

Solución de la ecuación de convección-difusión mediante las funciones de base radial multicuádricas

Solution of Convection-Diffusion Equation by Multiquadric Radial Basis Function

Leidy Johana Gaviria Posada¹
Andrés Felipe Hernández Marulanda²

¹Ingeniería Biomédica, Facultad de Ciencias Exactas y Aplicadas, Instituto Tecnológico Metropolitano Medellín, Colombia.
Email: leidygaviria186418@correo.itm.edu.co

²Facultad de Ingeniería Grupo de Investigación en modelamiento y simulación computacional, Universidad de San Buenaventura, Medellín, Colombia.
Email: andres.hernandez@usbmed.edu.co

 OPEN ACCESS



Copyright:

©2020. La revista *Ingenierías USBmed* proporciona acceso abierto a todos sus contenidos bajo los términos de la licencia creative commons Atribución no comercial SinDerivar 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0)

Tipo de artículo: Investigación.

Recibido: 18-05-2020.

Revisado: 18-20-2020.

Aprobado: 19-06-2020.

Doi: 10.21500/20275846.4727

Referenciar así:

L. J., Posada-Gaviria and A. F. Hernández-Marulanda, "Solución de la ecuación de convección difusión mediante las funciones de base radial multicuádricas," *Ingenierías USBMed*, vol. 11, no. 2, pp. 48-53, 2020.

Disponibilidad de datos:

todos los datos relevantes están dentro del artículo, así como los archivos de soporte de información.

Conflicto de intereses:

los autores han declarado que no hay conflicto de intereses.

Editor: Andrés Felipe Hernández.

Universidad de San Buenaventura,
Medellín, Colombia.

Resumen. En este paper se propone un algoritmo computacional que resuelve la ecuación de convección-difusión unidimensional estacionaria utilizando un método numérico basado en las funciones de base radial (RBF). Para la aplicación de este algoritmo fue necesaria la generación de diferentes valores del número de Peclet para obtener soluciones gráficas, que se compararon con la solución analítica reportada por Patankar.

Palabras Clave. Número de Peclet, funciones de base radial, función multicuádrica, convección-difusión.

Abstract. In this paper we propose a computational algorithm that solves the stationary one-dimensional diffusion-convection equation, using a numerical method based on radial base functions (RBF). For the application of this algorithm, it was necessary to generate different values of the Peclet number to obtain graphical solutions, which were compared to the analytical solution reported by Patankar.

Keywords. Peclet Number, Radial Basis Functions, Multiquadric Function, Convection-Diffusion

I. Introducción

En orden de disminuir el alto costo de la generación de malla, numerosas alternativas se han propuesto en las pasadas dos décadas. Los esquemas libres de malla son aquellos en que la solución se aproxima a un conjunto de nodos sin conectividad específica [1].

La ecuación de convección-difusión es importante para entender procesos de termodinámica, movimiento de fluidos o liberación de fármacos en la investigación biomédica [2]. Ha sido aplicada exitosamente en diferentes áreas de la ciencia y la ingeniería. Para resolverla se han implementado diversos métodos numéricos que varían en eficiencia y precisión [3]. El más utilizado es el de Galerkin [4]. La mayor limitación de la colocación por RBF es que al incrementar la cantidad de nodos o el parámetro de forma, el número de condiciones en la matriz correspondiente aumenta, lo cual puede generar problemas en la convergencia [5], [6].

Uno de los avances en el área es el método de Kansa [7], que fue de los primeros esquemas de colocación de fácil uso. Este contiene una falla en la simetría de la matriz de interpolación al colocar los límites [8]. Para remediar este problema algunos autores utilizan métodos de descomposición de dominios [9] u otros como la descomposición por matrices hermíticas propuesta por Fasshauer [10], [11].

Este trabajo plantea solucionar la ecuación de convección-difusión unidimensional estacionaria utilizando las funciones de base radial y el esquema de discretización numérica para resolver ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas, conocido como esquema upwind [12], [13], asociado tradicionalmente con el desarrollo de esta ecuación por el método de Crank-Nicholson [14].

Se creó un algoritmo computacional en Matlab que se entrega para libre uso. Además, se compararon los resultados con los encontrados en la literatura, especialmente con la solución analítica encontrada por Patankar [15], [16].

II. Modelos matemáticos

A. Ecuación de convección-difusión

Se parte de la ecuación en derivadas parciales:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + U \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

Donde $U = \frac{\rho\mu}{r}$ se conoce como el número de Peclet.

Se desea resolver el problema con condiciones tipo Dirichlet, con valores iniciales $u = 1$ en $x = 0$ y $u = 0$ en $x = 1$.

B. Funciones de base radial

Suponiendo que $f = f(x)$, $x \in \mathbb{R}^d$ es una función real definida en dimensiones que se buscan aproximar, donde la distribución de puntos es aleatoria. Una aproximación

a f vía funciones de base radial es una función S de la forma [17]:

$$S(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \Psi(|x - x_j|) + P \quad (2)$$

Donde N denota el número de puntos, α el vector de incógnitas, $\Psi: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ llamado núcleo radial y $|\cdot|$ la norma euclidiana.

La aproximación de f mediante el método de interpolación por funciones de base radial se expresa:

$$S(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \Psi(r_{ij}) + P \quad (3)$$

con $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2}$, donde el sistema de ecuaciones puede ser reescrito como:

$$S(x) = \sum_{j=1}^{N=3} \alpha_j \Psi_j(r_{ij}) + \alpha_4 + \alpha_5 x + \alpha_6 x^6 \quad (4)$$

Y en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \Psi & P \\ P^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

donde la matriz Ψ es de $n \times n$, λ de $n \times 1$ y f de $n \times 1$, y P es un polinomio de cualquier orden que acompaña la solución. En este trabajo se utilizó un polinomio de orden 2. La solución puede ser determinada si la matriz Ψ es no singular. Dentro de las funciones de base radial (FBR) se tienen las de soporte global y compacto, en el siguiente cuadro se muestran las más comunes [18]:

Tabla 1. Principales funciones de base radial empleadas normalmente.

Núcleo radial	Nombre
$\varphi(r) = r^{2d} \ln(r)$	Placa delgada
$\varphi(r) = \sqrt{r^2 + c^2}$	Multicuádrada
$\varphi(r) = \frac{1}{\sqrt{r^2 + c^2}}$	Inv. Multicuádrada
$\varphi(r) = e^{-\frac{r^2}{c^2}}$	Exponencial
$\varphi(r) = (1 - r)^4$	Wendland

C. Discretización

Partiendo de la definición de estencil como un arreglo ordenado de nodos y de la ecuación (1) se tiene que la propiedad física a determinar está conformada por la combinación lineal de coeficientes y valores de la función en cada nodo que compone el estencil.

$$T = \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 + \alpha_3 \phi_3 \quad (6)$$

En donde de forma matricial se puede saber que:

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix} = [\phi] \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} \quad (7)$$

Por definición de interpolación los valores de α están dados por el de la propiedad nodal y la matriz inversa:

$$[\phi][\alpha] = [T] \quad (8)$$

Como se conoce el valor de esos elementos, se debe expresar α en la forma:

$$\alpha = \phi^{-1} [T] \quad (9)$$

En donde el valor para cada coeficiente es:

$$[\alpha]_1 = [\phi]^{-1} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$[\alpha]_2 = [\phi]^{-1} \begin{bmatrix} T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} \quad (11)$$

Entonces, la ecuación de difusión está dada por:

$$\alpha_1 \frac{d^2 \phi_1}{dx^2} + \alpha_2 \frac{d^2 \phi_2}{dx^2} + \alpha_3 \frac{d^2 \phi_3}{dx^2} = 0 \quad (12)$$

Se crean nuevas variables que contienen la derivada de la función, lo cual permite resolver el sistema:

$$C_1 T_1 + C_2 T_2 + C_3 T_3 = 0 \quad (13)$$

$$C_1^* T_2 + C_2^* T_3 + C_3^* T_4 = 0 \quad (14)$$

En donde se tiene la matriz:

$$\begin{bmatrix} C_1 & C_2 & C_3 & 0 \\ 0 & C_1^* & C_2^* & C_3^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

Conformando un nuevo sistema de ecuaciones matriciales lineales que, por solución matricial, daría los valores de la propiedad en cada nodo que compone la matriz:

$$x = A \setminus b \quad (16)$$

III. Metodología

Se desarrolló un algoritmo computacional en Matlab que consta de una rutina principal que llama a otras subrutinas para la ejecución del código.

Se crea un estencil con 3 elementos para los nodos interiores y 2 elementos para las fronteras. Con base en esto se forma la matriz de solución final, que entrega los valores de la propiedad buscada en cada uno de los nodos a partir de los datos encontrados por medio de la ecuación matricial.

Esta rutina principal se generó empleando estructuras para la creación de los nodos y las coordenadas de la geometría.

Los archivos que se encuentran son:

Principal.m: es el programa que llama las demás subrutinas.

Fn_base: es la función que crea las funciones de base radial multicuádricas con para los estenciles de 3 elementos o interiores.

Fn_basel: es la función que crea las funciones de base radial multicuádricas con $c=0.8$ para los estenciles de 2 elementos o de fronteras.

Fn_norma: es la función que crea la distancia euclideana para la creación de las matrices de solución.

Primerap: calcula las derivadas de las funciones de base radial creadas, para la solución de la ecuación de convección-difusión.

Positive: utiliza el esquema upwind para crear el estencil cuando el número de Peclet es positivo.

Negative: utiliza el esquema upwind para crear el estencil cuando el número de Peclet es negativo.

Setup.exe: ejecuta el programa sin necesidad de entrar a principal.

IV. Resultados

Partiendo de la solución analítica reportada por Patankar [16] (Figura 1).

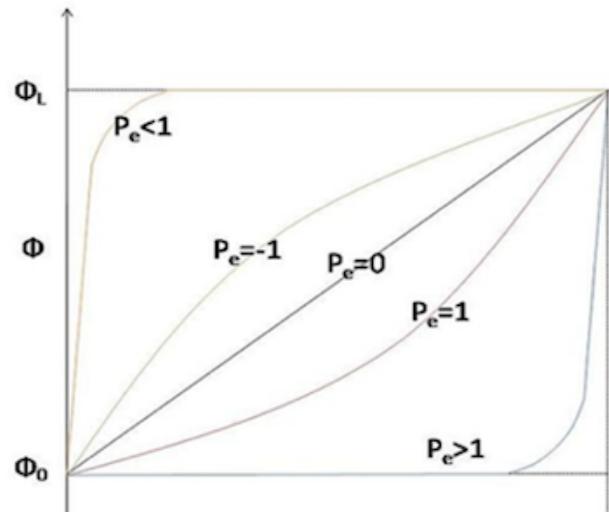


Figura 1. Solución analítica ecuación de convección-difusión variando Peclet

De acuerdo con la solución analítica conseguida por Pantankar [16], se replicaron los 5 casos registrados para ver cómo operaba el algoritmo computacional. Se obtuvieron los siguientes resultados:

Las simulaciones se corrieron con una interpolación local que, mediante la construcción del estencil, toma tres nodos interiores y dos nodos en la frontera. Los diferentes ensayos se realizaron con 100, 500 y 1000 nodos. Las gráficas obtenidas se plantearon con 500 nodos.

El primer caso es $-U < 1$. Esto representa el transporte dominado por la difusión. El fluido fluye en dirección de negativo. aumenta exponencialmente hasta un valor igual a 1 sin recorrer completamente la geometría de la simulación (Figura 2).

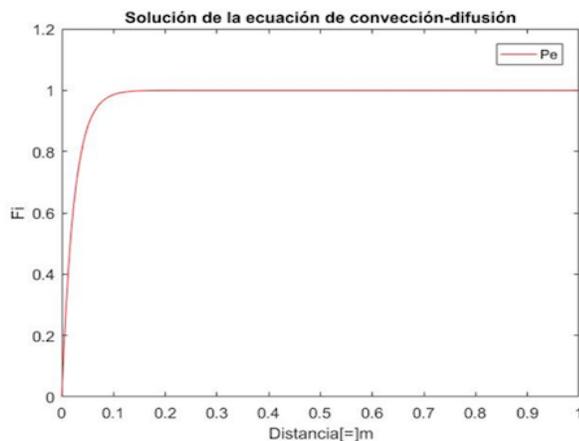


Figura 2. Solución numérica ecuación de convección-difusión variando Peclet < 1

El segundo es $U > 1$. Esto representa el transporte dominado por la convección. El fluido fluye en dirección de positivo. aumenta exponencialmente hasta un valor igual a 1 a medida que se desplaza por valor máximo de la posición, aunque el valor predominante es cero (Figura 3).

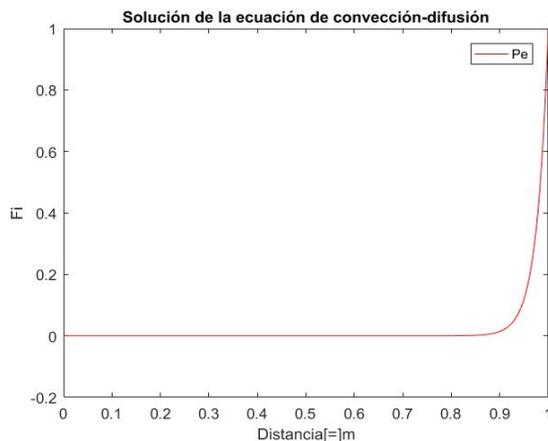


Figura 3. Solución numérica ecuación de convección-difusión variando Peclet > 1

El tercero es un comportamiento lineal cuando se tiene un valor en el número de Peclet igual a cero (Figura 4).

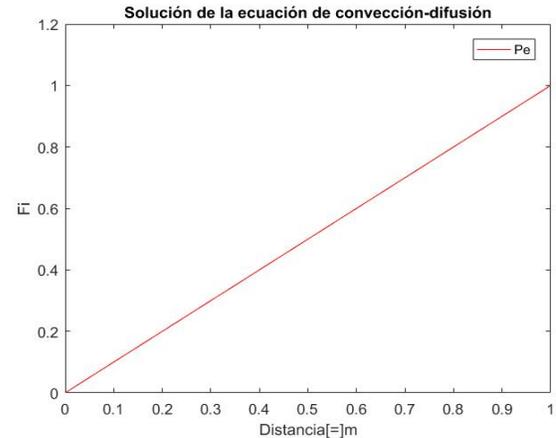


Figura 4. Solución numérica ecuación de convección-difusión variando Peclet $= 0$

Como se observa en los casos propuestos, el algoritmo efectúa la ecuación con el esquema upwind dependiendo de la variación en el número de Peclet. El resultado es igual al consignado por la literatura.

V. Discusión

Un algoritmo computacional que solucione la ecuación de convección-difusión utilizando el método numérico de funciones de base radial es una herramienta que permite entender el comportamiento asociado al transporte de un fluido o al de la ecuación de calor. Además, sirve como punto de partida para el estudio numérico de la formación de cardiomiopatías o para el proceso de liberación de fármacos utilizado en stent cardiovasculares.

Adicionalmente, combinado con técnicas de machine learning, puede ayudar a producir un modelo predictivo de fallas arteriales asociadas al flujo sanguíneo con desprendimiento de placa o transporte de trombos.

VI. Conclusiones

El uso del esquema de interpolación de funciones de base radial desarrollado por Kansa ha posibilitado la solución de ecuaciones en derivadas parciales con gran precisión y utilizando un menor tiempo de cómputo.

En el presente artículo presenta una alternativa para trabajar con la ecuación de convección-difusión utilizando el esquema de upwind y la función multicuádrica. Aunque varios autores han mejorado estos procedimientos, el algoritmo plantea una respuesta híbrida que se ha aplicado para llevar a cabo ecuaciones diferenciales no lineales [19].

El principal aporte de este trabajo es que dicho algoritmo computacional resuelve la ecuación para cualquier número de nodos, considerando que a mayor número de nodos, mayor precisión y menor tiempo de cómputo.

Se varió el número de Peclet según lo reportado en la literatura para hacer una validación cualitativa de los resultados entregados.

Aunque el método es relativamente joven permite ejecutar diferentes problemas de forma eficaz [20].

VII. Trabajos futuros

En el modelado computacional de ecuaciones diferenciales parciales existen dos vertientes: los métodos tradicionales que se apoyan en el mallado, como los volúmenes y los elementos finitos, y los métodos libres de malla, como es el caso de las funciones de base radial.

Estos últimos han facilitado la creación de una nueva línea de trabajo que optimiza la operatividad de los códigos. De este modo reduce considerablemente el tiempo de cómputo y hace posible usar computadores personales para realizar cálculos complejos.

Se propone la implementación de modelos híbridos como funciones de base radial con procedimientos numéricos vanguardistas –como el método de elementos de frontera– para solventar problemas de ingeniería en dos y tres dimensiones.

VIII. Agradecimientos

Los autores agradecen al Instituto Tecnológico Metropolitano por la formación de uno de los autores y a la Universidad de San Buenaventura por el tiempo para la elaboración de esta investigación.

Referencias

- [1] Y. Sanyasiraju and G. Chandhini, “Local radial basis function based gridfree scheme for unsteady incompressible viscous flows,” *Journal of Computational Physics*, vol. 227, no. 20, pp. 8922–8948, 2008.
- [2] V. Aswin, A. Awasthi and C. Anu, “A comparative study of numerical schemes for convection-diffusion equation,” *International Conference on Computational Heat and Mass Transfer-2015*, no. 127, pp. 621–627, 2015.
- [3] J. Biazar and . M. Bagher Mehrlatifan, “A Compact Finite Difference Scheme for Reaction-convection-diffusion Equation,” *Chiang Mai Journal of Science*, vol. 3, pp. 1559–1568, 2017.
- [4] P. Assari and M. Dehghan, “A meshless Galerkin scheme for the approximate solution of nonlinear logarithmic boundary integral equations utilizing radial basis functions,” *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 333, pp. 362–381, 2018.
- [5] J. M. Granados, C. A. Bustamante, H. Power, and W. F. Florez, “A global Stokes method of approximated particular solutions for unsteady two-dimensional Navier-Stokes system of equations,” *International Journal of Computer Mathematics*, vol. 94, no. 8, pp. 1515–1541, 2016.
- [6] B. Sarlet and R. Vertnik, “Meshfree explicit local radial basis function collocation method for diffusion problems,” *Comput. Math. Appl*, vol. 51, no. 8, pp. 1269–1282, 2006.
- [7] E. J. Kansa, “Multiquadrics –A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics– II solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations,” *Computers & mathematics with applications*, vol. 19, no. 8–9, pp. 147–161, 1990.
- [8] S. Scott, “Radial basis function approximation methods with extended precision,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 35, no. 1, pp. 68–76, 2011.
- [9] W. F. Florez, H. Power, and F. Chejne, “Conservative interpolation for the boundary integral solution of the Navier–Stokes equations,” *Computational mechanics*, vol. 26, no. 6, pp. 507–513, 2000.
- [10] G. Fasshauer, *Solving partial differential equations by collocation with radial basis functions*, A. Le Méhauté, C. Rabut, L.L. Schumaker, Surface Fitting and Multiresolution Methods, Vanderbilt University Press, 1997.
- [11] C. A. Bustamante, H. Power, and W. F. Flórez, “A global meshless collocation particular solution method for solving the two-dimensional Navier–Stokes system of equations,” *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 65, no. 12, pp. 1939–1955, 2013.
- [12] G. Lima, V. Ferreira, E. Cirilo, A. Castelo, M. Candezano, I. Tasso, D. Sano, and L. Scalvie, “A continuously differentiable unwinding scheme for the simulation of fluid flow problems,” *Applied Mathematics and Computation*, vol. 218, no. 17, pp. 8614–8633, 2012.
- [13] T. Ghaffar, M. Yousaf, and S. Qamar, “Numerical solution of special ultra-relativistic Euler equations using central upwind scheme,” *Results in Physics*, vol. 9, pp. 1161–1169, 2018.
- [14] M. Saqib, S. Hasnain, and D. S. Mashat, “Computational solutions of two dimensional convection diffusion equation using crank-nicolson and time efficient ADI,” *American Journal of Computational Mathematics*, vol. 7, no. 3, pp. 208–227, 2017.
- [15] S. Patankar and D. Spalding, “A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows,” *Int.J.Heat Mass Transfer*, vol. 15, pp. 1787–1806, 1972.
- [16] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. NY: Taylor & Francis, 1980.
- [17] W. Chen and M. Tanaka, “A meshless, integration-free, and boundary-only RBF technique,” *Com-*

- puters & Mathematics with applications*, vol. 43, no. 3–5, pp. 379–391, 2002.
- [18] R. Vertnik and B. Sarlet, “Meshless local radial basis function collocation for convective-dissusive solid-liquid phase change problems,” *Int. J. Numer. Methods Heat fluid Flow*, vol. 16, no. 5, pp. 617–640, 2006.
- [19] A. F. Hernández Marulanda, W. F. Flórez Escobar, and J. J. Bustamante Osorno, “Simulación de interacción fluido-estructura en la red vascular utilizando el método de elementos de frontera (BEM),” *Revista Ingeniería Biomédica*, vol. 13, no. 25, pp. 53–62, 2019.
- [20] A. Appadu, J. Djoko, and H. Gidey, “A computational study of three numerical methods for some advection-diffusion problems,” *Applied Mathematics*, vol. 272, no. 3, pp. 629–647, 2016.