

ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES DE SOLUCIONES ASOCIADAS A UN MODELO DE AEROSOLES

Fernando G. Basombrió †
Div. Mecánica Computacional, DIA - Centro Atómico Bariloche - CNEA
C.C. 439, 8400 SC de Bariloche, Río Negro, Argentina

RESUMEN

Se describe un estudio de soluciones de las ecuaciones de un modelo de aerosol, este último propuesto recientemente por Giménez, Schlamp y Clause. Teniendo en cuenta la insignificancia de los fenómenos difusivos en comparación con los de transporte, dicho modelo puede expresarse mediante un sistema hiperbólico no lineal, constituido por dos ecuaciones de conservación con variables independientes z y t . Se analizan las soluciones del tipo ondas viajeras, caracterizándose en particular los casos de propagación de frentes abruptos (ondas de choque), y calculándose algunos de ellos por medio de un método de viscosidad artificial (estructura de choque). Se completa el trabajo con una breve discusión elemental, referente a las condiciones de contorno apropiadas para transitorios, y temas afines.

ABSTRACT

An analysis of the solutions of an aerosol model recently proposed by Giménez, Schlamp and Clause, is described. As diffusive effects can be neglected in comparison with transport, such a model can be expressed by means of a nonlinear hyperbolic system of two conservation laws, with independent variables z and t . Travelling waves solutions are studied, with emphasis in abrupt fronts (shock waves). Some of them have been calculated using the artificial diffusivity approach (shock structure). The paper is completed with a brief discussion concerning appropriate boundary conditions for transients, and related topics.

NOTACION Y VALORES DE LAS CONSTANTES FISICAS

$\rho > 0$: Densidad de partículas

$\epsilon > 0$: Fracción de volumen

$v = \frac{\epsilon}{\rho}$: Volúmen medio de partículas

z, t : Variables independientes espacial (coordenada vertical, medida hacia abajo) y temporal

$U_\rho = aV_f v^{2/3} + u$: Velocidad de transporte asociada a ρ

$U_\epsilon = bV_f v^{2/3} + u$: Velocidad de transporte asociada a ϵ

u : Velocidad de arrastre (se la supone constante para simplificar)

$D_\rho = 1.135\alpha v^{-1/3}$: Coeficiente de viscosidad asociado a ρ

$D_\epsilon = 0.946\alpha v^{-1/3}$: Coeficiente de viscosidad asociado a ϵ

$$V_f = \left[\frac{3}{4\pi} \right]^{2/3} \frac{2\rho_p g}{9\mu} = 4.66 \cdot 10^7$$

$$\alpha = \frac{kT}{3\mu} \frac{1}{6^{1/3} \pi^{2/3}}$$

S_ρ : Fuente externa asociada a ρ

S_ϵ : Fuente externa asociada a ϵ

$C_\rho^G = -0.0827 \frac{2\rho_p}{6\mu} v^{4/3} \rho$: Coagulación gravitacional

† Trabajo realizado en la División Modelos Físicos y Numéricos de la GRISN - CAE, a través de un plan de colaboración

$C_p^B = -1.383 \frac{kT}{\mu} \rho^2$: Coagulación browniana

$\rho_p = 1000$: densidad de las partículas

$g = 9.81$: Aceleración de la gravedad

$k = 1.23 \cdot 10^{-23}$: Constante de Boltzmann

$\mu = 1.8 \cdot 10^{-5}$: Viscosidad del gas

$T = 300 \text{ K}$: Temperatura absoluta

$a = 0.947$

$b = 1.263$

(Se trata de unidades técnicas)

DESCRIPCION DEL SISTEMA HIPERBOLICO DE LEYES DE CONSERVACION

En este trabajo se analizan ciertas consecuencias formales del modelo propuesto por Giménez, Schlamp y Clause [1] a efectos de contribuir a un mejor conocimiento de las soluciones asociadas, lo que a su vez facilita el modelado numérico de los casos de interés físico.

Las ecuaciones macroscópicas deducidas en [1] son,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(U_p \rho) - \frac{\partial^2}{\partial z^2}(D_p \rho) &= S_p + C_p \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(U_e \epsilon) - \frac{\partial^2}{\partial z^2}(D_e \epsilon) &= S_e \end{aligned} \quad (1)$$

definidas para soluciones en el interior del primer cuadrante del plano $\rho - \epsilon$.

Se trata de un sistema no lineal de ecuaciones de conservación del tipo transporte-difusión, si consideramos a los términos de las derivadas segundas como términos difusivos con coeficientes de difusión D_p, D_e (dependientes de la solución). Esto último no es exactamente cierto ya que, a pesar de ser términos de segundo orden, su estructura no es la típica de un término difusivo. No obstante, la inclusión de los mismos transforma un sistema hiperbólico (como se verá luego) en parabólico, por lo que la presencia de fenómenos difusivos es de esperar.

Si aceptamos que D_p, D_e sean coeficientes de difusión, y si con ellos más las velocidades de transporte U_p, U_e y una longitud típica L del orden de los 10 metros fabricamos los correspondientes números de Péclet ($\frac{UL}{D}$), constatamos que los mismos resultan ser del orden $10^5 - 10^{13}$ para el rango $10^{-20} < v < 10^{-12}$. Es decir, salvo la situación particular de la *inversión de flujo* ($U_p \approx 0$ o $U_e \approx 0$), de efectos muy localizados, el transporte es completamente predominante pudiéndose despreciar la difusión. En lo sucesivo, adoptamos este criterio.

Eliminando entonces los términos difusivos, las ecuaciones (1) pueden re-escribirse de forma conveniente por medio de la notación vectorial, como sigue:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} F(U) + H(U) = 0 \quad (2)$$

donde,

$$U(z, t) \equiv \begin{bmatrix} \rho(z, t) \\ \epsilon(z, t) \end{bmatrix}, \quad F(U) \equiv \begin{bmatrix} U_p \rho \\ U_e \epsilon \end{bmatrix}, \quad H(U) \equiv - \begin{bmatrix} S_p + C_p \\ S_e \end{bmatrix} \quad (3)$$

Usando la regla de la cadena, el sistema (2) se transforma en

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A(U) \frac{\partial U}{\partial z} + H(U) = 0 \quad (4)$$

con

$$A(U) \equiv \begin{bmatrix} \frac{1}{3}aV_f v^{2/3} + u & \frac{2}{3}aV_f v^{-1/3} \\ -\frac{2}{3}bV_f v^{2/3} & \frac{5}{3}bV_f v^{2/3} + u \end{bmatrix} \quad (5)$$

Los autovalores de $A(U)$ están dados por.

$$\alpha_{1,2} = \frac{V_f}{6} \left[a + 5b \mp \sqrt{(a-b)(a-25b)} \right] v^{2/3} + u \quad (6)$$

Para los valores numéricos de a y b los autovalores $\alpha_{1,2}$ son reales y distintos, por lo que el sistema (4) es hiperbólico. Como se sabe [2,3], estos autovalores físicamente representan las velocidades de propagación de pequeñas perturbaciones. Bajo el punto de vista matemático son las pendientes de las líneas características en el espacio-tiempo z, t [2,3], de fundamental importancia, por lo pronto para establecer las condiciones de contorno correctas. Esto resulta útil en el estudio de transitorios.

SOLUCIONES TIPO "ONDAS VIAJERAS". FRENTES ABRUPTOS

Son soluciones particulares, para las que la dependencia de las variables espacio-temporales se produce sólo a través de la combinación lineal $\eta = z - Ut$ (abscisa de onda). Físicamente se trata de ondas que viajan a la velocidad constante U , sin deformarse. Es obvia la importancia de dichas soluciones por dos motivos: 1) Como en el modelo el transporte es dominante, los transitorios están caracterizados por la propagación y eventual reflexión de ondas. 2) Las soluciones de ondas viajeras atraen a los transitorios, lo que equivale a decir que éstas son sus formas asintóticas cuando el tiempo transcurre. Por otro lado, dichas soluciones dan el marco apropiado para la descripción de frentes abruptos. Tales ondas de choque resultan ser de importancia física y de consecuencias numéricas, ya que los algoritmos deben prever la generación espontánea de discontinuidades.

Consideraciones generales

Como consecuencia de su definición, las ondas viajeras se rigen por el siguiente sistema diferencial ordinario, caso particular de (5),

$$(-U1 + A) \frac{dU}{d\eta} + H(U) = 0 \quad (7)$$

Este sistema asociado de dos ecuaciones diferenciales ordinarias puede ser escrito de forma canónica (explícita), en las regiones donde el determinante de la matriz de coeficientes $\mathcal{A} \equiv (-U1 + A)$ no se anula. Es decir, cuando la velocidad U del tren de ondas es distinta de la velocidad de pequeñas perturbaciones, las que son precisamente los autovalores de A . Para ello obsérvese que en el caso contrario U satisface la ecuación característica de la matriz A ,

$$\det[-U1 + A(U)] = 0 \quad (8)$$

Por otro lado, para U dado y fijo, los valores de $U^T = (\rho, \epsilon)$ que satisfacen (8) definen *líneas críticas* en el plano $\rho - \epsilon$, llamado *espacio de fases* en la denominación clásica de los sistemas dinámicos. Estas dividen entonces al mencionado espacio en zonas sub y supercríticas, de acuerdo a que U sea respectivamente menor o mayor que alguna velocidad de propagación de pequeñas perturbaciones. De acuerdo también a denominaciones corrientes en la teoría de sistemas dinámicos, llamamos *campo* al segundo miembro de la forma canónica $y'(t) = f(y(t))$ de un sistema diferencial ordinario autónomo, y *órbitas* a las trazas que sus soluciones dejan en el espacio de fases. Sobre las líneas críticas el campo es singular en general, y las soluciones asociadas a las órbitas no pueden cruzar estas vallas sin recurrir a plegamientos, choques o soluciones transcíticas (ver [4]). La relación (8) es por todo ello llamada *condición de criticidad*.

Pasamos a analizar el cuadro de fases con sus fronteras críticas, para el modelo de aerosol en consideración. Particularizando lo dicho en general, teniendo en cuenta las definiciones (3) y (5), de la condición (8) aplicada respectivamente a las dos velocidades de propagación de pequeñas perturbaciones (6), (o sea, $\alpha_{1,2} = U$) se deducen las dos siguientes ecuaciones que definen las líneas críticas (rectas),

$$\begin{aligned} \epsilon_{cr} &= c_i(U - u)^{3/2} \rho, \quad i = 1, 2 \\ c_1 &= 5.462885.. \times 10^{-12}, \quad c_2 = 1.382898.. \times 10^{-12} \end{aligned} \quad (9)$$

donde los valores numéricos se obtienen por simple reemplazo de los valores de las constantes físicas en las ecuaciones. Observamos que las fronteras críticas sólo existen en el caso en que $U - u \geq 0$, es decir, cuando la velocidad de la onda relativa al medio es positiva (para abajo, respecto del medio).

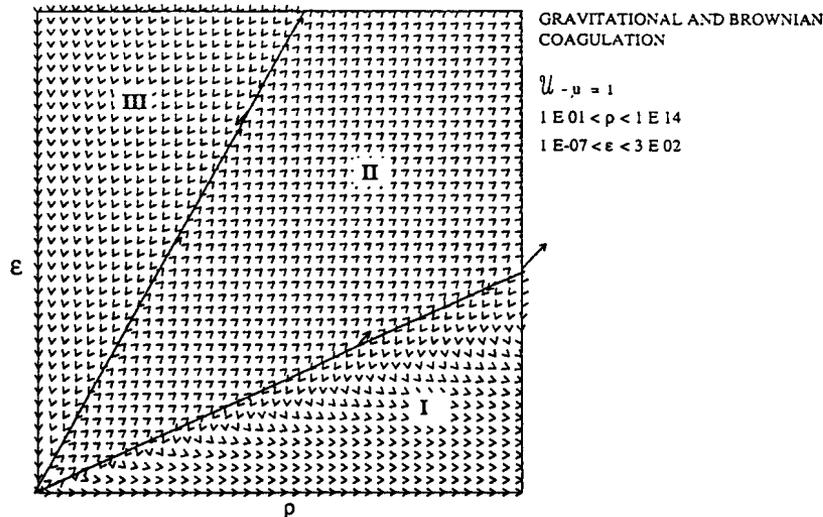


Figura 1: Cuadro de fases para el sistema diferencial ordinario de ondas viajeras. Se destacan tres regiones entre rectas críticas: I: $\alpha_1 < \alpha_2 < U$; II: $\alpha_1 < U < \alpha_2$; III: $U < \alpha_1 < \alpha_2$. Las rectas críticas, que se hacen visibles por el cambio brusco de orientación de las flechas, corresponden respectivamente a $\alpha_1 = U$ y $\alpha_2 = U$.

La Fig. 1 muestra el cuadro de fases para un caso particular: $U - u = 1$. En ella se indican las rectas críticas que separan las regiones I, II y III. En cada punto de la cuadrícula de 40×40 se dibuja el vector correspondiente al campo, obtenido a partir de (7) por inversión de la matriz A , y usando (3) y (5). Cerca de las rectas críticas se observan algunos vectores de módulo grande. Ocurre que el punto correspondiente cae muy cerca de la frontera, sobre la cual el campo es infinito. Por su magnitud estos vectores sacan de escala al resto, para los que queda representada únicamente la punta. La dirección del vector indica la tendencia de variación de ρ y ϵ cuando la variable independiente η crece. Su módulo, la intensidad con que ρ y ϵ varían al aumentarse η en una unidad. Se destaca que las rectas críticas sólo dependen de la matriz A y no de los términos fuente (2),(7) ya que por su definición, sólo involucran a los autovalores y a la velocidad U del tren de ondas. El campo, en cambio, es dependiente de las fuentes así como de A . Mencionamos también que la gran disparidad de los valores de ρ y ϵ obedece a sus respectivas definiciones físicas (ver [1]).

Una inspección visual del cuadro de fases exhibido en la Fig. 1 (lugar donde todas las soluciones de ondas viajeras "dejan sus huellas digitales"), permite formarse una idea de como son las soluciones corrientes o sea, aquellas cuyas órbitas no cruzan las fronteras críticas. Por ejemplo, la zona III está caracterizada por soluciones monótonas crecientes tanto en ρ como en ϵ . Contrario es el caso de la zona II. En la zona I, sólo ϵ es monótonamente decreciente.

Soluciones discontinuas

Más interesantes que las soluciones cuyas órbitas quedan dentro de alguna de las tres zonas, son aquellas que conectan dos zonas distintas. Las soluciones de este tipo que forman plegamientos (multi-valuadas), deben descartarse tanto desde el punto de vista físico como matemático. Por razones que no expondremos aquí, en el problema que nos concierne *no existen soluciones transcíticas* [4] (estas últimas cruzan la frontera crítica). Nos concentraremos entonces en las soluciones discontinuas u ondas de choque (éstas en cambio saltan la valla crítica).

La ecuación vectorial (2) presenta forma conservativa, requisito de origen físico. Las cantidades ρ y ϵ deben conservarse a través de las discontinuidades. Esto es lo que manifiestan las condiciones de Rankine-Hugoniot [2,3], que en su forma general se escriben,

$$\mathcal{U}[Z] = [F(Z)] \quad (10)$$

donde $[Z] \equiv Z^+ - Z^-$ es el salto de una magnitud Z a través de la línea de discontinuidad. Elegida una orientación de la coordenada espacial (hacia la derecha, digamos), el signo + corresponde convencionalmente al lado derecho de la línea y el - al izquierdo.

Para sistemas de conservación no lineales como el (2), las soluciones discontinuas que satisfacen las condiciones de Rankine-Hugoniot pueden caracterizarse matemáticamente bajo la noción de *solución débil* (por todo concepto relativo a ondas de choque, ver [2,3] o algún otro texto dedicado al tema).

Dentro de las muchas formas posibles de presentar las condiciones de Rankine-Hugoniot, para el modelo de aerosol en estudio hemos elegido las siguientes expresiones,

$$\frac{1 - \frac{U^+ - u}{U^- - u}}{1 - \frac{U^- - u}{U^+ - u}} = \frac{\rho^-}{\rho^+}, \quad \frac{1 - \frac{U^+ - u}{U^- - u}}{1 - \frac{U^- - u}{U^+ - u}} = \frac{\epsilon^-}{\epsilon^+} \quad (11)$$

obtenidas respectivamente a partir de las ecuaciones de conservación de ρ y de ϵ (2),(3).

No todas las soluciones discontinuas "que conservan" a través de la discontinuidad, tienen sentido físico y matemático. El problema, con condiciones iniciales y de borde, debe estar bien planteado en un entorno de la discontinuidad. Esto se traduce en las *condiciones de Lax* [3,2], escritas aquí para el caso general de sistemas hiperbólicos (2),(4) de m ecuaciones: *Para algún índice k , $1 \leq k \leq m$, deben verificarse las siguientes desigualdades,*

$$\begin{aligned} \alpha_k(U^+) &\leq U < \alpha_{k+1}(U^+) \\ \alpha_{k-1}(U^-) &< U \leq \alpha_k(U^-) \end{aligned} \quad (12)$$

entre los autovalores de A y la velocidad U de la discontinuidad. Estas desigualdades pueden ser vistas como condiciones de estabilidad, que atañen a la persistencia de la solución frente a pequeñas perturbaciones. También se las llama *desigualdades de entropía*, ya que en ciertos contextos equivalen a una condición de crecimiento de entropía, debidamente interpretada (ver [3] por detalles. También [5], para una discusión conceptual válida aún para sistemas no conservativos).

Aún con todos los requisitos impuestos, no es siempre posible probar la unicidad de las soluciones (discontinuas) en el sentido débil. Varios autores han tratado de lograr la unicidad, seleccionando sólo aquellas que resulten ser límite de soluciones (diferenciables) de un modelo más general, difusivo, cuando la difusividad incorporada (de origen físico o artificial) tiende a cero (límite singular). Estos modelos ampliados suelen satisfacer una condición de entropía (también física o artificial). Bajo el punto de vista matemático, la noción de entropía generalizada fue introducida por Lax en 1971. Dentro

del contexto de los sistemas hiperbólicos de leyes de conservación sin términos fuente, se pueden identificar (bajo condiciones apropiadas) las soluciones débiles que son límite de soluciones "difusivas", con aquellas soluciones débiles que satisfacen las condiciones de Lax (ver [3], Cap. 20 y 24).

La presencia de términos fuente, hace que no todo vector $U = \text{constante}$ sea solución de (2) o (4). Las soluciones constantes deben satisfacer el sistema algebraico $H(U) = 0$. De aquí se deduce que no todo salto une necesariamente dos estados constantes. En general si hay términos fuente, un salto conecta dos soluciones tipo onda viajera, siendo al menos una de ellas no constante. Un antecedente clásico de esta situación está constituido por las curvas de remanso y los resaltos (choques), en la teoría de canales hidráulicos. En nuestro problema, si está presente algún mecanismo de coagulación y no hay fuentes externas, no pueden existir estados constantes puesto que las ecuaciones $H(U) = 0$ no tienen solución para ρ y ϵ mayores que cero. En términos matemáticos, en los casos presentes el campo carece de "equilibrios".

Concluidos estos comentarios de conceptos generales, verificamos qué tipos de salto entre las regiones I, II y III del cuadro de fases satisfacen las condiciones de Lax. A tales efectos, simplemente contrastando las desigualdades que definen dichas regiones en la Fig. 1 con las desigualdades generales (12) con $m = 2$, se deduce que sólo son posibles los saltos entre regiones III \rightarrow II y II \rightarrow I, quedando descartados los cuatro tipos de salto restantes.

Cálculo de perfiles abruptos. Estructura de choque

En este párrafo se aplicará una metodología propuesta y utilizada en los trabajos [3] Cap. 8 y [4].

Comenzamos restituyendo en las ecuaciones (7) los términos difusivos de segundo orden, pero esta vez valiéndonos de difusividades artificiales ν_ρ, ν_ϵ constantes, en lugar de D_ρ, D_ϵ que aparecen en las ecuaciones originales (1). A continuación transformamos el sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden recién obtenido en un sistema de cuatro ecuaciones de primer orden, mediante la introducción de las variables dependientes auxiliares $z = \rho', w = \epsilon'$. El espacio de fases del sistema diferencial ordinario final es de dimensión 4, hecho que acarrea dificultades para nuestros fines, por razones que no explicamos aquí.

Como es inmediato verificar, si $\nu_\rho = 0$ ó $\nu_\epsilon = 0$ (pero no ambas!), la dimensionalidad del espacio de fases se reduce a 3 y el problema impresiona como abordable. Pero (y siempre sin entrar en detalles técnicos que no hacen a la finalidad de este trabajo), el sistema se vuelve "poco viscoso" y aparecen lo que se denominan choques internos (inner shocks) resultando en consecuencia posible que la estructura de algún salto no pueda calcularse. Concretamente, en el caso de nuestro interés, si $\nu_\epsilon = 0$ no es posible calcular el salto II \rightarrow I, aunque sí el III \rightarrow II, dándose justamente la situación opuesta si es $\nu_\rho = 0$. En definitiva, con el truco de anular alternativamente una de las dos viscosidades artificiales, ha sido posible calcular ejemplos de ambos saltos.

Describimos suscintamente la implementación de esta idea. Conviene establecer una notación que se adapte a las dos alternativas de la estrategia que se menciona en el párrafo anterior. Empleamos subíndices 1, 2, que de acuerdo al caso se refieren a ρ, ϵ o viceversa. Volviendo a la notación general introducida más arriba, en particular $\mathcal{A} = A - U1$, expresamos el sistema diferencial ordinario (de ondas viajeras) con difusividad artificial como sigue,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{11} \dot{y}_1 + \mathcal{A}_{12} \dot{y}_2 + H_1 &= \nu_1 \ddot{y}_1 \\ \mathcal{A}_{21} \dot{y}_1 + \mathcal{A}_{22} \dot{y}_2 + H_2 &= 0 \end{aligned} \quad (13)$$

donde también, de acuerdo a la conveniencia, y_1 e y_2 se refieren a ρ, ϵ o viceversa. Obsérvese que se ha tomado $\nu_2 = 0$. Si introducimos ahora la variable dependiente $y_3 = \dot{y}_1$ (antes z ó w), transformamos (13) en un sistema de tres ecuaciones de primer orden,

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= y_3 \\ \mathcal{A}_{11} y_3 + \mathcal{A}_{12} \dot{y}_2 + H_1 &= \nu_1 y_3 \\ \mathcal{A}_{21} y_3 + \mathcal{A}_{22} \dot{y}_2 + H_2 &= 0 \end{aligned} \quad (14)$$

Si $\mathcal{A}_{22} \neq 0$ (hecho que tiene sus consecuencias en la aparición eventual de "choques internos", y que no discutiremos aquí), se puede transformar (14) en un sistema canónico despejando las derivadas totales respecto de la variable independiente η (abscisa de onda):

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= y_3 \\ \dot{y}_2 &= -\frac{\mathcal{A}_{21}y_3 + H_2}{\mathcal{A}_{22}} \\ \dot{y}_3 &= \frac{1}{\nu_1} \left[\left(\mathcal{A}_{11} - \frac{\mathcal{A}_{12}\mathcal{A}_{21}}{\mathcal{A}_{22}} \right) y_3 - \frac{\mathcal{A}_{12}H_2}{\mathcal{A}_{22}} + H_1 \right] \end{aligned} \quad (15)$$

Mediante este último sistema (con los debidos reemplazos), se calculan luego las estructuras de choque.

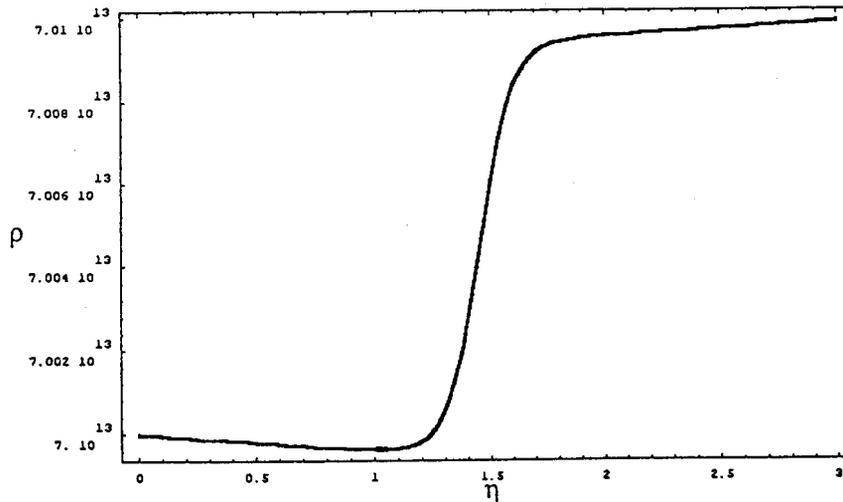


Figura 2: Frente abrupto débil del tipo III \rightarrow II. ρ vs. η . $S_x = S_z = 0$. Coagulación gravitacional (C_p^0). Datos: $U - u = 1$, $\nu_p = 1/100000$, $\rho_0 = 7 \cdot 10^{13}$, $\epsilon_0 = 382.5$, $z_0 = -4.008 \cdot 10^8$, $\eta \in [0, 3]$

Podemos imaginarnos el campo del sistema (15) en el espacio de fases tridimensional. Por conveniencia, orientamos en este espacio el eje y_3 en la dirección vertical. En los puntos del espacio de fases donde el corchete de la tercera ecuación de las (15) es cero, o sea para los que se cumple,

$$y_3 = \bar{y}_3 \equiv \frac{-H_1 + \frac{\mathcal{A}_{12}H_2}{\mathcal{A}_{22}}}{\mathcal{A}_{11} - \frac{\mathcal{A}_{12}\mathcal{A}_{21}}{\mathcal{A}_{22}}} \quad (16)$$

el campo es desde luego *horizontal*. Llamamos entonces a dicho conjunto de puntos, la *isóclina-0*. Esta superficie pasa a desempeñar un papel esencial en el problema de la estructura de choque, ya que la proyección sobre ella del campo tridimensional justamente corresponde al campo bidimensional no difusivo original [4,6]. No es difícil comprobarlo. En otras palabras, la isóclina cero es algo así como el "refugio de los fenómenos no difusivos" en el espacio de fases del problema difusivo. Se observa que

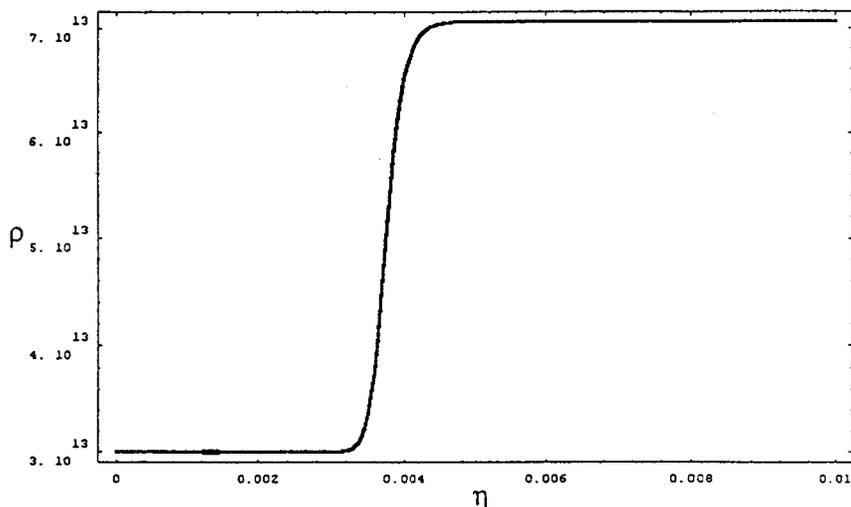


Figura 3: Frente abrupto intenso del tipo III \rightarrow II. ρ vs. η . $S_p = S_c = 0$. Coagulación gravitacional (C_p^g).
 Datos: $U - u = 1$, $\nu_p = 1/100000$, $\rho_0 = 3 \cdot 10^{13}$, $\epsilon_0 = 200.0$, $z_0 = -2.658661 \cdot 10^4$, $\eta \in [0, 0.01]$

en el proceso de hacer tender la difusividad artificial ν_1 a cero, la última componente del campo del sistema (15) tiende a infinito *salvo sobre la isóclina-0*. Es decir, entanto ν_1 decrece, el campo tiende a ser vertical fuera de tal región.

Se han seleccionado cuatro casos representativos para calcular estructuras de choque. Si los rangos de variación de ρ, ϵ resultasen marginales desde el punto de vista del interés físico, no es difícil lograr ejemplos numéricos mejores, dentro de rangos de mayor interés. Las Figs. 2, 3 y 4 se refieren al salto III \rightarrow II, para el cual es $\nu_p > 0$, $\nu_c = 0$. La Fig. 5 al salto II \rightarrow I, con $\nu_p = 0$, $\nu_c > 0$. En las Figs. 2 y 3 se ha considerado coagulación gravitacional (C_p^g) solamente, mientras que en las 3 y 4 coagulación gravitacional y browniana ($C_p^g + C_p^B$). En todos los casos las fuentes externas S_p y S_c se anulan. Por lo comentado más arriba, no existen entonces estados constantes y los saltos unen soluciones no constantes de ondas viajeras. Puede entonces resultar paradójico lo que se observa en las Figs. 3 a 5, en las que parecen verse estados constantes (sobre todo en la Fig. 3, en la que el rango de variación de la abscisa de onda es de 1cm). Es un problema de escala. Aumentando el rango de η , se percibe mejor la variación del pretendido estado constante.

Las figuras están hechas con una escala horizontal en la que el "espesor del choque" mantiene aproximadamente su proporción. En los casos mostrados los espesores de choque varían entre 1mm y 50cm, pequeños en comparación con las longitudes típicas (por lo menos mayores que 10m). Cuando la difusividad disminuye, el valor absoluto del espesor también disminuye si el resto de los parámetros permanece comparable. Cuanto menor es la viscosidad, más difícil resulta el cálculo. Se han resuelto problemas de valores iniciales, con condiciones iniciales ρ_0, ϵ_0, z_0 (ó w_0) próximas a la isóclina-0. La estrategia para obtener condiciones iniciales adecuadas es algo sofisticada, y requiere de algunos tanteos. Los frentes abruptos de las Figs. 3 a 5 son intensos, mientras que el de la Fig. 2 es débil en comparación. Por último observamos que al propagarse las ondas en el sentido positivo dado por el eje η , las figuras mostradas (gráficos de funciones crecientes) parecen ser "choques de expansión", los que en la dinámica de gases son imposibles. En realidad, en nuestro caso la función decreciente

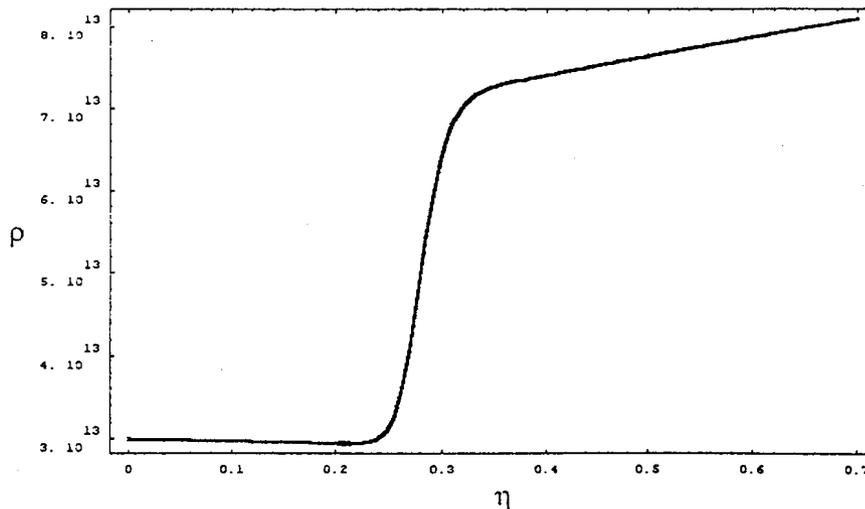


Figura 4: Frente abrupto intenso del tipo III \rightarrow II. ρ vs. η . $S_s = S_c = 0$. Coagulación gravitacional y browniana ($C_p^\sigma + C_p^\mu$). Datos: $U - u = 1$, $\nu_s = 1/1000$, $\rho_0 = 3 \cdot 10^{13}$, $\epsilon_0 = 200.0$, $z_0 = -2.681935209 \cdot 10^{12}$, $\eta \in [0, 0.7]$

es $v = \frac{z}{\rho}$ y por otro lado, los frentes abruptos mostrados son admisibles por satisfacer la condición de Lax. La paradoja es sólo aparente.

BREVE DISCUSION SOBRE FLUJOS TRANSITORIOS

Sobre las soluciones de flujos transitorios generales, poco y nada puede decirse "a priori" en comparación con la clase particular de soluciones de ondas viajeras, tratadas en la Sección precedente. Sólo están al alcance ciertas consideraciones cualitativas basadas en el análisis del campo de líneas características en el plano z, t , que brindan información sobre transitorios, en especial si no hay términos fuente. Estas consideraciones son sin embargo fundamentales para la correcta determinación de condiciones de contorno, cuestión que muy brevemente pasamos a comentar. Una descripción amplia y accesible sobre el tema puede encontrarse en la referencia [2].

Las líneas características en el plano z, t , cuyas pendientes coinciden con los autovalores de A en el punto en consideración ($\frac{dz}{dt} = \alpha_i(U(z, t))$, $i = 1, 2$), pueden orientarse de modo de que su vector tangente tenga producto escalar no negativo con la dirección del eje t . La teoría clásica de sistemas hiperbólicos afirma que sobre cualquier borde del recinto *debe prescribirse un número condiciones (generales) de contorno, exactamente igual al número de características que entran al recinto por el punto del borde en consideración*. Por ser los problemas de interés, no lineales, esta información básica referente al número de características entrantes no se conoce de antemano, salvo en casos particulares, pues depende de la solución. En programas de cálculo de transitorios, puede implementarse un control en el borde que permita predecir cuantas condiciones van a requerirse en el próximo paso de tiempo.

Otra propiedad de los sistemas hiperbólicos no lineales es la posibilidad de generar frentes abruptos, espontáneamente. Aun con condiciones iniciales y de contorno analíticas, a tiempos finitos puede

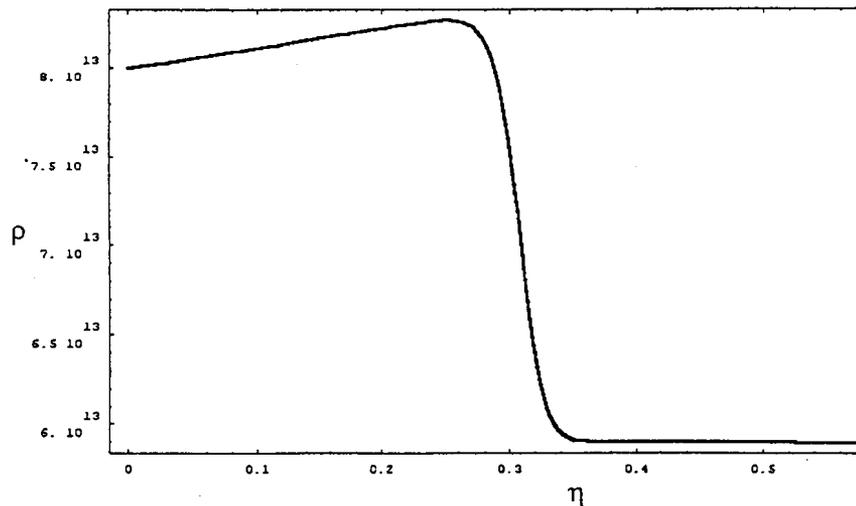


Figura 5: Frente abrupto intenso del tipo II — I. ρ vs. η . $S_p = S_i = 0$. Coagulación gravitacional y browniana ($C_p^g + C_p^b$). Datos: $U - u = 1$, $\nu_p = 1/1000$, $\rho_0 = 8 \cdot 10^{13}$, $\epsilon_0 = 130.0$, $w_0 = 28.488311$, $\eta \in [0, 0.7]$

aparecer una discontinuidad en la solución. La génesis de las mismas está asociada a la formación de una cúspide, en una envoltura de características. Como dicho fenómeno es dependiente de la solución, resulta imprevisible, salvo en casos sencillos. Los algoritmos de cálculo deben prever esta eventualidad, y estar equipados con viscosidad artificial apropiada o difusividad numérica suficiente.

Por último comentamos que para sistemas hiperbólicos de dos ecuaciones no lineales con dos variables independientes, pero *sin términos fuente*, puede obtenerse valiosa información sobre soluciones de flujos transitorios a través de los *invariantes de Riemann*. Cuando el número de ecuaciones es mayor que dos o bien, cuando hay términos fuentes no nulos (caso del modelo de aerosol), este recurso pierde prácticamente su valor.

COMENTARIO FINAL

Dada la insignificancia de los efectos difusivos del modelo en comparación con los de transporte, salvo en regiones localizadas alrededor de un punto de inversión del flujo, los aspectos de propagación de ondas (hiperbolicidad) son netamente predominantes. Si entonces el carácter de los fenómenos físicos a estudiar es tal que los rangos de variación de ρ , ϵ , invaden al menos dos de las regiones identificadas en la Fig. 1 (es decir, $v = \frac{\epsilon}{\rho} = \mathcal{O}(10^{-12})$) todas las consideraciones hechas en este trabajo pasan a desempeñar un papel preponderante en el análisis y la comprensión de las soluciones y en particular, de su cálculo numérico. Si no es así (volúmenes medios de partículas del orden antedicho pueden resultar algo grandes a efectos de las aplicaciones de mayor interés), el conocimiento de las soluciones de ondas viajeras también debería ser útil para estimar comportamientos asintóticos a tiempos crecientes, sobre todo si existen condiciones de borde con propiedades de reflexión. El hecho de saber de antemano que no pueden generarse espontáneamente discontinuidades, es también de utilidad numérica.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a Alejandro Clause y a Marcelo Gimenez (Sección Seguridad de Instalaciones Nucleares DIN - CAB) por haber despertado mi interés en el problema, facilitándome la información y aclaraciones al respecto.

El trabajo ha tenido apoyo parcial de la Fundación Balseiro, y del CONICET a través del PID-BID 252-0039/91.

REFERENCIAS

- [1] Giménez, M.; Schlamp, M. y Clause, A.: *Analysis of the spatial distribution of aerosol dispersions*. Aceptado para publicarse en *Annals of Nuclear Energy* (1994).
- [2] Jeffrey, A. y Taniuti, T.: **Non-Linear Wave Propagation with Applications to Physics and Magnetohydrodynamics**. *Mathematics in Science and Engineering*, Vol. 9. Academic Press, New York, London (1967).
- [3] Smoller, J.: **Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations** Springer Verlag, New York, Heidelberg, Berlin (1983).
- [4] Basombrío, F.G.: *Fluidos viscoelásticos, simulación numérica y problemas no lineales asociados*. Tesis doctoral. Fac. de Ciencias Exactas de la Univ. Nacional de Córdoba (1993).
- [5] Basombrío, F.G.: *Some reflections about the meaning of discontinuous solutions for viscoelastic fluid flows*. *Latin American Applied Research*, Vol. 23 pg. 215 (1993).
- [6] Basombrío, F.G.: *Shocks in shear flows of the Johnson-Segalman type*. *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 49 pg. 1 (1993).