RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES DE DIFUSIÓN EN COORDENADAS CILÍNDRICAS

Gladys Guineo Cobs yVíctor Martínez Luaces
Universidad de La República, Montevideo, Uruguay
GEGCTRINI@MIXMAIL.COM VICTORML@FING.EDU.UY

Resumen

En los cursos de Cálculo Numérico no resulta muy habitual la presentación de problemas de la vida real vinculados a los contenidos de la asignatura (Martínez Luaces, V. y Martínez Luaces, F., 2003). Por lo general, cuando se trabaja en la resolución de Ecuaciones en Derivadas Parciales parabólicas, se suele presentar el problema clásico de la transmisión de calor en una varilla fina. En este trabajo se resolverá un problema proveniente del secado de alimentos, que en el caso de estudiantes de Ingeniería de Alimentos, Ingeniería Química o ramas afines, puede resultar mucho más aplicado y motivador que los problemas de difusión de calor (Martínez Luaces, V., Guineo Cobs, G, 2002).
Se presentaran distintos métodos de resolución (Mathews, J., 1987), pero por motivos didácticos se ilustrará el algoritmo del método explícito y se analizarán sus ventajas educativas, complementando con una ilustración gráfica que permita la visualización de los distintos elementos vinculados a la solución del problema.
En función de lo anterior se formulan algunas conclusiones y se realizan recomendaciones.

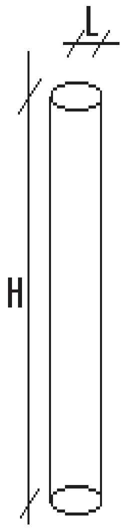
Introducción

Los problemas de difusión en Química y ciencias afines responden a modelos que involucran Ecuaciones en Derivadas Parciales (EDP) de tipo parabólicas. Entre los problemas de difusión de mayor riqueza matemática y de mayor relevancia industrial se encuentran los problemas de Transferencia de Masa. Por ejemplo, en la industria del arroz, el secado es una de las etapas determinantes de todo el proceso de producción, algo similar sucede en la industria del condimento o en la producción de frutas en almíbar donde la etapa de difusión de glucosa suele ser decisiva.
La riqueza matemática de los problemas de Transferencia de Masa se basa fundamentalmente en el hecho de trabajar con EDPs en distintos tipos de coordenadas, e incluso con cuerpos que cambian de geometría con el tiempo. Todo ello desemboca en una solución analítica que resulta complicada y no muy aprovechable del punto de vista práctico y/o didáctico, en cursos de grado.
En éste trabajo analizaremos el secado de una hierba, denominada Ciboulette, que posee cierta importancia económica y cuya geometría puede ser considerada aproximadamente cilíndrica.
La resolución analítica de este problema involucra temas como series de Fröbenius, funciones de Bessel de primera y segunda especie, de orden cero, uno y menos uno; series de Fourier – Bessel, etc.
Todos estos temas no siempre se llegan a enseñar en cursos de grado por lo que muchas veces su aplicabilidad didáctica se limita a cursos de nivel superior, como es el caso de los cursos de postgrado, los cursos de perfeccionamiento, etc..
En cambio si se “ataca” el problema con herramientas del Cálculo Numérico, en principio podría ser trabajado en los cursos de grado, con muy pocos prerrequisitos. El problema tiene algunas dificultades propias de la resolución de un problema real, por ejemplo, el trabajar con derivadas en las condiciones de borde y algunas diferencias de implementación

de los algoritmos utilizados normalmente para la resolución de EDP, debido a la presencia del operador Laplaciano en coordenadas cilíndricas.

El problema en estudio

La ciboulette es una hierba de geometría cilíndrica con L << H, como se ve en la figura adjunta.



La Ley de Fick, que rige el proceso de secado, establece que:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D.\left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r}.\frac{\partial C}{\partial r}\right)$$

donde C es la concentración de agua en el sólido, t es el tiempo, r es la posición radial (obsérvese que la expresión entre paréntesis es el Laplaciano en coordenadas cilíndricas) y D es la difusividad del agua dentro de la hierba.

Respecto a la difusividad, D, esta no depende de la posición (pues se puede considerar que es un sólido isotrópico respecto a la difusión), ni del tiempo (ya que en este caso el secado se realiza a temperatura constante).

Se supone además que:

a) C_a es la humedad inicial en la hierba,
b) en la superficie lateral se alcanza inmediatamente el equilibrio (llamaremos C_e a la humedad en el equilibrio) y
c) por simetría, no hay flujo a través del eje del cilindro.

En resumen, el problema en su versión matemática, queda expresado de la siguiente manera.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C}{\partial t} = D\left(\dfrac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial C}{\partial r}\right) & 0 \le r \le L \qquad t > 0 \\ C(L,t) = C_e \quad C(r,0) = C_a \quad \dfrac{\partial C}{\partial r}(0,t) = 0 & \end{cases}$$

Los Métodos Numéricos aplicables al problema planteado

Los Métodos Numéricos para este tipo de problemas pueden ser organizados en tres categorías (Mathews, J., 1987):

a) Métodos Explícitos o de Diferencias Progresivas, los cuales presentan problemas de estabilidad de las soluciones.
b) Métodos Implícitos o de Diferencias Regresivas, los cuales son asintóticamente estables pero requieren conocer iteraciones posteriores a las que se están calculando

c) y Métodos semi-implícitos, que corresponden a la combinación de un método implícito con uno explicito. Los mismos, dependiendo de las coordenadas en las que se trabaje, resultan estables o asintóticamente estables en posición y tiempo.

El método explicito o de Diferencias Progresivas no es asintóticamente estable, y las soluciones obtenidas pueden no responder adecuadamente al problema de origen, por lo que no es el más conveniente del punto de vista práctico aunque tal vez si lo sea del punto de vista didáctico. En este problema en particular este método es sumamente ilustrativo ya que muestra claramente cuales son las dificultades que se generan al utilizar el Laplaciano en coordenadas cilíndricas y la condición de borde de derivada nula.

Método de diferencias progresivas

Analicemos el procedimiento numérico.

Primero seleccionamos h y k, que son respectivamente los pasos en r y t, de modo tal que $\begin{cases} r_i = i.h & i \in (0,m),\ i \in \mathrm{Z} \\ t_j = j.k & j \in \mathrm{Z}_{\geq 0} \end{cases}$ generando una red cuyos puntos son $(r_i,\ t_j)$.

Como segundo paso se obtiene el método de diferencias progresivas por serie de Taylor:

$$\frac{\partial C}{\partial t}(r_i,t_j) = \frac{C(r_i,t_j+k)-C(r_i,t_j)}{k} - \frac{k}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}(r_i,\zeta_j) \qquad \zeta_j \in \left(t_j,t_{j+1}\right)$$

$$\frac{\partial C}{\partial r}(r_i,t_j) = \frac{C(r_i+h,t_j)-C(r_i,t_j)}{h} - \frac{h}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}(\xi_i,t_j) \qquad \begin{matrix} \xi_i \in \left(r_i,r_{i+1}\right) \\ i = 0,1,\ldots(m-1) \end{matrix}$$

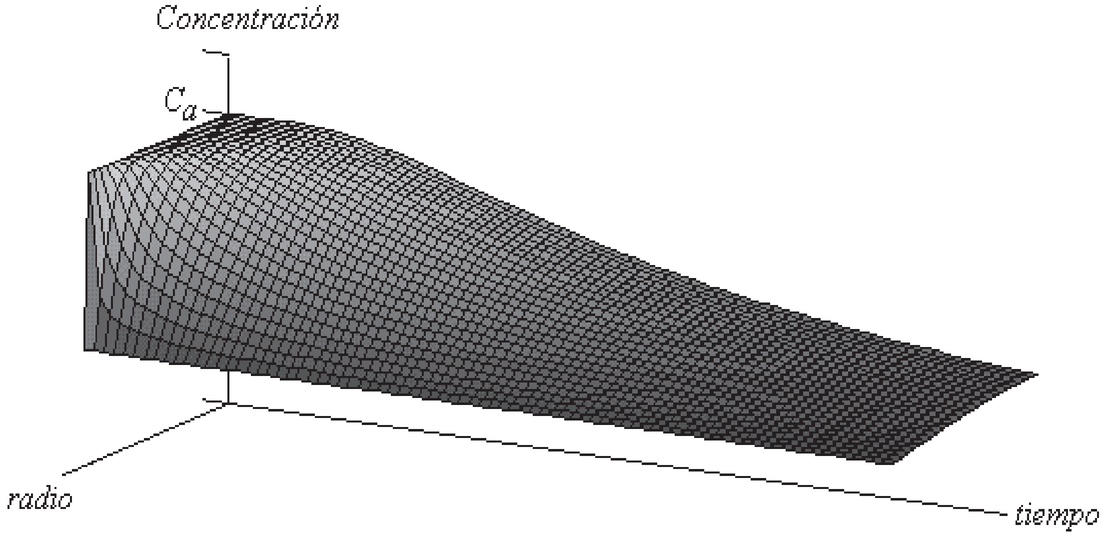
$$\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}(r_i,t_j) = \frac{C(r_i+h,t_j)-2C(r_i,t_j)+C\left(r_i-h.t_j\right)}{h} - \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial r^4}(\varsigma_i,t_j) \qquad \begin{matrix} \varsigma_i \in \left(r_i,r_{i+1}\right) \\ i = 1,2,\ldots(m-1) \end{matrix}$$

Si ahora utilizamos $w[i,j]$ como aproximación de $C(r_i,t_j)$

- El error de truncamiento es: $\tau_{ij} = \frac{k}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}(r_i,\zeta_j) + \frac{h}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}(\xi_i,t_j) + \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial r^4}(\varsigma_i,t_j)$
- la ecuación en diferencias progresivas para la EDP estudiada queda planteada de la siguiente manera: $\frac{w[i,j+1]-w[i,j]}{k} = \frac{D}{h^2}\left(\left(1+\frac{1}{i}\right).w[i+1,j]+w[i-1,j]-\left(2+\frac{1}{i}\right).w[i,j]\right)$
- la condición de derivada nula, como primera aproximación puede ser reemplazada por su aproximación en diferencias progresivas, lo que conduce a $w[1,j]=w[0,j]$.
- y finalmente, las demás condiciones quedan expresadas como: $\begin{cases} w[m,j] = C_e \\ w[i,0] = C_a \end{cases}$

El sistema construido posee una matriz asociada convertible en tridiagonal, **A**, de forma tal que la solución aproximada queda dada por $\mathbf{W}^{<j>}=\mathbf{A}.\mathbf{W}^{<j-1>}$, donde $\mathbf{W}^{<j>}$ representa la solución obtenida en la j-ésima iteración.

Si bien este método no es incondicionalmente estable, permite comprender el algoritmo de construcción y obtener fácilmente el método de diferencias regresivas. Posteriormente, combinando ambos métodos se puede construir el método de diferencias promediadas (método semi-implícito), el cuál permitiría obtener la solución. Para visualizar la misma se presenta el siguiente gráfico.



Conclusiones

Podemos observar que en este procedimiento (explícito) se utilizaron muy pocas herramientas matemáticas, concretamente Polinomio de Taylor con Resto de Lagrange y la discretización propia de la derivación numérica. Es decir, que a diferencia de la solución analítica la presentación de éste problema para cursos de cálculo numérico es absolutamente inmediata. Sin embargo no es tan inmediata la implementación con otros algoritmos más eficientes pero no tan didácticos. La combinación de las EDP parabólicas ya conocidas por el alumno, con los elementos ya mencionados de un primer curso de cálculo, favorece la construcción de una Zona de Desarrollo Próximo (Vigotsky, L.S., 1978) que hace posible la adquisición de estos nuevos proceptos.

Bibliografía

Martínez Luaces, V., Guineo Cobs, G., en evaluación “Las EDP en problemas industriales de secado de alimentos: su resolución analítica y su transferencia al aula”, enviado al *III Seminario Internacional de Matemática, Física e Informática Educativa*.

Mathews, J., (1987). *Numerical Methods for Mathematic, Sciencie and Enginering*. Ed. Prentice-Hall. ISBN 0-13-624990-6.

Vigotsky, L.S., (1978). “Mind in society. The Development of Higher Psychological Processes”, USA: Harvard University Press.

Martínez Luaces, V. y Martínez Luaces, F., (2003). "La importancia de la visualización en la resolución de problemas de Cálculo Numérico", *Acta Latinoamericana de Matemática Educativa.*16.2 686-693.