Ariel Fraidenraich [1], Maximiliano J. Pérez [1], Adolfo E. Altenberg [2]

[1] Departamento de Ingeniería - Universidad de Belgrano. Correo electrónico: ariel.fraidenraich@comunidad.ub.edu.ar

[2] Facultad de Ingeniería, UdeMM.

INGENIERÍA

Cálculo del transporte y dispersión de un contaminante arrojado en una corriente de agua

1. Resumen

El estudio de los mecanismos de transporte, dispersión y reacción es de fundamental importancia para el tratamiento del problema de la inyección de desechos contaminantes en una corriente de agua. En general, en los enfoques numéricos se realiza un análisis basado en la conservación de masa y momento para el fluido y el contaminante. Para incluir problemas donde la convección no sea dominante y para contaminantes no reactivos, se llega a un modelo no lineal basado en la ecuación de Burgers-Fisher que generaliza el modelo lineal de convección dominante presentado anteriormente por los autores de este trabajo. La resolución de la ecuación de convección difusión se realiza usando el método SUPG (Streamline Upwinding Petrov Galerkin). Este modelo se aplica como ejemplo a un canal con velocidad de arrastre uniforme al cual se introduce una sustancia contaminante caracterizada por su coeficiente de dispersión. Los resultados de la resolución numérica se presentan mediante gráficos de la distribución espacial y temporal de la concentración del contaminante y se verifica que son consistentes con los reportados en la literatura.

Palabras Clave: *Ecuación de Burgers-Fisher, Ecuación de Advección-Difusión, SUPG (Petrov Galerkin), Transporte y difusión de contaminantes.*

2. Introducción

El estudio de los mecanismos de transporte, dispersión y reacción es de fundamental importancia para el tratamiento del problema de la inyección de desechos contaminantes en una corriente de agua. Para cuantificar el efecto de un contaminante caracterizado por sus coeficientes de difusión y de reacción en una corriente de agua se realiza un análisis basado en la conservación de masa y momento en un sistema bifásico que incluye a la corriente de arrastre (agua) y al contaminante[1]. La ecuación de Burgers-Fisher presenta un modelo general que describe la relación entre los mecanismos de reacción y de transporte convectivo y difusivo. Recientemente, A. Fraidenraich et al. aplicaron este planteo a la resolución del problema del transporte y difusión de un contaminante en una corriente de agua de velocidad uniforme en donde consideraron que los términos convectivos (arrastre de la corriente de agua) son predominantes respecto a los difusivos y reactivos. [2] En efecto, en el caso estudiado se tomó como hipótesis que el número hidrodinámico de Pèclet es >>1 (5.0), lo que avala dicha aproximación. Esto lleva a un modelo lineal para el transporte de contaminantes en la situación descrita.

Si se quieren incluir problemas donde la convección no sea dominante (pensar en el problema de la difusión de una pluma de contaminante en un curso de agua con velocidad de arrastre pequeña o casi nula, como podría ser el caso del Río de la Plata o un lago o costa marítima) el planteo de la ecuación de Burgers-Fisher deberá incluir toda la influencia de los términos difusivos. Si no se consideran

1 Roig, B., "One-Step Taylor Galerkin Methods for convection diffusion problems", *Computational and Applied Mathematics*, Vol. 204, pp. 95-101, 2007.

2 Fraidenraich, A., Pérez M. J., Altenberg, E. A, *Un Análisis de Aplicación General para el Cálculo de Transporte y Difusión del Contaminante Arrojado en una Corriente de Agua, Perspectivas*; Revista Científica de la Universidad de Belgrano, Vol. 1, pp. 2218- 2246, 2018

las reacciones químicas del contaminante, se llega al planteo de un modelo no lineal que generaliza el planteo lineal realizado anteriormente.
Para la resolución de este modelo no lineal planteamos una discretización de la ecuación diferencial por medio del método de los elementos finitos en un régimen convectivo difusivo utilizando el método SUPG (Streamline Upwinding Petrov Galerkin). Presentaremos la solución del problema no lineal aplicado al caso de un canal de longitud y velocidad de arrastre determinadas en función del tiempo, cuya consistencia con los resultados reportados en la literatura es verificada.

3. Fundamentos y metodología

La ley de conservación en un medio fluido incompresible puede asimilarse a un caso particular de Burgers-Fisher. [3, 4] Para problemas donde la convección no es dominante y no se tienen en cuenta los efectos reactivos del contaminante se llega al planteo de un modelo no lineal que generaliza el planteo lineal realizado anteriormente por los autores de este trabajo

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+\phi\frac{\partial\phi}{\partial x}-k\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}=0 \quad (1)$$

donde, ϕ es la concentración del contaminante y k es la difusividad
Las condiciones iniciales y de borde del problema son:

$$\phi(x.0)=\phi_I(x), 0<x<L\ \square(L.t)=\phi_L(t), 0<t<T\ \square(0.t)=\phi_0(t), 0<t<T \quad (2)$$

La ecuación (1), junto con las condiciones iniciales y de borde puede ser numéricamente resuelta utilizando la técnica de SUPG.[5, 6] Integrando la ecuación en el dominio espacial tenemos una ecuación diferencial ordinaria dada por

$$M\Phi^{\cdot}-D(\Phi)+K\Phi=0 \quad (3)$$

con M matriz de masa global dada por,

$$m_{ij}=\int_0^h \left(\Psi_i+\Upsilon(\phi)\frac{h}{2}\frac{\partial\Psi_i}{\partial x}\right)\Psi_j dx, i,j=1,2$$

donde Ψ_i y Ψ_j son las funciones de base elemental y

$$\Upsilon(\phi)=\frac{e^{\frac{h\Phi}{2k}}-e^{\frac{-h\Phi}{2k}}}{e^{\frac{h\Phi}{2k}}+e^{\frac{-h\Phi}{2k}}}-\frac{1}{\frac{h\Phi}{2k}}$$

con h representando al incremento elemental espacial, $D(\Phi)$, es la matriz convectiva global dada por

$$D_j(\phi)=\frac{1}{2}\int_0^h \left(\sum_{i=1}^{2}\Psi_i\Phi_i\right)^2\frac{\partial\Psi_j}{\partial x}dx, i,j=1,2$$

siendo K la matriz global de difusividad cuyos elementos vienen dados por

$$k_{i,j}=k\int_0^h \frac{\partial\Psi_i}{\partial x}\frac{\partial\Psi_j}{\partial x}dx, i,j=1,2$$ $$k_{i,j}=k\int_0^h \frac{\partial\Psi_i}{\partial x}\frac{\partial\Psi_j}{\partial x}dx, i,j=1,2$$

Para resolver la ecuación (3) que es un esquema de ecuaciones diferenciales ordinarias usamos el método de multipasos de Jameson. [7]

3 Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L. *The Finite Element Method.* 6th Ed., Vol. 3, Butterworth-Heinemann, Oxford, 2005.

4 Chandraker, V., Ashdrish, A., Jayaraj, S., *Numerical Treatment of Burgers Fisher equations*, Procedia Technology Vol. 25 pp 1217-1225, 2016

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

6 Codina, R. *A Finite Element Formulation for the Numerical Solution of the Convection-Diffusion Equation. Monografía CIMNE N° 14, International Center for Numerical Methods in Engineering*, enero 1993.

7 Hirsch C., *Numerical Computation of Internal and External Flows*, Volume 2, John Wiley & Sons, New York, 1997.

4. Resultados

Para ejemplificar este estudio, se aplica el modelo dado por la ecuación (3) al caso de una corriente de agua moviéndose en un canal de longitud *L*. La Tabla 1 muestra los parámetros físicos y geométricos del problema.

Descripción	Nomenclatura	Valor
Tiempo de simulación total	T	1 s
Longitud del canal	L	1 m
Difusividad	k	0.001 m^2/s
Longitud elemental	h	0.1 m
Intervalo temporal	Δt	0.0625 s

Tabla 1. Parámetros geométricos y físicos

La Figura 1 muestra la evolución de las concentraciones del contaminante a lo largo del canal para varios instantes de tiempos. Se observa que la velocidad máxima se mueve hacia la salida del canal y decrece temporalmente. Estos resultados coinciden con los de Codina.

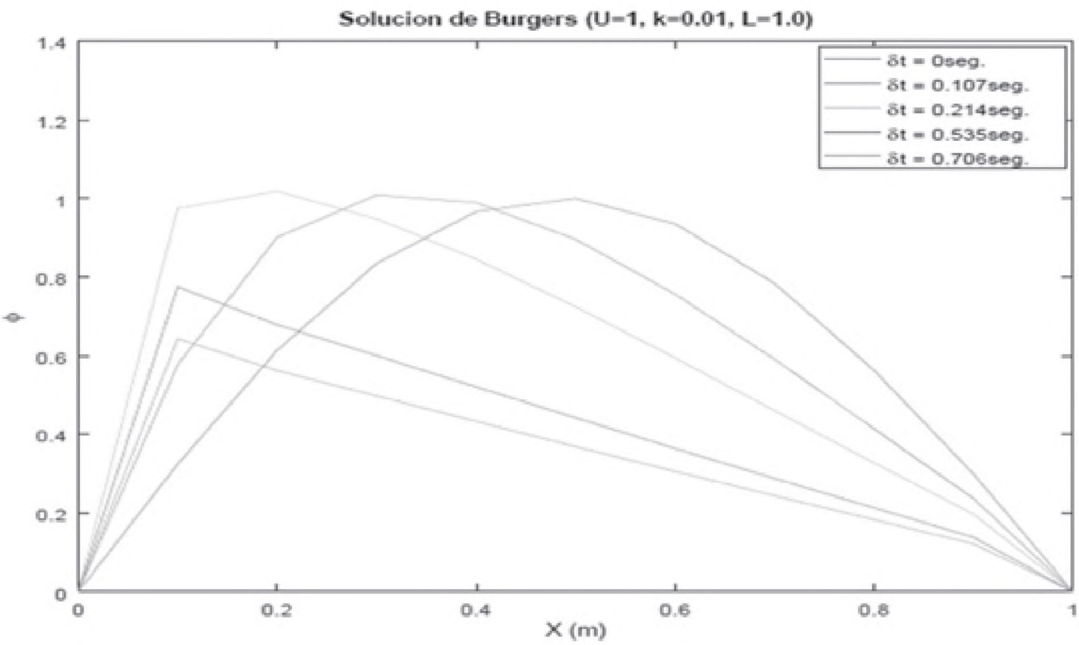

Figura 1: Evolución de la concentración del contaminante

5. Conclusiones

Se pudo generalizar el tratamiento del problema de convección difusión para el caso de difusión dominante, pudiéndose comprobar que los resultados son compatibles con los reportados en la literatura. En la solución obtenida se observa una capa límite numérica muy pronunciada a la salida del canal ($x=0$), lo que se evidencia en una mayor pendiente de la solución.