline{T}}{\partial x^{3}}\right]_{i}^{n} + \dots$$

Resolviendo

a+b+c = 0, $(-a+c)\Delta x = 1$ resulta

a = c-1/ Δx y b = -2c+a/ Δx para alguna c

Seleccionando c de tal forma que el tercer término del lado derecho de la ecuación (3.28) desaparezca, se produce la aproximación más precisa posible con tres parámetros disponibles, que son

 $c = -a = \frac{1}{2} \Delta x$ y b = 0

Substituyendo estos valores en (3.28) se obtiene

$$\left[\frac{\partial \overline{T}}{\partial x}\right]_{j}^{n} = \frac{1}{2\Delta x} \left(-\overline{T}_{j-1}^{n} + \overline{T}_{j+1}^{n}\right) - \frac{\Delta x^{3}}{6} \left[\frac{\partial^{3}\overline{T}}{\partial x^{3}}\right]_{j}^{n} + \dots$$
 3.29

Por lo tanto la aproximación en diferencias centradas de $\left[\partial T / \partial x\right]_{i}^{n}$, es

$$\left[\frac{\partial \overline{T}}{\partial x}\right]_{i}^{n} \approx \frac{\left(T_{j+1}^{n} - T_{j-1}^{n}\right)}{2\Delta x}$$
3.30

La cual tiene un error de truncamiento de $O(\Delta x^2)$. Claramente la aproximación en diferencias centradas produce un error de truncamiento de mayor orden que las diferencias hacia adelante o hacia atrás. La interpretación geométrica de (3.30) evalúa la pendiente AC en la **Figura 3.5**.

Utilizando una representación similar a (3.27), la siguiente fórmula en diferencias centradas puede ser obtenida para $\left[\partial^2 T / \partial x^2\right]_i^n$.

$$\left[\frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x^2}\right]_{j}^{n} = \frac{T_{j-1}^{n} - 2T_{j}^{n} + T_{j+1}^{n}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$
3.31

3.6 Precisión en el proceso de discretización

ż

La discretización es necesaria para convertir las ecuaciones diferenciales de gobierno en un sistema equivalente de ecuaciones algebraicas que pueden resolverse utilizando una computadora, dicho proceso invariablemente produce un error. Así la fórmula para diferencias centradas (3.30) es exacta para polinomios cuadráticos, y las fórmulas de diferencias finitas hacia adelante o hacia atrás son exactas sólo para polinomios lineales. La exactitud puede ser inferida del hecho de que todos los términos en el error de truncamiento son cero para polinomios de menor orden.

En general el error de una representación en diferencias finitas de una derivada puede obtenerse realizando una expansión en series de Taylor alrededor del nodo en el cual la derivada esta siendo calculada, y la evaluación del término principal en el residuo provee una aproximación cercana al error, si el tamaño de la malla es pequeño.

Una manera más directa de comparar la precisión de las fórmulas algebraicas que sustituyen a las derivadas es considerar una función analítica, como $\overline{T} = \exp x$, y comparar el valor de la derivada analíticamente y el obtenido de la discretización. En la **Tabla 3.1**, se tiene una comparación para $d\overline{T}/dx$, evaluada en x = 1, con $\overline{T} = \exp x$, como la función analítica; el tamaño del paso $\Delta x = 0.1$. Generalmente las formulaciones con tres puntos, ya sean simétricas o asimétricas son consideradas más precisas que las de dos puntos hacia delante (forward) o hacia atrás (backward). Aparentemente el término principal en la expansión de Taylor resulta una buena estimación del error, si Δx es suficientemente pequeño. Para este ejemplo en particular todas las derivadas de orden mayor en la expansión de Taylor son iguales a exp x.

Caso	Formula algebraica	$\left[\frac{d\overline{T}}{dx}\right]_{j}$	Error	Término principal en expansión de Taylor
Exacto		2.7183		*
3P Simétrica	(T _{j+1} – T _{j-1})/2∆x	2.7228	0.4533 x 10 ⁻²	0.4531 x 10 ⁻²
Diferencia finita hacia adelante	$(\overline{T}_{j+1} - \overline{T}_j) / \Delta \mathbf{x}$	2.8588	0.1406 x 10 ⁻⁰	0.1359 x 10 ⁻⁰
Diferencia finita hacia atrás	$\left(\overline{T}_{j}-\overline{T}_{j-1}\right)/\Deltax$	2.5868	-0.1315 x 10 ⁻⁰	-0.1359 x 10⁻ ⁰
3P Asimétrica	$\left(-1.5\overline{T}_{j}+2\overline{T}_{j+1}-0.5\overline{T}_{j+2}\right)/\Delta x$	2.7085	-0.9773 x 10 ⁻²	-0.9061 x 10 ⁻ 2
5P Simétrica	$\left(\overline{T}_{j-2} - 8\overline{T}_{j-1} + 8\overline{T}_{j+1} - \overline{T}_{j+2}\right)/12\Delta x$	2.7183	-0.9072 x 10 ⁻⁵	-0.9061 x 10 ⁻ ₅

3

Las fórmulas algebraicas para el término principal en el error de truncamiento se muestran en la **Tabla 3.2**. Estas formulaciones resultaron de realizar una expansión en series de Taylor alrededor del j-enésimo nodo. Como se observa la magnitud del error depende principalmente de la potencia de Δx .

Caso	Formula algebraica	Error de truncamiento del término principal
3P Simétrica	$\left(\overline{T}_{j+1} - \overline{T}_{j-1}\right)/2\Delta x$	$\Delta x^2 \overline{T}_{xxx} / 6$
Diferencia finita hacia adelante	$(\overline{T}_{j+1} - \overline{T}_j) / \Delta x$	۵xŦ _{xx} / 2
Diferencia finita hacia atrás	(Τ _j – Τ _{j-1})/ Δx	∆xT̄ _{xx} / 2
3P Asimétrica	$\left(-1.5\overline{T}_{j}+2\overline{T}_{j+1}-0.5\overline{T}_{j+2}\right)/\Delta x$	$-\Delta x^2 \overline{T}_{xxx} / 3$
5P Simétrica	$\left(\overline{T}_{j-2} - 8\overline{T}_{j-1} + 8\overline{T}_{j+1} - \overline{T}_{j+2}\right)/12\Delta x$	Δx ⁴ T _{xxxx} / 30

Tabla 3.2 Error de truncamiento del término principal (algebraico): dT / dx

3.7 Método de diferencias finitas

Como se mencionó en el apartado 3.1, la base para el método de diferencias finitas es la construcción de una malla discretizada, y reemplazar las derivadas continuas con expresiones equivalentes en diferencias finitas y finalmente convertir las ecuaciones algebraicas en un algoritmo, numérico. En ésta sección los aspectos anteriores se ligaran con la intención de establecer una metodología para resolver ecuaciones diferenciales con el método de diferencias finitas.

3.7.1 Implementación conceptual

Los pasos a seguir para aplicar el método de diferencias finitas para un problema dado están representados esquemáticamente en la **Figura 3.6**.


Figura 3.6 Diagrama de flujo para el método de diferencia finitas 🔅



Las condiciones de frontera e iniciales son:

T (x_L, t) = T Figura 307 Conducción de calor no permanente en una varilla 3.2 T (x, 0) = $\cos \pi x$, 0.5

El procedimiento anterior puede aplicarse específicamente al siguiente problema de conducción de calor (difusión). Una varilla (**Figura 3.7**), tiene inicialmente una temperatura de T(x, 0) = 0° C. En los extremos se aplica una temperatura de 100° C. El problema es encontrar numéricamente la temperatura T(x, t) de algún punto de la varilla. La ecuación de gobierno para este problema es (3.15)

$$\frac{\partial \overline{\mathsf{T}}}{\partial \mathsf{t}} - \alpha \frac{\partial^2 \overline{\mathsf{T}}}{\partial y^2} = 0$$

Para la solución de ésta ecuación, las condiciones iniciales están dadas por la ecuación (3.16). El esquema en diferencias finitas que se utilizará para resolver la ecuación de difusión es el conocido como hacia adelante en el tiempo y centrado en el espacio (FTCS) por sus siglas en inglés, el cual como algoritmo es el siguiente.

$$T_{i}^{n+1} = sT_{i-1}^{n} + (1-2s)T_{i}^{n} + sT_{i+1}^{n}$$
3.32

Donde s = $\alpha \Delta t / \Delta x^2$. La ecuación (3.32) es aplicada a los nodos internos j =2, ..., J-1. En un problema de conducción de calor típico los valores de frontera T_1^{n+1} y T_3^{n+1} están dados por las condiciones de frontera de la ecuación (3.16). El proceso de solución se repite avanzando en el tiempo (n = 1, 2, 3, ...), hasta completar el tiempo de simulación.

 $\overline{T}(x, 0) = 0$ Para las condiciones iniciales V condiciones de frontera $\overline{T}(0, t) = \overline{T}(1, t) = 100$, la salida generada por el algoritmo de la ecuación (3.32), correspondiente a s = 0.5, se muestra en la **Figura 3.8**. Disminuyendo el valor de Δt , se reduce s, y por lo tanto se produce un menor error en la solución. Esto se puede apreciar en la **Tabla 3.3** con $\overline{T}(0, 0) = \overline{T}(1, 0) = 50$, en donde se compara la solución obtenida con una solución analítica de la ecuación (3.15). El efecto de cambiar las condiciones iniciales $\overline{T}(0,0) = \overline{T}(1,0) = 0$, también se muestra en la Tabla 3.3. Se aprecia que el error es mayor en la solución obtenida.



Figura 3.8 Solución de la ecuación de difusión de calor unidimensional con s=0.5; comportamiento estable.

S	Error rms $\overline{T}(0, 0) = \overline{T}(1, 0) = 50$	Error rms $\overline{T}(0, 0) = \overline{T}(1, 0) = 0$
0.5	0.492	2.251
0.3	0.187	0.953
0.167	0.00169	0.440

- 8

Tabla 3.3 Error cuadrático medio (rms) para diferentes condiciones iniciales

Como se observa el método en diferencias finitas introduce un error que puede ser tomado en cuenta considerando el error de truncamiento. El error de truncamiento es el indicador más preciso del error en la solución, que como se ha visto depende directamente de que tan refinada este la malla de cálculo.

3.8 Fundamento teórico

÷,

Una cuestión importante concerniente a los métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales, es que se garantice que la solución obtenida a través de técnicas numéricas se acerque a la solución exacta de la ecuación diferencial, y además, bajo que circunstancias la solución numérica coincide con la solución exacta del problema planteado. La segunda parte de la pregunta se puede responder (superficialmente) obligando a que la solución aproximada deba converger a la solución exacta cuando los espaciamiento temporales y espaciales tiendan a cero. Sin embargo, la convergencia es muy difícil de establecer directamente, para llegar a dicha convergencia generalmente se utiliza un diagrama de flujo, como el de la **Figura 3.9**.

El diagrama indica que se requiere que el sistema de ecuaciones algebraicas, formado a partir del proceso de discretización debe ser consistente con las ecuaciones diferenciales parciales de gobierno. La consistencia implica que el proceso de discretización pueda ser reversible, es decir que a través de una expansión en series de Taylor, las ecuaciones de gobierno puedan formarse nuevamente. Además de que, el algoritmo utilizado para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas, debe ser estable.





Es muy difícil obtener una guía teórica para el comportamiento de la solución numérica de una ecuación diferencial en un tamaño de malla finita. Muchos de los resultados teóricos son sólo estrictamente aplicables en el límite cuando el tamaño de la malla tiende a cero. Sin embargo las conexiones que se han establecido entre la convergencia, consistencia y estabilidad son muy usadas cuantitativamente para encontrar soluciones en una malla finita.

3.8.1 Convergencia

La solución exacta del sistema de ecuaciones algebraicas es la solución aproximada de las ecuaciones diferenciales parciales de gobierno. Dicha solución es obtenida cuando no existe algún tipo de error, tal como el debido al redondeo durante el cálculo. La magnitud del error, e_j^n en el n-ésimo nodo depende comúnmente del tamaño de los espaciamientos, $\Delta x y \Delta t$.

Probar que una solución del sistema de ecuaciones algebraica converja a la solución de la ecuación diferencial parcial es generalmente muy difícil, aún para los casos más simples. Para la solución aproximada de la ecuación de difusión, utilizando el algoritmo más simple FTCS, una prueba de convergencia para s $\leq \frac{1}{2}$ fue realizada por Noye (AÑO). La convergencia es muy difícil de mostrar cuando la ecuación diferencial parcial es más complicada que la ecuación de difusión.

3.8.1.1 Teorema de equivalencia de Lax

Dado un apropiado valor lineal de condición inicial y una aproximación en diferencias finitas para satisfacer la condición de consistencia, la estabilidad es la condición necesaria y suficiente para la convergencia.

El teorema de equivalencia de Lax es de gran importancia, dado que es relativamente fácil mostrar la estabilidad de un algoritmo y su consistencia con la ecuación diferencial parcial original.

Muchos de los problemas reales de flujo son no lineales y el valor inicial no es lineal, así que el teorema de equivalencia no siempre puede ser aplicado rigurosamente. Consecuentemente dicho teorema debe ser interpretado como condición necesaria, pero no siempre suficiente.

3.8.1.2 Convergencia numérica

Para las ecuaciones que gobiernan la mecánica de fluidos, la convergencia es casi imposible demostrar teóricamente, sin embargo, para problemas que poseen una solución exacta como la ecuación de difusión, es posible obtener soluciones numéricas en una malla refinada y un cálculo del error en la solución. La convergencia implica que el error

en la solución debe reducirse a cero tanto como el espaciamiento de la malla tienda a cero.

A manera de ejemplo, se realizaron corridas del programa que resuelve la ecuación de difusión unidimensional, refinando sucesivamente el espaciamiento de la malla. Los correspondientes errores se muestran en la **Tabla 3.4** para s = 0.5 y s = 0.30. Es claro que el error se reduce conforme Δx decrece. Basado en estos resultados sería razonable inferir que el refinamiento de la malla produce una mayor reducción en el error, y en el límite de Δx cuando tiende a cero la solución de las ecuaciones algebraicas podrían converger a la solución exacta.

$S = \alpha \Delta t / \Delta x^2$	∆x=0.2	∆x=0.1	∆x=0.05	∆x=0.025
0.50	1.658	0.492	0.121	0.030
0.30	0.590	0.187	0.048	0.012

Tabla 3.4 Reducción del error (r	rms)	en la	a solución	con	refinamientos	de ma	alla
----------------------------------	------	-------	------------	-----	---------------	-------	------

3.8.2 Consistencia

El sistema de ecuaciones algebraicas generado por el proceso de discretización se dice consistente con la ecuación diferencial parcial original si, en el límite en el cual el espaciamiento tiende a cero, el sistema de ecuaciones algebraicas es equivalente a ecuación diferencial parcial en cada punto de la malla.

El mecanismo para probar la consistencia, requiere de la substitución de la solución exacta en ecuaciones algebraicas, y de la expansión de todos los valores en los nodos en una serie de Taylor alrededor de un punto. Para la consistencia la expresión resultante debe partir de la ecuación diferencial parcial original, más un residuo. La estructura del residuo debe ser tal que éste se reduce a cero, tanto como la malla se refina.

3.8.3 Estabilidad

Es la tendencia de algunas perturbaciones espontáneas (tal como el error de redondeo) en la solución del sistema de ecuaciones algebraicas. Un ejemplo de esto es la solución obtenida con el esquema FTCS con s = 0.6 que se muestra en la **Figura 3.8**, estos resultados han sido obtenidos con $\Delta x = 0.1$ y las mismas condiciones y de frontera utilizadas para generar la **Figura 3.10**.

Es claro de la **Figura 3.10** que una oscilación no física se origina en la línea de simetría y se propaga hacia las fronteras. La amplitud de la oscilación crece conforme se incrementa el tiempo.

ř





El concepto de estabilidad esta ligado con el crecimiento, o decaimiento, de errores introducidos en algún paso del cálculo. En éste contexto, los errores no son ocasionados por una lógica incorrecta en el algoritmo, ya que estos ocurren porque la computadora no puede dar respuestas a un número infinito de decimales. De hecho en cada cálculo realizado en la computadora se recorta un número de decimales, ocasionando el llamado error de redondeo.

Un método particular es estable, si el efecto acumulativo de todos los errores de redondeo producidos al aplicar el algoritmo es despreciable. Más específicamente, considérese el siguiente error

$$\xi_{j}^{n} = T_{j}^{n} - * T_{j}^{n}$$
 3.33

introducido en puntos de malla (j, n), donde j = 2, 3, ..., J-1 y n = 0, 1, 2. Usualmente no es posible determinar el valor exacto del error numérico ξ^n_j en el nodo (j, n) para una distribución arbitraria de errores en otros puntos de la malla. Sin embargo, puede ser estimado utilizando ciertos métodos estándar. En la práctica, las soluciones numéricas obtenidas son más precisas que estos indicadores para estimar los errores, ya que el análisis de estabilidad a menudo asume la peor combinación posible de errores individuales. Por ejemplo, puede asumirse que todos los errores tienen una distribución de signos tal que su efecto sea aditivo, lo cual no siempre resulta así. Existen varios métodos para determinar estos errores entre las cuales se pueden citar los siguientes; Método de la matriz y el método de Von Neumann, éste último se describe brevemente a continuación.

3.8.3.1 Método de Von Neumann

El análisis de von Neumann es el método más comúnmente utilizado para determinar criterios de estabilidad, además de que es más fácil aplicar. Desafortunadamente, sólo puede ser utilizado para establecer condiciones necesarias y suficientes para la estabilidad de problemas de valor inicial lineal con coeficientes constantes.

Los problemas prácticos involucran coeficientes variables, no lineales y tipos complicados de condiciones de frontera. Para esta situación más general, el método de von Neumann proporciona necesariamente, pero no suficientemente, condiciones para la estabilidad. Estrictamente hablando es sólo aplicable para puntos internos de la malla. Sin embargo el método puede proporcionar información heurística, acerca de la influencia de las condiciones de frontera en la estabilidad numérica, siempre y cuando sea aplicado por separado a los algoritmos utilizados en las fronteras.

En el método de von Neumann, los errores distribuidos a lo largo de las líneas de la malla en un nivel del tiempo son expandidos como una serie finita de Fourier. Entonces la estabilidad o inestabilidad del algoritmo de cálculo es determinada considerando si las componentes separadas de Fourier del error decaen o se amplifican progresivamente en el siguiente nivel en el tiempo.

Así un vector inicial del error ξ^0 se expresa como una serie finita compleja de Fourier, tal que en x_i el error es:

$$\xi_j^0 = \sum_{m=1}^{J-2} a_m e^{i\theta_m j}$$
, $j = 2, 3, ..., J-1$ 3.34

donde i=(-1)^{1/2} y $\theta_m = m\pi \Delta x$. La serie de Fourier anterior asume que los errores son periódicos en el intervalo de interés, $0 \le x \le 1$. Una solución del esquema FTCS para obtener la distribución inicial del error, es a través de la separación de variables siguiente.

$$\xi_i^n = (\mathbf{G})^n \mathbf{e}^{\mathbf{i}\theta \mathbf{j}} \tag{3.35}$$

Donde el tiempo depende de esta componente de Fourier y está contenido en el coeficiente complejo (G)ⁿ, el superíndice n, implica que G es elevado a la potencia n. Substituyendo (3.35) en el esquema FTCS se tiene la siguiente ecuación

$$(G)^{n+1}e^{i\theta j} = s(G)^{n}e^{i\theta(j-1)} + (1-2s)(G)^{n}e^{i\theta j} + s(G)^{n}e^{i\theta(j+1)}$$
3.36

Manipulando algebraicamente resulta

• • • • •

$$G = 1 - 4s \sin^2(\theta/2)$$
 3.37

El término G puede ser interpretado como el factor de amplificación para el m-ésimo modo de Fourier de la distribución del error tal como se propaga en un paso de tiempo. Como puede observarse $G(s, \theta)$ depende del tamaño del espaciamiento de la malla y del modo de Fourier que se esta considerando.

De la ecuación (3.37) la condición de estabilidad para el esquema FTCS es

 $-1 \le 1 - 4s \sin^2(\theta/2) \le 1$, para toda θ

In cual se cumple si s $\leq \frac{1}{2}$.

3.9 Esquemas explícitos e implícitos para la ecuación de difusión unidimensional

En este apartado se utilizará la ecuación de difusión como base para desarrollar esquemas en diferencias finitas explícitos e implícitos. Además se considerarán los dos tipos de fronteras que se utilizan comúnmente. Como ya se ha visto, la ecuación unidimensional de difusión o conducción de calor es la siguiente:

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial y^2} = 0$$
 3.38

Esta ecuación es una ecuación diferencial parcial de tipo parabólico. En la ecuación (3.35) la variable \overline{T} , puede ser interpretada como velocidad, vorticidad, temperatura, calor o masa. Si \overline{T} es la temperatura, la ecuación (3.38) gobierna el flujo o calor en una varilla la cual es calentada en sus extremos como se ha visto anteriormente.

Existen dos tipos de condiciones de frontera, la primera depende de una variable la cual es una función conocida en el tiempo, utilizando la misma notación que para la ecuación (3.38), ésta puede representarse de la siguiente manera.

$$\overline{\mathsf{T}}(\mathsf{0},\mathsf{t})=\mathsf{b}(\mathsf{t})$$
3.39

Esta condición de frontera es conocida como de Dirichlet. En la práctica b a menudo es constante. En el otro tipo de condición de frontera, la derivada espacial de la variable dependiente puede especificarse, es decir es de la siguiente forma.

$$\frac{\partial \overline{\mathsf{T}}}{\partial \mathsf{x}}(\mathsf{0},\,\mathsf{t}) = \mathsf{c}(\mathsf{t}) \tag{3.40}$$

. Þ

Esta condición de frontera es conocida como de Neumann, como con la condición de frontera de Dirichlet, c es considerada como constante.

Para obtener una solución única de la ecuación (3.38), es necesario especificar condiciones iniciales, las cuales están dadas por.

$$\overline{\mathsf{T}}(\mathsf{x},\mathsf{O}) = \overline{\mathsf{T}}_{\mathsf{O}}(\mathsf{x})$$

La solución exacta de (3.38) se logra utilizando en conjunto las ecuaciones (3.40) y (3.41). Existen dos métodos comúnmente utilizados para resolver las ecuaciones diferenciales a través de diferencias finitas, los cuales se describen a continuación.

3.9.1 Métodos explícitos

÷.

• ,

Al utilizar métodos explícitos generalmente se tiene una incógnita, por ejemplo Tⁿ⁺¹ la cual aparece como variable dependiente al lado izquierdo de la fórmula algebraica resultado de la discretización.

3.9.1.1 Esquema FTCS

Ejemplo de un esquema explícito es el FTCS el cual ya se ha analizado y utiliza diferencias hacia adelante en el tiempo y tres puntos en diferencias centradas en el espacio, la fórmula es la siguiente.

$$\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}}{\Delta t} - \frac{\alpha \left(T_{j-1}^{n} - 2T_{j}^{n} + T_{j+1}^{n}\right)}{\Delta x^{2}} = 0$$
3.42

Manipulando algebraicamente la ecuación anterior resulta el siguiente algoritmo.

$$T_{j}^{n+1} = sT_{j-1}^{n} + (1-2s)T_{j}^{n} + sT_{j+1}^{n}$$
3.43

Donde s = $\alpha \Delta t / \Delta x^2$

--- --- _-

..

Aplicando un análisis de estabilidad de von Neumman (sección anterior), el factor de amplificación resulta.

$$G = 1 - 4s \sin^2(\theta/2)$$
 3.44

Las propiedades del esquema FTCS para la ecuación de difusión unidimensional se resumen en la **Tabla 3.5**, además de que en dicha tabla se muestran otros esquemas explícitos e implícitos para dicha ecuación.

X

4

3.41

Ì

Comentarios	$s = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ $L_{xx} = \frac{1}{\Delta x^2} [1, -2, 1]$	$\Delta T_{j}^{n+1} = T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}$		$M_{x} = \left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right)$
Restricciones de estabilídad	s ⊳ 0.5	Ninguna	Ninguna	Ninguno
Factor de amplificación G(θ=mπ ∆x)	1-4s $\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$	$\frac{2s\cos\theta + (1 - 4s^2 \sin^2\theta)^{1/2}}{1 + 2s}$	$\frac{1-2s \operatorname{sen}^2(\theta/2)}{1+2s \operatorname{sen}^2(\theta/2)}$	$\frac{(2-3s)+\cos\theta(1+3s)}{(2+3s)+\cos\theta(1-3s)}$
Error de truncamiento (E)	$\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{2}\right) \left(s - \frac{1}{6}\right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\alpha \Delta X^{2} \left(s^{2} - \frac{1}{12} \right) \frac{\partial^{4} T}{\partial X^{4}}$	$-\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12}\right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12}\right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$
Forma Algebraica	$\frac{\Delta T_{i}^{n+1}}{\Delta} - \alpha L_{\infty} T_{i}^{n} = 0$	$\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{\alpha}{\Delta x^{2}}$ $\left[T_{j-1}^{n} - (T_{j}^{n-1} + T_{j}^{n+1}) + T_{j+1}^{n}\right] = 0$	$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} \left(\frac{T_j^n + T_j^{n+1}}{2} \right) = 0$	$M_{x} \frac{\Delta T_{j}^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} \left(\frac{T_{j}^{n} + T_{j}^{n+1}}{2} \right) = 0$
Esquema	FTCS	DuFort- Frankel	Crank- Nicolson	Método del elemento finito/Crank- Nicolson

Tabla 3.5 Esquemas algebraicos discretizados para la ecuación de difusión

ESTA TESIS NO SALÉ DE LA BIBLIOTECA

3.9.1.2 Esquema de Richardson y DuFort-Frankel

- 2

En la ecuación (3.43), el utilizar una fórmula en diferencias finitas de dos puntos hacia delante en el tiempo produce una contribución de primer orden al error de truncamiento y con una fórmula centrada en tres puntos en el espacio se tiene una contribución en el error de truncamiento de segundo orden. Por lo que una mejora lógica a la ecuación (3.43) a través del siguiente esquema, el cual fue propuesto originalmente por Richardson (año).

$$\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{\alpha \left[T_{j-1}^{n} - 2T_{j}^{n} + T_{j+1}^{n} \right]}{\Delta x^{2}} = 0$$
3.45

El esquema anterior produce un error $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$, al realizar un análisis de von Neumann se tiene que el esquema es incondicionalmente inestable para s > 0, lo cual en la práctica no tiene uso. Sin embargo, sí dicha ecuación se utiliza para una aproximación en diferencias finitas centradas en el tiempo en una ecuación convectiva se puede obtener un algoritmo estable, como se verá más adelante.

El esquema de Richardson puede ser modificado para obtener un algoritmo estable. Esto se logra al reemplazar T_{i}^{n} en (3.45) con $0.5(T_{i}^{n-1} + T_{i}^{n+1})$, de lo cual resulta.

$$\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{\alpha \left[T_{j-1}^{n} - \left(T_{j}^{n-1} + T_{j}^{n+1} \right) + T_{j+1}^{n} \right]}{\Delta x^{2}} = 0$$
3.46

La ecuación (3.46) es conocida como esquema de DuFort-Frankel. Después de manipular algebraicamente dicha ecuación resulta el siguiente algoritmo.

$$T_{j}^{n+1} = \left(\frac{2s}{1+2s}\right) \left(T_{j-1}^{n} + T_{j+1}^{n}\right) + \left(\frac{1-2s}{1+2s}\right) T_{j}^{n-1}$$
3.47

El esquema DuFort-Frankel tiene tres niveles en el tiempo, excepto cuando s = 0.5, el cual coincide con el esquema FTCS. En la Tabla 3.5 se muestran las propiedades de dicho esquema.

3.9.2 Métodos implícitos

- -- - . . .

Para los esquemas implícitos el término espacial $\partial^2 \overline{T} / \partial x^2$ en la ecuación de difusión unidimensional es evaluado, al menos parcialmente, en el nivel de tiempo desconocido (n+1). En la práctica esto lleva a una pareja de ecuaciones para cada nodo (j, n+1) en el nivel del tiempo (n+1).

X

.

3.9.2.1 Esquema totalmente implícito

÷

La más simple representación implícita en diferencias finitas de la ecuación de difusión es:

$$\frac{\left(T_{j}^{n+1}-T_{j}^{n}\right)}{\Delta t}-\frac{\alpha\left(T_{j-1}^{n+1}-2T_{j}^{n+1}+T_{j+1}^{n+1}\right)}{\Delta x^{2}}=0$$
3.48

En forma de algoritmo se escribe de la siguiente manera.

$$-sT_{j-1}^{n+1} + (1+2s)T_j^{n+1} - sT_{j+1}^{n+1} = T_j^n$$
3.49

Una expansión alrededor del nodo (j, n) indica que este esquema tiene un error de truncamiento

$$\mathsf{E}_{j}^{n} = -\frac{\Delta t}{2} \left(1 + \frac{1}{6s} \right) \left\| \frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial t^{2}} \right\|_{j}^{n} + O\left(\Delta t^{2}, \Delta x^{4} \right)$$
3.50

El cual es del mismo orden que para un esquema FTCS. Aplicando un análisis de estabilidad de von Neumann, se tiene la siguiente expresión para el factor de amplificación.

$$G = [1 + 2s(1 - \cos \theta)]^{-1}$$
 3.51

Para cualquier θ , $|G| \le 1$ si s > 0. Esto significa que (3.49) es incondicionalmente estable, lo cual es una mejora sobre los esquemas explícitos.

Sin embargo para resolver (3.49) es necesario considerar todos los nodos j y sus correspondientes ecuaciones. Por lo que la solución se encuentra a través de una matriz de ecuaciones para valores desconocidos T_i^{n+1} .

donde

$$\begin{split} \boldsymbol{d}_{2} &= \boldsymbol{T}_{2}^{n} + \boldsymbol{s}\boldsymbol{T}_{1}^{n+1} \\ \boldsymbol{d}_{j} &= \boldsymbol{T}_{j}^{n} \\ \boldsymbol{d}_{J-1} &= \boldsymbol{T}_{J-1}^{n} + \boldsymbol{s}\boldsymbol{T}_{J}^{n+1} \end{split}$$

 T_1^{n+1} y T_J^{n+1} son conocidas de las condiciones de frontera de Dirichlet. Este sistema de ecuaciones es conocido como tridiagonal, y se puede resolver a través del algoritmo de Thomas para sistemas de ecuaciones tridiagonales.

En la práctica, la solución del sistema implícito de ecuaciones vía el algoritmo de Thomas, requiere dos o más veces el tiempo de computadora que para la solución de esquemas explícitos. El paso de tiempo puede ser considerablemente mayor que el límite del paso de tiempo para esquemas explícitos, sin embargo, la precisión de la solución será menor.

3.9.2.2 Esquema Crank-Nicolson

Una alternativa de un algoritmo implícito para la ecuación de difusión está dada por el esquema Crank-Nicolson, el cual se muestra a continuación.

$$\frac{\left(\mathsf{T}_{j}^{n+1}-\mathsf{T}_{j}^{n}\right)}{\Delta t}-\alpha\left(0.5\mathsf{L}_{xx}\mathsf{T}_{j}^{n}+0.5\mathsf{L}_{xx}\mathsf{T}_{j}^{n}\right)=0$$
3.53

donde

$$L_{xx}T = \frac{T_{j-1} - 2T_j + T_{j+1}}{\Delta x^2}$$

Este esquema evalúa la derivada espacial al promediar n y n+1 nivel en el tiempo. Si se realiza una expansión en series de Taylor alrededor de (j, n+1/2) se encuentra que es consistente con la ecuación de difusión con un error de truncamiento $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$. Esto es una mejora considerable con respecto a los esquemas presentados anteriormente, los cuales solamente tienen una precisión de primer orden en el tiempo.

Un análisis de von Neumann indica que el esquema Crank-Nicolson es incondicionalmente estable, como se observa en la **Tabla 3.5**. Dicho esquema se presenta a continuación.

$$-0.5s T_{j-1}^{n+1} + (1+s)T_j^{n+1} - 0.5s T_{j+1}^{n+1} = -0.5s T_{j-1}^n + (1+s)T_j^n - 0.5s T_{j+1}^n$$
 3.54

82

X,

Al considerar en dicho esquema todos los nodos, éste produce un sistema de ecuaciones tridiagonal el cual puede resolverse utilizando el algoritmo de Thomas.

Dado que el esquema Crank-Nicolson tiene una precisión de segundo orden en el tiempo, resulta un método muy utilizado para resolver ecuaciones diferenciales parciales parabólicas. Una generalización de la ecuación (3.53) se puede escribir de la siguiente manera.

$$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha \left[(1-\beta) L_{xx} T_j^n + \beta L_{xx} T_j^{n+1} \right] = 0$$
3.55

donde $\Delta T_j^{n+1} = T_j^{n+1} - T_j^n$ y $0 \le \beta \le 1$. Sí $\beta = 0$, se obtiene el esquema FTCS. Sí $\beta = 0.5$, se tiene el esquema Crank-Nicolson, y sí $\beta = 1$, resulta el esquema totalmente implícito. Al realizar a la ecuación (3.55) un análisis de von Neumann, indica que una solución estable es posible para:

$$\Delta t \le \frac{0.5\Delta x^2}{\alpha(1-2\beta)} \qquad \qquad \text{si } 0 \le \beta < 1/2$$

sin restricción

si $1/2 \le \beta \le 1$

Para muchos problemas de flujo permanente dicho esquema es eficiente para resolver problemas transitorios, hasta que la solución no presente grandes cambios. Sin embargo, a menudo la solución en diferentes partes del domino de cálculo se aproxima a una solución en estado permanente con significativos cambios. Desafortunadamente el esquema Crank-Nicolson produce una solución oscilatoria, la cual no se aproxima rápidamente a la solución.

3.10 Ecuación multidimensional de difusión

Una breve conclusión del apartado 3.9 es que los esquemas implícitos son más efectivos que los esquemas explícitos para problemas con disipación significativa, tal como se ejemplificó con la ecuación unidimensional de difusión.

Para extender esquemas implícitos unidimensionales a multidimensionales, se requieren procedimientos especiales, si se desean algoritmos fáciles y rápidos de programar. Generalmente se utilizan técnicas llamadas "splitting", las cuales requieren una atención cuidadosa al momento de implementar las condiciones de frontera Neumann.

3.10.1 Ecuación bidimensional de difusión

La ecuación bidimensional de difusión se escribe de la manera siguiente.

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} - \alpha_x \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial x^2} - \alpha_y \frac{\partial^2 \overline{T}}{\partial y} = 0$$
3.56

Para la región de la Figura 3.11, las condiciones de frontera de Dirichlet son

$$\overline{T}(0, y, t) = a(y, t)$$

$$\overline{T}(1, y, t) = b(y, t)$$

$$\overline{T}(x, 0, t) = c(x, t)$$
3.57

$$\overline{T}(x, 1, t) = d(y, t)$$

a,

con condiciones iniciales

$$\overline{\mathsf{T}}(\mathsf{x},\mathsf{y},\mathsf{0}) = \mathsf{T}_{\mathsf{0}}((\mathsf{x},\mathsf{y}))$$
3.58



Figura 3.11 Dominio de cálculo bidimensional con condiciones de frontera de Dirichlet

A continuación se explicarán esquemas explícitos e implícitos en dos dimensiones y su aplicabilidad.

3.10.1.1 Métodos explícitos

El esquema FTCS, en dos dimensiones, resulta

\$

3.59

$$\frac{\Delta T_{j,k}^{n+1}}{\Delta t} - \alpha_x L_x T_{j,k}^n - \alpha_y L_{yy} T_{j,k}^n = 0$$

donde

$$L_{xx}T_{j,k}^{n} = \frac{T_{j-1,k}^{n} + (1 - 2s_{x} - 2s_{x})T_{j,k}^{n} + s_{x}T_{j+1,k}^{n}}{\Delta x^{2}}$$
$$L_{yy}T_{j,k}^{n} = \frac{T_{j,k-1}^{n} + (1 - 2s_{y} - 2s_{y})T_{j,k}^{n} + s_{x}T_{j,k+1}^{n}}{\Delta y^{2}}$$

Como algoritmo se tiene lo siguiente

$$T_{j,k}^{n+1} = s_{x}T_{j,k}^{n} + (1 - 2s_{x} - 2s_{y})T_{j,k}^{n} + s_{x}T_{j,k}^{n} + s_{y}T_{j,k-1}^{n} + s_{y}T_{j,k+1}^{n}$$
3.60

donde $s_x = \alpha_x \Delta t / \Delta x^2 y s_y = \alpha_y \Delta t / \Delta y^2$.

Una expansión en series de Taylor alrededor del nodo (j, k, n) indica que (3.60) es consistente con (3.56) y tiene un error de truncamiento de O(Δt , Δx^2 , Δy^2).

Un análisis de estabilidad de von Neumann, demuestra que (3.60) será estable si

$$s_x + s_y \le 0.5 \tag{3.61}$$

Se observa que si $s_x = s_y = s$, de la ecuación (3.61) resulta s \leq 0.25, lo cual tiene más restricciones que la correspondiente expresión unidimensional. Sin embargo, pueden utilizarse pasos de tiempo pequeños para obtener una solución lo suficientemente precisa, por lo que las restricciones de estabilidad pueden no ser críticas.

3.10.1.2 Métodos implícitos

Siguiendo el mismo procedimiento que se utilizó para problemas unidimensionales, es posible obtener un esquema implícito evaluando las derivadas en el espacio en la ecuación de difusión, en el nivel del tiempo (n+1). El algoritmo resultante es.

$$-s_{x}T_{j-1,k}^{n+1} + (1+2s_{x}+2s_{y})T_{j,k}^{n+1} - s_{x}T_{j+1,k}^{n+1} - s_{y}T_{j,k-1}^{n+1} - s_{y}T_{j,k+1}^{n+1} = T_{j,k}^{n}$$
3.62

Este esquema tiene un error de truncamiento de O(Δt , Δx^2 , Δy^2) y es incondicionalmente estable, sin embargo, la dificultad aquí es obtener una solución sencilla, ya que el algoritmo resultante es bastante difícil de manipular algebraicamente.

3.10.2 Métodos multidimensionales en dos pasos de tiempo

El problema que se presenta con el esquema implícito bidimensional, puede solucionarse utilizando un algoritmo en dos medios pasos de tiempo para avanzar un paso de tiempo. En cada medio paso de tiempo, únicamente los términos asociados con una dirección coordenada en particular se tratan implicitamente. En consecuencia, sólo tres términos implícitos aparecen y por ende formar un sistema tridiagonal, por lo que puede utilizarse el algoritmo de Thomas para obtener dicha solución.

3.10.2.1 Método ADI

. 2:

El mejor ejemplo conocido de una técnica de partición es el método ADI (Alternating Direction Implicit) (Peaceman and Rachford, 1955). A continuación se examinará el método ADI a mayor detalle.

El método ADI aplicado a la ecuación bidimensional de difusión se escribe en dos medios pasos de tiempo. Durante el primer medio paso de tiempo se tiene la siguiente discretización.

$$\frac{\mathsf{T}_{j,k}^{*}-\mathsf{T}_{j,k}^{n}}{\Delta t/2} - \alpha_{x}\mathsf{L}_{xx}\mathsf{T}_{j,k}^{*} - \alpha_{y}\mathsf{L}_{yy}\mathsf{T}_{j,k}^{n} = 0$$

$$3.63$$

y durante el segundo medio paso.

$$\frac{T_{j,k}^{n+1} - T_{j,k}^{*}}{\Delta t/2} - \alpha_{x}L_{xx}T_{j,k}^{*} - \alpha_{y}L_{yy}T_{j,k}^{n+1} = 0$$
3.64

Durante el primer medio paso de tiempo se conoce T en el nivel de tiempo (n), pero es desconocido en el paso de tiempo (n+1/2), denotado por *. Los valores desconocidos en los nodos T* se asocian con la dirección x, solamente. Así la ecuación (3.63) puede rescribirse como un sistema de ecuaciones de la siguiente manera.

$$-0.5 s_{x} T_{j-1,k}^{*} + (1+s_{x}) T_{j,k}^{*} - 0.5 s_{x} T_{j+1,k}^{*} = 0.5 s_{y} T_{j,k-1}^{n} + (1-s_{y}) T_{j,k}^{n} + 0.5 s_{y} T_{j,k+1}^{n}$$
 3.65

Al resolver el sistema de ecuaciones, se obtiene la solución intermedia $T_{j,k}^{*}$, j = 2,...,NX, para un valor de k, es decir en un renglón. Para cada renglón, k = 2, ..., NY-1, se plantea un sistema de ecuaciones similar (**Figura 3.12**), el cual es resuelto utilizando el algoritmo de Thomas.

3

ï

Durante el segundo medio paso de tiempo, se utiliza la ecuación (3.64), pero en la siguiente forma.

$$-0.5 s_{y} T_{j,k-1}^{n+1} + (1 + s_{y}) T_{j,k}^{n+1} - 0.5 s_{x} T_{j,k+1}^{n+1} = 0.5 s_{x} T_{j-1,k}^{*} + (1 - s_{x}) T_{j,k}^{*} + 0.5 s_{x} T_{j+1,k}^{*}$$
 3.66

La solución en el segundo medio paso de tiempo en el nivel de tiempo (n+1) es desconocida, pero la solución en el nivel de tiempo intermedio *, si se conoce. Así se plantea un sistema de ecuaciones asociados con todos los nodos a lo largo de una línea en la malla, en este caso la dirección y (j fijo), resolviendo para $T_{j,k}^{n+1}$, k = 2, ..., NY-1. El proceso se repite para línea de la malla, j = 2,..., NX-1.



Figura 3.12 Implementación del método ADI

La estabilidad del esquema ADI se puede conocer aplicando un análisis de estabilidad de von Neumann para obtener el factor de amplificación para cada medio paso de tiempo. La estabilidad del paso de tiempo completo se determina con el producto de los factores de amplificación para cada medio paso de tiempo, los cuales son los siguientes.

$$G = G'G'' = \left[\frac{1 - 2s_{y}\sin^{2}(\theta_{y}/2)}{1 + 2s_{x}\sin^{2}(\theta_{x}/2)}\right] \left[\frac{1 - 2s_{x}\sin^{2}(\theta_{x}/2)}{1 + 2s_{y}\sin^{2}(\theta_{y}/2)}\right]$$
3.67

Un análisis de la ecuación (3.67) indica que $|G| \le 1$ para cualquier valor de s_x, s_y, θ_x , θ_y . Sin embargo, al considerar |G'| y |G''| indica que mientras el paso completo de tiempo es incondicionalmente estable, cada medio paso de tiempo es sólo condicionalmente estable, pero lo que interesa es el paso completo de tiempo. El esquema compuesto (8.63) y (8.64) es consistente con la ecuación bidimensional de difusión y tiene un error de truncamiento de O(Δt^2 , Δx^2 , Δy^2). La precisión de segundo orden en el tiempo es por la simetría del esquema. Sin embargo, para lograr un error de truncamiento global $O(\Delta t^2)$, es necesario introducir valores en la frontera para la solución intermedia $T_{j,k}^*$ que sean compatibles con el algoritmo interno (3.65) y (3.66). Por ejemplo, si se utilizan condiciones de frontera de Dirichlet, al evaluar $T_{NX,k}^* = b_k^{n+1/2}$ en x = 1, produce un algoritmo que tiene un error de truncamiento de $O(\Delta t)$. Para tener un error de truncamiento de $O(\Delta t^2)$ es necesario evaluar $T_{NX,k}^*$ en (3.63) y (3.64) como.

$$T_{NX,k}^{*} = 0.5 (b_{k}^{n} + b_{k}^{n+1}) - 0.25 \Delta t \alpha_{y} L_{yy} (b_{k}^{n+1} - b_{k}^{n})$$
3.68

Así, se puede concluir que el esquema ADI, en dos dimensiones, tiene atributos deseables, tales como que es incondicionalmente estable, preciso de segundo orden en el tiempo y fácil de implementar en un programa de computadora.

3.10.3 Método del elemento finito

۰,

A continuación se aplicará el método del elemento finito de Galerkin (**Referencia 1**) para la ecuación bidimensional de difusión, con fronteras y condiciones iniciales dadas por la ecuaciones (3.57) y (3.58). Se utilizan elementos rectangulares con funciones de interpolación bilineal en cada elemento. Al aplicar dicho método en una malla uniforme en las direcciones x e y, se obtienen las siguientes ecuaciones, después de dividir todos los términos por Δx y Δy .

$$M_{x} \otimes M_{y} \left[\frac{\partial T}{\partial t} \right]_{j,k} = \alpha_{x} M_{y} \otimes L_{xx} T_{j,k} + \alpha_{y} M_{x} \otimes L_{yy} T_{j,k}$$
3.69

donde \otimes el tensor producto; M_x y M_y son los operadores direccionales de masa y L_{xx} y L_{yy} son los operadores diferenciales. Los operadores direccionales de masa están dador por

$$M_x = \left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right)$$
 $y \qquad M_x = \left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right)^T$ 3.70

y los operadores diferenciales

$$L_{xx} = \left(\frac{1}{\Delta x^2}, -\frac{2}{\Delta x^2}, \frac{1}{\Delta x^2}\right) \qquad y \qquad L_{yy} = \left(\frac{1}{\Delta y^2}, -\frac{2}{\Delta y^2}, \frac{1}{\Delta y^2}\right) \qquad 3.71$$

Así con el término $M_y \otimes L_{xx} T_{j, k}$ se obtiene una representación en nueve puntos de $\partial^2 T / \partial x^2$. Con referencia a la **Figura 3.13** se tiene lo siguiente

$$M_{y} \otimes L_{xx}T_{j,k} = \frac{1}{6} \left\{ \frac{T_{j-1,k+1} - 2T_{j,k+1} + T_{j+1,k+1}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k} + T_{j+1,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k}}{\Delta x^{2}} \right\} + \frac{2}{3} \left\{ \frac{T_{j-1,k} - 2T_{j,k}}{\Delta$$

· · · · ·

88



Figura 3.13 Nodos activos para esquemas en dos pasos de tiempo

La representaciones en diferencias finitas obtenidas anteriormente, por ejemplo (3.59), pueden deducirse a través de (3.69) al definir el operador diferencial de masa como

$$M_{x}^{Fd} = (M_{y}^{Fd})^{T} = (0, 1, 0)$$
 3.73

Por lo que la expresión en diferencias finitas sólo contendrá tres términos. Las mayores diferencias entre el elemento finito y diferencias finitas en dos o más dimensiones es que el método del elemento finito evalúa las derivadas espaciales sobre una región, mientras que el método en diferencias finitas evalúa las derivadas espaciales a lo largo de una dirección coordenada en particular.

Generalmente, las formulaciones con elemento finito son más precisas, pero también más difíciles de programar, dado que se involucran más términos.

3.10.3.1 Elemento finito, construcciones en dos pasos de tiempo

Para este método los términos espaciales son evaluados como un promedio pesado del (n) y (n+1) nivel en el tiempo, Así la ecuación de difusión puede escribirse de la siguiente manera

$$\mathsf{M}_{x} \otimes \mathsf{M}_{y} \frac{\Delta \mathsf{T}_{j,k}^{n+1}}{\Delta t} = \left(\alpha_{x}\mathsf{M}_{y} \otimes \mathsf{L}_{xx} + \alpha_{y}\mathsf{M}_{x} \otimes \mathsf{L}_{yy}\right) \left[(1-\beta)\mathsf{T}_{j,k}^{n} + \beta\mathsf{T}_{j,k}^{n+1} \right]$$
3.74

El esquema ADI del elemento finito es obtenido al agregar los siguientes términos.

$$\Delta t \alpha_{x} \alpha_{y} L_{xx} \otimes L_{yy} \left[\beta^{2} T^{n+1} - (1 - \beta)^{2} T^{n} \right]$$

al lado izquierdo de la ecuación anterior, por lo que se obtiene la siguiente ecuación.

$$(\mathsf{M}_{x} - \alpha_{x}\beta\Delta t \mathsf{L}_{x}) \otimes (\mathsf{M}_{y} - \alpha_{y}\beta\Delta t \mathsf{L}_{yy})\mathsf{T}_{j,k}^{n+1} = [\mathsf{M}_{x} - \alpha_{x}(1-\beta)\Delta t \mathsf{L}_{x}] \otimes [\mathsf{M}_{y} - \alpha_{y}(1-\beta)\Delta t \mathsf{L}_{yy}]\mathsf{T}_{j,k}^{n+1}$$
 3.75

La ecuación (3.75) puede ser implementada en dos pasos de tiempo, como se hizo con el método ADI en diferencias finitas. En el primer paso se tiene:

$$\left(\mathsf{M}_{x} - \alpha_{x}\beta\Delta t\mathsf{L}_{xx}\right)\mathsf{T}_{j,k}^{*} = \left[\mathsf{M}_{y} + \alpha_{y}(1-\beta)\Delta t\mathsf{L}_{yy}\right]\mathsf{T}_{j,k}^{n}$$
3.76

Dicha ecuación produce un sistema tridiagonal en cada línea en la dirección x de la malla. Para el segundo se tiene que:

$$\left(\mathsf{M}_{\mathsf{y}} - \alpha_{\mathsf{y}}\beta\Delta \mathsf{t}\,\mathsf{L}_{\mathsf{y}\mathsf{y}}\right)\mathsf{T}_{\mathsf{j},\mathsf{k}}^{\mathsf{n}+1} = \left[\mathsf{M}_{\mathsf{x}} + \alpha_{\mathsf{x}}\left(1 - \beta\right)\Delta \mathsf{t}\,\mathsf{L}_{\mathsf{x}\mathsf{x}}\right]\mathsf{T}_{\mathsf{j},\mathsf{k}}^{*}$$

$$3.77$$

De manera similar el algoritmo anterior produce un sistema tridiagonal en cada línea en la dirección y.

Si $\beta = 0.5$ la única diferencia entre el algoritmo ADI del elemento finito y él de ADI en diferencias finitas, es la aparición de los operadores de masa en (3.76) y (3.77). El algoritmo ADI en elemento finito es fácil de implementar en un programa de computadora, preciso en el segundo orden en el tiempo y en el espacio y es incondicionalmente estable si $\beta \ge 0.5 + (\delta - 0.25)/s$.

۲,

3.11 Problemas dónde domina la convección lineal

Para muchos problemas de flujo, el movimiento del fluido es un factor determinante en el comportamiento total de dicho fluido. En las ecuaciones de Navier-Stokes, el movimiento del fluido está caracterizado por las componentes de la velocidad, u, v, w en las coordenadas cartesianas x, y, z. En la ecuación unidimensional de momentum en x.

0	′ <u>∂u</u> — +u	<u>, ∂u</u>).	<u>+∂p</u> =	∂²u	3 78
M	ͺ∂t ໌ ື	∂x)	∂x	[™] ∂x²	00

la componente de la velocidad u, aparece en el término inercial y en el término visocoso (lado derecho de la ecuación (3.78)). Los otros términos son la densidad ρ, la presión p y la viscosidad dinámica μ.

Previamente, de acuerdo con la ecuación de difusión, se examinó el comportamiento de términos como $\partial^2 u/\partial x^2$. Ahora se considerarán los términos convectivos, tales como $u\partial u/\partial x$, y como pueden manejarse computacionalmente.

Los términos convectivos tienen dos características que debe analizarse por separado. Dichos términos contienen derivadas espaciales. Primero sí se utiliza una fórmula simétrica en tres puntos para representar $\partial u/\partial x$, se desarrollan inestabilidades numéricas en la solución, siempre que los términos viscosos son pequeños comparados con la parte convectiva. Este comportamiento tiene similitud con el fenómeno que se presentó en la dispersión con en el error de truncamiento.

Sí se utiliza una fórmula asimétrica para representar $\partial u/\partial x$ entonces, se mejora la solución del esquema. La precisión de la representación de $\partial u/\partial x$ es típicamente un orden menor que la correspondiente obtenida con una fórmula algebraica simétrica utilizando el mismo número de puntos de la malla. Para formulaciones asimétricas de orden menor, éstas pueden introducir términos en el error de truncamiento que son de magnitud comparable a los términos físicos que están siendo representados.

Este aspecto será considerado a continuación para la ecuación de convección pura, para la ecuación de convección-dispersión en estado permanente y finalmente en la ecuación de transporte.

La segunda característica importante de los términos convectivos es que es no lineal en la variable dependiente, lo cual para el caso de la ecuación de transporte no aplica, está característica se analiza por ejemplo con la ecuación de Burguer.

3.11.1 Ecuación unidimensional lineal de convección

Para analizar los problemas donde se incluya la convección, la siguiente ecuación lineal será considerada.

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + u \frac{\partial \overline{T}}{\partial x} = 0$$
 3.79

donde u, es la velocidad conocida y \overline{T} , es un escalar pasivo, por ejemplo temperatura. La ecuación (3.79) en carácter es hiperbólica. Dicha ecuación puede ser interpretada como un modelo para la parte convectiva de la ecuación de energía.

Sí u es constante y positiva entonces una solución general de (3.79) es la siguiente.

$$\overline{\mathsf{T}}(\mathsf{x},\mathsf{t}) = \mathsf{F}(\mathsf{x} - \mathsf{u}\mathsf{t}) \tag{3.80}$$

donde las condiciones iniciales están dadas por:

- -----

$$\overline{\mathsf{T}}(\mathsf{x},\mathsf{0}) = \mathsf{F}(\mathsf{x}) \tag{3.81}$$

y F(x) es conocida. Si F(x) es especificado sobre el dominio, $-\infty \le x \le \infty$, entonces la solución en algún punto específico (x₁, t₁) en el plano x-t es igual a la solución en x₁-ut₁ em el tiempo t = 0, por ejemplo.

$$\overline{T}(x_1 - t_1) = F(x_1 - ut_1) = \overline{T}(x_1 - ut_1, 0)$$

- 81

Esto se ilustra en la **Figura 3.14**. La solución \overline{T} , es constante a lo largo de la línea AB, lo cual es una característica para esta ecuación.





Ś

3.11.1.1 Esquema FTCS

El algoritmo más simple para la ecuación de difusión como se mencionó anteriormente es el FTCS. La correspondiente representación en diferencias finitas para la ecuación de convección lineal es:

$$\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}}{\Delta t} + \frac{u(T_{j+1}^{n} - T_{j-1}^{n})}{2\Delta x} = 0$$
3.82

como algoritmo la ecuación (3.82) puede escribirse de la siguiente manera.

$$T_{j}^{n+1} = T_{j}^{n} - 0.5 c \left(T_{j+1}^{n} - T_{j-1}^{n} \right)$$
3.83

El cual es consistente con la ecuación lineal de convección con un error de truncamiento de O(Δt , Δx^2). En la ecuación (3.83), c es el llamado número de Courant y esta definido por:

$$c = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$$
 3.84

La aplicación del análisis de estabilidad de von Neumann a la ecuación lineal de convección produce un factor de amplificación G para la m-esima componente de la distribución inicial del error, la cual esta dada por.

 $G = 1 - i c \sin \theta$

Claramente, $|G| \ge 1$ para toda θ , tal que (3.83) es incondicionalmente inestable. Como se observa éste tipo de esquema no es de uso práctico para problemas con convección pura. Las propiedades completas del esquema FTCS se presentan en la **Tabla 3.6**.

3.11.1.2 Esquema Upwind y la condición CFL

Un esquema alternativo se obtiene a través de una fórmula en diferencias finitas hacia atrás para $\partial \overline{T} / \partial x$, asumiendo que u es positiva. Así la ecuación de convección puede discretizarse de la siguiente manera.

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} + \frac{u(T_j^n - T_{j-1}^n)}{\Delta x} = 0$$
3.85

Como algoritmo, se convierte en

$$T_{i}^{n+1} = (1-c)T_{i}^{n} + cT_{i-1}^{n}$$
 3.86

Para valores negativos de u, (3.86) es de la siguiente manera.

$$T_{j}^{n+1} = (1 - |c|)T_{j}^{n} + |c|T_{j-1}^{n}$$
3.87.

La ecuación (3.86) índica que la solución T_j^{n+1} , es determinada por la información hacia atrás del nodo (j, n), de ahí que (3.86) sea conocida como un esquema numérico "upwind". Un análisis de estabilidad aplicado a (3.86) da un factor de amplificación como el que se muestra en la **Tabla 3.6**. Para obtener soluciones estables se debe cumplir la siguiente relación.

$$c = u \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1$$
 3.88

La desigualdad c \leq 1 es conocida como la condición de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Ésta condición aplica generalmente, a esquemas explícitos para ecuaciones diferenciales parciales parabólicas. Físicamente, la condición CFL índica que una partícula de fluido no debe viajar más que un paso espacial Δx en un paso de tiempo Δt .

Para el caso particular en que c = 1, (3.86) resulta $T_j^{n+1} = T_{j-1}^n$, la cual es la solución exacta de la ecuación de convección, como se observa en la **Figura 3.14**.

3.11.1.3 Esquema Crank-Nicolson

El esquema Crank-Nicolson resultó muy efectivo cuando se aplicó a la ecuación unidimensional de difusión, a continuación se utilizará dicho esquema en diferencias finitas y elemento finito para la ecuación unidimensional de convección.

En diferencias finitas resulta lo siguiente.

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} + u \Big(0.5 L_x T_j^n + 0.5 L_x T_j^{n+1} \Big) = 0$$
3.89

donde

$$L_{x}T_{j} = \frac{\left(T_{j+1} - T_{j-1}\right)}{2\Delta x}$$

A partir de la ecuación (3.89) se puede construir el siguiente algoritmo.

$$-0.25 cT_{j-1}^{n+1} + T_{j}^{n+1} + 0.25 cT_{j+1}^{n+1} = 0.25 cT_{j-1}^{n} + T_{j}^{n} - 0.25 cT_{j+1}^{n}$$
 3.90

94

¢

. 1 1

Igebraica	Error de truncamiento (E) Fac	ctor de amplificación G(θ≕mπ ∆x)	Restricciones de estabilidad	Comentarios
	$\operatorname{cu}\left(\frac{\Delta x}{2}\right)\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} +$	1-ic sinθ		$c = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$
	$u\left(\frac{\Delta x^2}{6}\right)\left(1+2c^2\right)\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}$			$L_{x} = \frac{1}{2\Delta x} \left[-1, 0, 1 \right]$
	$-u\left(\frac{\Delta x}{2}\right)(1-c)\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{1}{2}$	$(1 - \cos \theta) - i c \sin \theta$	c ⊳	$\Delta T_{j}^{n+1} = T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}$
	$u\left(\frac{\Delta x^{2}}{6}\right)\left(1-3c+2c^{2}\right)\frac{\partial^{3}T}{\partial x^{3}}$			
	$ u\left(\frac{\Delta x^2}{6}\right) \left(1 + 0.5c^2\right) \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \left \frac{1 - 0}{1 + 0} \right ^2 $).5icsen0).5icsen0	Ninguna	
	$c^{2}u\left(\frac{\Delta x^{2}}{12}\right)\frac{\partial^{3}T}{\partial x^{3}}$ $(2+c)$ $(2+c)$ $(2+c)$	$\frac{\cos \theta - 1.5 i \operatorname{csin} \theta}{\cos \theta + 1.5 i \operatorname{csin} \theta}$	Ninguno	$M_{x} = \left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right)$
	,			

Tabla 3.6 Esquemas algebraicos para la ecuación de convección lineal

El cual puede resolverse utilizando el algoritmo de Thomas (**Anexo 2**). El esquema Crank-Nicolson (3.89) es consistente con la ecuación de convección y tiene un error de $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$. Un análisis de estabilidad de von Neumann produce el factor de amplificación mostrado en la **Tabla 3.6**. Es claro que el esquema Crank-Nicolson es incondicionalmente estable. Con la aplicación del método de Galerkin del elemento finito con interpolación lineal en el espacio para la ecuación de convección, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

$$M_{x}\left[\frac{dT}{dt}\right]_{j} + uL_{x}T_{j} = 0$$
3.91

Donde el operador de masa es M_x = $\left\{\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right\}$

- ÷;

Diferenciando para dT/dt se obtiene lo siguiente

$$M_{x}\left[\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}}{\Delta t}\right] + uL_{x}\left[0.5(T_{j}^{n} + T_{j}^{n+1})\right] = 0$$
3.92

La ecuación anterior puede compararse con la ecuación (3.89). El operador de masa puede generalizarse de la manera siguiente.

$$M_{x} = \{\delta_{1}, 1 - 2\delta_{1}\delta\}$$
3.93

Donde si δ = 1/6 se tiene la forma del elemento finito y para δ = 0, se tiene la correspondiente formulación en diferencias finitas. Substituyendo (3.93) en (3.92) se obtiene el siguiente algoritmo.

$$(\delta - 0.25c)T_{j-1}^{n+1} + (1 - 2\delta)T_{j}^{n+1} + (\delta + 0.25c)T_{j+1}^{n+1} = (\delta + 0.25c)T_{j-1}^{n} + (1 - 2\delta)T_{j}^{n} + (\delta - 0.25c)T_{j+1}^{n}$$
3.94

La forma del elemento finito tiene un error de truncamiento de $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$. Así para espaciamientos de malla suficientemente pequeños, el error en la solución es dominada por la discretización espacial, por lo que el método del elemento finito utilizando el esquema de Crank-Nicolson es más preciso que el correspondiente en diferencias finitas.

Los esquemas implícitos típicamente son considerados para la ecuación de difusión, ya que son incondicionalmente estables. Sin embargo, el uso de esquemas implícitos para ecuaciones hiperbólicas no necesariamente resulta una ventaja. Al utilizar un esquema implícito se llega a un sistema de parejas de ecuaciones en un nivel de tiempo dado (n+1). Por lo que, una perturbación, por ejemplo el error de redondeo, introducido en un nodo (j, n) afecta la solución para todos los demás nodos (j, n+1) en el siguiente nivel en ¢

el tiempo. Físicamente, este comportamiento corresponde a una ecuación diferencial parabólica como la ecuación de difusión.

En contraste, perturbaciones para soluciones gobernadas por ecuaciones diferenciales hiperbólicas se propagan a velocidades finitas. Utilizar esquemas implícitos para ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas, comúnmente produce imprecisiones en la solución si Δt (o el equivalente c) es grande. Sí Δt es pequeño, por ejemplo c \leq 1 para la ecuación de convección, no hay ventaja de estabilidad al utilizar un esquema implícito, aunque puede haber una ventaja en la precisión si se usa el esquema de Crank-Nicolson para elemento finito.

3.11.2 Ecuación de la convección difusión en estado permanente

Para muchos problemas de mecánica de fluidos los mecanismos disipativos son significantes en una angosta capa, generalmente adyacente a la frontera. Las soluciones computacionales obtenidas con una apropiada discretización para el principal región del flujo, son a menudo oscilatorias cuando la solución real cambia rápidamente a través de la capa de la frontera. La ecuación de convección difusión en estado permanente se utilizará como modelo para ilustrar dicho fenómeno.

Ésta ecuación puede escribirse unidimensionalmente de la siguiente manera.

$$u\frac{d\overline{T}}{dx} - \alpha \frac{d^2\overline{T}}{dx^2} = 0$$
 3.95

Sí se utilizan las condiciones de frontera siguientes

$$\overline{T}(0) = 0 \text{ y } \overline{T}(1) = 1$$
 3.96

se obtiene la siguiente solución exacta en el intervalo $0 \le x \le 1$

$$\overline{T} = \frac{\left[e^{ux/\alpha} - 1.0\right]}{\left[e^{u/\alpha} - 1.0\right]}$$
3.97

La cual se muestra en la **Figura 3.15**. La solución esta caracterizada por una distribución uniforme de T combinada con una capa en la frontera adyacente para x = 1.0.

3.11.2.1 Efectos del número de Reynolds

Si se utiliza un esquema en diferencias centradas de tres puntos para sustituir las derivadas en la ecuación (3.95), se obtiene el siguiente algoritmo.

$$-(1+0.5R_{cell})T_{i-1}+2T_{i}-(1-0.5R_{cell})T_{i+1}=0$$
3.98

÷

donde $R_{cell} = u \Delta x/\alpha$. R_{cell} es un número de Reynolds (estrictamente de Peclet) basado en la longitud característica Δx .

Una expansión en series de Taylor de (3.98) sobre el j-ésimo nodo indica que es consistente con (3.95) con un error de truncamiento de $O(\Delta x^2)$. La ecuación (3.98) es implícita, por lo que se obtienen sistemas tridiagonales, los cuales se resuelven utilizando el algoritmo de Thomas.

Para este caso relativamente simple, es posible escribir una solución exacta de (3.98) como la siguiente.

$$T_{j} = A_{0} + B_{0} \left[\frac{1 + 0.5 R_{cell}}{1 - 0.5 R_{cell}} \right]^{j}$$
3.99

donde A₀ y B₀ son seleccionados para satisfacer las condiciones de frontera (3.96). Para el caso de u/ α = 20 y Δx = 0.05, 0.1 y 0.2, las soluciones para (3.99) son mostrados en la **Figura 3.15**. La solución para Δx = 0.05, R_{cell} = 1, es razonable de acuerdo con la solución exacta. Para R_{cell} = 2, es precisa excepto en la frontera adyacente para x = 1. Sin embargo, la solución en la malla más espaciada, R_{cell} = 4, no sólo es imprecisa, sino también oscilatoria.



Figura 3.15 Influencia del número de Reynolds (Peclet) en la solución de la ecuación de difusión convección.

ŕ

De la ecuación (3.99) puede observarse que las soluciones oscilatorias son evitadas si $R_{cell} \le 2$. Esto también se puede ilustrar a través de la matriz de ecuaciones (3.101), formada a partir de la ecuación (3.98), las condiciones de frontera están dadas por (3.96).

El sistema tiene la forma

donde a = -(1+0.5 R_{cell}), b =2 y c = -(1-0.5 R_{cell}). De dicha matriz tridiagonal se obtienen los autovalores que están en función de a, b y c.

$$\lambda_{j} = b + 2(ac)^{1/2} \cos\left(\frac{j\pi}{J-1}\right)$$
3.102

Como puede verse la condición ac>0 debe cumplirse para que los autovalores sean reales. Sustituyendo a y c, se obtiene la siguiente condición.

$$(1+0.5 R_{cell}) (1-0.5 R_{cell}) \ge 0$$
 ó $R_{cell} \le 2$ 3.103

Para este ejemplo, las soluciones oscilatorias coinciden con la ocurrencia de autovalores complejos.

Al reemplazar la representación en diferencias finitas centradas por un esquema upwind, se tiene el siguiente algoritmo.

$$-(1+R_{cell})T_{j-1}+2(1+0.5R_{cell})T_{j}-T_{j+1}=0$$
3.104

La solución para el esquema upwind con u/ α = 20 y Δx =0.2 se muestra en la **Figura 3.16**. Como se esperaba la solución no es oscilatoria pero no es muy precisa.

Una expansión en series de Taylor de (3.104) índica que es consistente con (3.95) para $O(\Delta x)$ solamente. Sí se quiere que (3.104) sea precisa para $O(\Delta x^2)$ se tiene que la ecuación debe ser de la forma.

$$u\frac{d\overline{T}}{dx} - \alpha \left(1 + 0.5 R_{cell}\right) \frac{d^2 \overline{T}}{dx^2} = 0$$
 3.105

Al utilizar una fórmula en diferencias finitas upwind de primer orden se ha creado una difusividad artificial 0.5 $R_{cell} \alpha$. Para soluciones precisas se sugiere el siguiente límite práctico.

 $0.5 R_{cell} < 1.$

. :

۰.

Lo cual es más restrictivo que 3.103.

3.11.3 Ecuación unidimensional de transporte

Del capítulo 2 se tiene que la ecuación unidimensional de transporte de masa se puede escribir de la siguiente manera.

$$\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} - \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} = 0$$
 3.106

Donde \overline{T} es un escalar pasivo (por ejemplo temperatura) el cual se mueve con una velocidad conocida u(x, t) y además se dispersa. Sí \overline{T} es la temperatura, entonces α es la dfusividad térmica. Para analizar el comportamiento de las soluciones numéricas de (3.106) se asumirá que u y α son constantes. Como la ecuación de difusión, la ecuación de transporte es estrictamente parabólica y requiere el mismo tipo de condiciones iniciales y de frontera, que se utilizaron para la ecuación de difusión.

Sin embargo, cuando la relación u/ α llega a ser mayor que los dos primeros términos de la ecuación (3.106), entonces la ecuación de transporte de masa tendrá un comportamiento similar al de la ecuación de convección. Como se vio, las soluciones exactas de la ecuación de convección son comúnmente movimientos de onda que se propagan sin amortiguamiento. Por lo tanto para valores grandes de u/ α en la ecuación de transporte, las soluciones podrían esperarse con movimientos como de una onda que se amortigua levemente. A continuación se examinarán algunos esquemas algebraicos, que se han utilizado previamente para las ecuacións de difusión y convección, para observar si la aparición simultánea de la convección y la difusión producen algunas dificultades nuevas.

3.11.3.1 Esquemas Explícitos

المصلح المراجعة المسلمة

El esquema FTCS aplicado a la ecuación (3.106) se obtiene la siguiente ecuación algebraica.

ŗ.

$$\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}}{\Delta t} + \frac{u(T_{j+1}^{n} - T_{j-1}^{n})}{2\Delta x} - \frac{\alpha(T_{j-1}^{n} - 2T_{j}^{n} + T_{j+1}^{n})}{\Delta x^{2}} = 0$$
3.107

el cual como algoritmo, puede escribirse

$$T_{j}^{n+1} = (s+0.5c)T_{j-1}^{n} + (1-2.0c)T_{j}^{n} + (s-0.5c)T_{j+1}^{n}$$
3.108

donde s = $\alpha \Delta t / \Delta x^2$ y c = u $\Delta t / \Delta x$

Una expansión en series de Taylor alrededor del nodo (j, n) índica que (3.108) es consistente con (3.106) con un error de truncamiento de $O(\Delta t, \Delta x^2)$. Puede recordarse que al utilizar diferencias hacia delante en el tiempo y diferencias centradas en el espacio produce un algoritmo que es condicionalmente estable para la ecuación de difusión e inestable para la ecuación de convección. Para la ecuación de transporte, del análisis de estabilidad de von Neumann se obtiene el valor del factor del amplificación G, mostrado en la **Tabla 3.7**. Para soluciones estables, $|G| \leq 1$, implica las siguientes restricciones

 $0 \le c^2 \le 2s \le 1$

Sí se utiliza una expresión en diferencias finitas "upwind" para la ecuación (3.106), el resultado es un algoritmo, que puede escribirse de la siguiente manera, para u positiva.

$$T_{j}^{n+1} = (s+c)T_{j-1}^{n} + (1-2s-c)T_{j}^{n} + sT_{j+1}^{n}$$
3.109

Las propiedades de dicho esquema se presentan en la **Tabla 3.7**. Las mayores restricciones para los esquemas considerados hasta ahora, están asociadas con la necesidad de obtener soluciones precisas cuando las derivadas son discretizadas con aproximaciones de primer orden.

3.11.3.2 Esquemas implícitos

Para la ecuación de difusión los esquemas implícitos son efectivos en remover la restricción de estabilidad $s \le 0.5$. El más efectivo esquema en dos niveles unidimensional, fue el de Crank-Nicolson, el cual será aplicado a la ecuación de transporte. Estrictamente dicho esquema debe ser descrito como un esquema trapezoidal, de ahí que el esquema original fuera desarrollado para la ecuación de difusión.

Para la ecuación de transporte el esquema Crank-Nicolson resulta.

$$\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}}{\Delta t} + (uL_{x} - \alpha L_{xx})0.5(T_{j}^{n} + T_{j}^{n+1}) = 0$$
3.110

donde $M_x = \{ \delta, 1-2\delta, \delta \}$ y L_x y L_{xx} son las formulaciones convencionales para fórmulas en tres puntos centradas.

La ecuación (3.110) puede escribirse como algoritmo de la siguiente manera.

$$-(s+0.5c)T_{j-1}^{n+1} + 2(1+s)T_{j}^{n+1} - (s-0.5c)T_{j+1}^{n+1} = (s+0.5c)T_{j-1}^{n} + 2(1+s)T_{j}^{n} + (s-0.5c)T_{j+1}^{n}$$
3.111

Una expansión en series de Taylor de (3.111) alrededor del nodo (j, n) índica que es consistente con (3.106) con un error de truncamiento de $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$. Un análisis de estabilidad de von Neumann produce el factor de amplificación G mostrado en la **Tabla 3.7**, sin restricción en la magnitud de c o s para la estabilidad. Pero para obtener soluciones espacialmente no oscilatorias, la restricción $R_{cell} \leq 2$ debe cumplirse.

Para las componentes de longitudes de onda largas (pequeño m Δx) de la solución, las propiedades de disipación y la dispersión del algoritmo de cálculo para la ecuación de transporte puede ser inferida desde los errores de truncamiento listados en la **Tabla 3.7**. Generalmente los esquemas implícitos se comportan bien. La disipación física en el sistema reduce el error en la dispersión asociado con longitudes de onda cortas que ocurren con la ecuación de convección. En particular el esquema de Crank-Nicolson en elemento finito mostrado en la **Tabla 3.7**, tiene errores en la dispersión menores para valores de c pequeños.

Otro esquema que disminuye los errores en la dispersión numérica es el de Crank-Nicolson con elemento finito, el cual aplicado a la ecuación unidimensional de transporte produce la siguiente ecuación algebraica.

$$M_{x}\left(\frac{T_{j}^{n+1} - T_{j}^{n}}{\Delta t}\right) + \left(uL_{x} - \alpha L_{xx}\right)0.5\left(T_{j}^{n} + T_{j}^{n+1}\right) = 0$$
3.112

donde $M_x = \{\delta, 1-2\delta, \delta\}$. El parámetro δ se selecciona de tal manera que reduce los errores en la dispersión numérica. Es claro que al utilizar (3.112) se generará un sistema tridiagonal el cual puede resolverse con el algoritmo de Thomas. Al realizar un análisis de von Neumann se tiene que (3.112) es estable para $\delta \le 0.25$. X

Comentarios	R _{cell} ≤ 2/c Para precisión	R _{cell} ≤ 2/(1-c) Para precisión	R _{cell} ≤ 2 Para evitar oscilaciones espaciales	R _{cell} ≤ 2 Para evitar oscilaciones espaciales
Restricción de estabilidad	0≤c ² ≤2s≤1	c + 2s ≤ 1	Ninguna	Ninguno
Factor de amplificación G(θ=mπ ∆x)	$1-2s(1-\cos\theta)-ic\sin\theta$	$1 - (2s + c)(1 - \cos\theta) - ic \sin\theta$	$\frac{1-s(1-\cos\theta)-0.5i\csc n\theta}{1+s(1-\cos\theta)+0.5i\csc n\theta}$	$\frac{2+3\cos\theta-3s(1-\cos\theta)-1.5ic\sin\theta}{2+3\cos\theta+3s(1-\cos\theta)+1.5ic\sin\theta}$
Error de truncamiento (E)	$cu\left(\frac{\Delta x}{2}\right)\frac{\partial^{2}T}{\partial x^{2}}\left[c_{\alpha\Delta x} - u\left(\frac{\Delta x}{6}\right)(1 + 2c^{2})\right]\frac{\partial^{3}T}{\partial x^{3}}$	$-u\left(\frac{\Delta x}{2}\right)(1-c)\frac{\partial^{2}T}{\partial x^{2}} - \left[c\alpha\Delta x - u\left(\frac{\Delta x^{2}}{6}\right)(1-3c+2c^{2})\right]\frac{\partial^{3}T}{\partial x^{3}}$	$u\left(\frac{\Delta x^{2}}{6}\right)\left(1+0.5c^{2}\right)\frac{\partial^{3}T}{\partial x^{3}}$ $-\alpha\left(\frac{\Delta x^{2}}{12}\right)\left(1+3c^{2}\right)\frac{\partial^{4}T}{\partial x^{4}}$	$uc^{2} \left(\frac{\Delta x^{2}}{12} \right) \frac{\partial^{3} T}{\partial x^{3}} + \alpha \left(\frac{\Delta x^{2}}{12} \right) \frac{\partial^{3} T}{\partial x^{3}} \left(1 - 3c^{2} \right) \frac{\partial^{4} T}{\partial x^{4}}$
Forma Algebraica	$\frac{\Delta T_{j}^{n+1}}{\Delta t} + uL_{x}T_{j}^{n} - \alpha L_{xx}T_{j}^{n} = 0$	$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} + u \frac{\left(T_j^n - T_{j-1}^n\right)}{\Delta x}$ $\alpha L_{xx} T_j^n = 0$	$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} + \frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} + \frac{\Delta T_j^{n+1}}{2} = 0$	$M_{x} \frac{\Delta T_{j}^{n+1}}{\Delta t} + \left\{ uL_{x} - \alpha L_{xx} \right\} \left\{ \frac{T_{j}^{n} + T_{j}^{n+1}}{2} \right\} = 0$
Esquema	FTCS	Upwind	Crank- Nicolson	Método del elemento finito/Cran k-Nicolson

-

Tabla 3.7 Esquemas algebraicos para la ecuación de transporte

. .. -

Resumen

ŧ;

Las ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas generalmente se asocian con problemas de propagación sin disipación, mientras que las ecuaciones parabólicas de igual manera se aplican a problemas de propagación pero incluyendo la disipación. En mecánica de fluidos la disipación proviene de los términos viscosos o del Eddy-viscosity al tratar problemas de turbulencia.

Por otra parte las ecuaciones diferenciales parciales elípticas se aplican a problemas de flujo en estado permanente. Cada tipo de ecuación requiere de condiciones de frontera e iniciales diferentes. La estricta clasificación matemática de las ecuaciones diferenciales parciales debe ser afinada con el conocimiento del proceso físico involucrado, con el fin de asegurar las correctas condiciones auxiliares especificadas.

El proceso de discretización de ecuaciones diferenciales parciales introduce un error que puede ser calculado considerando el error de truncamiento, al menos para el método de diferencias finitas.

Para las ecuaciones que gobiernan el movimiento de los fluidos no es posible demostrar la convergencia directamente, sin embargo es recomendable mostrar que la forma discretizada de las ecuaciones es consistente.

En la práctica la verificación de la estabilidad requiere una evaluación numérica. El método de von Neumann para determinar la estabilidad de las ecuaciones discretizadas es solamente aplicable a ecuaciones lineales.

Los esquemas explícitos generalmente restringen el máximo valor de ∆t para obtener soluciones estables de las ecuaciones diferenciales parciales. Los esquemas implícitos a menudo logran una estabilidad incondicional a cambio de mayor tiempo de calculo. La inclusión de términos adicionales en el nivel de tiempo (n+1) permite una mayor flexibilidad para la construcción de esquemas de mayor orden, sin embargo los resultados sugieren que se utilice una malla muy fina para obtener una mejora significante en la precisión.

Los métodos explícitos multidimensionales son apropiados siempre y cuando se utilicen pasos de tiempo pequeños para obtener una solución suficientemente precisa.

Para ecuaciones diferenciales parciales multidimensionales, por ejemplo, la ecuación de difusión, los esquemas implícitos son más efectivos que los esquemas explícitos, principalmente debido a su comportamiento estable, particularmente si la precisión de la solución espacial es más crítica que la solución temporal.

Al utilizar ecuaciones discretizadas para obtener soluciones de ecuaciones diferenciales, por ejemplo la de transporte de masa, debe ponerse atención para reconocer y controlar la disipación y dispersión numérica.

{

¢.

En problemas donde domina la convección sobre la difusión se presentan oscilaciones numéricas que no son propias del fenómeno físico, sin embargo al utilizar los operadores de masa, los cuales son una característica del método del elemento finito, proporcionan un mecanismo para ejercer un control sobre dichas oscilaciones.
4 Modelo numérico hidrodinámico

. 2

4.1 Introducción

ð;

En la actualidad existen numerosos modelos matemáticos empleados para la determinación de las características hidrodinámicas, ya sea en rios o en zonas litorales, si bien es necesario señalar que el estado del conocimiento actual no garantiza, debido a las dificultades inherentes de un buen calibrado y a las hipótesis de la formulación, que los modelos más sofisticados proporcionan buenos resultados. En general se considera que una aproximación de \pm 5 % en niveles y \pm 20 % en velocidades es aceptable.

La familia de modelos más utilizados en la actualidad para resolver el tema que nos ocupa son los denominados 2D o bidimensionales en el que las magnitudes de las ecuaciones son promediadas en la vertical. Estos modelos, en general, resuelven de manera suficientemente aproximada las corrientes de marea en zonas próximas al litoral de profundidad reducida, donde normalmente se efectúan los vertidos de sustancias contaminantes.

Las corrientes debidas al viento, cuya intensidad sufre una disminución en la profundidad no pueden ser modeladas de manera razonable en los modelos bidimensionales indicados (salvo en el caso de profundidades extremadamente reducidas), por lo que suelen adoptarse los modelos denominados cuasi tridimensionales, en los que a pesar de seguirse considerando nula la componente vertical del movimiento se admite una variación en la profundidad de las componentes horizontales del mismo.

A diferencia de los modelos utilizados para el estudio del flujo en canales y conductos a presión, donde las condiciones de aplicabilidad están perfectamente establecidas, los modelos hidrodinámicos deben ser aplicados en aquellas zonas o instantes en los que se cumpla de manera suficientemente aproximada las hipótesis bajo las cuales se han establecido. Por dicha razón, los apartados siguientes se dedican al estudio de forma más o menos exhaustiva de los modelos más utilizados, atendiendo principalmente las hipótesis que soportan su formulación.

4.2 Formulación del modelo matemático hidrodinámico

.. .. .

Para la formulación de los modelos hidrodinámicos aplicables al estudio de la hidrodinámica, se parte de los principios fundamentales de la mecánica clásica y una serie de hipótesis que hacen posible llegar a soluciones, siempre aproximadas, pero en muchas ocasiones útiles, a la hora de interpretar fenómenos hidrodinámicos que tienen interés desde el punto de vista práctico.

Las ecuaciones utilizadas para los modelos hidrodinámicos son las de Navier-Stokes descritas en él capitulo 1 (ecuación (1.68)).

¢

Con ésta ecuación, se puede obtener una solución general y exacta del flujo, tanto si fuese laminar o turbulento. En la práctica ingenieril los flujos de interés son normalmente turbulentos. Esto significa que la escala espacial es habitualmente menor del milímetro, mientras que la escala temporal es del orden del milisegundo. Incluso las computadoras más potentes que existen hoy no serían capaces de resolver ningún problema práctico a coste admisible, considerando las escalas espaciales y temporales citadas. Además una información tan detallada sobre las características del flujo no reviste interés práctico.

Así por ejemplo, en estudios de la circulación del agua en ríos o en zonas costeras, la menor escala espacial de interés es mayor que el metro y la temporal mayor que un minuto.

En la búsqueda de soluciones prácticas de la ecuación (1.68), Reynolds propone la siguiente descomposición de una propiedad cualquiera del fluido.

$$f = \overline{F} + f'$$

4.1

donde

 \overline{F} Es una propiedad cualquiera (v, P, ρ , ...) del flujo promediado un intervalo de tiempo dado

f' La desviación instantánea de f respecto de F, cuya media es cero.

Sustituyendo la ecuación (4.1) en la ecuación (1.68) se obtiene, para el caso de la velocidad ($u = \overline{U} + u'$)

$$\frac{D\overline{U}_{i}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial x_{i}} - g\delta_{i3} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_{j}}\left[\rho\upsilon\left[\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial\overline{U}_{j}}{\partial x_{i}}\right] - \rho\overline{u'_{i}u'_{j}}\right]$$

$$4.2$$

donde

 $υ = \frac{\mu}{\rho}$ Es la viscosidad cinemática en m²/s $δ_{i3} = 0 \text{ para i} = 1, 2$

 $\delta_{i3} = 1$ para i = 3

La ecuación (4.2) no se puede representar valores medios \overline{U} , ya que contiene en su último término variables que representan la desviación instantánea u'. Esta situación exige buscar una expresión que relacione el término $\overline{u'_{i}u'_{i}}$ con la velocidad media.

Por analogía con la expresión del principio de la viscosidad, Boussinesq propone llamar a $\rho \vec{u'_i u'_i}$ tensiones turbulentas y las relaciona con la velocidad media de la siguiente forma:

$$\rho \overline{u'_{i} u'_{j}} = \rho v_{e} \frac{d \overline{U}_{i}}{dx_{i}}$$

$$4.3$$

÷

En esta ecuación v_e se denomina viscosidad de remolino y se introduce más bien por conveniencia que por rigor físico-matemático. Este parámetro no está relacionado con las propiedades del fluido, sino que depende exclusivamente del carácter del flujo y del nivel de promediación. Su valor se obtiene por vía puramente empírica y es la primera indeterminación en los modelos matemáticos que se utilizan para el estudio del movimiento de masas de agua.

Sustituyendo la ecuación (4.3) en (4.2) y despreciando el penúltimo término de ésta, al ser éste varios órdenes de magnitud menor que $\overline{u'_{1}u'_{1}}$, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{D\overline{U}_{i}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_{i}} - g\delta_{i3} + v_{e}\nabla^{2}\overline{U}_{i}$$

$$4.4$$

En ésta ecuación se ha considerado que la viscosidad de remolino v_e es constante para las tres componentes i. Sin embargo, en muchos estudios oceanográficos se distinguen dos coeficientes de viscosidad de remolino, uno horizontal y otro vertical, siendo el primero de varios órdenes de magnitud mayor que el segundo. No obstante por ahora se mantendrá la aproximación v_e = constante y más adelante, cuando se haga necesario, se considerará la diferenciación de los coeficientes mencionados.

El principio de continuidad, para velocidades promediadas en el tiempo, se expresa de la siguiente forma:

$$\frac{1}{\rho}\frac{D\rho}{Dt} + \frac{\partial \overline{U}}{\partial x_i} = 0$$
4.5

Para las ecuaciones (4.4) y (4.5), en el caso que nos ocupa se puede aceptar otra de las aproximaciones de Boussinesq, válida si el número de Mach es pequeño, si no es necesario considerar la propagación de ondas de sonido y si la escala vertical del flujo no es muy grande.

Para estas condiciones la densidad ρ puede ser tratada como constante en las ecuaciones (4.4) y (4.5) excepto en el término de gravedad. Aplicando estas hipótesis a las ecuaciones anteriores se obtiene:

$$\frac{D\overline{U}_{i}}{Dt} = -\frac{1}{\rho_{0}} \frac{\partial p}{\partial x_{i}} - \frac{g\delta_{i3}}{\rho_{0}} + v_{e} \nabla^{2}\overline{U}_{i}$$

$$\frac{\partial \overline{U}}{\partial x_{i}} = 0$$

$$4.7$$

108

00

Las ecuaciones (4.6) y (4.7) son un posible punto de partida para la formulación del modelo matemático de circulación de agua en ríos y en el medio litoral.

Nótese que las ecuaciones (4.6) y (4.7) se pueden obtener, tanto en cambio en la densidad debidos, como del flujo debido al cambio de densidad. En todo caso, sería necesario introducir una ecuación de estado de la forma:

p = p(salinidad, temperatura)

Para la formulación del modelo matemático resulta cómodo realizar el siguiente cambio de nomenclatura:

$$\begin{array}{lll} \overline{U}_1=\overline{u}\,; & \overline{U}_2=\overline{v}\,; & \overline{U}_3=\overline{w} \\ \\ x_1=x\,; & x_2=y\,; & x_3=z \end{array}$$

Con lo que la ecuación (3.6) se expresa con las siguientes tres ecuaciones.

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial x} + \nu_e \left[\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial z^2}\right]$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial y} + \nu_e \left[\frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial z^2}\right]$$

$$4.8$$

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{w}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{w}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = -g\frac{\rho}{\rho_0} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} + \nu_e \left[\frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial z^2}\right]$$

y la ecuación (4.7) tendrá la forma:

 $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = 0$ 4.9

4.2.1 Modelo hidrodinámico bidimensional

Las observaciones del flujo en la zona litoral señalan que habitualmente las velocidades verticales son w, son pequeñas. Esto es debido al hecho de que en estas zonas el flujo se genera normalmente por ondas cuya longitud (L) es mucho mayor que la profundidad del agua (H) como es el caso, por ejemplo, de la onda de marea. La condición de onda larga (w \approx 0), que se puede considerar aplicable es a partir de L > 20 H.

En las condiciones mencionadas la ecuación (4.8) se transforma en las siguientes:

з,

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + v_e \left[\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial y^2} \right]$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + v_e \left[\frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial y^2} \right]$$

$$4.10$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g$$

$$\partial \bar{u} = \partial \bar{v} = \partial \bar{w}$$

4

$$\frac{\partial x}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial z} + \frac{\partial z}{\partial z} = 0$$
 4.11

Cabe señalar que la última ecuación del sistema (4.10) describe una distribución lineal de la presión vertical, equivalente al caso de presión hidrostática.

Nótese también que en la ecuación de continuidad (4.11) no es posible despreciar el término que contiene \overline{w} , ya que los tres sumandos del primer miembro son de igual orden de magnitud. En algunas situaciones se considera directamente $\overline{w} = 0$ y entonces, en la ecuación (4.11), el término que contiene \overline{w} se hace nulo.

Cuando el movimiento que se estudia presenta una distribución de las velocidades en vertical prácticamente uniforme, se puede establecer la siguiente hipótesis:

$$\overline{u}(z) = u = constante;$$
 $\overline{v}(z) = v = constante$ 4.12

Si ahora se realiza la promediación en vertical para los distintos términos de las ecuaciones (4.10), se obtiene:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -g \frac{\partial Z}{\partial x} + Fv + v_e \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right]$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -g \frac{\partial Z}{\partial y} + Fu + v_e \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right]$$
4.13

Para la ecuación de continuidad, sin necesidad de hacer la hipótesis (4.12), se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_{-h}^{z} \overline{u}(z) dz + \frac{\partial}{\partial y} \int_{-h}^{z} \overline{v}(z) dz + \overline{w}_{(z=z)} - \overline{w}_{(z=-h)} = 0$$

ť:

110

Ç

y teniendo en cuenta que $\overline{w}(z = -h) = 0$ y $\overline{w}(z = Z) = \frac{\partial Z}{\partial t}$ se obtiene:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{\partial UH}{\partial x} + \frac{\partial VH}{\partial y} = 0$$
4.14

H≠Z+h

En las ecuaciones H es la profundidad total, h la profundidad por debajo del nivel medio, Z la sobrelevación sobre el nivel medio; t es el tiempo; x e y las coordenadas cartesianas y u y v las velocidades promediadas en la vertical.

Las ecuaciones (4.13) y (4.14) forman un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas (U (x, y, t); V (x, y, t) y Z(x, y, t)).

En las ecuaciones (4.13) se ha introducido un nuevo término Fv. Éste término tiene en cuenta la fuerza de Coriolis, donde F=2 Ω sen (I), $\Omega = 0.73 \times 10^{-4}$ (rad/día) es la velocidad angular de la rotación de la Tierra y I es la latitud media del dominio del modelo.

En las ecuaciones (4.13) y (4.14), como se mencionó, se introdujo la hipótesis (4.12), es decir la del perfil uniforme en la vertical para las velocidades $\overline{u}(z)$ y $\overline{v}(z)$. Esta hipótesis es admisible en los casos en que las corrientes marinas son debidas a marea, ya que el perfil es prácticamente uniforme. Dicha hipótesis podría aplicarse al estudio de corrientes generadas por el viento en aguas muy poco profundas.

4.2.1.1 Condiciones iniciales y de contorno

Las condiciones iniciales que permiten resolver estas ecuaciones son la de sobrelevación del agua y las velocidades en las direcciones x e y en el dominio de cálculo para el instante t = 0.

 $Z_{t=0} = Z_0 (x, y)$ $U_{t=0} = U_0 (x, y)$ $V_{t=0} = V_0 (x, y)$

Sin embargo las funciones Z_0 , U_0 y V_0 normalmente no son conocidas, por esto habitualmente se asumen iguales a cero. Cuando el movimiento modelado es periódico, como el caso de la marea, una solución estable se obtiene después de varios ciclos.

Las ecuaciones (4.13) y (4.14) tienen que ser completadas con condiciones apropiadas de contorno. Desde un punto de vista físico se hace necesario definír las siguientes condiciones de contorno:

- En las líneas de tierra
- En la superficie libre
- En el fondo

- En mar abierto o en otro tipo de frontera.

En la línea de tierra se asume que la componente normal a la línea de tierra es nula, mientras que la componente tangencial no se le impone ninguna condición.

Sobre la superficie libre pueden actuar tensiones tanto normales como tangenciales:

Condición de contorno de tensión normal (presión) en la superficie libre

En las ecuaciones (4.13) se supone una presión atmosférica constante sobre todo el dominio de cálculo, sin embargo la presión en estas ecuaciones puede ser función del tiempo y del espacio P = P(x, y, t). En este caso la función P = (x, y, t) tiene que ser conocida.

Condición de contorno tangencial en la superficie libre

Las tensiones tangenciales en la superficie libre normalmente son generadas por el viento. Las tensiones tangenciales generadas por el viento en las direcciones x e y se pueden expresar de la siguiente forma:

$$\frac{\tau_{sx}}{\rho_0} = v_e \frac{\partial U}{\partial Z}\Big|_{z=Z} = C_w W_x \sqrt{W_x^2 + W_y^2} \frac{\rho_a}{\rho_0}$$

$$\frac{\tau_{sy}}{\rho_0} = v_e \frac{\partial V}{\partial Z}\Big|_{z=Z} = C_w W_y \sqrt{W_x^2 + W_y^2} \frac{\rho_a}{\rho_0}$$
4.15

Donde:

τ _{sv} y τ _{sv}	Son las tensiones generadas por el viento en la superficie libre														
Cw	Es el coeficiente de fricción por viento														
W _x y W _y	Las	velocida	des	del	viento	en	las	direcciones	х	е	y a	i 10	m	sobre	la
superficie libro	Э														
			1 1	•											

ρ_a La densidad del aire

ρ₀ La densidad del agua

$$K_v = C_w \frac{\rho_a}{\rho_0}$$

La condición de contorno de fricción en el fondo puede ser considerada a través del coeficiente de Chezy teniendo en cuenta las siguientes relaciones:

$$\frac{\tau_{bx}}{\rho_0} = v_e \frac{\partial U}{\partial Z}\Big|_{z=-h} = \frac{gU\sqrt{U^2 + V^2}}{C^2}$$

$$\frac{\tau_{by}}{\rho_0} = v_e \frac{\partial V}{\partial Z}\Big|_{z=-h} = \frac{gV\sqrt{U^2 + V^2}}{C^2}$$
4.16

112

ç

donde

 τ_{bx} , τ_{by} son tensiones en el fondo por fricción y C es el coeficiente de Chezy.

Por último, el contorno hacia mar abierto es una línea ficticia que separa el dominio del modelo del resto del mar. Es evidente entonces que para una correcta simulación es necesario conocer las características hidrodinámicas de este contorno, bien en términos de velocidades, o en niveles. Aunque existen distintas teorías para plantear la condición de contorno en mar abierto, como la de la radiación libre de Somerfield, la manera más fiable de obtener resultados correctos es disponer de datos reales.

Teniendo en cuenta las ecuaciones (4.13) y (4.14) y las condiciones de contorno de superficie libre (4.15) y del fondo (4.16), las ecuaciones de onda larga en dos dimensiones se pueden escribir de la siguiente forma:



4.2.1.2 Integración de las ecuaciones

La integración numérica de las ecuaciones (4.17) y (4.18) se lleva a cabo con el método ADI (Alternating Direction Implicit), el cual se explicó detalladamente para la ecuación bidimensional de difusión. Un posible discretización se describe, a continuación.

El esquema en diferencias finitas en el espacio se presenta en la Tabla 4.1.

La solución en el tiempo se obtiene en el siguiente orden:

En t + Δ t se resuelve V, Z implícitamente, y U explícitamente En t + Δ t/2 se resuelve U, Z implícitamente, y V explícitamente

ş.

En t se conocen U, V, Z.

÷. 1

j +1	Z	U	Z	υ	Z
j+1/2	V	h	_V	h	V
j	Z	U	Ζ	U	Z
j-1/2	V	h	V	h	V
j-1	Z	U	Z	U	Ζ
	i-1	i-1/2	i	i+1/2	i+1

Tabla 4.1 Esquema en diferencias finitas en el espacio

Las expresiones numéricas para el paso de t a t + ½ At son de la siguiente forma:

En el punto $\left[i + \frac{1}{2}, j\right]$ $u^{k+1/2} = u^{k} - \frac{\Delta t}{2} \left[u^{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{k} + \overline{v}^{k} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{k} - \overline{v}^{k} F + g \left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right)^{k+\frac{1}{2}} + g u^{k} \frac{\sqrt{\left(u^{k}\right)^{2} + \left(\overline{v}^{k}\right)^{2}}}{\overline{C}_{x}^{2} \left(\overline{h}_{y} + \overline{z}\right)} \right] 4.19$

En la ecuación (4.19) los términos no lineales, advectivos y de fricción en t + $\frac{1}{2} \Delta t$ se aproximan con sus valores en t. Los símbolos utilizados, para una función genérica F, son:

$$\begin{split} F_{i,j}^{k} &= F(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta t) \\ \overline{F}_{x} &= \frac{1}{2} (F_{i+1/2, j} + F_{i-1/2, j}) \\ \overline{F}_{y} &= \frac{1}{2} (F_{i, j+1/2} + F_{i, j-1/2}) \\ \overline{F} &= \frac{1}{4} (F_{i-1/2, j-1/2} + F_{i+1/2, j-1/2} + F_{i-1/2, j+1/2} + F_{i+1/2, j+1/2}) \end{split}$$

En el punto (i, j)

$$Z^{k+\frac{1}{2}} = Z^{k} - \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial ((\bar{h}_{y} + \bar{Z}_{x})u)^{k+\frac{1}{2}}}{\partial x} + \frac{\partial ((\bar{h}_{x} + \bar{Z}_{y})v)^{k}}{\partial y} \right]$$

$$4.20$$

114

Ę

En el punto (i, j+1/2)

$$v^{k+\frac{1}{2}} = v^{k} - \frac{\Delta t}{2} \left[v^{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{k} + \overline{u}^{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{k} - \overline{u}^{k+\frac{1}{2}} F + g \left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right)^{k} + g v^{k+\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{\left(\overline{u}_{\perp}^{k+\frac{1}{2}} \right)^{2} + \left(v^{k} \right)^{2}}}{\overline{C}_{y}^{2} \left(\overline{h}_{y} + \overline{z}_{y}^{k+\frac{1}{2}} \right)} \right] 4.21$$

Para el paso de tiempo t + Δt en el punto (i, j+1/2), las expresiones son:

$$v^{k+1} = v^{k+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \left[v^{k+1} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{k+\frac{1}{2}} + \overline{u}^{k+\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^{k+\frac{1}{2}} + \overline{u}^{k+\frac{1}{2}} \overline{F} + g \left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right)^{k+1} + g v^{k+\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{\left(\overline{u}^{k+\frac{1}{2}} \right)^2 + \left(v^{k+\frac{1}{2}} \right)^2}}{\overline{C}_y^2 \left(\overline{h}_x + \overline{z}_y^{k+\frac{1}{2}} \right)^2} \right]$$



En el punto (i, j).

$$Z^{k+1} = Z^{k+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial \left(\left(\overline{h}_{y} + \overline{Z}_{x} \right) u \right)^{k+\frac{1}{2}}}{\partial x} + \frac{\partial \left(\left(\overline{h}_{x} + \overline{Z}_{y} \right) v \right)^{k+1}}{\partial y} \right]$$

En el punto (i+1/2, j)

$$u^{k+1} = u^{k+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \left[u^{k+1} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{k+\frac{1}{2}} + \overline{v}^{k+1} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{k+\frac{1}{2}} - \overline{v}^{k+1} F + g \left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right)^{k+1} + g u^{k+\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{\left(u^{k+\frac{1}{2}} \right)^2 + \left(\overline{v}^{k+1} \right)^2}}{\overline{C}_x^2 \left(\overline{h}_y + \overline{z}_x^{k+1} \right)} \right]$$

4.23

Este procedimiento se repite para cada paso entero de tiempo.

4.2.1.3 Datos y resultados del modelo hidrodinámico

Los principales datos del modelo son:

- ..

• Información para el establecimiento de las condiciones de contorno en mar abierto. Estos datos pueden ser bien empíricos o analíticos.

Los datos de contorno analíticos pueden corresponder a la amplitud y período de la marea. A partir de estos dos parámetros el programa genera los valores necesarios, considerando la onda de marea como una sinusoide de amplitud y período dados.

- Coeficiente de Chezy de fricción de fondo
- Coeficiente de arrastre por viento
- Coeficiente de viscosidad del remolino
- Batimetría

. 8

e .

Para cada punto de la malla se ha de conocer la profundidad por debajo del nivel medio del mar. El resultado básico del modelo lo constituyen las elevaciones de la superficie libre y los campos de velocidades.

4.2.1.4 Calibración y validación del modelo

La calibración del modelo consiste en hacer coincidir los resultados que de él se obtienen con una serie de parámetros de mediciones "in situ". Estos parámetros son los siguientes:

- La fricción en el fondo
- El coeficiente de viscosidad del remolino
- El coeficiente de arrastre por viento
- Las condiciones de contorno en mar abierto
- La batimetría

Una vez realizada la calibración, la validación del modelo consiste en comprobar la confiabilidad del modelo con otro grupo de datos.

Fricción de fondo

El valor típico del coeficiente de Chezy oscila entre 30 y 50 m^{1/2}/s. En todo caso, ha de tenerse en cuenta que a mayor coeficiente de fricción corresponde menor fricción y mayores velocidades medias

Coeficiente de viscosidad de remolino

El coeficiente de viscosidad del remolino es probablemente el más difícil de calibrar, ya que se incluyen los efectos "turbulentos" no considerados de otra forma. Con este

C

coeficiente se intenta tener en cuenta también efectos debidos a promediaciones espaciales, como son:

- La promediación en vertical de las ecuaciones de cantidad de movimiento.
- La promediación en horizontal para el tamaño de las celdas de la malla

• La dispersión numérica debida a la transformación de las ecuaciones en diferencias finitas.

Una primera estimación de este coeficiente se puede establecer a partir de la fórmula siguiente:

 $v_e = K \Delta x U$ K = 0.05 - 0.15

donde U es una velocidad representativa

Coeficiente de arrastre por viento

Existen muchos estudios experimentales para la determinación de este coeficiente

Un valor inicial podría ser $C_w = 0.0026$

Condiciones de contorno en mar abierto

Sobre la condiciones de contorno en mar abierto es difícil plantear consideraciones de carácter general

Batimetría

La batimetría utilizada para el cálculo ha de ser suave, con pendientes mayores de 1:5, ya que en general, cambios bruscos pueden generar inestabilidades numéricas.

.

Resumen

Por las características del flujo en aguas poco profundas, resulta conveniente utilizar modelos matemáticos bidimensionales para conocer la hidrodinámica.

Al utilizar un modelo hidrodinámico es necesario conocer las hipótesis bajo las cuales fue creado, eso con la finalidad de realizar una correcta interpretación de los resultados del modelo matemático.

La precisión de un modelo de esta índole esta supeditada a las condiciones iniciales y de frontera, por lo que es muy recomendable realizar una campaña de campo para obtener todos los datos que se utilizarán como base para la modelación.

El esquema numérico de los modelos matemáticos debe ser en términos generales, fácil de programar y se considera como aceptable si se tiene un margen de error de entre 10 y 20%.

ø

٤.

5 Modelo numérico de transporte de masa

5.1 Formulación del modelo numérico de transporte de masa

5.1.1 Escalas en los procesos de dispersión

La dispersión es usada comúnmente, como un término general para referirse al movimiento aleatorio de las partículas de un fluido que dependen principalmente de dos procesos, la difusión molecular y el efecto del gradiente de velocidad (esfuerzo cortante), esto se ilustra en la **Figura 5.1**. Los procesos difusivos son bastante complejos, por lo que no se ha encontrado una solución exacta, Fick(1855) y Taylor(1921) asumieron que los flujos de masa pueden ser proporcionales a los gradientes de concentración, las constantes de proporcionalidad son los coeficientes de difusión molecular y turbulenta. Taylor (1953,1954) introdujo el concepto de los coeficientes de dispersión a partir de la combinación de los efectos de la advección y difusión molecular y el esfuerzo cortante en un fluido. Elder (1959) aplicó el análisis de Taylor a aguas poco profundas con el objeto de describir el efecto del esfuerzo cortante en los gradientes de velocidad en la vertical.

El concepto de dispersión de masa de una sustancia en solución o suspensión en un flujo, puede ser extendido a otras propiedades del mismo, por ejemplo los llamados coeficientes de viscosidad.

Principales procesos de transporte.

Advección. Movimiento de las partículas de un fluido debido a los procesos del flujo.

Dispersión. Esparcimiento de las partículas del flujo debido a los procesos del flujo.

Esfuerzo Cortante. Gradientes de velocidad Difusión.

Movimiento molecular.

Turbulencia.

Figura 5.1 Transporte de las partículas en un fluido

La clasificación que comúnmente se utiliza para los procesos de momentum y adveccióndispersión es la siguiente:

<u>Escala 1</u>

Movimiento molecular aleatorio.

Difusión molecular

Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa

Viscosidad

<u>Escala 2</u>

. Ł

. ,

Movimiento turbulento bajo una escala dada.

Difusión turbulenta Eddy viscosity

<u>Escala 3</u>

Promediando la profundidad para el perfil vertical de velocidad.

Dispersión Esfuerzo cortante para el fondo y superficie Esfuerzo cortante horizontal

<

Escala 4

Promediado sobre el modelo Resolución de Δx , Δt

Dispersión adicional Viscosidad adicional

<u>Escala 1</u>. Corresponde al movimiento molecular aleatorio, esta basado en la Ley de viscosidad de Newton

. .

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y}$$

Donde la viscosidad μ se define como una medida de la resistencia del flujo a la deformación impuesta por los esfuerzos cortantes tangenciales τ los cuales son generados por la transferencia de momentum debido a las fluctuaciones de la velocidad, normales a la superficie correspondiente.

Con respecto a las fluctuaciones debidas a los movimientos moleculares, sus efectos sobre la transferencia de momentum son independientes de las condiciones del flujo, por lo que la viscosidad dinámica es una característica independiente del fluido.

Escala 2. Se refiere a la turbulencia la cual es una agitación molecular que está siempre presente aún para fluidos en reposo, en ciertas condiciones de flujo las partículas experimentan movimientos adicionales aleatorios de mucha mayor magnitud, por lo que sus trayectorias son muy irregulares. Esto se observa en los registros de las series de tiempo de velocidad instantánea.

Escala 3. En muchas aplicaciones de ingeniería costera la profundidad es mucho menor que las dimensiones horizontales del dominio de cálculo, por lo que los modelos bidimensionales son usualmente adecuados para describir los principales procesos del flujo. Los flujos con gradientes de velocidad son a menudo referidos como "flujos cortantes", y el mecanismo de dispersión asociado, discutido por Taylor es conocido como "shear effect".

Escala 4. Una de las principales dificultades encontradas cuando se estiman los coeficientes de dispersión, es tomar en cuenta las discretizaciones espaciales, ya que es la representación de las nuevas escalas de movimiento, éstas dependen de factores como las configuraciones batimétricas locales, gradientes de densidad y fricción del

e e este a la composition de la composi

viento. Existen formulaciones generales que pueden ser usadas como guía, sin embargo, la precisión de los valores finales, dependerá siempre de la calibración y la experiencia del modelador.

5.1.2 Modelo de transporte de masa bidimensional

La ecuación de conservación de la masa o de transporte de una sustancia diluida en un fluido esta en función de velocidades y concentraciones instantáneas, se definió en el capítulo 2 dando como resultado la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} + \mathbf{u}_{j} \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{x}_{i}} = \mathbf{K} \frac{\partial^{2} \mathbf{c}}{\partial \mathbf{x}_{i}^{2}} = \mathbf{0}$$
 5.1

Desde el punto de vista práctico, la ecuación (5.1) es difícil de resolver (salvo que el flujo fuese laminar, lo que raramente ocurre en la práctica), ya que para obtener las velocidades instantáneas u_j para flujos turbulentos se necesitan enormes esfuerzos de cálculo.

Una manera de sustituir las concentraciones y velocidades instantáneas por valores promediados en el tiempo, es utilizar la usual descomposición denominada de Reynolds:

$$c = \overline{C} + c'$$

$$u = \overline{U} + u'$$

5.2

donde:

- \overline{C} y \overline{U} La concentración y la velocidad promediadas para un intervalo de tiempo conveniente.
- C' y u' Las desviaciones instantáneas sobre los valores medios de la concentración y velocidad respectivamente, y cuya media es cero

Haciendo uso de esta descomposición, la ecuación (5.1) se puede expresar de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \left(\overline{C} + c'\right)}{\partial t} + \left(\overline{U}_{j} + u'_{j}\right) \frac{\partial \left(\overline{C} + c'\right)}{\partial x_{j}} = K \frac{\partial^{2} \left(\overline{C} + c'\right)}{\partial x_{j}^{2}}$$
 5.3

La cual después de realizar operaciones se convierte en:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial t} + \overline{\mathbf{U}}_{j} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial \left(\overline{\mathbf{U}}'_{j} \overline{\mathbf{c}}'\right)}{\partial x_{j}} = \mathbf{K} \frac{\partial^{2} \left(\overline{\mathbf{C}} + \mathbf{c}'\right)}{\partial x_{j}^{2}}$$
5.4

Como se puede comprobar, el último sumando del primer miembro de la ecuación (5.4), es función de las desviaciones instantáneas c' y u'_i.

Para sustituir este término por otro, función de valores medios, es más conveniente escribir la ecuación (5.4) de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial t} + \overline{\mathbf{U}}_{j} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{x}_{j}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left(\mathbf{K} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{x}_{j}} - \overline{\mathbf{u}'}_{j} \overline{\mathbf{c}'} \right)$$
5.5

Si el segundo miembro de la ecuación (5.5) se pudiese expresar en función del gradiente de la concentración media, se obtendría una ecuación con la misma forma que la ecuación inicial (5.1). Para lograr esto Boussinesg propone la siguiente relación:

$$-\overline{\mathbf{u}}_{j}^{\prime}\overline{\mathbf{c}}^{\prime}=\varepsilon_{j}\frac{\partial\overline{\mathbf{C}}}{\partial\mathbf{x}_{j}}$$
5.6

Donde ε_j son los coeficientes de difusión turbulenta para las tres direcciones j, que en un principio son distintos y expresan el grado de difusión de la concentración \overline{C} debida a las fluctuaciones turbulentas. Es intuitivo pensar que la mezcla turbulenta depende del gradiente de la concentración, pero también del grado de la turbulencia. Así por ejemplo, la concentración no podría cambiar si la mezcla es completa (gradiente de concentración nulo). Por otro lado, para un mismo gradiente de concentración, es más intensa cuanto más intensa sea la turbulencia. Se puede pensar entonces que los coeficientes ε_j son indicadores del grado de turbulencia, ya que el gradiente de concentración se considera de forma explícita en la ecuación (5.6).

Si se sustituye la ecuación (5.6) en la ecuación (5.5) se obtiene:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial t} + \overline{\mathbf{U}}_{j} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{x}_{j}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left(\mathbf{K} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \varepsilon_{j} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \right)$$
5.7

Dado que la constante de difusión molecular K es varios órdenes de magnitud menor que cualquiera de los coeficientes ε_j , el penúltimo término de la ecuación (5.7) se puede despreciar frente a éstos últimos, obteniéndose la forma definitiva siguiente, que constituye un posible punto de partida para la formulación de un modelo matemático de transporte de una determinada sustancia.

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial t} + \overline{\mathbf{U}}_{j} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial x_{j}} = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\varepsilon_{j} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}}{\partial x_{j}} \right)$$
5.8

 A second sec second sec

De lo expuesto anteriormente hasta aquí es evidente que los coeficientes (ϵ) dependen exclusivamente de las características locales del flujo, por lo que una información fiable se puede obtener solamente mediante la realización de mediciones "in situ"

122

ĥ,

Un avance importante en el estudio de los coeficientes de la difusión turbulenta se debe a los trabajos de Taylor. A partir de ellos se establece que si en un flujo unidireccional se introduce instantáneamente en un punto una cantidad de sustancia, su dispersión a lo largo del tiempo se puede representar a través de las siguientes ecuaciones:

$\varepsilon_x = U^2 t$	t < < τ	
$\varepsilon_x = U^2 \tau$	t < < t	5.9

Donde t es el tiempo transcurrido desde el momento del vertido y τ es un lapso de tiempo dado. Como puede verse en las expresiones (5.9), el coeficiente de dispersión aumenta con el tiempo hasta un momento dado (τ) a partir del cual los valores de la dispersión se mantienen constantes. Este fenómeno podría tener la siguiente explicación: En un principio la mancha del contaminante tiene pequeñas dimensiones y la difusión es debida a remolinos de pequeña escala. En este momento los remolinos de mayor escala simplemente transportan la sustancia sin causar difusión. A medida que el tamaño de la mancha se incrementa, remolinos de mayor escala comienzan a dispersarla. Cuando el tamaño de la mancha alcanza la magnitud de los remolinos mayores, la difusión ya no puede crecer y se mantiene constante.

El fenómeno descrito lleva a la conclusión de que en muchas situaciones prácticas la difusión turbulenta no puede ser representada mediante coeficientes constantes.

Cuando para la integración de la ecuación (5.8) se utilizan velocidades promediadas en la vertical, los coeficientes de difusión horizontal deben tener en cuenta el llamado efecto "shear effect". Este efecto se debe a que la distribución de la velocidad en la vertical no es uniforme lo que origina que en las zonas de mayor velocidad la sustancia diluida en el fluido se mueva más rápidamente que en las zonas de menor velocidad, de manera que se realiza una importante dispersión de la sustancia que no se tiene en cuenta al utilizar la promediación. Los coeficientes con los que se tiene en cuenta el "shear effect" se denominan normalmente coeficientes de dispersión y suelen ser mucho mayores que los de difusión turbulenta horizontal.

Entre las fórmulas que se utilizan para obtener estos coeficientes, se encuentra la formulación propuesta por Elder:

$$D_x = K_E u^* h$$

 $u^* = \sqrt{ghS}$

Donde:

K_E = 5.9

- D_x: Coeficiente de dispersión en dirección del flujo
- h: Profundidad
- u Velocidad de fricción
- S Pendiente de la superficie libre
- g Aceleración de la gravedad

123

5.10

/:

Se han propuesto expresiones similares a las de Elder, con una gran variedad de coeficientes, como por ejemplo:

Krenkel(1962) para flujo en canales abiertos $D_x = 9.1u^* h$ Yotsukura(1964) para canales prismáticos $D_x = 13u^* h$ Thackston(1966) para cauces naturales $D_x = 7.25 \left(\frac{u}{u^*}\right)^{1/4} u^* h$

En cuanto a la aplicación a ríos, Fischer (1968) encontró que los coeficientes de dispersión longitudinal obtenidos por la formulación de Elder, eran mucho menores que los que él había reportado. Borden (1964) descubrió que los coeficientes de dispersión longitudinal son inversamente proporcionales al coeficiente de difusión vertical, lo cual es similar a lo que Elder investigó. De acuerdo con Bowden el coeficiente de difusión vertical turbulenta puede reducirse hasta 10 o 20 veces, con un correspondiente incremento en los coeficientes de dispersión horizontal del orden de 10⁵ a 10⁶ cm²/s.

Las conclusiones de estos autores son que los mecanismos de dispersión pueden ser dominantes en comparación con los "shear effects". Fischer propuso que el principal factor de contribución a la dispersión longitudinal era la difusión transversal y no la difusión vertical, dado que el mecanismo dominante de dispersión debe estar asociado con circulaciones transversales (éste análisis se realizó para cauces naturales). Bowden reconoció que los "shear effects" son más efectivos en estuarios y cerca de la costa.

5.1.2.1 Experiencias de campo

Con respecto a mediciones de campo y resultados de modelación se observa que en muchas situaciones los coeficientes de Elder son de menor magnitud que los que se han mencionado anteriormente, esto se aprecia en la **Tabla 5.1**, en la cual se comparan coeficientes calibrados con los obtenidos por la formulación de Elder para 4 casos de modelación en dos dimensiones.

Caso	h	u	u*	Δχ	∆t	E. calib	Elder
ļ	m) m/s	m/s) m	S) m²/s	6hu*
				ļ		L	m²/s
A	8	0.7	.05	50	30	2 - 5	2.4
В	20	1.0	0.1	500	300	40 - 50	12
С	30	0.5	0.03	6000	600	500	5.4
D	1000	0.1	0.003	30000	900	> 6000	18.0

Tabla 5.1 Comparación entre el coeficiente de Elder y coeficientes calibrados

La magnitud de los coeficientes calibrados puede ser explicada al considerar procesos en la escala 4, por lo que para valores de $\Delta x > > h$ usualmente dominan éstos, sobre los de escala 3.

Para representar la modelación a través de una discretización es natural relacionar los coeficientes efectivos de viscosidad y dispersión con la escala de longitud Δx y la escala de tiempo Δt . Por lo que los coeficientes pueden considerarse en las siguientes formas:

$K_1 \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$	5	.11.1
K₂∆ x u	5	.11.2

En la **Tabla 5.2**, se presentan diferentes valores de los coeficientes en la escala 4, los cuales se comparan con coeficientes calibrados, resultado de 5 situaciones diferentes.

Caso	h	u	Δχ	∆t	E _{cal}	K ₁	K ₂	K ₃
	m	m/s	m	S	M²/s			
A	8	0.7	50	30	1 - 5	0.06-0.01	0.14-0.03	0.34
В	20	1.0	500	300	40 - 50	0.06	0.10	0.07
С	30	0.5	6000	600	500	0.008	0.17	3.3
D	40	1.0	_20_	10	1 - 3	0.075-0.025	0.15-0.05	0.30-0.10
E	1000	0.1	30000	900	6000	0.006	2.0	667

Tabla 5.2 Coeficientes de dispersión para procesos en la escala 4

Es importante enfatizar que las ecuaciones (5.11.1), (5.11.2) y (5.11.3) no están basadas en un patrón definido del flujo, como la formulación de Elder, éstas estiman una aproximación de los valores verdaderos. Por otra parte se debe de tener en cuenta que en las situaciones en que $\Delta x > h$, el uso de la formulación de Elder es válida todavía aunque los procesos dispersivos asociados sean irrelevantes en comparación con otros efectos. No obstante, las formulaciones anteriores cuando se complementan con datos de campo y experiencia en situaciones similares, proporcionan una guía para la calibración de modelos ambientales bidimensionales.

Cuando ∆x y h son del mismo orden de magnitud, los "shear effects" serán se consideran importantes en la transferencia de movimiento. En la práctica, asumiendo que la velocidad de fricción para aguas costeras suele ser del orden de 6% de la velocidad media del flujo, la formulación de Elder toma la siguiente forma:

$$D_{y} = 5.9 \times 0.6 \text{ uh} = 0.4 \text{ uh}$$

Cuando $\Delta x \cong h$, los coeficientes de dispersión se toman como una primera aproximación el valor de:

 $K_3 \Delta t u^2$

Donde el factor 1.0 puede variar de acuerdo al valor de la calibración.

125

5.12

5.13

5.11.3

Debe de considerarse que en la deducción anterior, la dirección x estaba alineada en la dirección del flujo, por lo que los coeficientes obtenidos representan la dispersión longitudinal. En el caso de que existan "shear effects" transversalmente, éstos serán de menor magnitud que los coeficientes de dispersión longitudinales, como se indicó en los experimentos realizados por Talbot & Talbot (1974). Para una dirección arbitraria del flujo en un sistema de coordenadas cartesianas, los términos transversales se consideran, complicando así la definición de estos coeficientes. Sí D_L y D_T, son los coeficientes longitudinales y transversales entonces en coordenadas cartesianas y alineados al flujo se pueden expresar como:

$$D_{x} = \left(\left(\frac{\cos \alpha}{D_{L}} \right)^{2} + \left(\frac{\sin \alpha}{D_{L}} \right)^{2} \right)^{1/2}$$

$$D_{y} = \left(\left(\frac{\sin \alpha}{D_{L}} \right)^{2} + \left(\frac{\cos \alpha}{D_{L}} \right)^{2} \right)^{1/2}$$
donde $\alpha = \arctan\left(\frac{v}{u} \right)$
5.15

u: Velocidad en dirección x v: Velocidad en dirección y

5.1.3 Integración de las ecuaciones de transporte de masa

Los algoritmos implícitos evitan muchas dificultades de estabilidad que se presentan con los esquemas explícitos, pero tienen el problema de lograr un algoritmo eficiente; Como se vio en el capítulo 3 no fue el caso para la ecuación de difusión.

A continuación se utilizará el método ADI para la ecuación bidimensional de transporte de masa, la cual es una extensión de la ecuación unidimensional de transporte presentada en el capítulo 3, para esto se aplicará el método de Galerkin del elemento finito con elementos rectangulares bilineales, al utilizar dicho método se produce la siguiente ecuación.

$$M_{x} \otimes M_{y} \left[\frac{\partial T}{\partial t} \right]_{j,k} = \left[-uM_{y} \otimes L_{x} - vM_{x} \otimes L_{y} + \alpha_{x}M_{y} \otimes L_{xx} + \alpha_{y}M_{x} \otimes L_{yy} \right] T_{j,k}$$
 5.16

donde

 $\begin{array}{l} L_x \equiv (-1, \ 0, \ 1)/ \ 2 \Delta x \\ L_x \equiv (1, \ 0, \ -1)/ \ 2 \Delta y \end{array}$

126

X

Los demás operadores ya fueron definidos en el capítulo 3, la ecuación (5.16) puede compararse con la de difusión. Los términos adicionales en (5.16) son los convectivos. Sin embargo, los operadores direccionales de masa en los términos convectivos tienen el mismo comportamiento al de la ecuación de difusión. Esto ocurre, para el método del elemento finito, ya que dispersan la influencia de los operadores diferenciales, L_x y L_y, en la dirección normal.

Al igual que para la ecuación de difusión, el algoritmo para resolver la ecuación de transporte de masa se implementa en dos medios pasos de tiempo, siendo el procedimiento el siguiente.

En el primer medio paso de tiempo se tiene.

$$\left[\mathsf{M}_{x} + \beta \Delta t \left(\mathsf{u}_{j,k}\mathsf{L}_{x} - \alpha_{x}\mathsf{L}_{xx}\right)\right]\mathsf{T}_{j,k}^{n+1/2} \approx \left[\mathsf{M}_{y} - (1-\beta)\Delta t \left(\mathsf{v}_{j,k}\mathsf{L}_{y} - \alpha_{y}\mathsf{L}_{yy}\right)\right]\mathsf{T}_{j,k}^{n}$$
5.17

Para el segundo medio paso de tiempo

$$\left[M_{y} + \beta \Delta t \left(V_{j,k}L_{y} - \alpha_{y}L_{yy}\right)\right]T_{j,k}^{n+1} = \left[M_{y} - (1 - \beta)\Delta t \left(U_{j,k}L_{x} - \alpha_{x}L_{xx}\right)\right]T_{j,k}^{n+1/2}$$
5.18

Sí $\delta = 0$, se obtiene el método en diferencias finitas. El algoritmo dado por (5.17) y (5.18) es consistente con la ecuación bidimensional de transporte de masa y tiene un error de truncamiento de O(Δt^2 , Δx^2 , Δy^2). Un análisis de von Neumann índica que (5.17) y (5.18) es incondicionalmente estable para $\beta \ge 0.5$, para el método del elemento finito y en diferencias finitas.

El método para resolver numéricamente (5.17) y (5.18) es muy similar al de la ecuación bidimensional de difusión presentada en el capítulo 3.

5.1.3.1 Datos y resultados del modelo de transporte de masa

La tarea de recolección de datos para el modelo de transporte de masa, y en específico, para difusión térmica puede resultar bastante complicada si, por ejemplo se tiene que iniciar un programa de monitoreo, es decir que no se cuenta con información disponible. Para los estudios de advección dispersión es a menudo costoso obtener datos para la calibración, ya que se deben considerar grandes áreas y períodos de tiempo para el monitoreo.

En general la siguiente información es con la que se debe contar para la modelación.

 Datos de frontera, los cuales pueden ser obtenidos a través de mediciones de concentraciones (existentes o específicamente planeadas para el modelo) u observaciones.

- Las mediciones son muy importantes cuando se requiere estimar el campo inicial de concentración.
- Datos de fuentes y sumideros (por ejemplo magnitudes y concentraciones de flujo de ríos, esteros, descargas, bocas, etc.
- Para la calibración y validación de datos; éstos pueden obtenerse a través de mediciones de concentraciones en un determinado número de puntos en el área de interés, específicamente cercanos a las descargas del contaminante (por ejemplo calor).
- El campo hidrodinámico que se va a considerar para el modelo de advección dispersión.

5.1.3.2 Calibración y verificación del modelo

Habiendo recolectado la información para la ejecución del modelo, se ésta en condiciones de comenzar la calibración del mismo.

El propósito de la calibración es afinar el modelo para reproducir satisfactoriamente condiciones conocidas o medidas para un período particular conocido, por ejemplo el de calibración. La calibración del modelo es entonces, verificar corriendo una o más veces las simulaciones con las mediciones disponibles, sin cambiar algunos parámetros de la calibración. Debe asegurarse que las simulaciones sean hechas para algún período similar al período de calibración y verificación. Sin embargo nunca se deben usar resultados de la simulación, sin verificar que éstos sean razonable o no.

Parámetros de calibración

Cuando se realiza una corrida para calibración por primera vez y se comparan dichos resultados con las mediciones realizadas en campo, se encontrará que, en muchas ocasiones existirán diferencias entre sí. El propósito de la calibración es entonces afinar el modelo para que estas diferencias sean despreciables. Las simulaciones de advección dispersión dependen en gran parte de la calidad de campo hidrodinámico. De hecho, existe sólo un tipo de parámetro de calibración en la parte de advección dispersión, la cual comprende un grupo de parámetros de coeficientes de dispersión. Los coeficientes de dispersión son utilizados para estabilizar y calibrar el modelo.

Verificación del modelo

and a second second

Una vez que se ha concluido una calibración, entonces se pueden correr una o más simulaciones para las cuales se tienen mediciones (otros datos) sin cambiar los coeficientes de dispersión. Sí los resultados obtenidos entre los resultados de la simulaciones y las mediciones son satisfactorios, entonces se considera que la calibración ha concluido con éxito.

Resumen

Abbott (1985) mostró que es posible simular movimientos y circulaciones de agua a gran escala usando modelos bidimensionales. Madsen (1988) siguió la misma línea de investigación, y concluye que existen dos mecanismos fundamentales para la generación de la circulación del agua, donde las fuerzas de resistencia (fricción de fondo) están equilibradas por:

Transferencia de momentum en la escala de la discretización espacial adoptada (aceleraciones convectivas)

Transferencia de momentum en la escala de la discretización espacial adoptada, representada por el esfuerzo cortante horizontal.

El primer mecanismo es dominante en muchas situaciones donde las escalas de la circulación del flujo y discretización espacial Δx son mucho mayores que la profundidad, y el segundo está descrito fundamentalmente por circulaciones secundarias del flujo cuando $\Delta x \leq h$, sin embargo, para algunos casos donde $\Delta x >> h$ se encontró en la práctica que el segundo mecanismo es todavía necesario para describir ciertas escalas de circulación. Una posible explicación puede encontrarse a través de las siguientes hipótesis:

- a) Cuando la estructura del flujo está bien definida por un perfil logarítmico de velocidades y ∆x es del mismo orden de magnitud de la profundidad h, la fórmula de Elder es válida para la estimación de la viscosidad efectiva y los coeficientes de dispersión.
- b) Cuando $\Delta x >> h$ puede encontrarse que:

b1) El fondo es muy irregular y los efectos trídimensionales son despreciables, en este caso la fórmula de Elder es todavía válida pero no será sensible a valores del coeficiente de viscosidad. La circulación del flujo esta determinada solamente por el primer mecanismo, por los términos dispersivos.

b2) La configuración del fondo y la presencia de efectos tridimensionales ocasionan circulaciones, debido a que las escalas son del mismo orden de magnitud de Δx , esto se puede ilustrar a través de la experiencia de varios autores quienes para la calibración de modelos regionales usaron espaciamientos de mallas muy grandes (> 500 m), empleando coeficientes de dispersión proporcionales a Δx o h. Por ejemplo Schwiderski (1978) para su modelo global de mareas oceánicas usó un coeficiente de dispersión linealmente proporcional a la profundidad y a Δx , el cual dio valores consistentes con la fórmula previa.

6 Casos de aplicación de los modelos numéricos; hidrodinámico y de transporte de masa

Con la finalidad de analizar de manera detallada los resultados y alcances de los modelos numéricos hidrodinámico y de transporte de masa, se presentan dos casos de aplicación: el primero consiste en un análisis de sensitividad en el cual se estudia el comportamiento de los coeficientes de dispersión y el segundo es un caso práctico de los modelos al río Tecolutla ubicado en el estado de Veracruz.

6.1 Prueba de sensitividad del modelo hidrodinámico y de transporte de masa

Para analizar el fenómeno de advección dispersión en dos dimensiones y sus principales variantes, se realizará una prueba de sensitividad de los modelos, hidrodinámico y de transporte de masa descritos anteriormente.

Para esto se utilizará un canal, como el que se muestra en la **Figura 6.1**, el cual tiene una profundidad constante de 20 metros y un ancho constante de aproximadamente 500 metros con las fronteras sur y oeste abiertas (**Figura 6.1**)







Ķ.





6.1.1 Modelo hidrodinámico

El período de tiempo para la simulación que se eligió es de 6 horas, se utilizaron celdas rectangulares con un espaciamiento (Δx , Δy) de 50 metros y un paso de tiempo (Δt) de 30 segundos. El campo de flujo tiene una velocidad cero al comienzo de la simulación. El movimiento del flujo es inducido en la frontera sur por una onda de marea con un período de 12 horas y una amplitud de 0.05 m. El número de Courant resultante es de aproximadamente 8

Los coeficientes y las consideraciones utilizadas para el modelo hidrodinámico son las siguientes:

- Fricción de fondo
 Coeficiente de Manning 30 m^{1/2}/s
- Viscosidad de remolino
 Eddy Viscosity 15

En este caso no se incluye la fuerza de Coriolis, y la velocidad del viento es nula



En la **Figura 6.3** se muestra el campo hidrodinámico obtenido después de seis horas de simulación, y en la **Figura 6.4** la evolución de la velocidad de la corriente para dos puntos: el primero ubicado antes de la esquina y el otro después de ésta.





En la **Figura 6.4** se tiene el nivel del agua a través del tiempo en dos punto (25,5), (5,25) en ésta gráfica se aprecia perfectamente como entra y sale la marea del canal.



Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa



Figura 6.4 Nivel del agua en dos puntos del canal durante la simulación

En la **Figura 6.5**, se presenta la evolución de la velocidad a través del tiempo. De ésta figura, se observa que la máxima velocidad que provoca la marea entrante en el punto (25,5) es de 0.50 m/s, mientras que en el punto (5,25) se tiene una velocidad ligeramente mayor 0.54 m/s.



Figura 6.5 Evolución de la velocidad de la corriente para dos puntos durante la simulación

6.1.2 Modelo de transporte de masa

л.

Una vez obtenidos los campos hidrodinámicos, los cuales son la base para realizar las simulaciones de transporte de masa, a continuación se modelará una descarga de agua en el canal de 500 m³/s con una temperatura de 10° C. La temperatura del agua que circula en el canal es de 0° C.

La temperatura de la fuente ó sumidero en el modelo de transporte de masa se calcula de la siguiente manera

$$S = Q (Td - T)$$

6.1

ť

Donde

- Q Gasto de la fuente o sumidero descarga (m³/s/m²)
- Td Temperatura de la descarga
- T Temperatura del campo de flujo

Las condiciones para la simulación son las siguientes

 $\Delta x = 50 m$ $\Delta y = 50 m$ $\Delta t = 30 s$

La simulación de advección dispersión comienza al mismo tiempo que el hidrodinámico y el tiempo total es de 6 horas. La celda donde se aplica la descarga es la (25,3)

Los coeficientes de dispersión utilizados son los siguientes:

- a) $DX = 10 \text{ m}^2/\text{s}$ $DY = 10 \text{ m}^2/\text{s}$
- b) $DX = 25 \text{ m}^2/\text{s}$ $DY = 25 \text{ m}^2/\text{s}$

Para el caso a) los resultados obtenidos se muestran en las **Figuras 6.6** y **6.7**. En dichas figuras se tienen las isotermas después de 1.5 y 2:45 horas de simulación respectivamente, y en las **Figuras 6.8** se tiene la evolución de la temperatura en el tiempo de dos puntos (25, 10) y (5, 25); con este tipo de gráficas se observa con mayor detalle las evolución de la temperatura en el canal.



Figura 6.6 Isotermas a 1.5 horas de comenzada la simulación. Coeficiente de dispersión D = 10



Figura 6.7 Isotermas 2:45 horas después de comenzada la simulación. Coeficiente de dispersión D = 10



بد

Figura 6.8 Evolución de la temperatura en el tiempo durante la simulación. Coeficiente de dispersión D =10

De la **Figura 6.8** se observa que la temperatura disminuye poco después de las 3:00 horas, esto se debe a que precisamente a partir de ese instante la marea comienza a salir del canal y por ende las velocidades de la corriente en el modelo son menores.

De igual manera, para el caso b) en las **Figuras 6.9** y **6.10** se muestran los resultados obtenidos a 1.5 y 2:45 horas de iniciada la simulación, con un coeficiente de dispersión de 25 m²/s, y en la **Figura 6.11** la evolución de la temperatura durante las 6 horas de simulación para los puntos del caso a) (25,10) y (5, 25).



Figura 6.9 Isotermas a 1.5 horas de comenzada la simulación. Coeficiente de dispersión D = 25



Figura 6.10 Isotermas a 2:45 horas de comenzada la simulación. Coeficiente de dispersión D = 25

Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa



4

Figura 6.11 Evolución de la temperatura en el tiempo durante la simulación. Coeficiente de dispersión D =25

En la **Figura 6.11**, se aprecia claramente el efecto de los coeficientes de dispersión sobre el máximo valor de la temperatura, ya que si se compara dicho valor con el de la **Figura 6.8** se observa que la temperatura ha disminuido. Al incrementar dichos coeficientes se provoca una mayor dispersión de las concentraciones en el modelo.

Por otra parte en la **Figura 6.11** se aprecia con mayor claridad el efecto de la marea sobre el canal, ya que cuando la marea sale del canal las velocidades disminuyen, provocando que la mancha de temperatura retroceda y disminuya. Éste fenómeno demuestra la influencia de la velocidad de la corriente sobre el modelo de transporte de masa.

¢

6.2 Aplicación de los modelos hidrodinámico y de advección-dispersión en el río Tecolutla, Ver.

6.2.1 Introducción

El río Tecolutla se encuentra en el municipio de Tecolutla, Veracruz, cruza los estados de Puebla y Veracruz, dentro de la región totonaca, en las coordenadas 20° 29' latitud norte y 97° 00' longitud oeste. El clima es templado húmedo con abundantes lluvias en verano y todo el año en la parte alta de la cuenca; cálido húmedo y subhúmedo con abundantes lluvias en verano y todo el año en la cuenca baja. Temperatura media anual de 14-26 °C. Precipitación total anual de 1 200 hasta más de 4 000 mm; evaporación de 1 064-1 420 mm.

Las principales actividades económicas en el río son pesquerías de ostión, peces y crustáceos; actividad turística; agricultura de temporal y cultivos de vainilla, café, pimienta y cítricos. Además de presencia de recursos estratégicos como petróleo, abastecimiento de agua para riego y uso urbano. La principal problemática que existe en el río es la contaminación por agroquímicos que afectan el cultivo de la vainilla, además de coliformes en las cuencas baja y media. A pesar de esto se considera uno de los ríos mejor conservados de Veracruz, sin embargo hacen falta conocimientos generales de la zona.

La Cuenca del río Tecolutla se ubica dentro de la región No. 27, que se localiza en la parte centro del Golfo de México y está limitada al Norte y al Oeste por la región No. 26 (Pánuco), al Sur por las regiones No. 18 (Balsas) y No. 28 (Papaloapan) y al Este por el Golfo de México. Dicha cuenca se encuentra entre los paralelos 19° 30' y 20° 30' de latitud norte, y entre los meridianos 97° 98° 15' de Longitud Oeste del Meridiano de Greenwich. Políticamente está ubicada en los estados de Tlaxcala, Hidalgo, Puebla y Veracruz; su área de drenaje hasta la desembocadura en el Golfo de México se estima en 9,106 Km2.

Esta cuenca frecuentemente se encuentra afectada por ciclones tropicales que se forman en el mar Caribe y en el Golfo de México y que dan lugar a altas precipitaciones concentradas que producen avenidas considerables; también es afectada por las masa de aire polar, que generalmente se presenta entre los meses de septiembre a marzo y que en la región se les denominan "Nortes". La corriente principal, que es la de mayor longitud, se origina entre los Estados de Tlaxcala y Puebla y se le conoce con el nombre de río Apulco; con una dirección sensiblemente hacia el norte recibe la aportación de numerosos arroyos torrenciales y la de los ríos Xiucayucan, Zempoala y más adelante la contribución de los ríos Necaxa y Ajajalpan, que ya unidos forman el Río Tecolutla que desemboca a través de la Barra del mismo nombre. En la **Figura 6.12** se presenta un fotografía aérea de la desembocadura del río, en ella se observan las comunidades de Gutiérrez Zamora y Tecolutla (Desembocadura).





TESIS CON FALLA DE ORIGEN



6.2.2 Especificaciones del problema

La finalidad de éste caso es analizar una descarga de agua de 10 m³/s con un incremento de temperatura de 10° C, sobre el río Tecolutla a la altura de la población de Gutiérrez Zamora, y observar el proceso de advección – dispersión del contaminante. Para lograr esto se utilizará un modelo hidrodinámico bidimensional del río.

6.2.3 Información de campo

6.2.3.1 Batimetría

La CFE a través del Departamento de Oceanografía realizó un levantamiento batimétrico con ecosonda desde una sección ubicada 200 m. aguas arriba del puente Tecolutla hasta otra sección localizada 100 m. aguas abajo de la Isla que se encuentra entre la desembocadura del río Tecolutla y la población de Gutiérrez Zamora, en septiembre de 2001. Los seccionamientos se realizaron a cada 50 y 25 m. La batimetría se presenta en la **Figura 6.13** la cual esta en coordenadas UTM.

6.2.3.2 Medición de los níveles de marea en el cauce

Al observar el comportamiento hidráulico del río se determinó que era necesario medir los niveles de la marea en el río, ya que éste fenómeno es el que tiene mayor influencia sobre el río. De ésta manera para determinar los niveles de marea en el río el Departamento de Oceanografía de la CFE instaló un limnígrafo, aproximadamente 200 m aguas abajo del puente Tecolutia.; la gráfica de marea registrada se presenta en la **Figura 6.14**.

Como se observa en la **Figura 6.14**, se tuvieron algunas interrupciones en el período de medición debido a una falla técnica en el reloj del limnígrafo. Sin embargo con la información disponible se dedujo que el tipo de marea era principalmente diurna. Además se aprecian algunos picos en los niveles del agua producto muy probablemente de un incremento en el caudal del río por la incidencia de una avenida, ya que de acuerdo con la información de la estación hidrométrica el remolino, en octubre suelen presentarse éste tipo de fenómenos.

Por otra parte también se obtuvieron mediciones de marea aguas abajo de la isla, sólo que estas mediciones no eran cada hora como las realizadas con el limnígrafo, sino que se tomaban las lecturas a las 6:30 am, 12:30 pm y 6:30 pm, en la **Tabla 6.1**, se muestran los resultados de estas mediciones.


Figura 6.13 Batimetría del río Tecolutla. Septiembre de 2001

TE	SIS	CON
FALLA	DE	ORIGEN

Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa



Figura 6.14 Resultados de las mediciones con limnígrafo en el río Tecolutla

Dia		Lectura	
01-Ago-00	06:30	12:30	18:30
02-Ago-00	0.77	0.35	0.3
03-Ago-00	0.7	0.65	0
04-Ago-00	0.7	0.65	0.5
05-Ago-00	0.7	0.55	0.45
06-Ago-00	0.65	0.52	0.4
07-Ago-00	0.6	0.52	0.5
08-Ago-00	0.6	0.55	0.48
09-Ago-00	0.63	0.57	0.5
10-Ago-00	0.63	0.55	0.51
11-Ago-00	0.63	0.55	0.48
12-Ago-00	0.53	0.4	0.46
13-Ago-00	0.55	0.36	0.3
14-Ago-00	0.65	0.5	0.45
15-Ago-00	0.6	0.48	0.4
16-Ago-00	0.55	0.4	0.35
17-Ago-00	0.55	0.4	0.38
18-Ago-00	0.55	0.45	0.38
19-Ago-00	0.5	0.43	0.35
20-Ago-00	0.6	0.53	0.45
21-Ago-00	0.57	0.48	0.5



Tabla 6.1 Lecturas tomadas por una regla ubicada aguas abajo de la isla (sigue..)

22-Ago-00	0.58	0.5	0.45
23-Ago-00	0.5	0.45	0.38
24-Ago-00	0.55	0.47	0.4
25-Ago-00	0.45	0.5	0.47
26-Ago-00	0.58	0.52	0.45
27-Ago-00	0.55	0.5	0.38
28-Ago-00	0.5	0.42	0.35
29-Ago-00	0.52	0.45	0.4
30-Ago-00	0.54	0.47	0.42
31-Ago-00	0.52	0.43	0.38
01-Sep-00	0.63	1.02	0.8
02-Sep-00	0.62	0.55	0.46
03-Sep-00	0.68	0.52	0.42
04-Sep-00	0.6		

6.2.4 Información de Gabinete

De la revisión de la información disponible de la zona en estudio, se encontró que la estación hidrométrica El Remolino, ubicada sobre el río Tecolutla, aguas arriba de la zona de estudio, resulta ser la más cercana. A continuación se presenta la información reportada por dicha estación. En la **Tabla 6.2** se tienen los gastos medios reportados por dicha estación hidrométrica. De dicha tabla se observa que los gastos medios anuales se encuentran en el rango de 100 a 300 m³/s.

	Año	Gasto (m ³ /s)	Año	Gasto (m³/s)
	1962	120.50	1981	279.49
	1963	132.53	1982	140.00
	1964	151.45	1983	168.10
	1965	198.48	1984	253.00
	1966	195.24	1985	190.00
	1967	165.09	1986	190.47
	1968	174.60	1987	157.31
	1969	223.30	1988	172.90
	1970	171.25	1989	166.50
	1971	201.10	1990	226.00
	1972	213.00	1991	212.47
	1973	200.20	1992	272.00
	1974	200.80	1993	211.00
	1975	187.37	1994	115.70

Tabla 6.2 Gastos medios registrados en la estación hidrométrica, El Remolino. (sigue ...) ł

1976	277.00	1995	171.92
1977	138.00	1996	139.00
1978	192.85	1997	154.73
1979	185.52	1998	211.00
1980	148.92		

Tabla 6.2. Gastos medios registrados en la estación hidrométrica, El Remolino

6.2.5 Descripción del escenario y condiciones de frontera hidrodinámicas.

El escenario a simular corresponde a una situación teórica dado que desgraciadamente no se cuenta con mediciones simultáneas en las fronteras sur y este, sin embargo esta simulación hidrodinámica nos da una idea del comportamiento del flujo en el río.

El escenario a simular corresponde a las condiciones en las cuales se realizaron las mediciones con la regla de mareas aguas abajo de la isla, partiendo de que el tipo de marea que se presenta es diurna, esta información se dedujo de la curva de marea medida por el limnígrafo.

Dado que no se tienen datos de aforo de gastos en 2001 en la estación El Remolino, se utilizarán los datos estadísticos de dicha estación hidrométrica durante el mes de octubre, que es cuando se realizaron las mediciones de marea en el cauce. En la **Tabla 6.3** se tienen los gastos aforados el día 4 de octubre de 1962 a 1998.

Apoyándose en la gráfica de marea medida (**Figura 6.15**) se observa que no está influenciada por un gasto extraordinario en el río, por lo que para efectos de simulación se eligió un gasto normal. El gasto considerado es el de 1995, es decir 102 m³/s.

Año	Q (m ³ /s)						
1962	818	1971	478	1980	379	1989	184
1963	127	1972	171	1981	477	1990	213
1964	244	1973	171	1982	125	1991	376
1965	314	1974	548	1983	_233	1992	371
1966	187	1975	601	1984	409	1993	1175
1967	269	1976	371	1985	309	1994	168
1968	338	1977	463	1986	248	1995	102
1969	245	1978	339	1987	223	1996	293
1970		1979	133	1988	272	1997	261
				-		1998	367

Q Promedio 333

Tabla 6.3 Gastos medidos el día 4 de octubre de 1962 a 1998

Aguas abajo del río Tecolutla, se utilizará una onda de marea diurna promedio con amplitud de 0,15 m, como la que se muestra en la **Figura 6.15**, además de que dicha frontera se considera totalmente absorbente. Establecidas las dos fronteras, se realizará la simulación para el 4 de octubre de las 00:00 horas al 5 de octubre a las 00:00 horas, es decir 24 horas.





Figura 6.15 Curva de marea utilizada como condición de frontera aguas abajo

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

146

¥

6.2.6 Condiciones iniciales y de frontera para el modelo de advección dispersión

La temperatura de la descarga es de 10 °C, y el gasto de 20 m³/s. La condición inicial para la simulación es de 0° C, para todo el campo de flujo. La simulación de advección dispersión comienza 3 horas después de iniciado el hidrodinámico y el tiempo total es de 6 horas. Las coordenadas UTM donde se aplica la descarga son aproximadamente: $X = 700\ 000\ Y = 2\ 263\ 000$

Los coeficientes de dispersión utilizados son los siguientes:

 $DX = 10 \text{ m}^2/\text{s}$ $DY = 10 \text{ m}^2/\text{s}$

6.2.7 Discretización espacial y temporal

La longitud del río que se simulará es de aproximadamente 4.5 km, siendo la máxima profundidad de 13 m, la cual se encuentra en el brazo izquierdo de la bifurcación. El ancho promedio del río es de 300 m, sin embargo en los brazos este ancho se reduce considerablemente en algunos tramos a 30 metros.

De acuerdo con lo anterior se eligió una resolución de la malla de 5 m en ambas direcciones, resultando 49 000 nodos con 700 en la dirección oeste-este y 700 en la dirección sur-norte.

De acuerdo con la máxima profundidad, con el espaciamiento de celdas y tomando en cuenta que, para incluir los términos no lineales al resolver las ecuaciones de gobierno de movimiento el número de Courant debe ser menor que 1, se optó por utilizar un paso de tiempo de 0.4 segundos. Además con éste paso de tiempo se evitan inestabilidades al integrar las ecuaciones del modelo hidrodinámico. El tiempo total a modelar son 24 horas, es decir un ciclo completo de marea.

6.2.8 Resultados hidrodinámicos

En la **Figura 6.17**, se tiene la evolución de los niveles del agua en seis puntos del cauce del río, el primero se encuentra ubicado aguas abajo de la frontera sur, dos en el brazo izquierdo y otros dos en el brazo derecho y finalmente el último aguas abajo de la isla; estos puntos se utilizaron para observar los niveles del agua durante la entrada y salida de la marea.



Figura 6.17 Evolución de los niveles del agua durante toda la simulación

En la **Figura 6.17** se aprecia claramente el efecto que tiene la isla sobre la onda de marea y el flujo del río, ya que se observa que las curvas de marea aguas arriba de la isla se modifican en fase y amplitud. Este fenómeno provoca un remanso, sobreelevando el nivel del agua y disminuyendo la velocidad del flujo aguas arriba de dicha isla.

En la **Figura 6.18**, se presenta el comportamiento de las velocidades del flujo en los puntos citados. Al comparar los puntos que se encuentran en los extremos, es decir el de aguas abajo de la frontera sur y el de aguas abajo de la isla, se observa que las velocidades aguas arriba de la isla son menores que la que se presentan aguas abajo de la misma, tal como se mencionó anteriormente.

ł



Figura 6.18 Evolución de las velocidades del flujo durante toda la simulación

Pro otra parte al bajar la marea, las velocidades del flujo en todo el sistema se ven incrementadas debido a que temporalmente desaparece el tapón hidráulico provocado por dicha onda de marea.

En las **Figuras 6.19** y **6.20** se presenta el campo de velocidades después de 12 y 24 horas de simulación respectivamente, nótese que en general las velocidades son menores que 0.55 m/s, presentándose las máximas en la parte más angosta del brazo izquierdo; se observa que justo donde comienza la bifurcación en el brazo derecho las velocidades son del orden de 0.2 a 0.25 m/s, además se aprecia que la mayor parte del flujo circula por el brazo izquierdo.

Charles and the second



Modelo Hidrodinámico Integrado en la Vertical de Transporte de Masa



Figura 6.19 Campo de velocidades después de 12 horas de simulación





Figura 6.20 Campo de velocidades después de 24 horas de simulación

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

6.2.9 Resultados de advección - dispersión

Con los resultados del modelo hidrodinámico se simuló la descarga de la temperatura, la cual comenzó 3:00 horas después de iniciada la simulación hidrodinámica. La intención de este caso es la de mostrar que el modelo de advección-dispersión funciona para contornos batimétricos reales ya que desgraciadamente no se cuenta con mediciones de campo. Los resultados de las curvas de igual temperatura se presentan en las **Figuras 6.22** a **6.24**. Dado que el área de influencia de la descarga es pequeña, se presenta un acercamiento de la misma con la finalidad de apreciar a mayor detalle el fenómeno.



Figura 6.22 Isotermas 3:30 horas después de iniciada la simulación hidrodinámica. Coeficiente de dispersión D = 10





Figura 6.23 Isotermas 6:00 horas después de iniciada la simulación hidrodinámica. Coeficiente de dispersión D = 10

En las Figuras 6.22, 6.23 y 6.24, se aprecia como la temperatura se va dispersando, sin embargo llega un momento en el cual la mancha de temperatura no crece, debido a que la dispersión aumenta con el tiempo hasta un cierto momento, a partir del cual los valores de los coeficientes de dispersión se mantienen constantes. Es decir llega un instante en el cual la temperatura es transportada sin dispersarse.





Figura 6.24 Isotermas 12:00 horas después de comenzada la simulación hidrodinámica. Coeficiente de dispersión D = 10



Resumen

Se analizaron de manera detallada los resultados y alcances de los modelos numéricos hidrodinámico y de transporte de masa, se presentaron dos casos de aplicación.

En el primero, el cual consistió en un análisis de sensitividad se aprecia claramente el efecto de los coeficientes de dispersión sobre el contaminante, en éste caso la temperatura. Al comparar los valores obtenidos para diferentes coeficientes de dispersión se observa que el valor de la temperatura disminuye al incrementar dichos coeficientes, provocando una mayor dispersión en las concentraciones del modelo.

Por otra parte, se mostró con claridad el efecto de la marea sobre el canal, ya que cuando la marea sale del canal las velocidades disminuyen, provocando que la mancha de temperatura retroceda y disminuya. Éste fenómeno demuestra la influencia de la velocidad de la corriente sobre el modelo de transporte de masa.

También se observa que en el punto aguas abajo de la frontera sur, el nivel del agua durante toda la simulación es mayor que el resto de los demás, esto es porque la isla provoca un remanso, sobreelevando el nivel del agua y disminuyendo la velocidad del flujo aguas arriba de la isla.

En cuanto al modelo de transporte de masa para el caso del río Tecolutla se observó como la temperatura se va dispersando hasta un momento en el cual la mancha de temperatura no crece, esto debido a que la dispersión aumenta con el tiempo hasta un cierto instante, a partir del cual los valores de los coeficientes de dispersión se mantienen constantes. Es decir se llega a un punto en el tiempo en el cual la temperatura es transportada sin que se disperse.

CONCLUSIONES GENERALES

Para fluidos incompresibles y flujos isotérmicos en un campo gravitacional, hay cuatro variables de flujo, u, v, w y p, las cuales aparecen en las ecuaciones de movimiento. En principio, las tres ecuaciones de movimiento más la de conservación de masa para fluidos incompresibles, son suficientes para obtener una solución cuando se especifican las condiciones iniciales y de frontera. El sistema completo de ecuaciones deberá satisfacer las condiciones de frontera, tanto cinemáticas como físicas. (Capítulo 1)

La difusión molecular es el proceso mediante el cual la materia se transporta por la movilidad molecular. Si el fluido está en un estado de movimiento convectivo, se debe tener cuidado en distinguir de movimientos laminares y turbulentos. Por ejemplo, si el fluido es turbulento, el intercambio macroscópico de partículas de fluido generalmente "eclipsará" al proceso de intercambio molecular. (Capítulo 2)

Los esquemas explícitos generalmente restringen el máximo valor de ∆t para obtener soluciones estables de las ecuaciones diferenciales parciales. Los esquemas implícitos a menudo logran una estabilidad incondicional a cambio de mayor tiempo de calculo, sin embargo los resultados sugieren que se utilice una malla muy fina para obtener una mejora significante en la precisión. (Capítulo 3)

Para ecuaciones diferenciales parciales multidimensionales, por ejemplo, la ecuación de difusión, los esquemas implícitos son más efectivos que los esquemas explícitos, principalmente debido a su comportamiento estable, particularmente si la precisión de la solución espacial es más crítica que la solución temporal. (**Capítulo 3**)

En problemas donde domina la convección sobre la difusión se presentan oscilaciones numéricas que no son propias del fenómeno físico, sin embargo al utilizar los operadores de masa, los cuales son una característica del método del elemento finito, proporcionan un mecanismo para ejercer un control sobre dichas oscilaciones. (Capítulo 3)

Al utilizar un modelo hidrodinámico es necesario conocer las hipótesis bajo las cuales fue creado, eso con la finalidad de realizar una correcta interpretación de los resultados dei modelo matemático. La precisión de un modelo de esta índole está supeditada a las condiciones iniciales y de frontera, por lo que es muy recomendable realizar una campaña de campo para obtener todos los datos que se utilizarán como base para la modelación. (Capítulo 4)

Cuando la estructura del flujo está bien definida por un perfil logarítmico de velocidades y Δx es del mismo orden de magnitud de la profundidad h, la fórmula de Elder es válida para la estimación de la viscosidad efectiva y los coeficientes de dispersión. (Capítulo 5)

Si la configuración del fondo y la presencia de efectos tridimensionales ocasionan circulaciones y se emplean espaciamientos de malla muy grandes (>500m), se pueden utilizar coeficientes de dispersión proporcionales a Δx o h. (**Capítulo 5**)

De los casos presentados y en específico el del análisis de sensitividad se aprecia claramente el efecto de los coeficientes de dispersión sobre el contaminante, en éste caso la temperatura, ya que al comparar los valores obtenidos para diferentes coeficientes de dispersión se aprecia que el valor de la temperatura disminuye al incrementar dichos coeficientes, provocando una mayor dispersión en las concentraciones del modelo. (Capítulo 6)

FUTURAS LÍNEAS DE TRABAJO

- > Extender el modelo de Advección-Dispersión a tres dimensiones.
- Implementarle al modelo de Advección-Dispersión módulos de calidad de agua y de transporte de sedimentos en suspensión de fondo fijo.
- Estudiar y agregar esquemas numéricos para comparar y en su caso utilizar el más apropiado de acuerdo con el problema a resolver.

t

ANEXO 1. Método de Thomas para resolver sistemas tridiagonales

El uso de formulaciones en diferencias finitas de tres puntos ó elemento finito con interpolación lineal conduce, a una estructura tridiagonal. Al utilizar esquemas en diferencias finitas, ó de elemento finito de mayor orden produce sistemas pentadiagonales o mayores. Un método para resolver dichos sistemas de ecuaciones es a través del algoritmo de Thomas. A manera de ejemplo se tiene a continuación el siguiente algoritmo.

$$-(1+0.5R_{cell})v_{i-1} + 2v - (1-0.5R_{cell})v_{i+1} = 0$$
 A1.1

El cual aplicado en cada nodo de la malla, resulta el siguiente sistema

$$\begin{bmatrix} b_{1} & c_{1} & & & & \\ a_{2} & b_{2} & c_{2} & & & \\ & & \ddots & \ddots & & & \\ & & a_{i} & b_{i} & c_{i} & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & a_{N} & b_{N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1} \\ v_{2} \\ \vdots \\ v_{i} \\ \vdots \\ v_{N-1} \\ v_{N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{1} \\ d_{2} \\ \vdots \\ v_{i} \\ \vdots \\ d_{N-1} \\ d_{N} \end{bmatrix}$$
A1.2

donde

$$a_i = -(1+0.5R_{cell})$$

b = 2

 $c_i = -(1-0.5R_{cell})$

Los valores que no son cero de (A.2) están asociados con sus respectivos términos, d_1 y d_N son las condiciones de frontera. Todos lo demás términos son cero. El algoritmo de Thomas para resolver (A.2) consiste en dos partes (**Figura A.1.1**).

Primero (A.2) se manipula de la siguiente manera.

 $\begin{bmatrix} 1 & c'_{1} & & & & \\ & 1 & c'_{2} & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & 1 & c'_{1} & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & 1 & c'_{N-1} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{1} \\ \cdot \\ \cdot \\ v_{i} \\ \cdot \\ \cdot \\ v_{N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d'_{1} \\ \cdot \\ \cdot \\ d'_{i} \\ \cdot \\ \cdot \\ d'_{N} \end{bmatrix}$

donde los coeficientes ai han sido eliminados y los coeficientes bi son unitarios.



Figura A.1.1 Diagrama de flujo del algoritmo de Thomas para resolver un sistema de ecuaciones tridiagonales

Para la primer ecuación se tiene

$$c'_{1} = \frac{c_{1}}{b_{1}},$$
 $d'_{1} = \frac{d_{1}}{b_{1}}$ A1.3

y para la ecuación general

$$c'_{1} = \frac{c_{i}}{b_{i} - a_{i}c'_{i-1}},$$
 $d'_{i} = \frac{d_{i} - a_{i}d'_{i-1}}{b_{i} - a_{i}c'_{i-1}}$ A1.4

En (A.4) se realizó un barrido hacia adelante (**Figura A.1.1**). El segundo paso consiste en una substitución hacia atrás (Barrido hacia atrás en **Figura A.1.1**)

 $V_N = d'_N$

У

 $v_i = d'_i - v_{i+1} c'_i$

El algoritmo de Thomas es fácil de resolver, ya que solamente requiere 5N-4 operaciones (multiplicaciones y divisiones).

Bibliografía

1 Computational Techniques for Fluid Dynamics. Vol.1. Fundamental and General Techniques. Second Edition. (1991).

- 2. J. W. Thomas, Numerical Partial Differential Equations. Finite Difference Methods
- 3. M. B. Abbot, W. A. Price, Coastal, Estuarial and Harbour Engineers'. Reference Book
- 4. R. B. Bird, Fenómenos de Transporte. Segunda Edición
- 5. James W. Daily, Donald R. F. Halerman, Dinámica de Fluidos con aplicaciones en Ingeniería
- 6. Confederación Hidrográfica del Norte, Metodología de Estudios de los Saneamientos Litorales, Oviedo (1995)
- 7. Dale R. Durran, Numerical Methods for Wave Equations in Geophysical Fluids Dynamics
- 8. Malcom L Spaulding. Estuarine and Coastal Modeling
- 9. Irving H. Shames. Mecánica de Fluidos