



UNIVERSIDADE DA CORUÑA



E. T. S. DE INGENIEROS DE  
CAMINOS, CANALES Y PUERTOS

# TESIS DOCTORAL

---

## UNA FORMULACIÓN HIPERBÓLICA PARA EL PROBLEMA DEL TRANSPORTE POR CONVECCIÓN-DIFUSIÓN EN MECÁNICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

POR

**HÉCTOR GÓMEZ DÍAZ**

DIRIGIDA POR

**IGNASI COLOMINAS EZPONDA  
FERMÍN NAVARRINA MARTÍNEZ**

A CORUÑA - MARZO 2006



UNIVERSIDADE DA CORUÑA



E. T. S. DE INGENIEROS DE  
CAMINOS, CANALES Y PUERTOS

# TESIS DOCTORAL

---

## UNA FORMULACIÓN HIPERBÓLICA PARA EL PROBLEMA DEL TRANSPORTE POR CONVECCIÓN-DIFUSIÓN EN MECÁNICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

POR

**HÉCTOR GÓMEZ DÍAZ**  
Ingeniero de Caminos, Canales y Puertos

DIRIGIDA POR

**IGNASI COLOMINAS EZPONDA**  
Dr. Ingeniero Industrial  
**FERMÍN NAVARRINA MARTÍNEZ**  
Dr. Ingeniero de Caminos, Canales y Puertos

A CORUÑA - MARZO 2006

A mis padres

# Índice general

Índice de figuras	v
Índice de tablas	xI
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	2
1.1.1. La necesidad de revisar el modelo matemático . . . . .	2
1.1.2. La necesidad de revisar el modelo numérico . . . . .	5
1.2. Objetivos de la tesis . . . . .	8
1.3. Estructura y contenido del documento . . . . .	9
<b>2. Formulación propuesta para el problema del transporte</b>	<b>11</b>
2.1. Introducción . . . . .	11
2.2. El origen de las ondas de calor . . . . .	12
2.3. El movimiento de pequeñas partículas suspendidas en un fluido . . . . .	13
2.4. Un problema de difusión pura con velocidad finita . . . . .	14
2.5. Aplicación de las ideas de Cattaneo a la formulación del problema de convección-difusión . . . . .	15
2.6. Estudio del modelo propuesto como un sistema de ecuaciones en forma conservativa . . . . .	16
2.6.1. Problema unidimensional . . . . .	17
2.6.2. Problema bidimensional . . . . .	19
2.6.3. El carácter dispersivo de las ecuaciones . . . . .	22
2.7. Conclusiones . . . . .	23
A.1. Solución exacta de la ecuación de difusión pura utilizando la ley de Cattaneo	24
<b>3. Formulación numérica 1D</b>	<b>31</b>
3.1. Introducción . . . . .	31
3.2. Estudio numérico del modelo propuesto en estado estacionario . . . . .	32
3.2.1. El efecto de la formulación de Galerkin sobre las ecuaciones clásicas de convección-difusión . . . . .	34
3.2.2. Resultados numéricos en flujo subcrítico . . . . .	36



3.2.3.	Ejemplos numéricos en flujo supercrítico . . . . .	39
3.2.4.	Conclusiones extraídas de los ejemplos numéricos . . . . .	41
3.3.	Problema transitorio . . . . .	42
3.3.1.	Taylor-Galerkin de segundo orden . . . . .	42
3.4.	Conclusiones . . . . .	46
<b>4.</b>	<b>Formulación numérica 2D basada en el método de Taylor-Galerkin</b>	<b>48</b>
4.1.	Introducción . . . . .	48
4.2.	Método de Taylor-Galerkin de segundo orden . . . . .	48
4.3.	Método de Taylor-Galerkin de tercer orden . . . . .	50
4.4.	Integración numérica . . . . .	51
4.5.	Ejemplos numéricos . . . . .	51
4.5.1.	Flujo subcrítico en un canal rectangular . . . . .	51
4.5.2.	Flujo transcrito en un canal rectangular . . . . .	55
4.5.3.	Vertido accidental en un puerto . . . . .	58
4.5.4.	Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo subcrítico . . . . .	58
4.5.5.	Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo supercrítico . . . . .	63
4.6.	Conclusiones . . . . .	63
<b>5.</b>	<b>Formulación numérica basada en el método de Discontinuous Galerkin</b>	<b>66</b>
5.1.	Introducción . . . . .	66
5.2.	Formulación 1D . . . . .	68
5.2.1.	Flujo numérico . . . . .	69
5.2.2.	Interpolación . . . . .	70
5.2.3.	Integración temporal . . . . .	72
5.2.4.	Estabilización . . . . .	72
5.2.5.	Condiciones de contorno . . . . .	72
5.3.	Ejemplos numéricos 1D . . . . .	73
5.4.	Formulación multidimensional . . . . .	77
5.4.1.	Flujo numérico . . . . .	77
5.4.2.	Interpolación . . . . .	80
5.4.3.	Integración numérica . . . . .	81
5.4.4.	Integración temporal . . . . .	81
5.4.5.	Estabilización . . . . .	81
5.4.6.	Condiciones de contorno . . . . .	81
5.5.	Ejemplos numéricos 2D . . . . .	82
5.5.1.	Flujo subcrítico en un canal . . . . .	82
5.5.2.	Flujo transcrito en un canal. Convección media . . . . .	82
5.5.3.	Flujo transcrito en un canal. Convección alta . . . . .	84
5.5.4.	Convección de un senoide en una rotación pura . . . . .	86
5.5.5.	Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura . . . . .	90
5.5.6.	Condición de contorno discontinua en la frontera de entrada de flujo . . . . .	92
5.5.7.	Convección oblicua a la malla . . . . .	94
5.5.8.	Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña . . . . .	102
5.6.	Conclusiones . . . . .	107

<b>6. Conclusiones y futuras líneas de desarrollo</b>	<b>113</b>
6.1. Conclusiones	113
6.1.1. Resumen	113
6.1.2. Conclusiones particulares	114
6.1.3. Conclusión general	115
6.2. Algunas conjeturas	116
6.2.1. Estudio teórico sobre la capacidad del modelo numérico para capturar las discontinuidades en una sola celda	116
6.2.2. Relación de las ecuaciones propuestas con los métodos estabilizados de elementos finitos	116
6.3. Líneas futuras de investigación	117
6.3.1. Utilización de un método $p$ -multigrad para la integración temporal	117
6.3.2. Utilización de métodos implícitos para la integración temporal	118
6.3.3. Aplicación del modelo a problemas con convección no lineal	118
6.3.4. Aplicación del modelo a problemas de flujo compresible	119
6.3.5. Aplicación de ecuaciones hiperbólicas para calcular los flujos térmicos de las ecuaciones de Navier-Stokes	119
<b>Bibliografía</b>	<b>120</b>

# Índice de figuras

1.1. Comparación para $t = 4$ (izquierda) y para $t = 10$ (derecha) entre la solución de (1.4) (línea discontinua) y la solución de (2.2) (línea continua). Los parámetros $k$ y $\tau$ tienen un valor unitario. Las flechas verticales de la figura representan distribuciones de Dirac. . . . .	5
2.1. Velocidad de la onda $v$ (izquierda) y ratio de amortiguamiento $d$ (derecha) para diferentes números de onda $\xi$ . . . . .	24
3.1. Difusividad adimensional ( $k^*/k$ ) en función de $P_e$ (izquierda) y número adimensional $H$ en función de $P_e$ (derecha). . . . .	35
3.2. Tres problemas de transporte formulados mediante la ley de Cattaneo en flujo subcrítico. Estos ejemplos están definidos por $k = 1$ , $\tau = 0.01$ y tres valores diferentes de $H$ : $H = 0.7$ (izquierda), $H = 0.88278221857319$ (centro), $H = 0.975$ (derecha). Las soluciones numéricas se han obtenido usando el método de Galerkin y 20 elementos finitos lineales. . . . .	38
3.3. Tres problemas de transporte formulados mediante la ley de Cattaneo en flujo subcrítico. Estos ejemplos están definidos por $k = 1$ , $\tau = 1$ y tres valores diferentes de $H$ : $H = 0.97$ (izquierda), $H = 0.98757812194848$ (centro), $H = 0.995$ (derecha). Las soluciones numéricas se han obtenido usando el método de Galerkin y 20 elementos finitos lineales. . . . .	39
3.4. Tres problemas de transporte formulados mediante la ley de Cattaneo en flujo supercrítico. Estos ejemplos están definidos por $k = 1$ , $\tau = 0.01$ y tres valores diferentes de $H$ : $H = 1.2$ (izquierda), $H = 1.132782218537319$ (centro), $H = 1.05$ (derecha). Las soluciones numéricas se han obtenido usando el método de Galerkin y 20 elementos finitos lineales. . . . .	40
3.5. Tres problemas de transporte formulados mediante la ley de Cattaneo en flujo supercrítico. Estos ejemplos están definidos por $k = 1$ , $\tau = 1$ y tres valores diferentes de $H$ : $H = 1.05$ (izquierda), $H = 1.01257812194848$ (centro), $H = 1.005$ (derecha). Las soluciones numéricas se han obtenido usando el método de Galerkin y 20 elementos finitos lineales. . . . .	41

3.6. Problema de convección-difusión en flujo subcrítico. Soluciones numéricas (matriz de masas condensada y consistente) en una malla de 20 elementos frente a la solución exacta. Se dibujan las soluciones para $t = 0.25$ s. (arriba izquierda), $t = 0.5$ s. (arriba derecha), $t = 1$ s. (abajo izquierda) y $t = 2$ s. (abajo derecha). Los valores de los parámetros son $k = 1$ , $\tau = 1$ , $a = 0.9$ . . .	45
3.7. Problema de convección-difusión en flujo subcrítico. Soluciones numéricas (matriz de masas condensada y consistente) en una malla de 20 elementos frente a la solución exacta. Se dibujan las soluciones para $t = 0.25$ s. (izquierda) y $t = 0.5$ s. (derecha). Los valores de los parámetros son $k = 1$ , $\tau = 1$ , $a = 0.995$ . . . . .	46
3.8. Problema de convección-difusión en flujo supercrítico. Soluciones numéricas (matriz de masas condensada y consistente) en una malla de 20 elementos frente a la solución exacta. Se dibujan las soluciones para $t = 0.25$ s. (izquierda) y $t = 0.5$ s. (derecha). Los valores de los parámetros son $k = 1$ , $\tau = 1$ , $a = 1.005$ . . . . .	47
4.1. Flujo subcrítico en un canal. Malla de cálculo (450 elementos bilineales). . .	51
4.2. Flujo subcrítico en un canal. Condición inicial en concentraciones. . . . .	52
4.3. Flujo subcrítico en un canal. Soluciones para $t = 3$ s., $t = 6$ s., $t = 9$ s., $t = 12$ s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden. . .	53
4.4. Flujo subcrítico en un canal. Soluciones para $t = 3$ s., $t = 6$ s., $t = 9$ s., $t = 12$ s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de tercer orden. . . . .	54
4.5. Flujo transcrito en un canal. Malla de cálculo (1500 elementos bilineales). . . . .	55
4.6. Flujo transcrito en un canal. Soluciones para $t = 1.5$ s., $t = 3$ s., $t = 4.5$ s., $t = 6$ s., $t = 12$ s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden. . . . .	56
4.7. Flujo transcrito en un canal. Soluciones para $t = 1.5$ s., $t = 3$ s., $t = 4.5$ s., $t = 6$ s., $t = 12$ s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de tercer orden. . . . .	57
4.8. Vertido accidental en un puerto: Malla de elementos finitos empleada para el cálculo (2481 elementos bilineales) y campo de velocidades. La malla se ha generado mediante el sistema GEN4U [116]. El contorno tipo pared se ha dibujado en color verde, el contorno en el que se produce el vertido se ha dibujado en color rojo y en el contorno de mar abierto se ha dibujado en naranja la parte de salida de flujo y en azul la parte de entrada de flujo. . .	59
4.9. Vertido accidental en un puerto: De izquierda a derecha y de arriba a abajo, condición inicial de concentraciones y soluciones para los instantes $t^* = 6$ , $t^* = 12$ , $t^* = 24$ , $t^* = 36$ , $t^* = 48$ , $t^* = 60$ , $t^* = 84$ , $t^* = 132$ y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden. . . . .	60
4.10. Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo subcrítico. Planteamiento del problema. . . . .	61
4.11. Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo subcrítico. Malla de cálculo de 1254 nodos y 1166 elementos bilineales. . . . .	61

4.12. Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo subcrítico. De arriba a abajo condición inicial de concentraciones y soluciones para $t = 4.82$ s., $t = 9.62$ s., $t = 14.42$ s., $t = 19.22$ s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden. . . . .	62
4.13. Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo supercrítico. Malla de cálculo de 1824 nodos y 1711 elementos bilineales. . . . .	63
4.14. Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo supercrítico. De arriba a abajo condición inicial de concentraciones y soluciones para $t = 3$ s., $t = 6$ s., $t = 9$ s., $t = 12$ s., $t = 15$ s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden. . . . .	64
5.1. Esquema de la solución que proporciona el método de <i>discontinuous Galerkin</i> . Obsérvese que si la interpolación es de tipo polinómico el grado del polinomio puede ser diferente en cada elemento. . . . .	67
5.2. Error en norma $\ \cdot\ _2$ (izquierda) y en norma $\ \cdot\ _\infty$ (derecha) frente a tamaño de elemento. El orden de convergencia se obtiene mediante un ajuste por mínimos cuadrados. $k = 1$ , $\tau = 1$ , $a = 0.5$ . . . . .	75
5.3. Error en norma $\ \cdot\ _2$ (izquierda) y en norma $\ \cdot\ _\infty$ (derecha) frente a número de grados de libertad. El orden de convergencia se obtiene mediante un ajuste por mínimos cuadrados. $k = 1$ , $\tau = 1$ , $a = 0.5$ . . . . .	76
5.4. Error en norma $\ \cdot\ _2$ (izquierda) y en norma $\ \cdot\ _\infty$ (derecha) frente a coste computacional por paso de tiempo. El orden de convergencia se obtiene mediante un ajuste por mínimos cuadrados. $k = 1$ , $\tau = 1$ , $a = 0.5$ . . . . .	76
5.5. Problema de convección-difusión en flujo subcrítico. Soluciones numéricas en una malla de 20 elementos lineales para $t = 0.5$ s. (arriba izquierda), $t = 2$ s. (arriba derecha) y $t = 4$ s. (abajo izquierda). En el estacionario (abajo derecha) se dibuja la solución numérica en una malla de 20 elementos lineales frente a la solución exacta. Los valores de los parámetros son $k = 1$ , $\tau = 1$ , $a = 0.99999999$ . . . . .	78
5.6. Problema de convección-difusión en flujo subcrítico. Soluciones numéricas en una malla de 20 elementos cuadráticos para $t = 0.5$ s. (arriba izquierda), $t = 2$ s. (arriba derecha) y $t = 4$ s. (abajo izquierda). En el estacionario (abajo derecha) se dibuja la solución numérica en una malla de 20 elementos cuadráticos frente a la solución exacta. Los valores de los parámetros son $k = 1$ , $\tau = 1$ , $a = 0.99999999$ . . . . .	79
5.7. Elemento que interviene en el cálculo del flujo numérico en la cara $L_{iedge}$ del elemento $\Omega_{ielem}$ . . . . .	80
5.8. Flujo subcrítico en un canal. Malla de cálculo (120 elementos bicuadráticos). . . . .	82
5.9. Flujo subcrítico en un canal. Condición inicial de concentraciones y soluciones para $t = 3$ s., $t = 6$ s., $t = 9$ s., $t = 12$ s. y estacionario utilizando el método de <i>discontinuous Galerkin</i> y elementos bicuadráticos. . . . .	83
5.10. Flujo transcrito en un canal. Convección media. Malla de cálculo (200 elementos bicuadráticos). . . . .	84

5.11. Flujo transcrito en un canal. Convección media. Soluciones para $t = 1.5$ s., $t = 3$ s, $t = 4.5$ s., $t = 6$ s., $t = 12$ s. y estacionario usando el método de <i>discontinuous Galerkin</i> y elementos bicuadráticos. . . . .	85
5.12. Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Malla de cálculo (900 elementos bicuadráticos). . . . .	86
5.13. Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Soluciones para $t = 4 \cdot 10^{-4}$ s., $t = 8 \cdot 10^{-4}$ s., $t = 16 \cdot 10^{-4}$ s., $t = 32 \cdot 10^{-4}$ s., $t = 64 \cdot 10^{-4}$ s. y estacionario usando el método de <i>discontinuous Galerkin</i> y elementos bicuadráticos. . . . .	87
5.14. Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Detalle de la solución para $t = 0.0192$ s. usando <i>discontinuous Galerkin</i> y elementos bicuadráticos. . . . .	88
5.15. Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Malla de cálculo de la mitad del dominio (450 elementos bicuadráticos). . . . .	88
5.16. Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Cálculo de la mitad del dominio. Condición inicial en concentraciones (arriba izquierda), soluciones para $t = 4 \cdot 10^{-4}$ s. (arriba derecha), $t = 8 \cdot 10^{-4}$ s. (centro izquierda), $t = 16 \cdot 10^{-4}$ s. (centro derecha), $t = 32 \cdot 10^{-4}$ s. (abajo izquierda) y solución estacionaria (abajo derecha) usando el método de <i>discontinuous Galerkin</i> y elementos bicuadráticos. . . . .	89
5.17. Convección de un senoide en una rotación pura. Planteamiento del problema. . . . .	90
5.18. Convección de un senoide en una rotación pura. Solución estacionaria en una malla de $30 \times 30$ elementos bicuadráticos. $k = 10^{-6}$ , $\tau = 1$ , $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ . . . . .	91
5.19. Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Planteamiento del problema. . . . .	91
5.20. Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Solución estacionaria en la malla gruesa (1875 elementos, izquierda) y en la malla fina (4601 elementos, derecha). Las mallas se han generado mediante el sistema GEN4U [116]. $k = 10^{-6}$ , $\tau = 1$ , $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ . . . . .	92
5.21. Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Detalle de la solución estacionaria en la malla gruesa (1875 elementos, izquierda) y en la malla fina (4601 elementos, derecha). $k = 10^{-6}$ , $\tau = 1$ , $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ . . . . .	93
5.22. Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Detalle de la solución estacionaria en la malla gruesa (1875 elementos, izquierda) y en la malla fina (4601 elementos, derecha). $k = 10^{-6}$ , $\tau = 1$ , $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ . . . . .	93
5.23. Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Solución en la malla gruesa para $t = 0.5$ s. (izquierda) y $t = 0.75$ s. (derecha). $k = 10^{-6}$ , $\tau = 1$ , $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ . . . . .	94
5.24. Condición de contorno discontinua en la frontera de entrada de flujo. Solución estacionaria para $k = 0.02$ (izquierda) y para $k = 10^{-6}$ (derecha). . . . .	95
5.25. Convección oblicua a la malla. Planteamiento del problema. . . . .	96

- 5.26. Convección oblicua a la malla. Solución estacionaria en una malla de  $20 \times 20$  elementos cuadrados. En las dos figuras superiores la discontinuidad de las condiciones de contorno se aproxima por una condición de contorno continua en la que el salto se realiza en un sólo elemento. En las dos figuras inferiores la discontinuidad de las condiciones de contorno se impone de forma exacta. Contorno de salida de flujo (izquierda) y contorno de entrada de flujo (derecha).  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = 45^\circ$ . . . . . 96
- 5.27. Convección oblicua a la malla. Solución estacionaria en una malla de  $20 \times 20$  elementos cuadrados. En las dos figuras superiores la discontinuidad de las condiciones de contorno se aproxima por una condición de contorno continua en la que el salto se realiza en un sólo elemento. En las dos figuras inferiores la discontinuidad de las condiciones de contorno se impone de forma exacta. Contorno de salida de flujo (izquierda) y contorno de entrada de flujo (derecha).  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = \arctan(2) \approx 63.4^\circ$ . . . . . 97
- 5.28. Convección oblicua a la malla. Solución transitoria en una malla de  $20 \times 20$  elementos. Solución para  $t = 0.217$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.496$  s. (arriba derecha),  $t = 0.784$  s. (abajo izquierda) y  $t = 1.072$  s. (abajo derecha). La discontinuidad de las condiciones de contorno se aproxima por una condición de contorno continua en la que el salto se realiza en un sólo elemento. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = 45^\circ$ . . . . . 98
- 5.29. Convección oblicua a la malla. Solución transitoria en una malla de  $20 \times 20$  elementos. Solución para  $t = 0.249$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.536$  s. (arriba derecha),  $t = 0.816$  s. (abajo izquierda) y  $t = 1.100$  s. (abajo derecha). La discontinuidad de las condiciones de contorno se impone de forma exacta. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = 45^\circ$ . . . . . 99
- 5.30. Convección oblicua a la malla. Solución transitoria en una malla de  $20 \times 20$  elementos. Solución para  $t = 0.169$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.392$  s. (arriba derecha),  $t = 0.616$  s. (abajo izquierda) y  $t = 0.848$  s. (abajo derecha). La discontinuidad de las condiciones de contorno se aproxima por una condición de contorno continua en la que el salto se realiza en un sólo elemento. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = \arctan(2) \approx 63.4^\circ$ . . . . . 100
- 5.31. Convección oblicua a la malla. Solución transitoria en una malla de  $20 \times 20$  elementos. Solución para  $t = 0.193$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.368$  s. (arriba derecha),  $t = 0.648$  s. (abajo izquierda) y  $t = 0.872$  s. (abajo derecha). La discontinuidad de las condiciones de contorno se impone de forma exacta. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = \arctan(2) \approx 63.4^\circ$ . . . . . 101
- 5.32. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Situación geográfica del problema. Europa Occidental (arriba) y Galicia (abajo). La fotografía de Europa Occidental es cortesía del Instituto Nacional de Meteorología. La fotografía de Galicia es cortesía de Videalab, ETSICCP-UDC. En ambas fotografías se ha indicado con un círculo la situación de A Coruña. 103
- 5.33. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Fotografías de la ciudad de A Coruña (arriba) y del puerto de A Coruña (abajo). . . . . 104

5.34. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Dominio del problema constituido por los muelles y el contorno de mar abierto del puerto de A Coruña. . . . .	105
5.35. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Campo de velocidades y tipos de contornos (arriba) y malla de cálculo (abajo). El contorno tipo pared se ha dibujado en color verde, el contorno en el que se produce el vertido se ha dibujado en color rojo y el contorno de mar abierto se ha dibujado en color azul. La malla de cálculo contiene 2023 elementos bicuadráticos y ha sido generada mediante el sistema GEN4U [116]. . . . .	106
5.36. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Condición inicial de concentraciones (arriba) y solución de concentraciones para $t^* = 25$ (abajo). . . . .	108
5.37. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Soluciones para $t^* = 50$ (arriba) y $t^* = 75$ (abajo). . . . .	109
5.38. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Soluciones para $t^* = 100$ (arriba) y $t^* = 150$ (abajo). . . . .	110
5.39. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Soluciones para $t^* = 200$ (arriba) y $t^* = 400$ (abajo). . . . .	111



# Índice de tablas

5.1.	Error en la concentración en norma $\ \cdot\ _\infty$ , error en la concentración en norma $\ \cdot\ _2$ y órdenes de convergencia. Elementos lineales. $k = 1, \tau = 1, a = 0.5$ . .	74
5.2.	Error en el flujo en norma $\ \cdot\ _\infty$ , error en el flujo en norma $\ \cdot\ _2$ y órdenes de convergencia. Elementos lineales. $k = 1, \tau = 1, a = 0.5$ . . . . .	74
5.3.	Error en la concentración en norma $\ \cdot\ _\infty$ , error en la concentración en norma $\ \cdot\ _2$ y órdenes de convergencia. Elementos cuadráticos. $k = 1, \tau = 1, a = 0.5$ .	74
5.4.	Error en el flujo en norma $\ \cdot\ _\infty$ , error en el flujo en norma $\ \cdot\ _2$ y órdenes de convergencia. Elementos cuadráticos. $k = 1, \tau = 1, a = 0.5$ . . . . .	74

## Agradecimientos

Siempre he creído en la importancia de la formación académica para la trayectoria profesional y personal de los miembros de una sociedad. La preparación y el trabajo me parecen la mejor forma de alcanzar el éxito. Sin embargo, la austeridad con que la sociedad actual trata a aquellos que deciden completar su formación mediante estudios de doctorado es capaz de acabar con la ilusión de la mayoría. Es por ello que creo que mis convicciones y mi determinación por realizar una tesis doctoral no hubiesen sido suficientes para terminar mis estudios de posgrado sin la ayuda y el apoyo de los profesores Manuel Casteleiro, Fermín Navarrina e Ignasi Colominas. Y no sólo creo que sin su colaboración no hubiese realizado mis estudios de doctorado, sino que dudo que hubiese merecido la pena hacerlo. Trabajar con ellos ha sido una experiencia tan enriquecedora como la elaboración de la propia tesis. Durante este tiempo me he sentido parte de su magnífico trabajo para el desarrollo de la investigación en métodos numéricos en ingeniería. Su estrategia de trabajo genera oportunidades para los jóvenes ingenieros y tecnología de alto nivel para la sociedad, por lo que me siento orgulloso de formar parte de su grupo.

Como directores de tesis Fermín Navarrina e Ignasi Colominas han sido todo lo que un director de tesis puede ser. Han sabido ilusionarme con este proyecto, han encauzado correctamente mi esfuerzo y han sabido apremiarme para que la realización de esta tesis no se dilatase, lo cual aprecio sobremanera. Les agradezco sincera y profundamente su apoyo y su amistad. Gracias por haberme permitido trabajar en un ambiente de confianza y por poner a mi disposición todos los medios necesarios para viajar a universidades de todo el mundo, participar en congresos y cursos, etc.

Por supuesto, agradezco a Luis Cueto-Felgueroso sus numerosos y acertados consejos durante la realización de esta tesis. Su amistad y su compañía han sido un apoyo importante para la realización de este trabajo. José Luis Añón es también parte activa de esta tesis. Le agradezco su amabilidad, su eficacia y su continua disponibilidad.

Quiero expresar mi gratitud hacia el Concello de Monforte de Lemos por el magnífico comportamiento que ha tenido conmigo cuando fui galardonado con el premio Arquímedes. El reconocimiento público del Concello a mi trabajo me llena, cada día más, de orgullo y satisfacción. Seguiré trabajando para intentar responder satisfactoriamente a la confianza depositada en mí. En particular, deseo mostrar mi sincero y profundo agradecimiento a Severino Rodríguez y José Tomé. Les deseo lo mejor en su trayectoria profesional y personal.

No es posible mostrar en esta página (ni en número finito de páginas) mi agradecimiento hacia mi familia y amigos. Todas las decisiones que tomo (como, por ejemplo, realizar esta tesis doctoral) tienen su origen y final en ellos. Espero poder devolverles algún día todo lo que me han dado.

Resta añadir mi agradecimiento a las instituciones que con su financiación han hecho posible esta investigación: La *Subdirección Xeral de I+D de la Xunta de Galicia* (Proyectos PGIDT03PXIC18001PN y PGIDT05PXIC18002PN), el Ministerio de Educación y Ciencia (Proyectos DPI2002-00297 y DPI2004-05156), la Universidad de A Coruña y la Fundación de la Ingeniería Civil de Galicia. También quisiera agradecer la financiación recibida de la Fundación Marie Curie que hizo posible mi asistencia al curso *Very high order discretization methods* celebrado en el *von Karman Institute*, Bruselas.

## Resumen

Una formulación hiperbólica para el problema del transporte por  
convección-difusión en mecánica de fluidos computacional

por

Héctor Gómez Díaz

Ingeniero de Caminos, Canales y Puertos

Universidad de A Coruña

En esta tesis se propone una nueva metodología (constituida por un modelo matemático y un modelo numérico) para la resolución de problemas de transporte por convección-difusión en ingeniería. La formulación propuesta está basada en una ecuación constitutiva desarrollada a partir de la ley de Cattaneo y elimina parte de los inconvenientes de la formulación basada en la ley de Fick como, por ejemplo, la predicción de transporte a velocidad infinita. El modelo matemático propuesto introduce un nuevo parámetro denominado *tiempo de relajación* y las ecuaciones que constituyen el modelo se pueden escribir como un sistema (totalmente hiperbólico) de leyes de conservación. La formulación parabólica basada en la ley de Fick se puede obtener como un caso particular de la formulación propuesta.

El estudio de las ecuaciones unidimensionales en estado estacionario permite obtener conclusiones interesantes: Por ejemplo, se demuestra que bajo ciertas condiciones, la solución numérica (obtenida por el método de Galerkin con elementos lineales) del problema clásico es (para mallas suficientemente finas) igual a la solución exacta de las ecuaciones propuestas para un cierto valor del tiempo de relajación que depende del tamaño de malla. Además, se prueba que si se utiliza la formulación de Galerkin, la solución numérica de las ecuaciones del transporte propuestas es estable para todos los valores posibles de la velocidad, excepto para un pequeño intervalo cuyo tamaño es inversamente proporcional al tiempo de relajación.

Se han propuesto dos algoritmos para la resolución numérica del modelo matemático hiperbólico. El primero de ellos está basado en el método de Taylor-Galerkin y el segundo es un esquema tipo *discontinuous Galerkin*. Mediante el primer método se resuelven varios casos de interés en ingeniería, probando de este modo que el modelo propuesto conduce a soluciones razonables desde un punto de vista ingenieril y que puede ser aplicado a problemas reales de ingeniería. Sin embargo, es recomendable desarrollar un algoritmo especialmente

orientado a la resolución de problemas de convección dominante. Por este motivo, se propone un esquema numérico fundamentado en el método de *discontinuous Galerkin* para la resolución del modelo hiperbólico propuesto. Por medio de algunos ejemplos se muestra que al utilizar el método de *discontinuous Galerkin* se alcanzan los órdenes de convergencia óptimos para elementos lineales y cuadráticos. Además, con el algoritmo de tipo *discontinuous Galerkin* se resuelven ejemplos clásicos de convección dominante, obteniéndose en todos los casos muy buenos resultados (soluciones estables con las discontinuidades capturadas en una o dos celdas) sin necesidad de realizar ningún tipo de estabilización. Además, se utiliza el algoritmo tipo *discontinuous Galerkin* para la simulación numérica de la evolución de un vertido accidental en una zona portuaria haciendo uso de la geometría real del puerto de A Coruña.

Por los motivos anteriores se propone la utilización de la metodología presentada (modelo matemático hiperbólico y modelo numérico de *discontinuous Galerkin*) para la resolución de problemas de convección-difusión en ingeniería. Esta metodología compite con los métodos más eficientes disponibles en la actualidad, teniendo además las ventajas de predecir velocidades difusivas finitas, de no requerir ningún tipo de estabilización y de evitar la imposición de condiciones de contorno en los contornos de salida de flujo en situaciones de convección dominante. Probablemente, uno de los métodos más eficientes para la resolución de las ecuaciones clásicas de convección-difusión en situaciones de convección dominante sea el *local discontinuous Galerkin* (LDG). Para aplicar este método es necesario realizar una descomposición del sistema de segundo orden que constituyen las ecuaciones de convección-difusión en un sistema mayor de primer orden, lo que aumenta mucho los grados de libertad del problema con respecto a otros métodos numéricos. Sin embargo, el dominio de dependencia local del método, la posibilidad de obtener soluciones de alto orden y la alta eficiencia en la paralelización compensa con mucho el número extra de grados de libertad según Cockburn y Shu [34]. El método presentado en esta tesis tiene soporte mínimo (sólo primeros vecinos), por lo que es altamente paralelizable, da lugar al mismo número de grados de libertad que el *local discontinuous Galerkin*, permite aumentar el orden de convergencia arbitrariamente (al menos desde un punto de vista formal), se puede implementar mediante una técnica de *flux vector splitting* (el sistema es totalmente hiperbólico y el flujo una función homogénea de las variables conservadas) y no requiere la utilización de técnicas de difusividad artificial ni de limitadores.

## Abstract

A hyperbolic formulation for convective-diffusive problems in CFD

by

Héctor Gómez Díaz

Civil Engineer

University of A Coruña

In this thesis, a new methodology for convection-diffusion problems in engineering is introduced. The proposal comprises both mathematical and numerical models. The proposed formulation is based on a constitutive equation which has been derived from Cattaneo's law. Thus, the infinite speed paradox, that is inherent to the standard parabolic model is avoided. The proposed formulation can be cast as a totally hyperbolic system of conservation laws. The hyperbolic model introduces an additional parameter called *relaxation time*. In fact, when the relaxation time vanishes, the convection-diffusion equation based on Fick's law is obtained.

From a numerical point of view, an accurate study of the 1D steady equations renders some important results. For instance, under certain hypothesis, the exact solution of the proposed model for a certain value of the relaxation time equals the numerical solution of the standard equation given by the Galerkin method with linear elements. In addition, we show that the Galerkin solution (with linear elements) of the proposed equations is stable for any value of the fluid velocity, except for a small interval whose length decreases as the relaxation time increases.

Two different algorithms are introduced for the numerical resolution of the multidimensional proposed model. The first one is based on the Taylor-Galerkin methods and the second one is a discontinuous Galerkin method. Some practical engineering problems are solved by using the Taylor-Galerkin method. These examples show that the proposed model leads to quite realistic results and that it can be applied to solve real engineering problems. However, it is convenient to develop a numerical method especially designed for convection-dominated problems. For this reason, a discontinuous Galerkin method is proposed for the resolution of the hyperbolic model. By means of some examples we show that the optimal convergence orders are achieved for linear and quadratic elements. In addition, we

check the discontinuous Galerkin method by solving some classical convection-dominated test problems. The quality of the numerical results is excellent. This is remarkable, since we do not use any stabilization technique. Both boundary and internal layers are normally captured within one or two elements without the presence of spurious oscillations. Finally, an application example concerning the evolution of a pollutant spilled in a port is solved by using the real geometry of the Port of A Coruña (northwest of SPAIN, EU).

For the stated above reasons, we conclude that the proposed methodology (what includes both, the mathematical and the numerical model) is an efficient tool for the resolution of convection-diffusion problems in engineering and it competes with the best methods known so far. Moreover, the proposed method possesses the following advantages: it predicts a finite velocity of propagation, it does not require the use of stabilization techniques and it avoids the imposition of boundary conditions on outflow boundaries in convection-dominated situations. Maybe, one of the most efficient methods for the resolution of convection-diffusion problems in convection-dominated flows is the local discontinuous Galerkin by Cockburn and Shu [34]. In order to use this method, it is necessary to split the second order equation that governs the standard description of convective-diffusive problems in a system of first order equations. Obviously, this procedure introduces a lot of extra degrees of freedom. However, the local domain of dependence of the method, which allows a very efficient parallelization as well as the possibility of increasing the order of convergence, compensates by far the extra amount of computations, according to Cockburn and Shu [34]. The method proposed in this thesis presents a minimum domain of dependence (only first neighbors), it involves the same number of degrees of freedom as the local discontinuous Galerkin does, it allows arbitrarily increasing the order of convergence (at least from a theoretical point of view) and it does not require the use of any stabilization technique.

# Capítulo 1

## Introducción

Esta tesis está dedicada al estudio de problemas de transporte por convección-difusión. Este tipo de problemas es muy frecuente en ingeniería. Algunos de los ejemplos más relevantes son:

- Simulación de los efectos de un vertido de contaminante en el océano, en un río o en la atmósfera;
- Estudio de la evolución de reservas de petróleo, gas natural, etc.
- Estudios de transmisión de calor y masa en problemas de ingeniería química o nuclear.

En este trabajo se estudiarán principalmente fenómenos de transporte de masa en medios fluidos, por ejemplo, el transporte de un contaminante en un fluido en movimiento. En este contexto, y en el ámbito de la ingeniería, es necesario elaborar modelos matemáticos y numéricos para realizar predicciones fiables de la evolución del contaminante en el medio fluido. Para este tipo de problemas se han utilizado tradicionalmente modelos matemáticos muy simplificados a pesar de la complejidad del fenómeno físico de la difusión molecular. Además, la resolución numérica de estos modelos matemáticos es costosa desde un punto de vista computacional cuando el transporte está dominado por la convección.

En esta tesis se propone una metodología para la resolución de problemas de transporte por convección-difusión en ingeniería haciendo énfasis tanto en el modelo matemático como en su solución numérica.

En el primer apartado de este capítulo se presenta la motivación para realizar este trabajo enfatizando el importante campo de aplicación en ingeniería del problema estudiado. Los objetivos de esta tesis se presentan en el apartado 1.2. Estos objetivos se dividen en objetivos generales y objetivos específicos.

## 1.1. Motivación

La importancia de los fenómenos de transporte por convección-difusión ha sido reconocida en muchos campos de la ingeniería y las ciencias aplicadas. Se presentan, por ejemplo, en las siguientes situaciones:

1. Vertidos de contaminantes en ríos (ver, por ejemplo, [14])
2. Almacenamiento geológico profundo de residuos nucleares [106]
3. Problemas en biología marina [70]
4. Intrusión de sal marina en un estuario [98, 117]
5. Problemas en ingeniería agrícola como puede ser la predicción del movimiento de pesticidas y fertilizantes a través del suelo [1]

El importante número de situaciones en que se encuentran fenómenos de transporte por convección-difusión en la naturaleza y su gran impacto socio-económico hace de este tipo de fenómenos un tema de gran interés científico.

### 1.1.1. La necesidad de revisar el modelo matemático

La complejidad de realizar un modelo matemático para el transporte por convección-difusión reside en la necesidad de describir a nivel macroscópico un fenómeno (la difusión molecular) que realmente tiene un carácter microscópico. A lo largo de la historia ha habido multitud de intentos de modelar este fenómeno, pero en la actualidad se sigue utilizando en la mayoría de las aplicaciones prácticas uno de los primeros modelos propuestos. Este modelo es el establecido por Fick en 1855 [50]. Sin embargo, el modelo de Fick, al igual que la ley de Fourier, presenta una deficiencia clara: *predice propagaciones de masa a velocidad no acotada*. En lo que sigue demostraremos la aseveración anterior. Para ello, comenzaremos revisando la formulación y resolveremos las ecuaciones para un ejemplo sencillo.

En toda la tesis se asumirá que se pueden desacoplar las ecuaciones hidrodinámicas de las ecuaciones del transporte, y así, calcular primero el campo de velocidades que se utiliza luego para resolver las ecuaciones que nos dan los niveles de contaminación. Por tanto, en todo momento supondremos conocido el campo de velocidades, teniendo presente que debe verificar las ecuaciones de la hidrodinámica. A lo largo de la tesis se supondrá que el fluido es incompresible y que no existen fuentes ni sumideros, por lo que el campo de velocidades debe ser solenoidal. Teniendo en cuenta las consideraciones anteriores, las ecuaciones que gobiernan el problema de convección-difusión son:



$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{q}) = 0 \quad (1.1a)$$

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \nabla_{\mathbf{x}}(u) \quad (1.1b)$$

donde (1.1a) es la ecuación de conservación de masa de contaminante y (1.1b) es la ecuación de Fick (ecuación constitutiva). En las ecuaciones anteriores  $u$  es la concentración de contaminante,  $\mathbf{a}$  es el vector velocidad,  $\mathbf{q}$  es el flujo difusivo de contaminante por unidad de densidad de fluido y  $\mathbf{K}$  es el tensor de difusividad (se asume que es definido positivo). El sistema de ecuaciones (1.1) se puede desacoplar ya que es posible introducir (1.1b) en (1.1a) y resolver la ecuación escalar

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K} \nabla_{\mathbf{x}}(u)) = 0 \quad (1.2)$$

La ecuación (1.2) es parabólica, por lo que para obtener un problema bien planteado se debe imponer una condición en cada punto del contorno, así como una condición inicial.

Consideremos, por ejemplo, el transporte por convección-difusión en un dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  con un contorno regular. Denotamos  $\Gamma$  a este contorno y  $\mathbf{n}$  a su normal exterior unitaria. Supongamos que el dominio está compuesto por una parte  $\Gamma_D$  en la que se prescribe el valor de  $u$  (condición tipo Dirichlet) y una parte complementaria  $\Gamma_N$  en la que se prescribe el flujo (condición tipo Neumann). Además, se supone conocida la distribución inicial de la cantidad transportada  $u$ . Con estas consideraciones podemos plantear el problema de valores iniciales y de contorno como sigue: dado un campo de velocidades solenoidal  $\mathbf{a}$ , dado el tensor difusividad  $\mathbf{K}$  y dadas las convenientes condiciones iniciales y de contorno, hallar  $u: \Omega \times [0, T] \mapsto \mathbb{R}$  tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K} \nabla_{\mathbf{x}}(u)) = 0 \quad \text{en } \Omega \times [0, T] \quad (1.3a)$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) \quad \text{en } \Omega \quad (1.3b)$$

$$u = u_D \quad \text{en } \Gamma_D \times (0, T] \quad (1.3c)$$

$$\mathbf{K} \nabla_{\mathbf{x}}(u) \cdot \mathbf{n} = h_N \quad \text{en } \Gamma_N \times (0, T] \quad (1.3d)$$

Es conveniente destacar que resolver numéricamente (1.1) en lugar de (1.2) implica un mayor coste computacional. Sin embargo, si se resuelve el problema utilizando la expresión (1.2) el flujo de contaminante  $\mathbf{q}$  deberá ser calculado mediante la expresión (1.1b) y, por tanto, el orden de convergencia en flujos será una unidad menor que en concentraciones. Si se resuelve directamente el sistema de ecuaciones (1.1) se obtendrá el mismo orden de convergencia en concentraciones y en flujos.

Revisada la formulación, demostraremos ahora que conduce a propagaciones de masa a velocidad no acotada. Consideremos un medio (incompresible) homogéneo, isótropo (por tanto, si  $\mathbf{I}$  es el tensor identidad,  $\mathbf{K} = k\mathbf{I}$  para un cierto  $k > 0$ ), unidimensional y de longitud infinita. En este dominio resolveremos el problema del vertido puntual en situación de difusión pura. Por tanto, el problema a resolver es: hallar  $u: \mathbb{R} \times [0, \infty) \mapsto \mathbb{R}$  tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} - k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad t > 0 \quad (1.4a)$$

$$u(x, 0) = \delta(x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (1.4b)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x, t) = 0 \quad t > 0. \quad (1.4c)$$

donde  $\delta$  es la distribución de Dirac. Dado que el dominio es infinito, no se han impuesto condiciones de contorno sino simplemente unas condiciones de normalidad en el infinito.

El problema (1.4) se puede resolver de forma exacta mediante una transformación de Fourier (ver [61] para una resolución detallada). La solución de (1.4) es

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kt}} e^{-\frac{x^2}{4kt}}, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \quad (1.5)$$

Si fijamos un tiempo  $t = \tau > 0$ , podemos definir

$$\tilde{u}(x) = u(x, \tau) = \frac{1}{\sqrt{4\pi k\tau}} e^{-\frac{x^2}{4k\tau}} \quad (1.6)$$

que es la función de Gauss y por lo tanto cumple  $\tilde{u}(x) > 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$ . Esto quiere decir que existe masa de contaminante en cualquier punto del dominio  $\forall t > 0$ . Además, como ya habíamos visto, en el instante inicial  $u(x, 0) = 0 \quad \forall x \neq 0$ , es decir, no hay masa de contaminante en ningún punto que no sea el origen de coordenadas. Teniendo en cuenta lo anterior podemos ver que si fijamos un punto cualquiera  $x_0$  se cumple:

$$u(x_0, \tau) > 0 \quad \forall \tau > 0 \quad (1.7)$$

y por tanto una partícula que en el instante  $t = \tau$  se encuentre en el punto  $x = x_0$  necesariamente ha tenido que alcanzar en su trayectoria una velocidad  $\bar{v} = x_0/\tau$  que no está acotada porque el razonamiento anterior es válido  $\forall \tau > 0$  y  $\forall x_0 \in \mathbb{R}$ . En la figura 1.1 se muestra (en línea discontinua)<sup>1</sup> la solución de (1.4) para  $k = 1$  en los instantes  $t = 4$  y  $t = 10$ .

---

<sup>1</sup>Las flechas verticales de la figura representan distribuciones de Dirac.

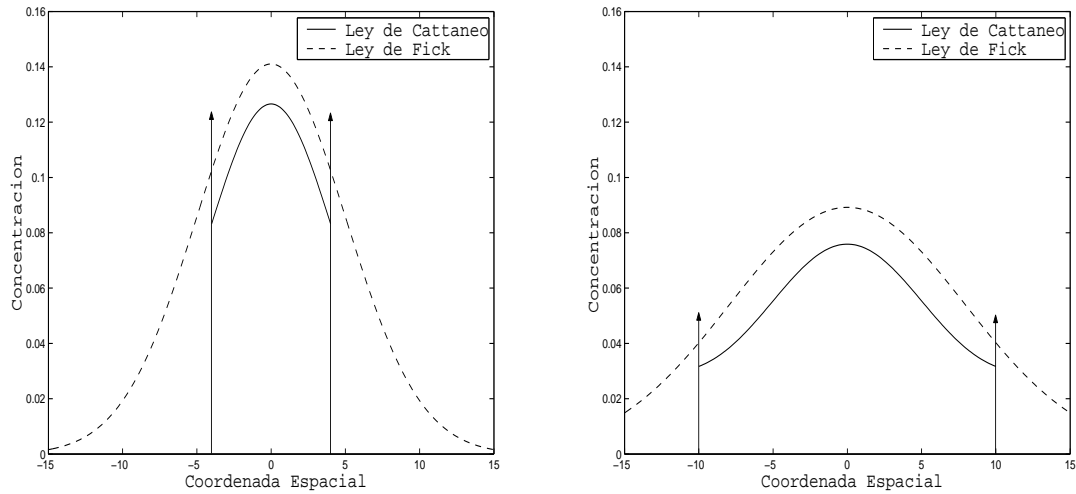


Figura 1.1: Comparación para  $t = 4$  (izquierda) y para  $t = 10$  (derecha) entre la solución de (1.4) (línea discontinua) y la solución de (2.2) (línea continua). Los parámetros  $k$  y  $\tau$  tienen un valor unitario. Las flechas verticales de la figura representan distribuciones de Dirac.

### 1.1.2. La necesidad de revisar el modelo numérico

En problemas prácticos de ingeniería no es posible obtener soluciones exactas de las ecuaciones del transporte, por lo que es necesario realizar un modelo numérico. Estos modelos numéricos requieren un gran coste computacional en situaciones de convección dominante.

Aparte de su interés práctico, la ecuación de convección-difusión representa un modelo adecuado para la introducción de esquemas numéricos para problemas más complicados como pueden ser las ecuaciones de Navier-Stokes.

Por estos motivos, se ha llevado a cabo una intensa actividad investigadora con el fin de desarrollar nuevos métodos numéricos para la resolución de este tipo de problemas. Desde 1950 se han propuesto numerosos procedimientos interesantes pero los resultados que proporcionan siguen siendo a día de hoy un compromiso entre precisión y estabilidad cuando el término convectivo es importante.

En los años 50 surge la idea de que añadir disipación numérica (de un modo u otro) es la forma de obtener soluciones estables para esta ecuación. En el ámbito de las diferencias finitas esta idea fue propuesta por primera vez por von Neumann y Richtmyer [100]. No tardó mucho en observarse que esta disipación se podía introducir por medio de una aproximación en diferencias descentrada, teniendo en cuenta la dirección del flujo. Este hecho motivó el nombre de *métodos upwind* para este tipo de aproximaciones. Este tipo de métodos son capaces de proporcionar soluciones estables aunque excesivamente difusivas (ver,

por ejemplo, [40, 91] donde se realiza un análisis crítico de este tipo de formulaciones).

En el ámbito de los elementos finitos se pueden utilizar varias técnicas para conseguir el efecto *upwind*. Las primeras formulaciones *upwind* de elementos finitos fueron presentadas en [25] para ecuaciones diferenciales ordinarias y posteriormente en [92] para ecuaciones en derivadas parciales. Estos métodos estaban basados en funciones de test modificadas de modo que el elemento aguas arriba de un nodo está ponderado en mayor medida que el elemento que está aguas abajo de ese nodo. Estos procedimientos permiten obtener soluciones estables pero fueron objeto de las mismas críticas que las diferencias *upwind* porque también conducen a resultados excesivamente difusivos. En la referencia [72] se demuestra que el carácter *upwind* también se puede obtener utilizando una cuadratura diferente para integrar el término convectivo. En este artículo se obtienen los puntos de la cuadratura para elementos lineales unidimensionales y para cuadriláteros bilineales. Sin embargo, el procedimiento bidimensional ha sido criticado por introducir excesiva difusión fuera de las líneas de corriente.<sup>2</sup>

Durante los años siguientes se sigue trabajando en las primeras formulaciones *upwind* de elementos finitos [71] y se proponen otras técnicas nuevas. Belytschko y Eldib [13] introducen un *esquema de amplificación* para obtener una formulación *upwind* de elementos finitos. Sin embargo, el comportamiento de este esquema resultó muy similar a otras formulaciones *upwind* de elementos finitos. En 1979 Griffiths y Mitchell apuntan la necesidad de introducir disipación numérica sólo a lo largo de las líneas de corriente, mientras que Hughes y Brooks plantean formalmente esta idea [76]. Esta es la principal idea bajo el método *streamline upwind Petrov-Galerkin*. Casi simultáneamente Kelly *et al.* [86] sugirieron el mismo procedimiento para eliminar *crosswind diffusion* en problemas multidimensionales. Este método fue inicialmente formulado utilizando una función de test modificada sólo para el término convectivo. Este esquema fue llamado método *streamline upwind*.

Poco después Hughes y Brooks [75] propusieron aplicar la función de test modificada a todos los términos de la ecuación con el fin de obtener una formulación consistente de residuos ponderados (ver también [19]). Esta idea constituyó el último elemento para la construcción del método *streamline upwind Petrov-Galerkin* también llamado *streamline diffusion* [81, 82, 99] en otros grupos de trabajo. Más tarde, Hughes y su grupo de trabajo propusieron varios métodos con una estabilización consistente. Todos estos métodos consisten en añadir un término adicional a la formulación de Galerkin sobre el interior de los elementos. Este término es una función del residuo de la ecuación diferencial por lo que la consistencia del esquema está asegurada. El método de *Galerkin/least-squares* propuesto

---

<sup>2</sup>Este tipo de disipación fuera de las líneas de corriente se denomina habitualmente *crosswind diffusion* y así será denominado en lo que resta de tesis

en [78] puede ser formulado de este modo.

A principios de los años 90 surgió la idea de enriquecer el método de Galerkin con las llamadas *bubble functions* o *wavelet functions*. Baiocchi, Brezzi y Franca [6] fueron los primeros en señalar que el enriquecimiento del espacio de elementos finitos con la suma de funciones polinómicas produce una estabilización para problemas de convección-difusión. Este método de estabilización es formalmente similar a los métodos *streamline-upwind Petrov-Galerkin* y *Galerkin/least-squares*. De hecho, en [73] se demuestra que los métodos estabilizados y los métodos de enriquecimiento son todos modelos *subgrid scale* aproximados. Este resultado se alcanzó utilizando el *método variacional multiescala* propuesto por Hughes [73]. En [77] se puede encontrar una presentación detallada de este método. Posteriormente, en un intento de capturar capas límite internas con gradientes importantes u otros fenómenos de pequeña escala, se presentó la idea de enriquecer al método de Galerkin con lo que se denominó *residual-free bubbles* [16, 55].

En los últimos años Strouboulis, Babuška y Copps [124] han propuesto el *método de elementos finitos generalizado* y Farhat, Harari y Franca [49] propusieron el *método de enriquecimiento discontinuo*. Con el objetivo de obtener soluciones numéricas precisas y estables para problemas de convección-difusión transitorios Donea, Roig y Huerta [47] introdujeron esquemas de integración temporal de alto orden basados en aproximaciones de Padé a la función exponencial. En [44] se puede encontrar una exposición más detallada de la mayoría de estos métodos.

Los métodos de volúmenes finitos tampoco son óptimos para resolver la ecuación de convección-difusión. En este tipo de métodos se utiliza una representación constante a trozos de la solución teniendo que recurrir a reconstrucciones para obtener soluciones con un orden de convergencia mayor que 1. Este procedimiento da lugar a muy buenos resultados en ausencia de flujos difusivos, pero cuando es necesario discretizar flujos viscosos la reconstrucción de los gradientes es compleja [48] y los resultados son a menudo bastante dependientes de la malla.

Los métodos tipo *discontinuous Galerkin* [9, 17, 35, 42] han evolucionado mucho en los últimos años. Este tipo de técnicas son métodos de elementos finitos que utilizan representaciones discontinuas de la solución en las caras de los elementos. El orden de aproximación dentro de cada elemento es, en principio, arbitrario. Al igual que los métodos de volúmenes finitos, los métodos de *discontinuous Galerkin* se caracterizan por la necesidad de definir los *flujos numéricos* en las caras de los elementos. Para los flujos no viscosos se han utilizado con éxito los flujos numéricos estándar de volúmenes finitos (con la ventaja de que no es necesario realizar las reconstrucciones de la solución) pero la obtención de flujos numéricos adecuados en el caso de los flujos difusivos es mucho más complicada. En este momento

la mayoría de las publicaciones relativas al método de *discontinuous Galerkin* tratan este tema (ver, por ejemplo, las referencias [8, 9, 10, 17, 20, 29, 34, 121, 134]).

Otro de los métodos numéricos en auge en los últimos años es el método de *fluctuation splitting* o *residual distribution* propuesto por Roe en [113]. Este método surge con la intención de realizar discretizaciones *upwind* que sean realmente multidimensionales y no simples extensiones de discretizaciones *upwind* unidimensionales [2, 3, 112, 120]. Sin embargo, la discretización de términos difusivos es de nuevo compleja.

## 1.2. Objetivos de la tesis

El objetivo de esta tesis es desarrollar una nueva metodología para la resolución de problemas de transporte por convección-difusión de mecánica de fluidos en ingeniería haciendo énfasis tanto en el modelo matemático como en su resolución numérica. Este objetivo general se puede dividir en los siguientes objetivos específicos:

1. Estudio de la formulación matemática actual del problema del transporte por convección-difusión:

El objetivo es analizar la formulación matemática que se utiliza en la actualidad para el problema del transporte por convección-difusión en mecánica de fluidos, evaluando sus principales ventajas e inconvenientes.

2. Desarrollo de un modelo matemático alternativo para el problema de transporte convección-difusión en mecánica de fluidos:

Se propone una nueva formulación alternativa basada en la generalización de la ecuación de Cattaneo [22] previamente aplicada a problemas de difusión pura en el ámbito del estudio de problemas de transmisión de calor.

3. Desarrollo de una formulación numérica basada en el método de Taylor-Galerkin para la resolución del modelo propuesto de transporte por convección-difusión:

Se propone un algoritmo basado en el método de Taylor-Galerkin con el que se resuelven ejemplos de test y casos de interés práctico. Mediante estos ejemplos se prueba que el modelo propuesto puede ser aplicado a problemas reales de ingeniería.

4. Desarrollo de una formulación numérica basada en el método de *discontinuous Galerkin* para la resolución del modelo de transporte por convección-difusión basado en la ecuación de Cattaneo:

Con el objetivo de desarrollar un algoritmo específico para problemas dominados por la convección se propone un esquema numérico fundamentado en el método de *discontinuous Galerkin*. Con este algoritmo se analizan problemas clásicos de transporte por convección-difusión en mecánica de fluidos y se resuelve un problema de transporte de contaminantes en zonas portuarias haciendo uso de la geometría real del puerto de A Coruña.

#### 5. Comparación de los dos modelos de transporte por convección-difusión:

Se compara el modelo de transporte basado en la ley de Fick y el modelo propuesto y se discuten las ventajas e inconvenientes de cada uno de ellos.

### 1.3. Estructura y contenido del documento

En este primer capítulo se ha comenzado presentando el interés práctico de los problemas de transporte por convección-difusión en mecánica de fluidos. Posteriormente, se analizan las deficiencias del modelo que se utiliza en la actualidad para las predicciones del transporte de contaminantes en fluidos. En primer lugar se ha puesto de manifiesto que el modelo que se emplea actualmente predice velocidades difusivas no acotadas. Este hecho junto con la dificultad de obtener soluciones numéricas precisas y estables de las ecuaciones anteriores en situaciones de convección dominante hace deseable una mejora tanto del modelo matemático del problema como del modelo numérico. De estas ideas se extraen los objetivos de la tesis presentados en la sección 1.2.

En el capítulo 2 se presenta la formulación del modelo de transporte por convección-difusión propuesto. En primer lugar se revisa la formulación para el caso de problemas de difusión pura y luego se extiende a problemas convectivo-difusivos. Asimismo, se analizan las propiedades de las ecuaciones propuestas desde un punto de vista teórico y se estudian las condiciones de contorno que se deben imponer para obtener un problema bien planteado.

En el capítulo 3 se presenta una formulación numérica para el modelo propuesto en el caso unidimensional tanto para problemas estacionarios como para problemas transitorios. Posteriormente se resuelven algunos ejemplos y se extraen importantes conclusiones.

En el capítulo 4 se generaliza la formulación anterior para problemas bidimensionales y se resuelven varios ejemplos con aplicaciones prácticas en ingeniería.

En el capítulo 5 se desarrolla un modelo numérico de *discontinuous Galerkin* para problemas unidimensionales y bidimensionales transitorios, se analizan varios ejemplos clásicos y se resuelve un caso con la geometría real del puerto de A Coruña.

Finalmente se exponen las conclusiones de esta tesis y se plantean diversas líneas de investigación futuras.



## Capítulo 2

# Formulación propuesta para el problema del transporte

### 2.1. Introducción

Como se ha comentado en el capítulo anterior, la formulación estándar para el problema del transporte por convección-difusión (en términos de la ecuación de Fick) predice transportes de masa a velocidad no acotada. Un efecto similar se produce al utilizar la ley de Fourier [54] para obtener la ecuación de la transmisión del calor. En este caso, un pulso de calor en la superficie de un cuerpo es sentido inmediatamente en todas las partes del cuerpo sin importar la distancia a la que se encuentren del punto donde se produce el pulso. En general, en cualquiera de los dos contextos, decimos que *la velocidad de propagación es infinita*. Este comportamiento anómalo ha sido observado por varios investigadores en el segundo cuarto del siglo XX tanto en el ámbito de la transmisión de calor como en el contexto de la difusión de contaminantes en fluidos. Por ejemplo, en el ámbito de la transmisión del calor Onsager [103] advierte que la ley de Fourier contradice el principio de reversibilidad microscópica; una contradicción que “...is removed when we recognize that it [Fourier’s law] is only an approximate description of the process of conduction, neglecting the time needed for acceleration of the heat flow”. En ambos campos se han llevado a cabo gran cantidad de estudios y se han derivado nuevas ecuaciones constitutivas teniendo en cuenta las características físicas de cada uno de los fenómenos. Sin embargo, parece que estos dos fenómenos siguen unidos por la formulación, ya que en ambos casos, utilizando razonamientos físicos diferentes, la ecuación que más aceptación ha tenido es una ecuación

hiperbólica que denominaremos *ecuación de Cattaneo*<sup>1</sup>.

En realidad, los fenómenos del transporte de masa y el transporte de calor no sólo están unidos por la formulación, sino que son lo que habitualmente se denomina *fenómenos acoplados* [12] en el sentido de que un flujo de masa puede deberse a un gradiente de concentraciones o a un gradiente de temperaturas. Del mismo modo, un flujo de calor puede ser consecuencia de un gradiente de temperaturas o también de un gradiente de concentraciones. El flujo de masa debido a un gradiente de temperaturas se conoce como *efecto Soret* y el flujo de calor debido a un gradiente de concentraciones recibe habitualmente el nombre de *efecto Dufour*. Existen en la bibliografía [12] ecuaciones constitutivas que intentan reflejar este acoplamiento entre los dos fenómenos.

En lo que sigue haremos un breve repaso de la evolución del conocimiento en los campos científicos de la transmisión de calor y de la difusión de contaminantes en fluidos. Seguidamente, se presentará el modelo matemático propuesto (ecuaciones y condiciones iniciales y de contorno) para el problema de convección-difusión.

## 2.2. El origen de las ondas de calor

Desde el segundo cuarto del siglo XX se han publicado una gran cantidad de artículos sobre lo que denominaremos de forma genérica *ondas de calor*. En estos artículos se han realizado diferentes tipos de aproximaciones a este fenómeno: teórica, matemática, computacional y experimental. No es objeto de esta tesis hacer una revisión detallada de la evolución del conocimiento en ondas de calor (para ello consúltense las referencias [83, 84]) pero sí que se intentará dar una idea del tipo de investigaciones que se han realizado con anterioridad.

Existen aproximaciones teóricas basadas en la teoría cinética, en la ecuación de Boltzmann, en la dinámica molecular y en la termodinámica. También se han publicado muchos artículos teóricos dedicados a la predicción de las condiciones de temperatura y frecuencia para las cuales se pueden observar ondas de calor [83].

Se han publicado artículos sobre las propiedades matemáticas de varios de los modelos propuestos. En estas publicaciones se habla de la existencia, unicidad y otro tipo de propiedades matemáticas de varios modelos de transmisión de calor. En los artículos de carácter computacional se habla de cómo resolver problemas particulares que pueden aparecer en aplicaciones concretas [83].

Existen, por último, artículos donde se presentan ensayos experimentales en los que se

---

<sup>1</sup>Un estudio de otro tipo de ecuaciones constitutivas se puede hallar en otros trabajos del autor; ver, por ejemplo, [61]

han detectado ondas de calor y se ha medido su velocidad. Algunos de los que han tenido más relevancia son los realizados por Peshkov [109]. También han tenido gran repercusión los estudios realizados por Özisik [104].

Tras varias aproximaciones teóricas al problema [89, 103], M.C. Cattaneo [22] presentó una ecuación constitutiva según la que la transmisión de calor se produce en forma de onda y, por tanto, a una velocidad finita. La ecuación de Cattaneo fue presentada en su versión unidimensional y, salvo pequeños cambios de notación, es:

$$q + \tau \frac{\partial q}{\partial t} = -k \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.1)$$

donde  $q$  es el flujo de calor por unidad de tiempo y de superficie,  $u$  es la temperatura,  $k$  es la difusividad y  $\tau$  un *tiempo de relajación*. De la teoría cinética se pueden obtener expresiones para  $k$  y para  $\tau$ . Nótese que cuando  $\tau = 0$  recuperamos la ecuación de Fourier.

Posteriormente Vernotte [129] derivó esta misma ecuación mediante una investigación independiente. Otra importante contribución fue la de Chester [24] que obtiene una expresión explícita para calcular el tiempo de relajación  $\tau$ . Una última referencia interesante es [85] donde Kaliski obtuvo la ecuación previamente obtenida por Cattaneo y Vernotte utilizando razonamientos diferentes. En concreto, Kaliski obtuvo la ecuación de Cattaneo imponiendo como axioma que la velocidad de propagación fuese finita. A partir de este momento se realizaron una gran cantidad de publicaciones sobre este tema bajo el nombre genérico de *second sound*, pero un repaso de esta bibliografía va más allá de los objetivos de esta tesis.

### 2.3. El movimiento de pequeñas partículas suspendidas en un fluido

Uno de los estudios más conocidos que se han realizado sobre este fenómeno se debe a Adolf Fick, que siguiendo las ideas de Fourier para la conducción de calor desarrolló una ecuación constitutiva para describir la difusión de contaminantes en fluidos. Esta ecuación, fue deducida por Fick en 1855 [50] utilizando técnicas más o menos heurísticas.

Posteriormente, se hicieron aproximaciones estadísticas al problema derivando directamente una ecuación para la difusión sin realizar el paso intermedio de obtener una ecuación constitutiva. Este tipo de problemas también se conocen como *random walk problems*. Las primeras formulaciones para *random walks* dieron lugar a la ecuación de difusión estándar obtenida a partir de la ecuación de conservación de masa y la ecuación de Fick. Por tanto, esta formulación conducía también a un transporte a velocidad infinita. Pronto se observó que esto era una consecuencia de la hipótesis de que cada paso en el *random walk*

es independiente de los pasos anteriores. Por tanto, la siguiente idea fue intentar introducir una *correlación* o *inercia* entre dos pasos consecutivos. De este modo existirá una tendencia de la partícula a seguirse moviendo en una determinada dirección una vez ha comenzado a moverse en esa dirección. Esta hipótesis fue introducida en la formulación anterior por Fürth [56] quien también demostró que ello daba lugar a una velocidad de propagación finita. Estas mismas conclusiones fueron alcanzadas por Taylor en [125] (ver también [96]). Posteriormente, Goldstein [58] reexaminó los trabajos anteriores y obtuvo la ecuación en derivadas parciales que gobierna la difusión de contaminantes en un fluido en reposo. Esta ecuación resultó ser la ecuación del telégrafo y es la misma que se obtiene cuando se utiliza la ecuación de Cattaneo para obtener las ecuaciones de la transmisión de calor. Por tanto, estudios independientes en el campo de la transmisión de calor y de la difusión de contaminantes en fluidos conducen a una misma ecuación constitutiva que denominaremos de modo genérico *ecuación de Cattaneo*.

## 2.4. Un problema de difusión pura con velocidad finita

Con el fin de comparar la solución del modelo de difusión clásico con la solución del modelo propuesto resolveremos el mismo problema que se ha resuelto en el capítulo anterior pero ahora empleando el modelo con velocidad de propagación finita. Para obtener la ecuación que gobierna el problema es necesario combinar la versión unidimensional de la ecuación de conservación de masa de contaminante (1.1a) con la ecuación de Cattaneo (2.1). De este modo se llega a una única ecuación que describe la difusión pura. Esta ecuación (ecuación del telégrafo) es una ecuación diferencial de segundo orden en el tiempo por lo que es necesario imponer una condición inicial adicional a la que se impuso para la ecuación de difusión estándar. Considerando un medio (incompresible) homogéneo, isótropo, unidimensional y sin convección el problema se puede plantear como [61]: hallar  $u: \mathbb{R} \times [0, \infty) \mapsto \mathbb{R}$  tal que

$$\tau \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial u}{\partial t} - k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad t > 0 \quad (2.2a)$$

$$u(x, 0) = \delta(x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (2.2b)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (2.2c)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x, t) = 0 \quad t > 0. \quad (2.2d)$$

Este problema se puede resolver utilizando de forma consecutiva transformaciones de Laplace y Fourier (ver la resolución completa en el Apéndice A.1). Procediendo de este modo,

se obtiene

$$u(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{2}e^{-\frac{c^2}{2k}t} \left[ \delta(|x| - ct) + \frac{c}{2k}I_0\left(\frac{c}{2k}\sqrt{c^2t^2 - x^2}\right) + \frac{c^2}{2k}t \frac{I_1\left(\frac{c}{2k}\sqrt{c^2t^2 - x^2}\right)}{\sqrt{c^2t^2 - x^2}} \right], & |x| \leq ct \\ 0, & |x| > ct \end{cases} \quad (2.3)$$

donde  $I_0$  y  $I_1$  son las funciones de Bessel modificadas de primera clase de orden 0 y 1. Además,  $c$  es la *celeridad de la onda difusiva* definida por:

$$c = \sqrt{k/\tau}. \quad (2.4)$$

En la figura 1.1 se comparan las soluciones de (1.4) y (2.2) en los instantes  $t = 4$  y  $t = 10$ . En estas figuras se observa que al utilizar el modelo propuesto existe un frente de onda<sup>2</sup> que avanza con celeridad  $c$ .

## 2.5. Aplicación de las ideas de Cattaneo a la formulación del problema de convección-difusión

En los apartados anteriores hemos visto que la ecuación de Cattaneo parece ser un modelo adecuado para describir fenómenos de difusión pura tanto en el ámbito de los problemas térmicos como en el campo de la difusión de contaminantes en fluidos. Por tanto, este tipo de fenómenos estarían gobernados por la ecuación de conservación de energía (o masa) y la ecuación constitutiva

$$\mathbf{q} + \tau \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -\mathbf{K} \nabla_{\mathbf{x}}(u) \quad (2.5)$$

Sin embargo, el objetivo de esta tesis es el estudio de problemas de transporte por convección-difusión. Por tanto, es necesario plantearse cuál es la homóloga de la ecuación de Cattaneo para problemas con convección. La idea que se utiliza en esta tesis es modificar la ecuación de Cattaneo de modo que el modelo de transporte resultante sea invariante frente a la transformación de Galileo. De este modo, cuando se vierte un contaminante en un fluido en movimiento la velocidad del contaminante es la suma de la velocidad difusiva y la velocidad del fluido. Este procedimiento da lugar a la ecuación (ver [61] para una exposición detallada)

$$\mathbf{q} + \tau \left( \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{a} \right) = -\mathbf{K} \nabla_{\mathbf{x}}(u) \quad (2.6)$$

---

<sup>2</sup>Las flechas verticales de la figura representan distribuciones de Dirac.

que ha sido posteriormente utilizada por Christov y Jordan en el año 2005 para problemas de transmisión de calor [26]. Por tanto, la formulación completa del problema del transporte por convección-difusión en un medio incompresible y utilizando un modelo de transporte con velocidad de propagación finita es la siguiente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{q}) = 0 \quad (2.7a)$$

$$\mathbf{q} + \tau \left( \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{q}) \mathbf{a} \right) = -\mathbf{K} \nabla_{\mathbf{x}}(u) \quad (2.7b)$$

donde (2.7a) es la ecuación de conservación de masa de contaminante y (2.7b) es la *ecuación de Cattaneo con término convectivo*. En estas ecuaciones se observa que la formulación propuesta es más general que la formulación basada en la ley de Fick ya que tomando  $\tau = 0$  en (2.7b) se recuperan las ecuaciones clásicas.

## 2.6. Estudio del modelo propuesto como un sistema de ecuaciones en forma conservativa

El sistema de ecuaciones (2.7) se puede reducir a una sola ecuación en derivadas parciales escalar cuando el campo de velocidades es constante. En caso contrario, no es posible desacoplar el sistema, por lo que es necesario resolverlo como un sistema de ecuaciones en derivadas parciales de primer orden<sup>3</sup>. Este hecho provoca un aumento del coste computacional de la resolución del problema del transporte, pero tiene la ventaja de que se alcanza el mismo orden de convergencia en concentraciones y flujos en lugar de un orden de convergencia inferior en flujos. Bajo las hipótesis de que el medio es incompresible, homogéneo e isótropo, el sistema (2.7) se puede escribir en forma conservativa. Para demostrar la aseveración anterior, hay que tener en cuenta que  $\mathbf{a}$  es un campo vectorial solenoidal, por tanto, se verifica:

$$\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (u\mathbf{a}) \quad (2.8a)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{q}) \mathbf{a} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{q} \otimes \mathbf{a}) \quad (2.8b)$$

Como el medio es homogéneo e isótropo,  $\mathbf{K} = k\mathbf{I}$ ,  $\tau = \tau\mathbf{I}$  para ciertos  $k, \tau \in \mathbb{R}^+$ . En consecuencia, podemos reescribir (2.7) del siguiente modo:

---

<sup>3</sup>Esta idea ha sido ya apuntada en [61]. Posteriormente Christov y Jordan llegan a la misma conclusión en [26].

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (u\mathbf{a} + \mathbf{q}) = 0 \quad (2.9a)$$

$$\frac{\partial(\tau\mathbf{q})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\tau\mathbf{q} \otimes \mathbf{a} + ku\mathbf{I}) + \mathbf{q} = 0 \quad (2.9b)$$

En lo que sigue trataremos de forma independiente el problema unidimensional y el bidimensional con el fin de clarificar la exposición.

### 2.6.1. Problema unidimensional

En esta sección nos centraremos en el problema unidimensional. Es fácil probar que la versión unidimensional del sistema (2.9) se puede escribir del siguiente modo:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = \mathbf{S} \quad (2.10)$$

donde

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \\ \tau q \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} ua + q \\ \tau qa + ku \end{pmatrix}; \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -q \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

El sistema (2.10) se puede escribir también en forma no conservativa como,

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad (2.12)$$

siendo  $\mathbf{A}$  la matriz Jacobiana definida por

$$\mathbf{A} = \nabla_{\mathbf{U}} (\mathbf{F}) = \begin{pmatrix} a & 1/\tau \\ k & a \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Es evidente que el sistema (2.12) es lineal ya que la matriz  $\mathbf{A}$  no depende de  $\mathbf{U}$ . Por otra parte, es sabido (ver por ejemplo la referencia [39]) que el sistema (2.10) es totalmente hiperbólico si, y sólo si, la matriz  $\mathbf{A}$  tiene dos autovalores reales diferentes. Además, se puede comprobar que

$$\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1} \quad \text{donde} \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \tau c & -\tau c \end{pmatrix}; \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} a+c & 0 \\ 0 & a-c \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

por lo que el sistema (2.10) es, en efecto, totalmente hiperbólico. Ahora probaremos que el sistema (2.12) se puede diagonalizar pero no desacoplar. De este modo se pueden definir los cuasi-invariantes de Riemann <sup>4</sup>. Para probar esta aseveración usaremos la ecuación (2.14)

<sup>4</sup>Denominamos a estas funciones cuasi-invariantes de Riemann en lugar de invariantes de Riemann [39] porque hay un término fuente en (2.10) y, por tanto, estas funciones no tienen un valor constante a lo largo de las características.

que permite reescribir (2.12) como sigue:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{C} \mathbf{D} \mathbf{C}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad (2.15)$$

Haciendo uso de la hipótesis de homogeneidad, la ecuación (2.15) toma la forma

$$\frac{\partial(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{U})}{\partial t} + \mathbf{D} \frac{\partial(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{S} \quad (2.16)$$

Usando la notación

$$\begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = \mathbf{R} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{U} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} u + q/c \\ u - q/c \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

para los cuasi-invariantes de Riemann se obtiene la ecuación

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t} + \mathbf{D} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial x} = \mathbf{Q} \mathbf{R} \quad (2.18)$$

donde  $\mathbf{Q}$  es la matriz

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{2\tau} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Por tanto, como la matriz  $\mathbf{D}$  es diagonal (y  $\mathbf{Q}$  no lo es), el sistema de ecuaciones (2.18) está acoplado sólo por el término fuente. Las dos ecuaciones escalares en (2.18) son dos ecuaciones de transporte con término fuente. La cantidad  $R_1$  se transporta a lo largo de la coordenada espacial con velocidad  $a + c$ . Mientras,  $R_2$  también se transporta a lo largo de la coordenada espacial, en este caso con velocidad  $a - c$ . Por tanto, la dirección en la cual es transportada cada una de las ondas ( $R_1$  y  $R_2$ ) a lo largo de la coordenada espacial depende del signo de su correspondiente velocidad de propagación. En consecuencia, dependiendo de los valores de  $a$  y  $c$ , la solución puede ser la superposición de dos ondas propagándose en el mismo sentido o en sentido contrario. En lo que sigue nos referiremos a esta situación como *flujo supercrítico* y *flujo subcrítico* respectivamente.

Para desarrollos posteriores, es útil introducir el número adimensional

$$H = \frac{|a|}{c} \quad (2.20)$$

que permite caracterizar el flujo subcrítico y el flujo supercrítico. El primero de ellos ocurre cuando  $H < 1$  y el segundo cuando  $H > 1$ . Llamaremos *flujo crítico* al flujo que verifica  $H = 1$ .

El desarrollo anterior permite comprender de forma clara qué condiciones de contorno deben imponerse al sistema de ecuaciones (2.18). Supongamos que tenemos que resolver (2.18) en un dominio  $\Omega = (0, L)$ ;  $L \in \mathbb{R}^+$  con un contorno  $\Gamma$ . Llamaremos *contorno de*



entrada de flujo ( $\Gamma^{\text{in}}$  en lo que sigue) a la parte del contorno en la cual  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} < 0$ . Por contra, llamaremos *contorno de salida de flujo* ( $\Gamma^{\text{out}}$  en forma abreviada) a la parte complementaria del contorno. Si definimos  $\Gamma_0$  como el punto  $x = 0$  y  $\Gamma_L$  como  $x = L$ , entonces  $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_L$ . En condiciones de flujo supecrítico  $R_1$  y  $R_2$  deben ser prescritas en el contorno de entrada de flujo ( $\Gamma_0$  cuando  $a > 0$  y  $\Gamma_L$  cuando  $a < 0$ ). En condiciones de flujo subcrítico, debemos imponer  $R_1$  en  $\Gamma_0$  y  $R_2$  en  $\Gamma_L$ . En resumen, en cualquier caso se deben imponer en cada contorno condiciones sobre las ondas que están entrando en el dominio a través de él.

Sin embargo, está comúnmente aceptado [4] que un sistema hiperbólico como (2.10) está bien planteado cuando el número de componentes impuestas de  $\mathbf{U}$  en un contorno coincide con el número de autovalores negativos de la matriz Jacobiana. Así, en flujo supercrítico debemos prescribir las dos componentes de  $\mathbf{U}$  en el contorno de entrada de flujo. En flujo subcrítico, debemos imponer una componente de  $\mathbf{U}$  en el contorno de entrada de flujo y la otra en el contorno de salida de flujo. En lo que sigue llamaremos *componentes entrantes* a las componentes de  $\mathbf{U}$  prescritas en el contorno. Denotaremos estas funciones por  $\mathbf{U}^{\text{in}}$ . Por tanto, el problema unidimensional del transporte formulado mediante la ecuación de Cattaneo, se puede plantear como sigue: dados  $k, \tau > 0$ , dado el campo de velocidades  $a$  y dadas las convenientes condiciones iniciales y de contorno, hallar  $\mathbf{U}: \Omega \times [0, T] \mapsto \mathbb{R}^2$  tal que

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = \mathbf{S} \quad \text{en } \Omega \times [0, T] \quad (2.21a)$$

$$\mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_0(x) \quad \text{en } \Omega \quad (2.21b)$$

$$\mathbf{U}^{\text{in}} = \mathbf{U}_D^{\text{in}} \quad \text{en } \Gamma \times (0, T] \quad (2.21c)$$

siendo  $\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{F}$  y  $\mathbf{S}$  los vectores definidos en (2.11).

### 2.6.2. Problema bidimensional

Si consideramos que el dominio es bidimensional y usamos la notación  $\mathbf{q} = (q_1, q_2)^T$ ,  $\mathbf{a} = (a_1, a_2)^T$ , el sistema (2.7) se puede escribir del siguiente modo:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = \mathbf{S} \quad (2.22)$$

donde

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \\ \tau q_1 \\ \tau q_2 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} ua_1 + q_1 & ua_2 + q_2 \\ \tau q_1 a_1 + ku & \tau q_1 a_2 \\ \tau q_2 a_1 & \tau q_2 a_2 + ku \end{pmatrix}; \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -q_1 \\ -q_2 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

Para establecer las propiedades básicas de la ecuación (2.22) es necesario escribirla en forma no conservativa. De este modo, si definimos  $\mathbf{F}_i$  como la columna  $i$ -ésima de la matriz  $\mathbf{F}$ , se verifica la siguiente relación:

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial x_2} = \mathbf{A}_1 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_1} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_2} \quad (2.24)$$

siendo  $\mathbf{A}_1$  y  $\mathbf{A}_2$  las matrices Jacobianas cuyas expresiones son:

$$\mathbf{A}_1 = \nabla_{\mathbf{U}} (\mathbf{F}_1) = \begin{pmatrix} a_1 & 1/\tau & 0 \\ k & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & a_1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{A}_2 = \nabla_{\mathbf{U}} (\mathbf{F}_2) = \begin{pmatrix} a_2 & 0 & 1/\tau \\ 0 & a_2 & 0 \\ k & 0 & a_2 \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

Definamos ahora la hipermatriz  $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2)^T$ . Esta definición nos permite usar la notación  $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = (\mathbf{A} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{U}$  y reescribir (2.22) como

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{A} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{U} = \mathbf{S} \quad (2.26)$$

que es un sistema lineal de ecuaciones ya que  $\mathbf{A}$  no depende de  $\mathbf{U}$ . Si ahora definimos  $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_1, \kappa_2)^T$  como un vector arbitrario con la única restricción de que tenga norma Euclídea unitaria, se puede demostrar que el sistema (2.26) es totalmente hiperbólico si la ecuación

$$\det(\omega \mathbf{I} - \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\kappa}) = 0 \quad (2.27)$$

tiene tres soluciones reales diferentes  $\omega$  para valores arbitrariamente prescritos de  $\boldsymbol{\kappa}$  [39]. Es fácil probar que las soluciones de (2.27) son

$$\omega_1 = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (2.28a)$$

$$\omega_2 = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\kappa} - c \quad (2.28b)$$

$$\omega_3 = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\kappa} + c \quad (2.28c)$$

Y, por tanto, (2.22) es un sistema totalmente hiperbólico. Además, las soluciones de (2.27) son los autovalores de la matriz  $\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\kappa}$  que se conoce normalmente como *matriz de proyección*. Llegados a este punto es sencillo calcular los autovectores de  $\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\kappa}$ . Una vez hecho esto, podemos definir la matriz cuadrada  $\mathbf{C}$  como la matriz cuyas columnas son los autovectores de la matriz de proyección, esto es,

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & c & c \\ \kappa_2 & -k\kappa_1 & k\kappa_1 \\ -\kappa_1 & -k\kappa_2 & k\kappa_2 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

En consecuencia, sea  $\mathbf{D}$  la matriz diagonal, tal que los elementos de la diagonal son los autovalores  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ , entonces, se verifica la siguiente relación

$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\kappa} = \mathbf{C} \mathbf{D} \mathbf{C}^{-1} \quad (2.30)$$

Es importante notar que, aunque las matrices  $\mathbf{A}_1$  y  $\mathbf{A}_2$  son diagonalizables, el sistema (2.22) no lo es, ya que  $\mathbf{A}_1$  y  $\mathbf{A}_2$  son diagonalizables en diferentes bases. En consecuencia, los cuasi-invariantes de Riemann [39] no se pueden definir en 2D.

En este punto, y de forma análoga al problema unidimensional en (2.20), es muy útil definir el número adimensional

$$H = \frac{\|\mathbf{a}\|}{c} \quad (2.31)$$

que es el homólogo del número de Mach [135] en problemas de flujo compresible o del número de Froude [135] en flujos con superficie libre. Al igual que en el problema unidimensional, la definición (2.31) permite clasificar el flujo como sigue:

- $H < 1 \Leftrightarrow$  Flujo subcrítico
- $H > 1 \Leftrightarrow$  Flujo supercrítico
- $H = 1 \Leftrightarrow$  Flujo crítico

Con la definición anterior, en flujo supercrítico no es posible el transporte de contaminante hacia “aguas arriba” porque el modo de propagación difusivo avanza con una velocidad menor que el modo de propagación convectivo.

La imposición de las condiciones de contorno al sistema (2.22) no es trivial y una elección inadecuada puede provocar que no exista o que no sea única la solución. Una situación muy frecuente es tener que imponer una condición de contorno en una pared sólida fija. La condición de contorno en este caso es  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ , siendo  $\mathbf{n}$  la normal exterior unitaria en cada punto del contorno. Sin embargo, los dominios computacionales están normalmente compuestos también de *contornos de entrada de flujo* y *contornos de salida de flujo*. En lo que sigue utilizaremos la notación  $\Gamma^{\text{in}}$  para el contorno de entrada de flujo (aquel que verifica  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} < 0$ ) y  $\Gamma^{\text{out}}$  para el contorno de salida de flujo (aquel que verifica  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} > 0$ ). En estos tipos de contornos la imposición de las condiciones de contorno es más complicada. Es conocido que para problemas hiperbólicos escalares sólo se debe imponer una condición en el contorno de entrada de flujo (ver, por ejemplo [39]), y para sistemas de ecuaciones hiperbólicos sólo se deben prescribir las ondas que entran por el contorno. En consecuencia, es necesario un análisis de Riemann en la dirección de la normal exterior. Se ha demostrado en la sección 2.6.1 que las ecuaciones del transporte utilizando la ley de Cattaneo se pueden

diagonalizar (sin embargo siguen acopladas por el término fuente) en 1D que es el caso de la normal exterior al contorno. Procediendo de este modo, se encuentran tres velocidades de propagación diferentes:

$$\omega_1 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} \quad (2.32a)$$

$$\omega_2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} - c \quad (2.32b)$$

$$\omega_3 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} + c \quad (2.32c)$$

Para obtener un problema bien planteado se deben imponer en un determinado contorno tantas componentes de  $\mathbf{U}$  como velocidades negativas (ondas entrantes) haya en (2.32). Por tanto, en un contorno de entrada de flujo supercrítico se deben prescribir todas las componentes de  $\mathbf{U}$  mientras que en un contorno de salida de flujo supercrítico no se debe imponer ninguna. Por contra, en un contorno de salida de flujo subcrítico, sólo se debe prescribir una componente de  $\mathbf{U}$ , mientras que en un contorno de entrada de flujo subcrítico se deben imponer dos componentes de  $\mathbf{U}$ . Independientemente de las condiciones de contorno se debe dar una condición inicial para (2.22). Por tanto, el problema bidimensional del transporte por convección-difusión formulado con la ley de Cattaneo, se puede plantear como sigue: dados  $k, \tau > 0$ , dado un campo de velocidades solenoidal  $\mathbf{a}$  y dadas las convenientes condiciones iniciales y de contorno, hallar  $\mathbf{U}: \Omega \times [0, T] \mapsto \mathbb{R}^3$  tal que

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = \mathbf{S} \quad \text{en } \Omega \times [0, T] \quad (2.33a)$$

$$\mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_0(x) \quad \text{en } \Omega \quad (2.33b)$$

$$\mathbf{U}^{\text{in}} = \mathbf{U}_D^{\text{in}} \quad \text{en } \Gamma_D \times [0, T] \quad (2.33c)$$

$$\mathbf{F}^{\text{in}} \mathbf{n} = \mathbf{F}_N \quad \text{en } \Gamma_N \times [0, T] \quad (2.33d)$$

siendo  $\mathbf{F}$  y  $\mathbf{S}$  los vectores definidos en (2.23),  $\mathbf{U}^{\text{in}}$  las componentes entrantes de  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{F}^{\text{in}}$  las componentes entrantes de la matriz de flujo.

### 2.6.3. El carácter dispersivo de las ecuaciones

En esta sección nos centraremos en el problema unidimensional, ya que es más sencillo y los resultados son generalizables a problemas multidimensionales. Para comprender el carácter dispersivo de las ecuaciones del transporte con velocidad de difusión finita consideramos una solución del tipo

$$\begin{pmatrix} u \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{U} \\ \mathcal{Q} \end{pmatrix} e^{i(\omega t - \xi x)} \quad (2.34)$$

que conduce a la relación de dispersión

$$\omega i - a\xi i = \tau\omega^2 - (k - \tau a^2)\xi^2 - 2a\tau\omega\xi \quad (2.35)$$

donde  $i^2 = -1$ . Para un problema de valores iniciales (que es el caso que nos ocupa)  $\xi$  es un número de onda real y  $\omega$  una frecuencia compleja. Escribiremos la frecuencia compleja  $\omega$  como  $\omega = \omega_R + i\omega_C$  donde  $\omega_R$  es una frecuencia real y  $\omega_C$  un coeficiente de amortiguamiento. Introduciendo la expresión de  $\omega$  en (2.35) se obtienen las expresiones

$$\frac{\omega_R}{\xi} = a \pm \sqrt{c^2 - \frac{1}{4\tau^2\xi^2}} \equiv v(\xi) \quad (2.36a)$$

$$\omega_C = \frac{1}{2\tau} \left( 1 \pm \sqrt{1 - 4\tau^2 c^2 \xi^2} \right) \quad (2.36b)$$

donde  $v(\xi)$  es la velocidad de la onda y  $\omega_C$  es el coeficiente de amortiguamiento (de modo que las ondas se amortiguan con un ratio  $e^{-\omega_C t}$ ). En la figura 2.1 se han dibujado la velocidad de la onda  $v(\xi)$  (izquierda) y el ratio de amortiguamiento (derecha)  $d = e^{-\omega_C t}$  para diferentes valores del número de onda  $\xi$ . En estos ejemplos se han supuesto valores unitarios de la difusividad  $k$  y del tiempo de relajación  $\tau$ . Asimismo, se ha considerado nula la velocidad del fluido  $a$ . Tomando un valor diferente para  $a$  la gráfica de velocidad de la onda simplemente se vería desplazada en el eje vertical  $a$  unidades, mientras que no se producirían variaciones en la gráfica del amortiguamiento. En estas gráficas se puede observar que para valores grandes del número de onda la velocidad de la onda tiende a la velocidad característica  $\sqrt{k/\tau}$ . Para valores más pequeños del número de onda la velocidad va decreciendo, llegando a ser 0 ( $a$  en general) cuando  $\xi = 1/(2\tau c)$ , punto conocido como *punto de bifurcación*. En lo que se refiere a la gráfica del amortiguamiento se observa que para todos los números de onda en el intervalo  $[1/(2\tau c), \infty)$  el factor de amortiguamiento es constante y de valor  $e^{-1/(2\tau)}$ .

## 2.7. Conclusiones

En este capítulo se ha llevado a cabo una breve revisión de la evolución del conocimiento en la transmisión del calor y la difusión de contaminantes en fluidos. La mayoría de los autores que han estudiado estos fenómenos independientemente están de acuerdo en proponer una misma ecuación para ambos mecanismos de transporte, que hemos denominado de forma genérica ecuación de Cattaneo. Esta ecuación ha sido formulada para problemas de difusión pura.

Seguidamente, en la sección 2.5 del capítulo se propone una generalización de la ecuación de Cattaneo válida para problemas con término convectivo [61] que ha sido posteriormente justificada por Christov y Jordan en 2005 para problemas de calor [26]. Esta ecuación

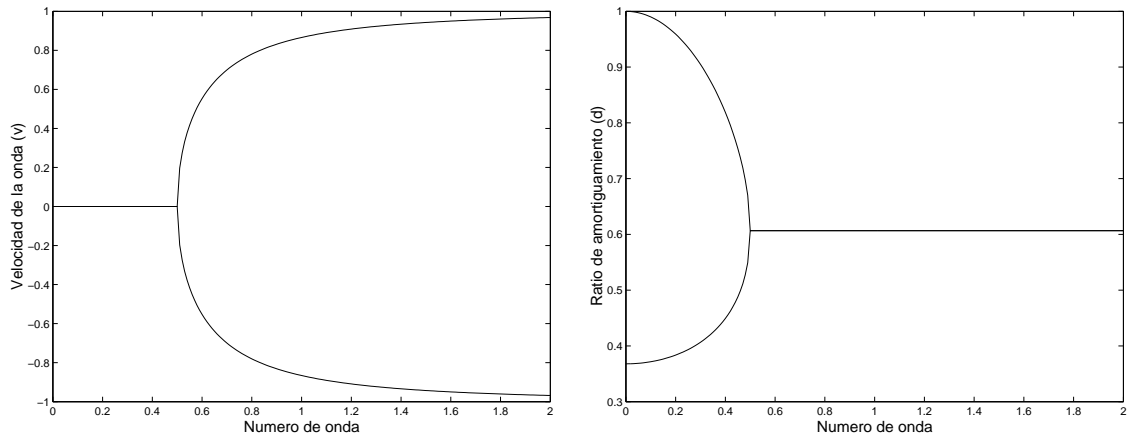


Figura 2.1: Velocidad de la onda  $v$  (izquierda) y ratio de amortiguamiento  $d$  (derecha) para diferentes números de onda  $\xi$ .

es fundamental ya que junto con la ecuación de conservación constituyen el modelo propuesto para la simulación de problemas de transporte por convección-difusión en mecánica de fluidos.

Posteriormente se ha estudiado el modelo de transporte propuesto como un sistema de ecuaciones en forma conservativa, lo que permite conocer las condiciones de contorno que se deben imponer a estas ecuaciones en cualquier situación.

Por último se analizan ciertas propiedades de dispersión de las ecuaciones de convección-difusión propuestas.

### A.1. Solución exacta de la ecuación de difusión pura utilizando la ley de Cattaneo

En este apéndice se resuelve de forma exacta la ecuación unidimensional de difusión pura utilizando la ley de Cattaneo.<sup>5</sup> para unas condiciones iniciales genéricas y luego particularizaremos el resultado para obtener la solución de (2.2). Por tanto, el problema a

<sup>5</sup>La solución exacta de la ecuación unidimensional de convección-difusión utilizando la ecuación de Cattaneo se obtiene fácilmente a partir de la solución para el caso de difusión pura y se puede encontrar en [61]

resolver inicialmente es:

$$\tau \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial u}{\partial t} - k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad t > 0 \quad (2.37a)$$

$$u(x, 0) = f(x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (2.37b)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = g(x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (2.37c)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x, t) = 0 \quad t > 0. \quad (2.37d)$$

Para abordar este problema lo primero que haremos es un cambio de función que nos permita eliminar el término de amortiguamiento  $\frac{\partial u}{\partial t}$ . Este cambio se puede obtener tanteando con una expresión del tipo

$$u(x, t) = h(t)v(x, t) \quad (2.38)$$

Si introducimos (2.38) en (2.37) y exigimos que se anule el coeficiente de  $\frac{\partial u}{\partial t}$  obtenemos

$$h(t) = e^{-\frac{1}{2\beta}t} \Rightarrow u(x, t) = e^{-\frac{1}{2\beta}t}v(x, t) \quad (2.39)$$

Con este cambio de función el problema de valores iniciales queda del siguiente modo:

$$\frac{\partial^2 v}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{1}{4\beta^2}v = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad t > 0 \quad (2.40a)$$

$$v(x, 0) = f(x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (2.40b)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x, 0) = g(x) + \frac{1}{2\beta}f(x) \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (2.40c)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x, t) = 0 \quad t > 0. \quad (2.40d)$$

Ahora aplicaremos una transformada de Laplace en la variable  $t$  a este nuevo problema. Haremos una aclaraciones previas sobre la transformación integral que vamos a usar:

Sea  $f(t)$  una función que cumple las siguientes condiciones:

- $f(t)$  es continua a trozos.
- $f(t)$  es de orden exponencial, es decir,  $|f(t)| \leq ce^{\alpha t}$  para algún  $(c, \alpha) \in \mathbb{R}^2$

En esta situación podemos definir la transformada de Laplace de  $f(t)$  del siguiente modo:

$$\mathcal{L}[f(t)] = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (2.41)$$

Además utilizaremos la siguiente propiedad de la transformada de Laplace:

Sean  $f$ ,  $\frac{df}{dt}$  y  $\frac{d^2f}{dt^2}$  funciones continuas y de orden exponencial, con estas hipótesis se cumple que

$$\mathcal{L}\left[\frac{d^2f}{dt^2}\right] = s^2 \mathcal{L}[f] - sf(0) - \frac{df}{dt}(0) \quad (2.42)$$

Ahora ya estamos en condiciones de hallar la transformada de Laplace del problema (2.40). Utilizando la notación  $V(x, s) = \mathcal{L}[v(x, t)]$  resulta

$$s^2V(x, s) - sv(x, 0) - \frac{\partial v}{\partial t}(x, 0) - c^2 \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - \frac{1}{4\beta^2}V = 0 \quad (2.43)$$

Si ahora hacemos uso de las condiciones iniciales obtenemos la siguiente EDO definida en toda la recta real:

$$-c^2 \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + (s^2 - \frac{1}{4\beta^2})V = (s + \frac{1}{2\beta})f(x) + g(x); \quad x \in \mathbb{R} \quad (2.44)$$

Para resolver esta ecuación utilizaremos una transformada de Fourier en la variable  $x$ . Como en el caso anterior haremos unas aclaraciones previas con respecto a la notación y las propiedades de la transformada de Fourier que a continuación emplearemos.

1. Sea  $f(x)$  una función continua a trozos e integrable en  $(-\infty, +\infty)$ . Si se cumplen estas hipótesis podemos definir la transformada de Fourier de  $f(x)$  del siguiente modo:

$$\mathcal{F}[f(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(s)e^{-i\omega s} ds \quad (2.45)$$

donde  $i = \sqrt{-1}$ .

2. Sea  $f(x)$  una función que cumple los siguientes requisitos:

- $f(x) \in \mathcal{C}^0 \wedge \frac{df}{dx}(x) \in \mathcal{C}^0$  siendo  $\mathcal{C}^0$  el conjunto de las funciones continuas en todo el eje real.
- $\lim_{|x| \rightarrow \infty} f(x) = 0$
- $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{df}{dx}(x) = 0$
- $\frac{d^2 f}{dx^2}(x) \in \mathcal{I}$  siendo  $\mathcal{I}$  el conjunto de las funciones continuas a trozos y absolutamente integrables.

En esta situación se cumple:

$$\mathcal{F}\left[\frac{d^2 f}{dx^2}(x)\right] = -\omega^2 \mathcal{F}[f(x)]. \quad (2.46)$$

Si ahora aplicamos la transformada de Fourier a la ecuación (2.44) usando la notación  $\hat{v}(\omega, s) = \mathcal{F}[V(x, s)]$ ,  $\hat{f}(\omega) = \mathcal{F}[f(x)]$  y  $\hat{g}(\omega) = \mathcal{F}[g(x)]$  resulta

$$\omega^2 c^2 \hat{v}(\omega, s) + (s^2 - \frac{1}{4\beta^2})\hat{v}(\omega, s) = (s + \frac{1}{2\beta})\hat{f}(\omega) + \hat{g}(\omega) \quad (2.47)$$



En consecuencia,

$$\hat{v}(\omega, s) = \frac{1}{(s - \frac{1}{2\beta})} \hat{f}(\omega) \frac{1}{1 + \frac{c^2}{(s^2 - \frac{1}{4\beta^2})} \omega^2} + \frac{1}{(s^2 - \frac{1}{4\beta^2})} \hat{g}(\omega) \frac{1}{1 + \frac{c^2}{(s^2 - \frac{1}{4\beta^2})} \omega^2} \quad (2.48)$$

Para hallar la transformada inversa de  $\hat{v}(\omega, s)$  utilizaremos dos propiedades de la transformada de Fourier:

1. Propiedad de cambio de escala

Según esta propiedad si  $f(x)$  y  $g(x)$  son dos funciones continuas a trozos y absolutamente integrables y además  $g(x) = f(\alpha x)$  se cumple que  $\hat{g}(\omega) = \frac{1}{\alpha} \hat{f}(\frac{\omega}{\alpha})$ , siendo  $\hat{f}(\omega)$  y  $\hat{g}(\omega)$  la transformada de Fourier de  $f(x)$  y  $g(x)$  respectivamente.

2. Propiedad de convolución

Antes de enunciar esta propiedad de la transformación integral tendremos que definir el producto de convolución de dos funciones. Sean  $f(x)$  y  $g(x)$  dos funciones absolutamente integrables. En este caso podemos definir el producto de convolución de  $f$  y  $g$  como una nueva función  $h$  obtenida del siguiente modo:

$$h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(x - \tau)d\tau \quad (2.49)$$

Para mayor comodidad de aquí en adelante representaremos la convolución de dos funciones  $f(x)$  y  $g(x)$  por  $(f \star g)(x)$ . Entonces, si  $f(x)$  y  $g(x)$  admiten transformada de Fourier se cumple que

$$\mathcal{F}[f \star g] = \sqrt{2\pi} \mathcal{F}[f] \cdot \mathcal{F}[g] \quad (2.50)$$

Además, es un resultado conocido que:

$$\mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-|x|}\right] = \frac{1}{1 + \omega^2} \quad (2.51)$$

Haciendo uso de estos tres resultados podemos obtener que

$$V(x, s) = \mathcal{F}^{-1}[\hat{v}(\omega, s)] = \frac{1}{2c} \left\{ \left( f(x) \star \left( s + \frac{1}{2\beta} \right) \frac{e^{-\left| \frac{x}{c} \sqrt{s^2 - \frac{1}{4\beta^2}} \right|}}{\sqrt{s^2 - \frac{1}{4\beta^2}}} \right) + \left( g(x) \star \frac{e^{-\left| \frac{x}{c} \sqrt{s^2 - \frac{1}{4\beta^2}} \right|}}{\sqrt{s^2 - \frac{1}{4\beta^2}}} \right) \right\} \quad (2.52)$$

Si denominamos

$$H(x, s) = \frac{e^{-\left| \frac{x}{c} \sqrt{s^2 - \frac{1}{4\beta^2}} \right|}}{\sqrt{s^2 - \frac{1}{4\beta^2}}} \quad (2.53)$$

podemos escribir  $V(x, s)$  del siguiente modo:

$$V(x, s) = \frac{1}{2c} \left\{ (f(x) \star sH(x, s)) + (f(x) \star \frac{1}{2\beta} H(x, s)) + (g(x) \star H(x, s)) \right\} \quad (2.54)$$

Consideremos ahora la convolución de una función de una variable  $a(x)$  con otra de dos variables  $b(x, t)$ . Obviamente la convolución sólo afecta a la variable  $x$  y se puede definir como

$$a(x) \star b(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(z)b(z-x, t)dz \quad (2.55)$$

Según esta definición

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[a(x) \star b(x, t)] &= \int_{t=0}^{t \rightarrow \infty} e^{-st} \int_{z \rightarrow -\infty}^{z \rightarrow \infty} a(z)b(z-x, t)dzdt \\ &= \int_{z \rightarrow -\infty}^{z \rightarrow \infty} a(z) \int_{t=0}^{t \rightarrow \infty} e^{-st}b(z-x, t)dt dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} a(z)B(z-x, s)dz = a(x) \star B(x, s) \end{aligned} \quad (2.56)$$

siendo  $B(z-x, s) = \mathcal{L}[b(z-x, t)]$ . De esto se deduce que

$$\mathcal{L}^{-1}[a(x) \star B(x, s)] = a(x) \star b(x, t). \quad (2.57)$$

En este punto conviene recordar que, habitualmente, la convolución de dos funciones  $a(x)$  y  $b(x)$  se suele definir de un modo diferente cuando intervienen transformadas de Laplace, sin embargo para este desarrollo nos conviene más definirlo como lo hemos hecho en (2.55). La definición habitual, que aquí no emplearemos, es:

$$a(x) \star b(x) = \int_0^x a(z)b(z-x)dz \quad (2.58)$$

Por otra parte, se verifica la siguiente propiedad [133]:

$$\mathcal{L}[I_0(a\sqrt{t^2-b^2})u(t-b)] = \frac{e^{-b\sqrt{s^2-a^2}}}{\sqrt{s^2-a^2}} \quad (2.59)$$

en donde:

- $I_0$  es la función modificada de Bessel de primera clase de orden cero cuya definición se obtiene particularizando para  $\nu = 0$  la expresión siguiente:

$$I_\nu(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! 2^{2k+\nu} \Gamma(k+\nu+1)} x^{2k+\nu}, \quad \nu \in \mathbb{R} \quad (2.60)$$

siendo  $\Gamma$  la función Gamma de Euler.

- $u(t)$  es la función de Heaviside cuya definición es

$$u(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & t > 0 \end{cases} \quad (2.61)$$

Además utilizaremos una última propiedad de la transformada de Laplace según la cual si  $f(t)$  y  $g(t)$  son dos funciones continuas y de orden exponencial se cumple que

$$g(t) = \int_0^t f(z)dz \Rightarrow \mathcal{L}[f(t)] = s\mathcal{L}[g(t)] \quad (2.62)$$

Según esto, y teniendo en cuenta que

$$\frac{dI_0(t)}{dt} = I_1(t), \quad (2.63)$$

siendo  $I_1$  la función modificada de Bessel de primera clase de orden uno, que se obtiene de (2.60); resulta:

$$\begin{aligned} v(x, t) = \frac{1}{2c} \left\{ \right. & \left( f(x) \star \frac{c^3}{2k} t \frac{I_1\left(\frac{c}{2k}\sqrt{c^2t^2 - x^2}\right)}{\sqrt{c^2t^2 - x^2}} u(ct - |x|) \right) \\ & + \frac{1}{2\beta} \left( f(x) \star I_0\left(\frac{c}{2k}\sqrt{c^2t^2 - x^2}\right) u(ct - |x|) \right) \\ & + \left( g(x) \star I_0\left(\frac{c}{2k}\sqrt{c^2t^2 - x^2}\right) u(ct - |x|) \right) \\ & \left. + \left( f(x) \star \delta(ct - |x|) \right) \right\} \quad (2.64) \end{aligned}$$

Además, si hacemos uso de la definición de producto de convolución dada en (2.55), llegamos a que

$$\begin{aligned} v(x, t) = & \frac{f(x - ct) + f(x + ct)}{2} \\ & + \frac{c}{4k} \int_{x-ct}^{x+ct} f(\xi) I_0\left(\frac{c}{2k}\sqrt{c^2t^2 - (x - \xi)^2}\right) d\xi \\ & + \frac{c^2}{4k} t \int_{x-ct}^{x+ct} f(\xi) \frac{I_1\left(\frac{c}{2k}\sqrt{c^2t^2 - (x - \xi)^2}\right)}{\sqrt{c^2t^2 - (x - \xi)^2}} d\xi \\ & + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} g(\xi) I_0\left(\frac{c}{2k}\sqrt{c^2t^2 - (x - \xi)^2}\right) d\xi \quad (2.65) \end{aligned}$$

Por lo tanto, por la ecuación (2.38), tenemos

$$\begin{aligned}
 u(x, t) = e^{-\frac{c^2}{2k}t} & \left\{ \frac{f(x-ct) + f(x+ct)}{2} \right. \\
 & + \frac{c}{4k} \int_{x-ct}^{x+ct} f(\xi) I_0 \left( \frac{c}{2k} \sqrt{c^2 t^2 - (x-\xi)^2} \right) d\xi \\
 & + \frac{c^2}{4k} t \int_{x-ct}^{x+ct} f(\xi) \frac{I_1 \left( \frac{c}{2k} \sqrt{c^2 t^2 - (x-\xi)^2} \right)}{\sqrt{c^2 t^2 - (x-\xi)^2}} d\xi \\
 & \left. + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} g(\xi) I_0 \left( \frac{c}{2k} \sqrt{c^2 t^2 - (x-\xi)^2} \right) d\xi \right\}
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

Una vez obtenido este resultado, para hallar la solución del problema (2.37) que nos permite comparar la ecuación de Fick con la de Cattaneo, no hay más que particularizar (2.66) para  $f(x) = \delta(x)$  y  $g(x) = 0$ . Si hacemos esto resulta

$$u(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{2} e^{-\frac{c^2}{2k}t} \left[ \delta(|x| - ct) + \frac{c}{2k} I_0 \left( \frac{c}{2k} \sqrt{c^2 t^2 - x^2} \right) + \frac{c^2}{2k} t \frac{I_1 \left( \frac{c}{2k} \sqrt{c^2 t^2 - x^2} \right)}{\sqrt{c^2 t^2 - x^2}} \right], & |x| \leq ct \\ 0, & |x| > ct \end{cases} \tag{2.67}$$

donde  $c$  es la *celeridad de la onda difusiva* definida por:

$$c = \sqrt{k/\tau}. \tag{2.68}$$

## Capítulo 3

# Formulación numérica 1D

### 3.1. Introducción

En el capítulo anterior se ha propuesto un modelo para el problema de convección-difusión con velocidad de difusión finita y se han estudiado desde un punto de vista teórico sus principales propiedades tanto en casos unidimensionales como bidimensionales.

En este capítulo se presentará una formulación numérica para las ecuaciones unidimensionales propuestas anteriormente y se resolverán varios ejemplos. Se comenzará estudiando las ecuaciones en estado estacionario y se comparará la solución numérica de las ecuaciones propuestas con la solución numérica de la ecuación clásica y con las soluciones exactas. En particular, se demostrará que bajo ciertas condiciones, la solución numérica (obtenida por el método de Galerkin con elementos lineales) del problema estacionario clásico es (para mallas suficientemente finas) igual a la solución exacta de las ecuaciones propuestas para un cierto valor del tiempo de relajación  $\tau$  que depende del tamaño de malla. Además, se demostrará que si se utiliza la formulación de Galerkin la solución numérica de las ecuaciones del transporte propuestas es estable para todos los valores posibles de la velocidad, excepto para un intervalo de tamaño  $I = h/\tau$ , donde  $h$  es el tamaño de malla.

Finalmente se resuelven varios ejemplos transitorios mediante el método de Taylor-Galerkin en los que se compararán los resultados obtenidos usando la matriz de masas condensada y la matriz de masas consistente.

### 3.2. Estudio numérico del modelo propuesto en estado estacionario

En esta sección se analiza el comportamiento de la solución numérica del problema estacionario del transporte utilizando la ecuación de Cattaneo. En esta parte del trabajo nos referiremos exclusivamente a problemas unidimensionales. Consideremos el dominio  $\Omega = (0, L)$ ,  $L \in \mathbb{R}^+$  con contorno  $\Gamma$ . Si definimos  $\Gamma_0$  como el punto  $x = 0$  y  $\Gamma_L$  como  $x = L$  se verifica  $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_L$ . Usando esta notación, el contorno de entrada de flujo será  $\Gamma_0$  cuando  $a > 0$  y  $\Gamma_L$  en caso contrario. El contorno de salida de flujo será el complementario del contorno de entrada de flujo. Por tanto, el problema que estamos analizando se puede plantear como

$$\mathbf{A} \frac{d\mathbf{U}}{dx} = \mathbf{S} \quad \text{en } \Omega \quad (3.1a)$$

$$\mathbf{U}^{\text{in}} = \mathbf{U}_D^{\text{in}} \quad \text{en } \Gamma \quad (3.1b)$$

donde  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{S}$  son las variables definidas en (2.11) y (2.13). Además,  $\mathbf{U}^{\text{in}}$  representa las componentes entrantes de  $\mathbf{U}$ . La ecuación (3.1a) también se puede escribir del siguiente modo:

$$\frac{dq}{dx} = -\frac{du}{dx} \quad (3.2a)$$

$$k \frac{du}{dx} + \tau a^2 \frac{dq}{dx} = -q \quad (3.2b)$$

Introduciendo (3.2a) en (3.2b) se obtiene la relación

$$q = -(k - \tau a^2) \frac{du}{dx} \quad (3.3)$$

que sólo es válida en este caso simplificado. Con el fin de comparar el modelo propuesto con el modelo estándar, escribiremos (3.2) como una ecuación de segundo orden equivalente. Esta ecuación toma la forma

$$a \frac{du}{dx} - (k - \tau a^2) \frac{d^2u}{dx^2} = 0 \quad (3.4)$$

Para obtener (3.4) ha sido necesario derivar la ecuación (3.2b), por lo que (3.4) *podría contener soluciones espurias*, es decir, pueden existir soluciones de (3.4) que no son soluciones de (3.2). Para evitar la obtención de estas soluciones espurias se deben imponer a (3.4) las mismas condiciones de contorno que hay que imponer a (3.1). En flujo supercrítico debemos

imponer  $u$  y  $q$  en el contorno de entrada de flujo y ninguna condición en el contorno de salida de flujo. En flujo subcrítico se debe imponer una componente de  $\mathbf{U}$  ( $u$  por ejemplo) en el contorno de entrada de flujo y la otra ( $q$  en este caso) en el contorno de salida de flujo<sup>1</sup>. Sin embargo, es correcto prescribir la concentración en  $\Gamma_0$  y  $\Gamma_L$  en flujo subcrítico porque estamos imponiendo una condición en cada contorno.

En lo que sigue compararemos la formulación estándar con la formulación propuesta. Esta comparación resultará más sencilla si utilizamos la expresión (3.4) para describir el modelo propuesto. De este modo, se recupera la formulación clásica simplemente tomando  $\tau = 0$  en (3.4). Comenzaremos esta comparación analizando un problema homogéneo con dos condiciones tipo Dirichlet. En este ejemplo utilizaremos la formulación estándar. Por tanto, el problema puede ser planteado como: hallar una función  $u: [0, L] \mapsto \mathbb{R}$  tal que

$$a \frac{du}{dx} - k \frac{d^2u}{dx^2} = 0; \quad x \in (0, L) \quad (3.5a)$$

$$u(0) = u_0 \quad (3.5b)$$

$$u(L) = u_L \quad (3.5c)$$

Sea  $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = L$  una partición uniforme del intervalo  $[0, L]$  y sea  $h$  la distancia entre dos nodos consecutivos. Llamaremos

$$P_e = \frac{ah}{2k} \quad (3.6)$$

al *número de Péclet* asociado a la partición anterior. Si resolvemos (3.5) usando el método de Galerkin y elementos finitos lineales se obtiene la siguiente ecuación en diferencias para un nodo interior  $j$  [36]:

$$(1 - P_e)u_{j+1} - 2u_j + (1 + P_e)u_{j-1} = 0 \quad (3.7)$$

siendo  $u_j$  la aproximación de elementos finitos de  $u(x_j)$  y  $u_0, u_N$  los valores dados por las condiciones de contorno de (3.5). Además, las ecuaciones en diferencias (3.7) se pueden resolver exactamente (ver, por ejemplo, la referencia [79]) ya que son ecuaciones lineales. La solución exacta de (3.7) es

$$u_j = \frac{1}{1 - \left(\frac{1+P_e}{1-P_e}\right)^N} \left\{ u_0 \left[ \left(\frac{1+P_e}{1-P_e}\right)^j - \left(\frac{1+P_e}{1-P_e}\right)^N \right] + u_L \left[ 1 - \left(\frac{1+P_e}{1-P_e}\right)^j \right] \right\} \quad (3.8)$$

---

<sup>1</sup>Utilizando la relación (3.3) la condición de contorno de flujo se puede imponer de forma débil por medio de la derivada espacial de  $u$

Mediante una simple inspección de la solución numérica (3.8) se concluye que se producirán oscilaciones cuando  $|P_e| > 1$ . Por otra parte, la solución exacta de (3.5) es

$$u(x_j) = \frac{1}{1 - e^{\frac{ah}{k}N}} \left[ u_0 \left( e^{\frac{ah}{k}j} - e^{\frac{ah}{k}N} \right) + u_L \left( 1 - e^{\frac{ah}{k}j} \right) \right] \quad (3.9)$$

Una simple comparación entre (3.8) y (3.9) muestra que la solución numérica será igual a la solución exacta sólo para  $P_e = 0$ , es decir, para el caso de difusión pura. En la siguiente sección realizaremos un estudio más profundo que nos permitirá extraer conclusiones no tan evidentes.

### 3.2.1. El efecto de la formulación de Galerkin sobre las ecuaciones clásicas de convección-difusión

En esta sección estudiaremos el efecto de la formulación numérica de Galerkin sobre las ecuaciones de convección-difusión clásicas, es decir, las ecuaciones donde las perturbaciones se propagan a velocidad infinita. Como veremos, en la solución numérica (al menos para tamaños de malla suficientemente pequeños) las perturbaciones ya no se propagarán a velocidad infinita sino que existirá una velocidad finita (dependiente del tamaño de malla) a la cual se propagan los pulsos de contaminante. Para probar la aseveración anterior demostraremos que cuando  $|P_e| \leq 1$  (es decir, cuando la malla es suficientemente fina) la solución aproximada (3.8) es la solución exacta del problema

$$a \frac{du}{dx} - k^* \frac{d^2u}{dx^2} = 0; \quad x \in (0, L) \quad (3.10a)$$

$$u(0) = u_0 \quad (3.10b)$$

$$u(L) = u_L \quad (3.10c)$$

para un cierto valor  $k^* \leq k$ . Para demostrar esta proposición utilizaremos (3.8) y (3.9). La relación entre  $k$  y  $k^*$  viene dada por

$$e^{\frac{ah}{k^*}j} = \left( \frac{1 + P_e}{1 - P_e} \right)^j \quad \forall j = 0, \dots, N \quad (3.11)$$

Queremos obtener  $k^*$  tal que se verifique (3.11). Si se admiten soluciones complejas, entonces siempre existe un  $k^*$  que verifique (3.11). Si se admiten exclusivamente soluciones reales, entonces (3.11) tiene solución sólo cuando  $|P_e| \leq 1$ , y la solución es:

$$k^* = k \frac{2P_e}{\ln \left( \frac{1+P_e}{1-P_e} \right)} \quad (3.12)$$



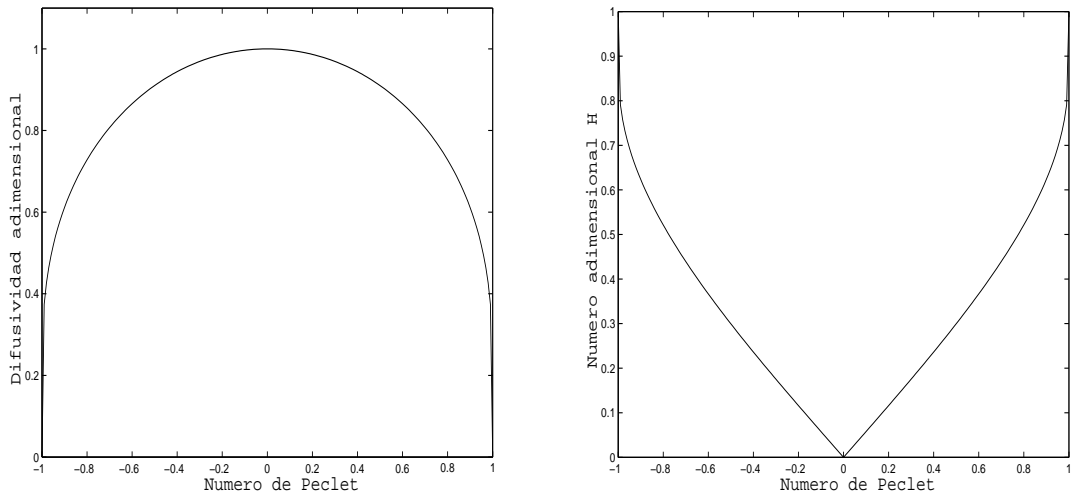


Figura 3.1: Difusividad adimensional ( $k^*/k$ ) en función de  $P_e$  (izquierda) y número adimensional  $H$  en función de  $P_e$  (derecha).

Por medio de la expresión (3.12) se puede demostrar que  $k^* \rightarrow 0$  cuando  $|P_e| \rightarrow 1$  y que  $k^* \rightarrow k$  cuando  $|P_e| \rightarrow 0$ . Véase la figura 3.1 donde se representa  $k^*/k$  para  $P_e \in (-1, 1)$ . Por tanto, el método de Galerkin aplicado a (3.5) resuelve exactamente un problema de convección-difusión con una difusividad menor. Por otra parte, la ecuación (3.12) puede ser reescrita como

$$k^* = k - k \left( 1 - \frac{2P_e}{\ln \left( \frac{1+P_e}{1-P_e} \right)} \right) < k \quad (3.13)$$

Comparando el coeficiente difusivo  $k^*$  con  $k - \tau a^2$  que es el coeficiente que se obtiene utilizando la ley de Cattaneo (ver ecuación (3.4)) se llega a la siguiente conclusión: cuando resolvemos (3.5) mediante el método de Galerkin con elementos lineales se obtiene la solución de un problema de transporte gobernado por la ecuación de Cattaneo. El tiempo de relajación para este problema tiene el valor:

$$\tau_{G-FEM} = \frac{h}{a} \left( \frac{1}{2P_e} - \frac{1}{\ln \left( \frac{1+P_e}{1-P_e} \right)} \right) \quad (3.14)$$

Por tanto, la formulación de Galerkin introduce un tiempo de relajación “artificial”. En consecuencia, se puede definir una velocidad de propagación finita en el problema discreto:

$$c_{G-FEM} = \frac{a}{\left( 1 - \frac{2P_e}{\ln \left( \frac{1+P_e}{1-P_e} \right)} \right)^{1/2}} \quad (3.15)$$

Por medio de la relación (3.15) es fácil obtener el valor de  $H$  (definido en (2.20)) “artificial” para un cierto valor de  $P_e$ . En la figura 3.1 se ha representado el  $H$  “artificial” como una función de  $P_e$ . En consecuencia, cuando se resuelve el problema (3.5) para  $|P_e| < 1$  usando el método de Galerkin se obtiene la solución de un problema de convección-difusión gobernado por la ecuación de Cattaneo en flujo subcrítico. Por tanto, el problema discreto está bien planteado por que las condiciones de contorno (3.5b), (3.5c) se pueden imponer en flujo subcrítico. Sin embargo, cuando  $|P_e| \rightarrow 1$  el problema que realmente se resuelve tiende a un problema que está mal planteado.

En lo que sigue se resolverá el problema del transporte utilizando la ecuación de Cattaneo en estado estacionario. Se presentarán ejemplos en flujo subcrítico y en flujo supercrítico. Para hacer más sencilla la comparación entre el modelo estándar y el modelo propuesto se utilizará la ecuación (3.4) para describir el modelo propuesto. Sin embargo, debemos tener en cuenta que las condiciones de contorno que se deben imponer son (3.1b).

### 3.2.2. Resultados numéricos en flujo subcrítico

En esta sección analizaremos el problema

$$a \frac{du}{dx} - (k - \tau a^2) \frac{d^2u}{dx^2} = 0; \quad x \in (0, L) \quad (3.16a)$$

$$u(0) = u_0 \quad (3.16b)$$

$$u(L) = u_L \quad (3.16c)$$

que representa un problema de transporte formulado mediante la ecuación de Cattaneo sólo cuando el flujo es subcrítico. Consideremos de nuevo la partición de  $[0, L]$  definida por los nodos  $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = L$ . En lo que sigue utilizaremos la notación  $h = L/N$ . Llegados a este punto resulta muy útil definir el número adimensional

$$H_e = \frac{ah}{2(k - \tau a^2)} \quad (3.17)$$

que es el equivalente al número de Péclet en la descripción estándar del problema de transporte. Por tanto, este número es el que controla el espesor de las capas límite que se pueden formar en la solución.

Si resolvemos la ecuación (3.16) usando el método de Galerkin y elementos finitos lineales se obtienen las siguientes ecuaciones en diferencias:

$$(1 - H_e)u_{j+1} - 2u_j + (1 + H_e)u_{j-1} = 0; \quad \forall j = 1, \dots, N - 1 \quad (3.18)$$

donde  $u_0$  y  $u_N$  vienen dados por las condiciones de contorno (3.16b), (3.16c). Del mismo modo que (3.7), las ecuaciones en diferencias (3.18) se pueden resolver analíticamente y se puede obtener la condición de estabilidad

$$|H_e| \leq 1. \quad (3.19)$$

Si tomamos  $\tau = 0$  en (3.19) obtenemos

$$|P_e| \leq 1 \quad (3.20)$$

que es la condición de estabilidad utilizada para la formulación basada en la ley de Fick. Las condiciones de estabilidad (3.19) y (3.20) parecen no ser de utilidad porque sólo pueden ser aplicadas a (3.16a) y (3.5a) respectivamente. Efectivamente esto es cierto en el caso de (3.20). Sin embargo, la condición (3.19) es asintóticamente equivalente a imponer que el tamaño de malla es menor que espacios característicos relacionados con las ondas que determinan la solución del problema del transporte que se deriva de la ecuación de Cattaneo. Como se ha comentado anteriormente, las ondas que determinan la solución del modelo de transporte propuesto se propagan con celeridades  $a - c$  y  $a + c$ . Por tanto, los espacios característicos hacia aguas arriba y hacia aguas abajo son  $\tau(c - a)$  y  $\tau(a + c)$ , respectivamente. Es posible demostrar [61] que

$$h < \text{mín}(\tau(c - a), \tau(a + c)) \quad (3.21)$$

tiende a (3.19) cuando  $a$  tiende a la celeridad de la onda difusiva, excepto por un factor de escala, por lo que la condición de estabilidad (3.21) parece tener un sentido físico.

En lo que sigue representaremos la solución numérica y la solución exacta del problema (3.16). Usaremos varios conjuntos de valores para los parámetros del problema de modo que se presentarán dos grupos de tres ejemplos cada uno. Para cada grupo el tiempo de relajación es constante. Del mismo modo, el tamaño de malla, la difusividad, la longitud del dominio y los valores prescritos en el contorno son los mismos para todos los ejemplos numéricos. Sin embargo, en cada grupo mostraremos tres problemas definidos por la velocidad del fluido  $a$ . Para todos los ejemplos en la sección 3.2 usaremos una malla de 20 elementos lineales,  $L = 1$  (por tanto,  $h = 0.05$ ) y  $k = 1$ .

- Grupo 1: tiempo de relajación pequeño

El primer grupo de ejemplos está definido por  $\tau = 0.01$ . Este valor del tiempo de relajación es pequeño por lo que no nos hemos alejado mucho de la ley de Fick. Usando los valores de  $k$  y  $\tau$  que se han dado anteriormente se obtiene una celeridad de la onda difusiva de  $c = \sqrt{k/\tau} = 10$ . Por tanto, si  $|a| \geq 10$ , entonces (3.16) no

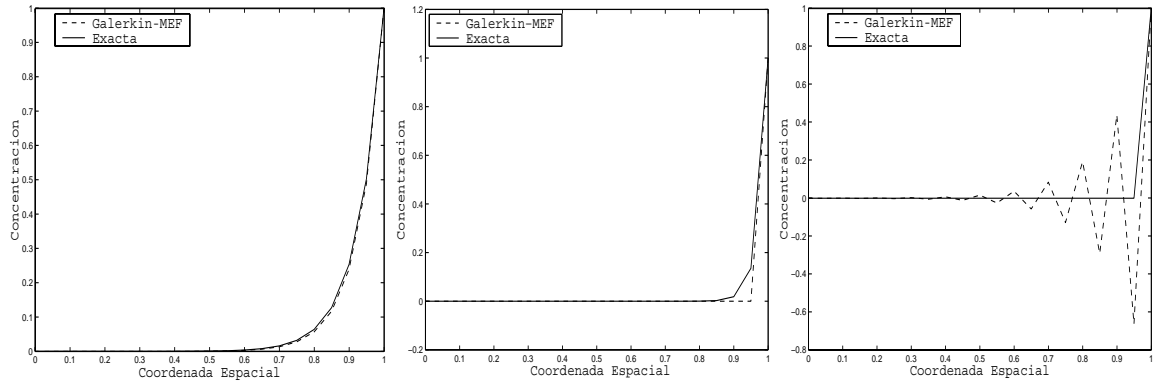


Figura 3.2: Tres problemas de transporte formulados mediante la ley de Cattaneo en flujo subcrítico. Estos ejemplos están definidos por  $k = 1$ ,  $\tau = 0.01$  y tres valores diferentes de  $H$ :  $H = 0.7$  (izquierda),  $H = 0.88278221857319$  (centro),  $H = 0.975$  (derecha). Las soluciones numéricas se han obtenido usando el método de Galerkin y 20 elementos finitos lineales.

representa un problema de transporte formulado con la ley de Cattaneo. El paso siguiente será calcular el máximo valor de la velocidad  $a$  para obtener una solución estable de (3.16) usando la condición de estabilidad  $|H_e| \leq 1$ . Procediendo de este modo se deduce que el esquema numérico empleado conduce a soluciones inestables cuando  $|a| > 8.8278221857319$ . Por tanto, podemos decir que la solución numérica de (3.16) es estable para casi todos los valores posibles de la velocidad  $a$ , porque (3.16) no representa un problema de transporte cuando  $|a| \geq 10$ .

En la figura 3.2 se muestra la solución numérica y la solución exacta para tres valores de la velocidad  $a$ . En la gráfica de la izquierda se han dibujado las soluciones para  $a = 7$ . En el gráfico central se muestran las soluciones para  $a = 8.8278221857319$  que es el mayor valor de  $a$  para el que se obtienen soluciones estables. Finalmente, se muestran las soluciones para  $a = 9.75$  a la derecha.

- Grupo 2: tiempo de relajación medio

Este grupo de problemas está definido por  $\tau = 1$ . Por tanto, la celeridad de la onda difusiva es  $c = \sqrt{k/\tau} = 1$ . Además, según las condiciones de estabilidad (3.19), la mayor velocidad que conduce a soluciones numéricas estables es  $a = 0.98757812194848$ . Se muestran tres ejemplos numéricos para este tiempo de relajación en la figura 3.3. Se han representado las soluciones para las velocidades  $a = 0.97$  (izquierda),  $a = 0.98757812194848$  (centro) y  $a = 0.995$  (derecha).

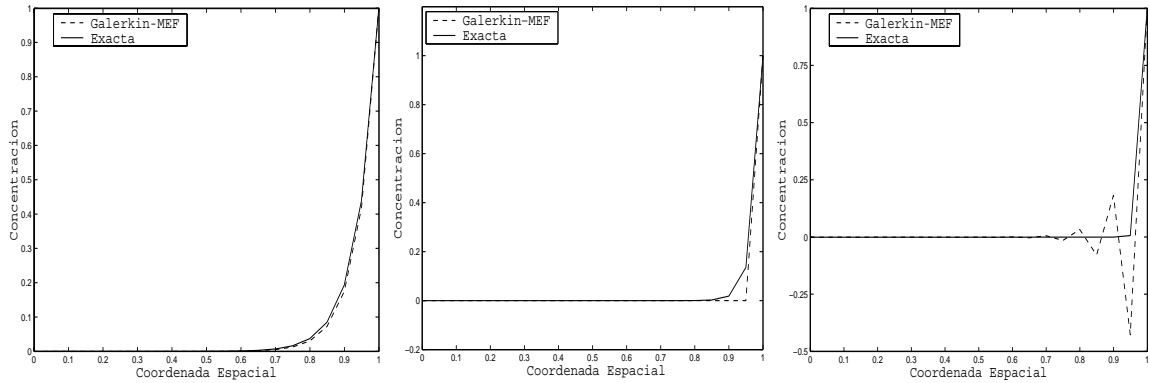


Figura 3.3: Tres problemas de transporte formulados mediante la ley de Cattaneo en flujo subcrítico. Estos ejemplos están definidos por  $k = 1$ ,  $\tau = 1$  y tres valores diferentes de  $H$ :  $H = 0.97$  (izquierda),  $H = 0.98757812194848$  (centro),  $H = 0.995$  (derecha). Las soluciones numéricas se han obtenido usando el método de Galerkin y 20 elementos finitos lineales.

### 3.2.3. Ejemplos numéricos en flujo supercrítico

En esta sección abordaremos la resolución numérica del problema del transporte utilizando la ley de Cattaneo en flujo supercrítico. Utilizaremos el método de Galerkin y elementos finitos lineales. Como hemos dicho anteriormente, en flujo supercrítico  $u$  y  $q$  deben ser prescritos en el contorno de entrada de flujo. La condición de contorno de flujo se puede imponer de forma débil usando la relación (3.3). Para simplificar supondremos  $a > 0$ . De esta forma, sabemos que el contorno de entrada de flujo es  $\Gamma_0$ . Por tanto, analizaremos el problema

$$a \frac{du}{dx} - (k - \tau a^2) \frac{d^2 u}{dx^2} = 0; \quad x \in (0, L) \quad (3.22a)$$

$$u(0) = u_0 \quad (3.22b)$$

$$\frac{du}{dx}(0) = -\frac{q_0}{k - \tau a^2} \quad (3.22c)$$

que podría también ser planteado en términos del sistema (3.2) con las condiciones de contorno  $u(0) = u_0$ ,  $q(0) = q_0$ . Sin embargo, analizaremos este problema resolviendo (3.22) para ser consistentes con el planteamiento de la sección anterior. De nuevo se presentarán dos grupos de ejemplos. En cada grupo el tiempo de relajación es constante. Los valores de  $L$ ,  $k$  y  $h$  son los mismos que en la sección anterior. Los valores impuestos en el contorno ( $u_0 = 1$  y  $q_0 = -1$ ) son los mismos para todos los ejemplos.

- Grupo 1: tiempo de relajación pequeño

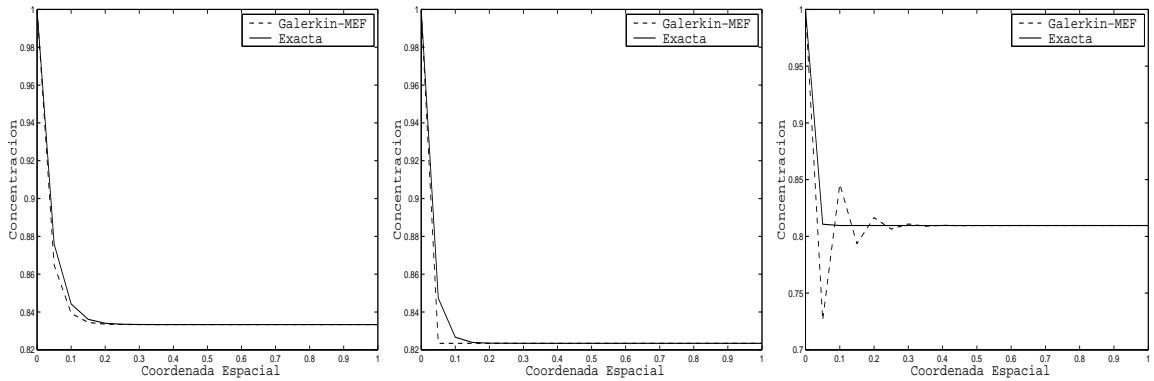


Figura 3.4: Tres problemas de transporte formulados mediante la ley de Cattaneo en flujo supercrítico. Estos ejemplos están definidos por  $k = 1$ ,  $\tau = 0.01$  y tres valores diferentes de  $H$ :  $H = 1.2$  (izquierda),  $H = 1.132782218537319$  (centro),  $H = 1.05$  (derecha). Las soluciones numéricas se han obtenido usando el método de Galerkin y 20 elementos finitos lineales.

El primer grupo está definido por  $\tau = 0.01$ . Este es un valor pequeño para el tiempo de relajación por lo que no nos hemos alejado mucho de la ley de Fick. Con los valores de los parámetros anteriores el cálculo de  $c = \sqrt{k/\tau} = 10$  es directo. Como se ha dicho previamente, el problema (3.22) representa un problema de transporte sólo cuando  $|a| > 10$ . El mínimo valor de  $a$  que conduce a soluciones estables viene dado por la condición  $|H_e| \leq 1$  y resulta ser  $a = 11.32782218537319$ .

En la figura 3.4 se muestran la solución numérica y la solución exacta del problema (3.22) para  $a = 12$  (izquierda), para  $a = 11.32782218537319$  (centro) que es el mínimo valor de la velocidad para el que se obtienen soluciones estables y para  $a = 10.5$  (derecha).

- Grupo 2: tiempo de relajación medio

Este grupo de figuras está definido por el tiempo de relajación  $\tau = 1$ . En consecuencia, la celeridad de la onda difusiva es  $c = 1$ . Se muestran tres ejemplos numéricos para este tiempo de relajación en la figura 3.5. Las soluciones para  $a = 1.05$  se muestran a la izquierda. En el gráfico central se han dibujado las soluciones para  $a = 1.01257812194848$  que es el mínimo valor de  $a$  que conduce a soluciones estables. Finalmente, se han dibujado las soluciones para  $a = 1.005$  a la derecha.

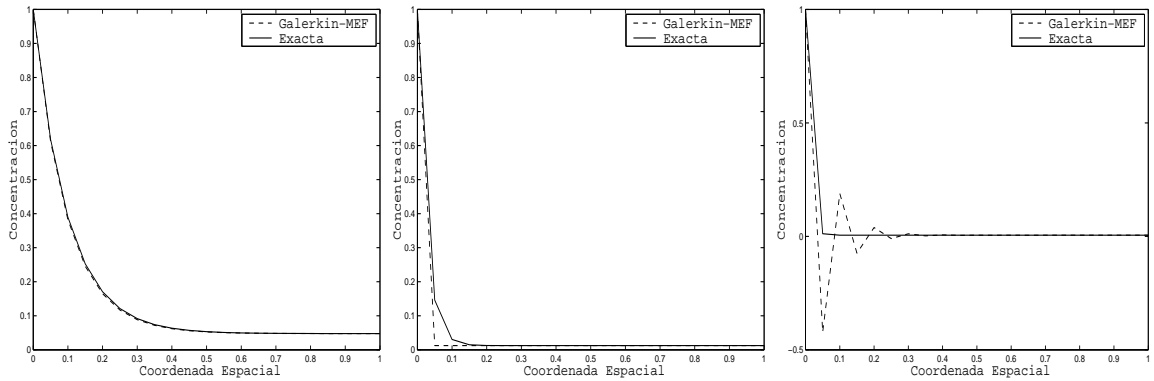


Figura 3.5: Tres problemas de transporte formulados mediante la ley de Cattaneo en flujo supercrítico. Estos ejemplos están definidos por  $k = 1$ ,  $\tau = 1$  y tres valores diferentes de  $H$ :  $H = 1.05$  (izquierda),  $H = 1.01257812194848$  (centro),  $H = 1.005$  (derecha). Las soluciones numéricas se han obtenido usando el método de Galerkin y 20 elementos finitos lineales.

### 3.2.4. Conclusiones extraídas de los ejemplos numéricos

Mediante los ejemplos numéricos anteriores se ha mostrado que utilizando la ecuación de Cattaneo se obtienen soluciones estables prácticamente para cualquier valor de la velocidad  $a$ . Esto se verifica incluso usando el método de Galerkin. Por tanto, desde un punto de vista práctico podemos decir que la ecuación unidimensional del transporte formulada mediante la ley de Cattaneo conduce en general a soluciones estables, ya que los valores de la velocidad  $a$  que hacen que la solución sea inestable son despreciables incluso para valores pequeños del tiempo de relajación. Además, se concluye que a medida que el tiempo de relajación aumenta, el intervalo de velocidades para los que la solución numérica presenta oscilaciones se hace más pequeño, por lo que en cierto modo el problema del transporte se estabiliza. De hecho, se puede demostrar que el tamaño (en el dominio de la velocidad) del intervalo que conduce a soluciones numéricas inestables es

$$I = h/\tau \quad (3.23)$$

que disminuye a medida que aumenta  $\tau$ . Para demostrar la proposición anterior encontraremos los valores de  $a$  que hacen que se verifique la relación

$$|H_e| = 1 \quad (3.24)$$

Es fácil probar que (3.24) tiene 4 soluciones reales, a saber

$$a_1 = -a_4 = -\frac{h}{4\tau} - \sqrt{\left(\frac{h}{4\tau}\right)^2 + c^2} \quad (3.25a)$$

$$a_2 = -a_3 = -\frac{h}{4\tau} + \sqrt{\left(\frac{h}{4\tau}\right)^2 + c^2} \quad (3.25b)$$

De las expresiones anteriores se observa que  $a_1 < 0$ ,  $a_1 < -c$ ,  $a_2 > 0$ ,  $a_2 < c$ . Teniendo en cuenta lo anterior, el intervalo de velocidades que conduce a soluciones inestables tiene un tamaño de

$$I = a_4 - a_2 + a_3 - a_1 = -2(a_1 + a_2) = h/\tau \quad (3.26)$$

que decrece cuando  $\tau$  crece como se ha dicho anteriormente.

### 3.3. Problema transitorio

Una vez estudiado el problema estacionario, procedemos a discretizar las ecuaciones correspondientes al problema transitorio. El objetivo es encontrar  $\mathbf{U}: \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^2$  donde  $\Omega = ]0, L[$  que verifique

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad \text{en } \Omega \times [0, T] \quad (3.27a)$$

$$\mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_0(x) \quad \text{en } \bar{\Omega} \quad (3.27b)$$

$$\mathbf{U}^{\text{in}} = \mathbf{U}_D^{\text{in}} \quad (3.27c)$$

donde

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \\ \tau q \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} ua + q \\ \tau qa + ku \end{pmatrix}; \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -q \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Para resolver el problema (3.27) utilizaremos los métodos de Taylor-Galerkin propuestos por Donea en [43] (ver también [45, 46]). Estos métodos representan un intento de capturar (por medio de una serie de Taylor en el tiempo extendida hasta segundo, tercer o cuarto orden) el carácter direccional de la propagación de la información debido al transporte convectivo.

#### 3.3.1. Taylor-Galerkin de segundo orden

Para discretizar el problema anterior emplearemos el método de Taylor-Galerkin de segundo orden. En el procedimiento desarrollado por Donea [43] se realiza en primer lugar la



discretización temporal. Así, dada la solución en el instante  $t^n$ , la solución en  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  se obtiene mediante la expresión

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta t \left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right)^n \quad (3.29)$$

donde se ha despreciado un error de truncamiento de tercer orden. En la expresión anterior las derivadas temporales se pueden substituir por derivadas espaciales utilizando la ecuación original. De este modo,

$$\left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)^n = \mathbf{S}^n - \left( \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} \right)^n \quad (3.30a)$$

$$\left( \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right)^n = \left( \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} \right)^n - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \right)^n \quad (3.30b)$$

Si a continuación definimos las *matrices jacobianas*  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  como

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \begin{pmatrix} a & 1/\tau \\ k & a \end{pmatrix}; \quad \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1/\tau \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

podemos reescribir la expresión (3.30b) del siguiente modo:

$$\left( \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right)^n = \mathbf{B} \left( \mathbf{S}^n - \left( \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} \right)^n \right) - \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mathbf{S}^n - \left( \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} \right)^n \right) \quad (3.32)$$

Por otra parte, si denominamos  $\Delta \mathbf{U}^n = \mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n$  y substituímos las derivadas (3.30a) y (3.32) en (3.29) llegaremos a la siguiente identidad:

$$\Delta \mathbf{U}^n = \mathbf{b}^n - \left( \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial x} \right)^n \quad (3.33)$$

donde

$$\mathbf{b}^n = \Delta t \mathbf{S}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{B} \mathbf{S}^n \quad (3.34a)$$

$$\mathbf{G}^n = \Delta t \mathbf{F}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{B} \mathbf{F}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{A} \left( \mathbf{S}^n - \left( \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} \right)^n \right) \quad (3.34b)$$

Por tanto, aplicando residuos ponderados a la expresión (3.33) se obtiene la siguiente ecuación vectorial para un nodo interior  $B$

$$\sum_A M_{BA} \Delta \mathbf{U}_A^n = \mathbf{f}_B^n \quad (3.35)$$

donde

$$M_{BA} = \int_0^L N_B N_A dx \quad (3.36a)$$

$$\mathbf{f}_B^n = \int_0^L N_B \mathbf{b}^n dx + \int_0^L \mathbf{G}^n \frac{dN_B}{dx} dx - N_B \mathbf{G}^n \Big|_0^L \quad (3.36b)$$

siendo  $N_A$  y  $N_B$  funciones interpolantes con continuidad  $\mathcal{C}^0$ .

### Integración numérica

Para integrar el término (3.36b) se han utilizado cuadraturas de Gauss-Legendre de dos puntos. Asimismo, para integrar la matriz de masas (3.36a) se han implementado dos cuadraturas numéricas diferentes. La primera de ellas es una cuadratura de Gauss-Legendre de dos puntos y da lugar a lo que llamaremos *matriz de masas consistente*; la segunda es una cuadratura nodal que da lugar a la *matriz de masas condensada* [74]. Como es sabido, la utilización de la cuadratura nodal produce un gran ahorro en el coste computacional debido a que la matriz de masas condensada es diagonal [74].

### Resultados numéricos

En este apartado obtendremos una solución aproximada de (3.27) para unos valores determinados de los parámetros. En todos los casos  $\Omega = (0, 1)$ ,  $k = 1$  y  $\tau = 1$ . Resolveremos este problema para diferentes valores de la velocidad del fluido. En los casos en que el flujo sea subcrítico se prescribirá la concentración tanto en el contorno de entrada de flujo como en el contorno de salida de flujo. Cuando el flujo sea supercrítico se prescribirán la concentración y el flujo en el contorno de entrada. Los valores prescritos son siempre compatibles con las condiciones iniciales. En todos los casos se presentará la solución numérica obtenida mediante la matriz de masas consistente y la matriz de masas condensada. Para los dos métodos se utiliza una malla de 20 elementos lineales y se compara la solución con una solución de referencia denominada “exacta” en la gráfica. Esta solución de referencia es la solución numérica en una malla de 500 elementos y utilizando matriz de masas consistente.

- Flujo subcrítico:  $a = 0.9$

Las condiciones iniciales impuestas en este ejemplo son  $u(x, 0) = x$ ,  $q(x, 0) = 0$ . En la figura 3.6 se muestran las dos soluciones numéricas (matriz de masas consistente y condensada) frente a la solución de referencia para los instantes  $t = 0.25$ ,  $t = 0.5$ ,  $t = 1$  y  $t = 2$ .

En esta figura se observa que la matriz de masas condensada produce una pérdida de precisión aceptable frente a la matriz consistente.

- Flujo subcrítico:  $a = 0.995$

Las condiciones iniciales impuestas en este ejemplo son  $u(x, 0) = x$ ,  $q(x, 0) = 0$ . En este caso se produce una capa límite en el contorno de salida de flujo tal y como se puede observar en la solución de referencia. Obviamente, ninguna de las soluciones numéricas (matriz condensada y matriz consistente) es capaz de capturar esta capa límite, pues

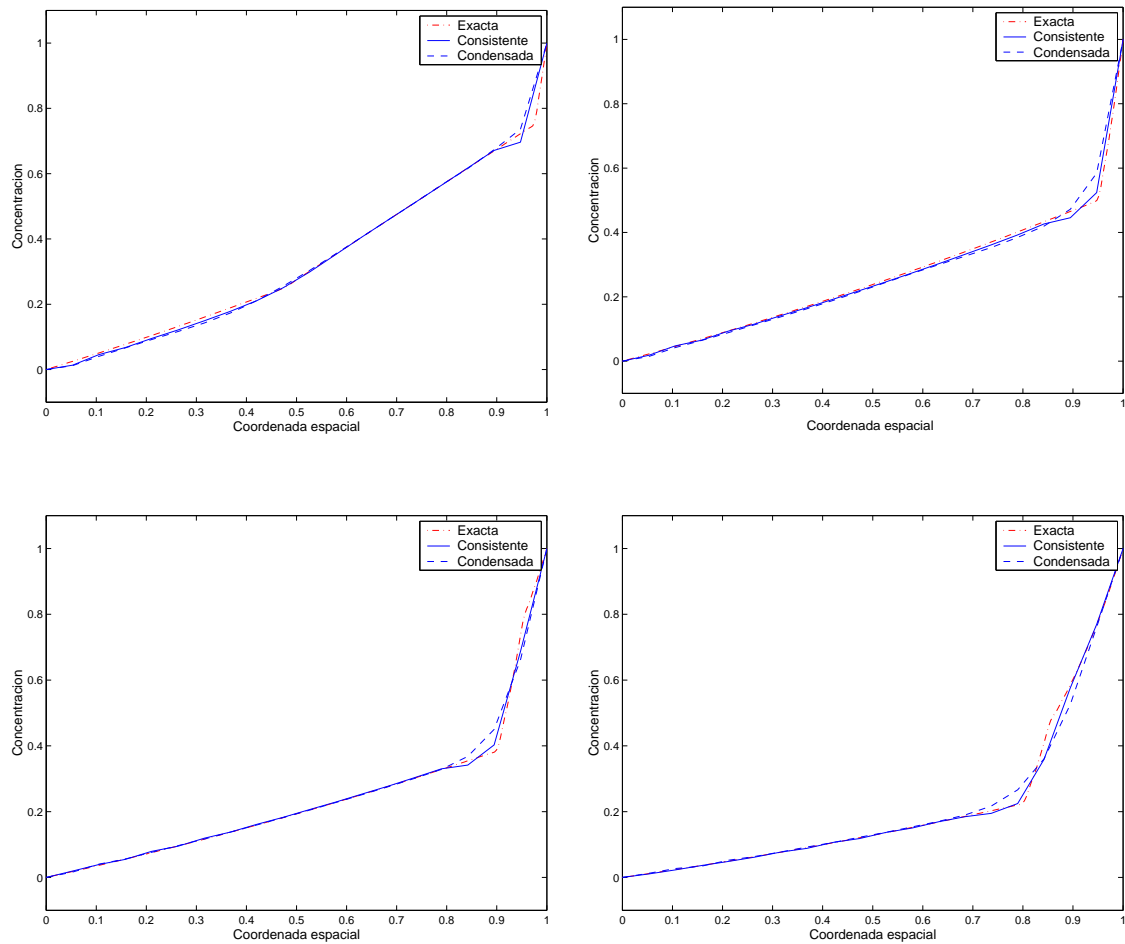


Figura 3.6: Problema de convección-difusión en flujo subcrítico. Soluciones numéricas (matriz de masas condensada y consistente) en una malla de 20 elementos frente a la solución exacta. Se dibujan las soluciones para  $t = 0.25$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.5$  s. (arriba derecha),  $t = 1$  s. (abajo izquierda) y  $t = 2$  s. (abajo derecha). Los valores de los parámetros son  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.9$ .

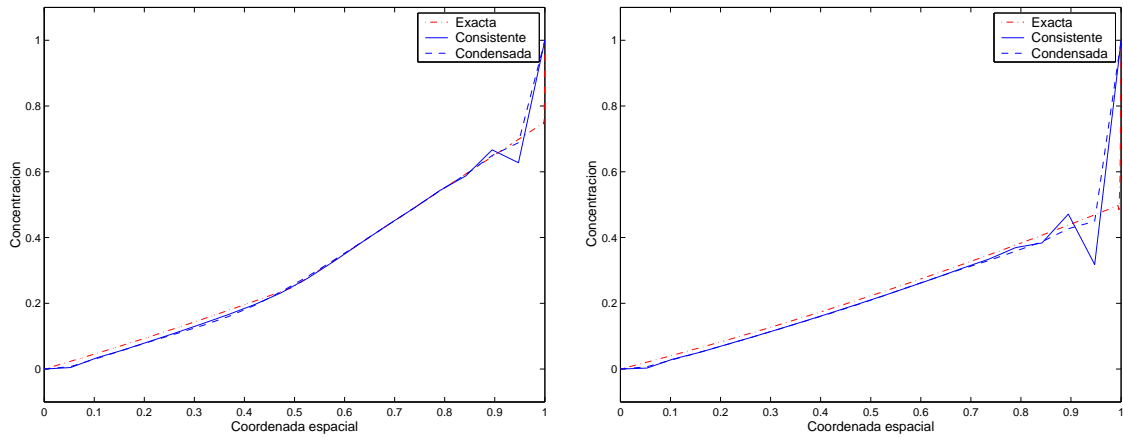


Figura 3.7: Problema de convección-difusión en flujo subcrítico. Soluciones numéricas (matriz de masas condensada y consistente) en una malla de 20 elementos frente a la solución exacta. Se dibujan las soluciones para  $t = 0.25$  s. (izquierda) y  $t = 0.5$  s. (derecha). Los valores de los parámetros son  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.995$ .

la malla está formada sólo por 20 elementos (ver figura 3.7). Sin embargo, se observa que, para una precisión similar, la solución numérica obtenida con la matriz de masas condensada es más estable que la obtenida mediante la matriz de masas consistente.

- Flujo supercrítico:  $a = 1.005$

Las condiciones iniciales para este ejemplo son  $u(x, 0) = 1$ ,  $q(x, 0) = -1$ . La solución de este problema es similar a la del anterior con la diferencia de que en este caso la capa límite se forma en el contorno de entrada de flujo. Del mismo modo, ninguna de las soluciones numéricas (matriz condensada y matriz consistente) es capaz de capturar la capa límite, pues la malla sólo cuenta con 20 elementos lineales (ver figura 3.8). De nuevo se observa que la solución con matriz de masas condensada presenta aproximadamente la misma precisión que la solución con matriz de masas consistente, pero mayor estabilidad.

### 3.4. Conclusiones

En este capítulo se ha presentado una formulación numérica unidimensional para las ecuaciones del transporte propuestas y se han resuelto varios ejemplos. La primera parte del capítulo se ha dedicado al problema estacionario. Se ha hecho un estudio detallado de la formulación de Galerkin de la ecuación clásica y de las ecuaciones propuestas. Mediante

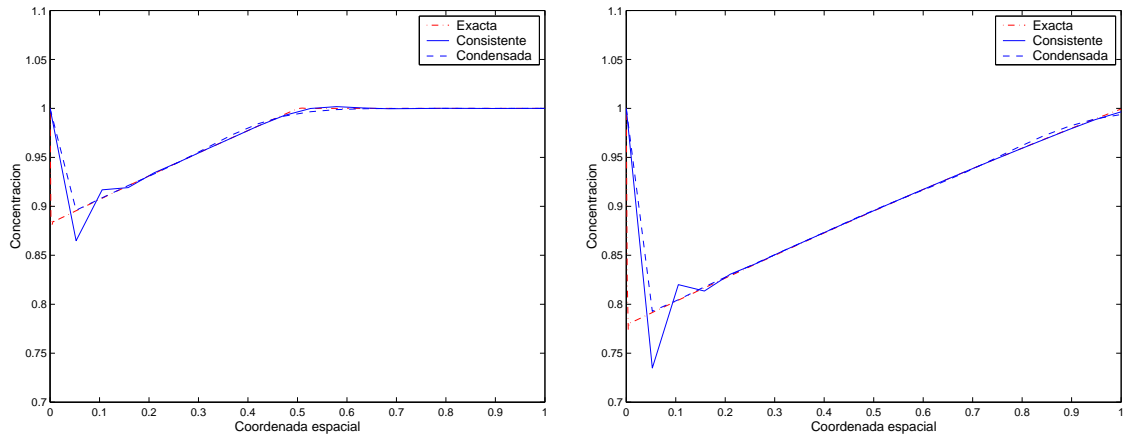


Figura 3.8: Problema de convección-difusión en flujo supercrítico. Soluciones numéricas (matriz de masas condensada y consistente) en una malla de 20 elementos frente a la solución exacta. Se dibujan las soluciones para  $t = 0.25$  s. (izquierda) y  $t = 0.5$  s. (derecha). Los valores de los parámetros son  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 1.005$ .

este estudio se han obtenido principalmente dos resultados:

- Bajo ciertas condiciones, la solución numérica (obtenida por el método de Galerkin con elementos lineales) del problema clásico es (para mallas suficientemente finas) igual a la solución exacta de las ecuaciones propuestas para un cierto valor del tiempo de relajación  $\tau$  que depende del tamaño de malla
- Si se utiliza la formulación de Galerkin la solución numérica de las ecuaciones del transporte propuestas es estable para todos los valores posibles de la velocidad, excepto para un intervalo de tamaño  $I = h/\tau$ , donde  $h$  es el tamaño de malla. El tamaño  $I$  de este intervalo es inversamente proporcional al tiempo de relajación, por lo que a medida que aumenta  $\tau$  (a medida que nos alejamos de la ley de Fick) el rango de velocidades que da lugar a soluciones numéricas inestables es más pequeño. Por tanto, podemos concluir que usar la ley de Cattaneo en lugar de la ley de Fick conduce, en general, a soluciones numéricas más estables.

Finalmente se han resuelto varios ejemplos transitorios mediante el método de Taylor-Galerkin de segundo orden. Se han comparado los resultados obtenidos usando la matriz de masas condensada y la matriz de masas consistente. Los resultados son de calidad similar (incluso un poco mejores los obtenidos con matriz condensada) por lo que se recomienda el uso de matriz de masas condensada debido al menor coste computacional que supone.

## Capítulo 4

# Formulación numérica 2D basada en el método de Taylor-Galerkin

### 4.1. Introducción

En el capítulo anterior se presentó un modelo numérico unidimensional para las ecuaciones del transporte con velocidad difusiva finita. En este capítulo se extenderá ese modelo a problemas bidimensionales. En particular, se realizará la discretización de la ecuación (2.22) mediante los métodos de Taylor-Galerkin de segundo y tercer orden. La discretización de las ecuaciones tridimensionales es inmediata a partir de la formulación numérica bidimensional que se presenta, por lo que no se ha considerado necesario incidir en ello.

Para finalizar el capítulo se resuelven varios ejemplos prácticos. Mediante estos ejemplos se muestra que el modelo propuesto puede ser utilizado para problemas reales de ingeniería y se observan algunas características interesantes del modelo propuesto. Finalmente, se extraen diversas conclusiones.

### 4.2. Método de Taylor-Galerkin de segundo orden

En esta sección llevaremos a cabo la discretización del modelo de transporte propuesto. Las ecuaciones que gobiernan el problema escritas en forma conservativa son (2.22). Reescribimos aquí estas ecuaciones por completitud:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = \mathbf{S} \quad (4.1)$$

donde

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \\ \tau q_1 \\ \tau q_2 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} ua_1 + q_1 & ua_2 + q_2 \\ \tau q_1 a_1 + ku & \tau q_1 a_2 \\ \tau q_2 a_1 & \tau q_2 a_2 + ku \end{pmatrix}; \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -q_1 \\ -q_2 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Usaremos también la ecuación (2.24) y la notación (2.25). Resolveremos la ecuación (4.1) en un dominio  $\Omega$  con un contorno regular  $\Gamma$ . Denotaremos  $\mathbf{n} = (n_1, n_2)^T$  la normal unitaria exterior a  $\Gamma$ . Por último, debemos imponer una condición inicial y las condiciones de contorno necesarias (ver sección 2.6.2) para obtener un problema bien planteado. El método numérico que utilizaremos se puede describir como sigue: Sea  $\mathbf{U}^n$  la aproximación de elementos finitos en el instante  $t^n = n\Delta t$ , siendo  $\Delta t$  el incremento de tiempo. La solución  $\mathbf{U}^{n+1}$  en el siguiente nivel de tiempo  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  se obtiene mediante una serie de Taylor, truncada en segundo orden, alrededor de  $t = t^n$ ,

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta t \left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right)^n \quad (4.3)$$

Seguidamente, al igual que en la formulación unidimensional, las derivadas temporales de  $\mathbf{U}$  son reemplazadas por derivadas espaciales utilizando la ecuación original (2.22):

$$\left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)^n = \mathbf{S}^n - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F})^n \quad (4.4a)$$

$$\left( \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right)^n = \mathbf{B}(\mathbf{S}^n - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F})^n) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{P})^n \quad (4.4b)$$

donde  $\mathbf{B}$  es la matriz Jacobiana asociada al término fuente, a saber

$$\mathbf{B} = \nabla_{\mathbf{U}}(\mathbf{S}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/\tau & 0 \\ 0 & 0 & -1/\tau \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

y  $\mathbf{P}$  es la matriz que resulta de ensamblar los vectores columna

$$\mathbf{P}_i = -\mathbf{A}_i(\mathbf{S} - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F})); \quad i = 1, 2 \quad (4.6)$$

Si definimos  $\Delta \mathbf{U}^n = \mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n$  y tenemos en cuenta que el medio es homogéneo, se verifica la siguiente relación:

$$\Delta \mathbf{U}^n = \mathbf{b}^n - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{G})^n \quad (4.7)$$

siendo

$$\mathbf{b}^n = \Delta t \mathbf{S}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{B} \mathbf{S}^n \quad (4.8a)$$

$$\mathbf{G}^n = \Delta t \mathbf{F}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{B} \mathbf{F}^n - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{P}^n \quad (4.8b)$$

La formulación en residuos ponderados de (4.7) usando el método de Galerkin conduce a la siguiente ecuación vectorial en un nodo interior  $B$

$$\sum_A M_{BA} \Delta \mathbf{U}_A^n = \mathbf{f}_B^n \quad (4.9)$$

donde

$$M_{BA} = \iint_{\Omega} N_B N_A d\Omega \quad (4.10a)$$

$$\mathbf{f}_B^n = \iint_{\Omega} N_B \mathbf{b}^n d\Omega + \iint_{\Omega} \mathbf{G}^n \nabla_{\mathbf{x}} (N_B) d\Omega - \int_{\Gamma} N_B \mathbf{G}^n \mathbf{n} d\Gamma \quad (4.10b)$$

$N_A, N_B$  son las funciones de forma asociadas a los nodos globales  $A$  y  $B$ .

### 4.3. Método de Taylor-Galerkin de tercer orden

El método de Taylor-Galerkin de tercer orden está basado en una serie de Taylor extendida hasta tercer orden en el tiempo. Para hacer posible una implementación con elementos finitos de clase  $\mathcal{C}^0$ , la tercera derivada de  $\mathbf{U}$  no se reemplaza totalmente por derivadas espaciales sino que se escribe en una forma mixta espacio-temporal. Esta forma mixta conduce a una modificación de la matriz de masas usual cuando se utiliza una aproximación de Euler hacia delante para la parte temporal de la derivada mixta. Otro procedimiento para alcanzar tercer orden de precisión en el tiempo que permite usar interpolantes  $\mathcal{C}^0$  es realizar el avance en el tiempo en dos pasos. En este estudio se utilizará el esquema propuesto por Selmin en [119], esto es,

$$\tilde{\mathbf{U}}^n = \mathbf{U}^n + \frac{1}{3} \Delta t \left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)^n + \alpha \Delta t^2 \left( \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right)^n \quad (4.11a)$$

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta t \left( \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left( \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{U}}}{\partial t^2} \right)^n \quad (4.11b)$$

donde  $\alpha$  es un parámetro que sólo afecta al coeficiente de cuarto orden. Selmin propuso determinar  $\alpha$  para obtener (en el caso unidimensional lineal de convección pura) un esquema con el mismo error de fase que el método de Taylor-Galerkin de orden 3 de un paso. Este procedimiento conduce al valor  $\alpha = 1/9$ . Además, el algoritmo de dos pasos tiene un dominio de estabilidad mayor que el de un paso en problemas bidimensionales (ver [119]).



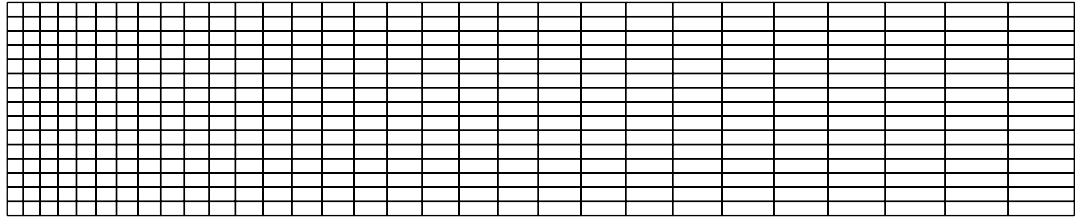


Figura 4.1: Flujo subcrítico en un canal. Malla de cálculo (450 elementos bilineales).

#### 4.4. Integración numérica

Para los dos algoritmos anteriores (Taylor-Galerkin de segundo y tercer orden) se ha utilizado la misma integración numérica. La matriz de masas se obtiene mediante la integración nodal de (4.10a) dando lugar a un tipo de *matriz de masas condensada* [74]. Se ha comprobado mediante varios tests numéricos que la pérdida de precisión que se produce al utilizar esta cuadratura en lugar de cuadraturas de Gauss-Legendre de dos puntos en cada dirección es aceptable. Además, este procedimiento produce un gran ahorro en el coste computacional debido a que la matriz de masas condensada es diagonal. La integración de los términos restantes se realiza mediante cuadraturas de Gauss-Legendre de dos puntos en cada dirección. Para las integrales de línea se utilizan también cuadraturas de Gauss-Legendre de dos puntos en cada cara del elemento.

#### 4.5. Ejemplos numéricos

En esta sección se mostrarán los resultados obtenidos mediante los esquemas numéricos presentados en las secciones 4.2 y 4.3. Se presentarán varios ejemplos de transporte de un contaminante en un canal rectangular y un ejemplo de un vertido accidental en un puerto. Las mallas no estructuradas fueron generadas usando el código GEN4U basado en el algoritmo de Sarrate y Huerta [116].

##### 4.5.1. Flujo subcrítico en un canal rectangular

Consideremos un canal rectangular sobre la región  $[0, 10] \times [0, 2]$ . Usaremos una malla totalmente estructurada de 450 elementos bilineales (ver figura 4.1). Los valores de los parámetros son  $k = 1$  y  $\tau = 1$  lo que implica  $c = 1$ . El campo de velocidades empleado en los cálculos es

$$\mathbf{a}(x_1, x_2) = (0.8x_2(2 - x_2), 0)^T \quad (4.12)$$

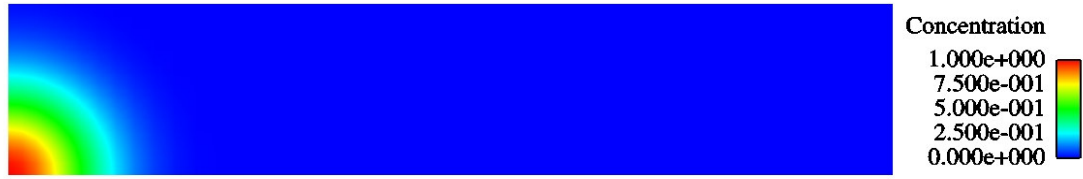


Figura 4.2: Flujo subcrítico en un canal. Condición inicial en concentraciones.

que es un campo solenoidal. Usando las relaciones (2.31) y (4.12) es claro que el flujo es subcrítico en todo el dominio. Las condiciones iniciales son

$$u(x_1, x_2) = e^{-(x_1^2 + x_2^2)} \quad (4.13a)$$

$$\mathbf{q}(x_1, x_2) = 0 \quad (4.13b)$$

La condición inicial en concentraciones ha sido dibujada en la figura 4.2.

Con respecto a las condiciones de contorno, se prescribe la concentración y  $q_2$  en el contorno de entrada de flujo;  $q_1$  en el contorno de salida de flujo y  $q_2 = 0$  en las paredes del canal (en todos los casos se imponen los valores que resultan de las condiciones iniciales). En lo que sigue presentaremos los resultados obtenidos utilizando los métodos de Taylor-Galerkin de segundo y tercer orden. El paso de integración temporal es  $\Delta t = 0.1$  s. y se avanza en el tiempo hasta que se verifica la relación

$$\text{Residuo} = \frac{\|\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n\|}{\|\mathbf{U}^{n+1}\|} \leq 10^{-6} \quad (4.14)$$

- Método de Taylor-Galerkin de segundo orden

En la figura 4.3 se muestra la solución de concentraciones en 4 tiempos diferentes: Para  $t = 3$  s., para  $t = 6$  s., para  $t = 9$  s. y para  $t = 12$  s. Además, se presenta la solución estacionaria.

- Método de Taylor-Galerkin de tercer orden

En la figura 4.4 se muestra la solución de concentraciones en 4 tiempos diferentes: Para  $t = 3$  s., para  $t = 6$  s., para  $t = 9$  s. y para  $t = 12$  s. Además, se presenta la solución estacionaria.

Los resultados obtenidos por los métodos de segundo y tercer orden son prácticamente idénticos a pesar de que el coste computacional del método de tercer orden es el doble del coste del método cuadrático.

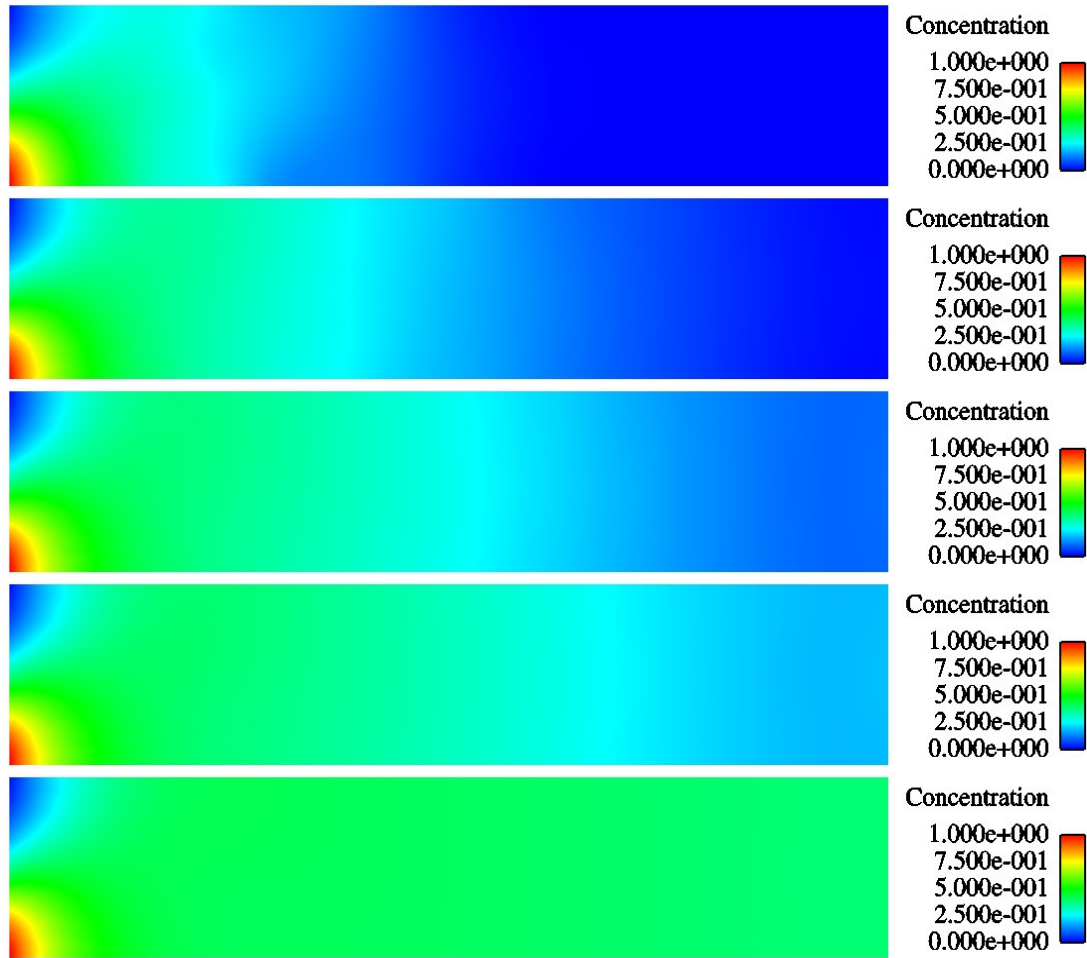


Figura 4.3: Flujo subcrítico en un canal. Soluciones para  $t = 3$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 9$  s.,  $t = 12$  s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden.

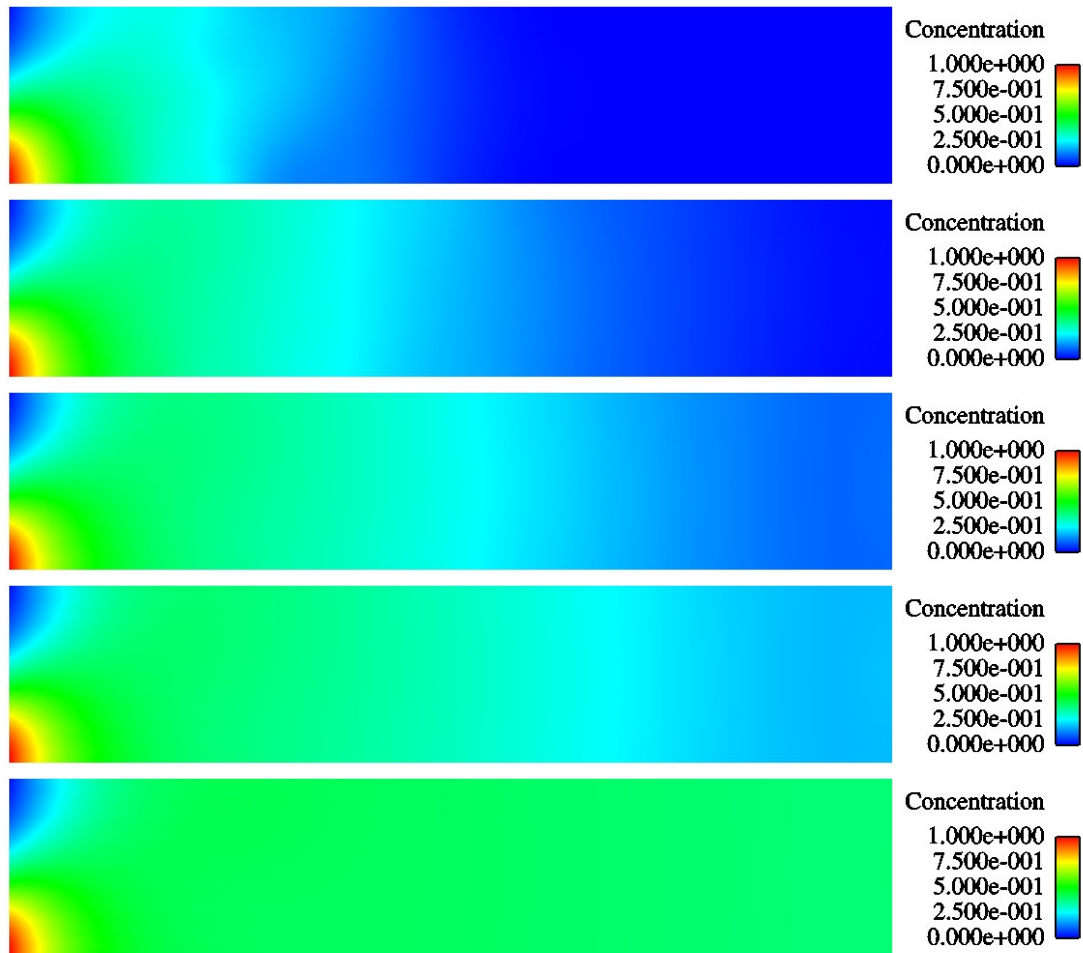


Figura 4.4: Flujo subcrítico en un canal. Soluciones para  $t = 3$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 9$  s.,  $t = 12$  s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de tercer orden.

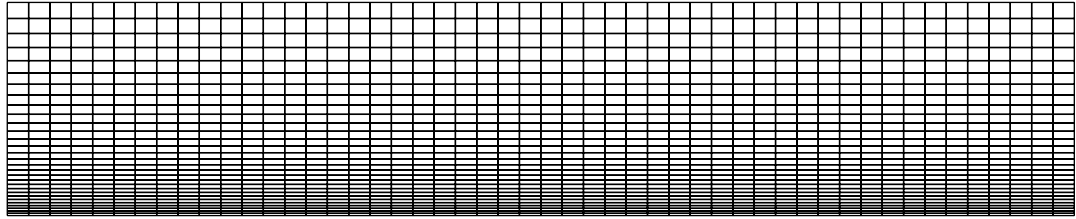


Figura 4.5: Flujo transcrito en un canal. Malla de cálculo (1500 elementos bilineales).

#### 4.5.2. Flujo transcrito en un canal rectangular

Consideremos un canal rectangular sobre la región  $[0, 10] \times [0, 2]$ . La malla de cálculo (1500 elementos) se ha dibujado en la figura 4.5. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-2}$  y  $\tau = 1$ . Por tanto, la celeridad de la onda difusiva es  $c = 0.1$ . Resolveremos el problema usando el campo de velocidades

$$\mathbf{a}(x_1, x_2) = (2x_2(2 - x_2), 0)^T \quad (4.15)$$

que es un campo solenoidal. Usando (2.31) se puede ver que el flujo considerado es supercrítico excepto en 2 regiones muy estrechas adyacentes a las paredes del canal. De hecho, este es un problema con un flujo de alta velocidad ya que verifica  $H = 20$  (esto sería equivalente a  $Mach = 20$  en un problema de flujo compresible) en la recta  $x_2 = 1$ . Las condiciones iniciales son (4.13) (la relativa a la concentración se ha dibujado en la figura 4.2).

Con respecto a las condiciones de contorno, se prescriben todas las incógnitas (se imponen valores compatibles con las condiciones iniciales) en el contorno de entrada de flujo supercrítico. En la pared sólida se impone  $q_2 = 0$  que es también compatible con las condiciones iniciales y no se impone ninguna variable en el contorno de salida de flujo. Se utiliza un paso de tiempo  $\Delta t = 2 \cdot 10^{-2}$  s. y se avanza en el tiempo hasta que se satisface la relación (4.14).

- Método de Taylor-Galerkin de segundo orden

En la figura 4.6 se muestra la solución de concentraciones en 6 tiempos diferentes: Para  $t = 1.5$  s., para  $t = 3$  s., para  $t = 4.5$  s., para  $t = 6$  s. y para  $t = 12$  s. Además, se ha dibujado la solución estacionaria.

- Método de Taylor-Galerkin de tercer orden

En la figura 4.7 se muestra la solución de concentraciones en 6 tiempos diferentes: Para  $t = 1.5$  s., para  $t = 3$  s., para  $t = 4.5$  s., para  $t = 6$  s. y para  $t = 12$  s. Además, se ha dibujado la solución estacionaria.

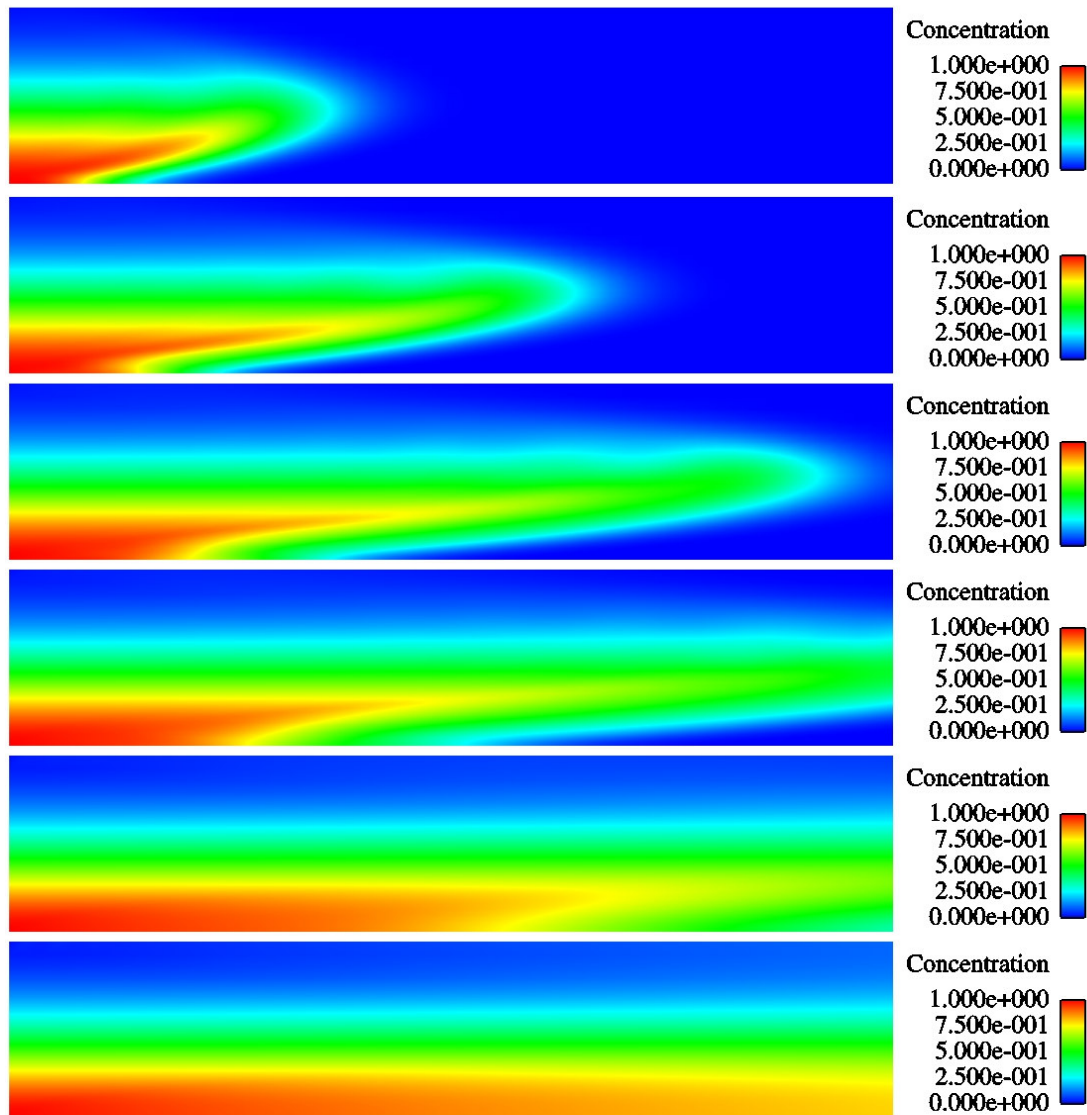


Figura 4.6: Flujo transcrito en un canal. Soluciones para  $t = 1.5$  s.,  $t = 3$  s.,  $t = 4.5$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 12$  s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden.

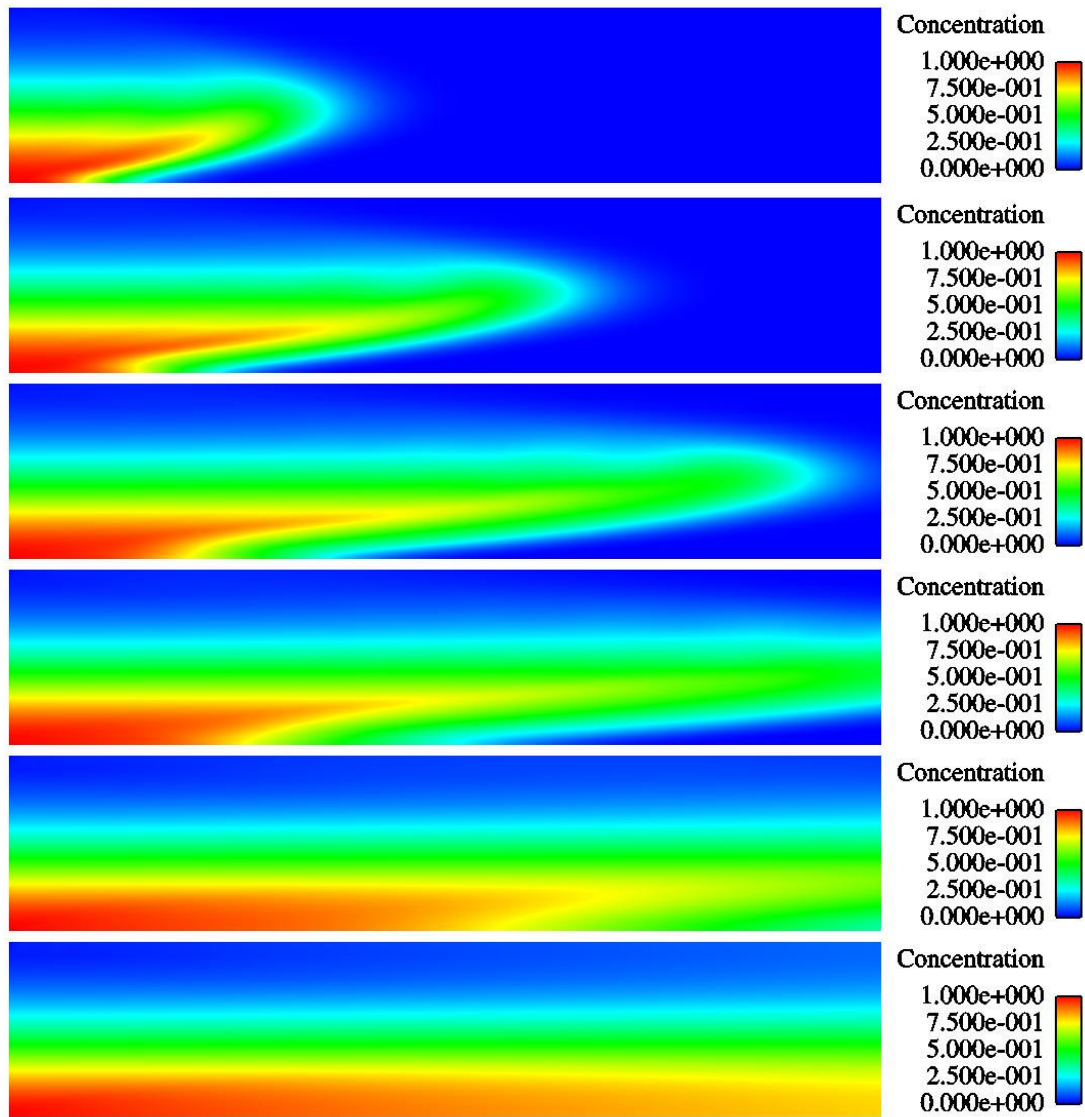


Figura 4.7: Flujo transcrito en un canal. Soluciones para  $t = 1.5$  s.,  $t = 3$  s.,  $t = 4.5$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 12$  s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de tercer orden.

De nuevo se observa que los resultados de los dos métodos analizados son muy parecidos. Por tanto, en los ejemplos que se presenten a continuación sólo se utilizará el método de segundo orden ya que tiene un coste somputacional menor.

### 4.5.3. Vertido accidental en un puerto

En esta sección se analiza la evolución de un vertido accidental en un puerto. La planta del puerto se ha dibujado en la figura 4.8. En esta misma figura se observan los tres tipos de contorno que existen en el problema: un contorno tipo pared, un contorno de mar abierto y un contorno con un flujo normal de contaminante prescrito para simular el vertido.

El objetivo de este ejemplo es demostrar que el modelo propuesto se puede utilizar para un problema con geometría real. Los parámetros del flujo se han elegido de forma arbitraria. Obviamente, si se quisiese realizar un cálculo real en el puerto habría que realizar ensayos y una estimación de parámetros adecuada, pero esto se sale de los objetivos de la tesis. Asimismo, tampoco se ha calculado el campo de velocidades sino que se ha generado analíticamente de modo que verifique la condición de incompresibilidad y las condiciones de contorno de un fluido viscoso. El campo de velocidades y la malla de elementos finitos empleada se pueden ver también en la figura 4.8.

El flujo viene dado por valor máximo del número adimensional  $H$  (ver la definición en (2.31))  $H_{\text{máx}} \approx 0.85308889888607$ , por lo que el flujo es subcrítico en todo el dominio. También en la figura 4.8 se han marcado con diferentes colores los tipos de contornos que existen en el problema: el contorno tipo pared se ha dibujado en color verde; el contorno en el que se produce el vertido se ha dibujado en color rojo; por último, en el contorno de mar abierto se ha dibujado en naranja la parte de salida de flujo y en azul la parte de entrada de flujo. El tiempo se mide mediante la variable adimensional  $t^* = t/\tau$ . El problema se ha resuelto empleando el esquema numérico descrito en la sección 4.2 y un paso de tiempo  $\Delta t^* = 0.05$ . Estos valores conducen a un número de Courant máximo  $C_{\text{máx}} = \frac{\Delta t(\|\mathbf{a}\|_{\text{máx}} + c)}{\Delta x} \approx 0.78619903592631$ . En la figura 4.9 se presentan (de izquierda a derecha y de arriba a abajo) la condición inicial en concentraciones, las soluciones de concentraciones usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden para los instantes  $t^* = 6$ ,  $t^* = 12$ ,  $t^* = 24$ ,  $t^* = 36$ ,  $t^* = 48$ ,  $t^* = 60$ ,  $t^* = 84$ ,  $t^* = 132$  y la solución estacionaria.

### 4.5.4. Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo subcrítico

En esta sección se resuelve un problema de transporte de contaminante en un canal rectangular. El canal está situado sobre la región  $[0, 10] \times [0, 2]$ . Inicialmente no existe contaminante en el canal, pero a partir del instante inicial se introduce un flujo de contaminante



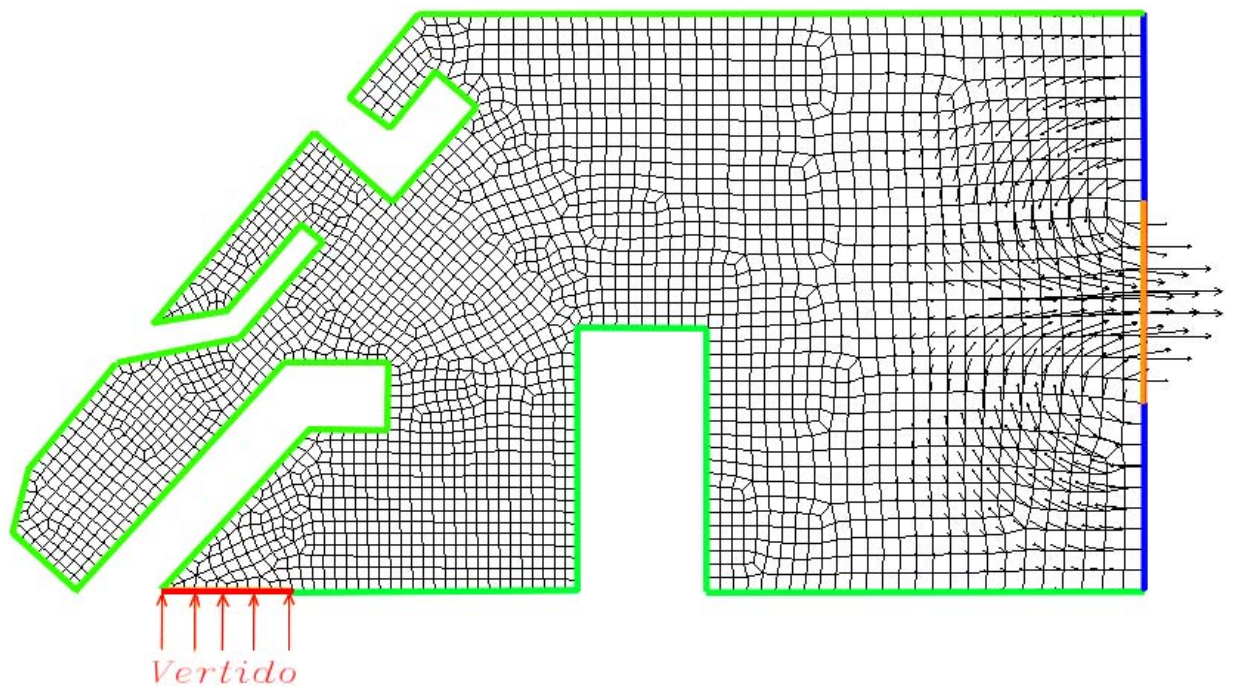


Figura 4.8: Vertido accidental en un puerto: Malla de elementos finitos empleada para el cálculo (2481 elementos bilineales) y campo de velocidades. La malla se ha generado mediante el sistema GEN4U [116]. El contorno tipo pared se ha dibujado en color verde, el contorno en el que se produce el vertido se ha dibujado en color rojo y en el contorno de mar abierto se ha dibujado en naranja la parte de salida de flujo y en azul la parte de entrada de flujo.

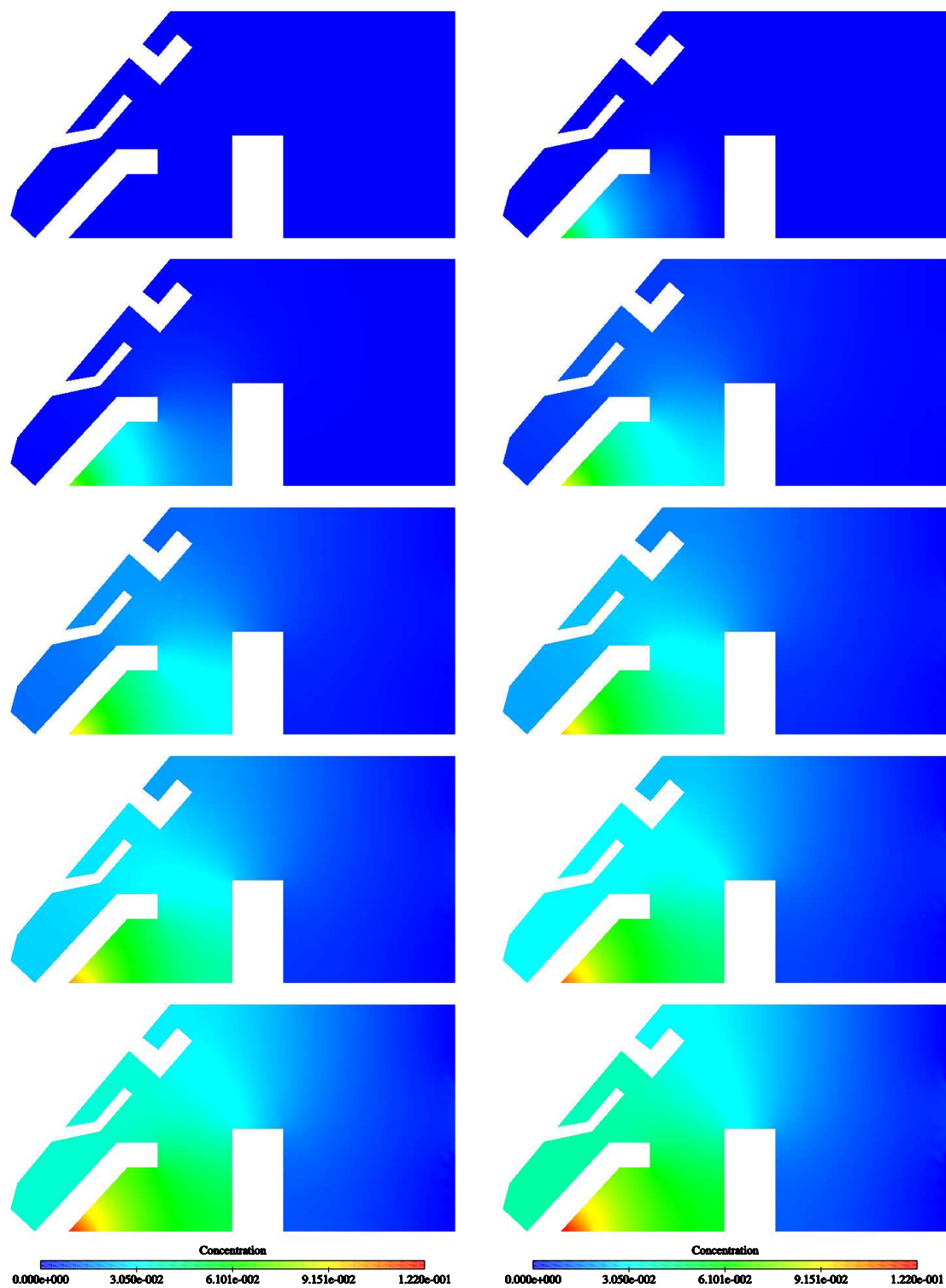


Figura 4.9: Vertido accidental en un puerto: De izquierda a derecha y de arriba a abajo, condición inicial de concentraciones y soluciones para los instantes  $t^* = 6, t^* = 12, t^* = 24, t^* = 36, t^* = 48, t^* = 60, t^* = 84, t^* = 132$  y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden.

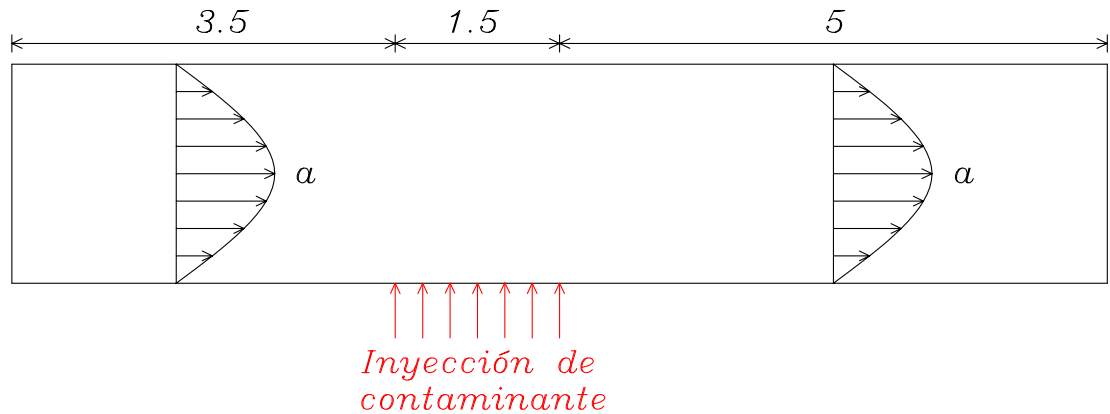


Figura 4.10: Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo subcrítico. Planteamiento del problema.

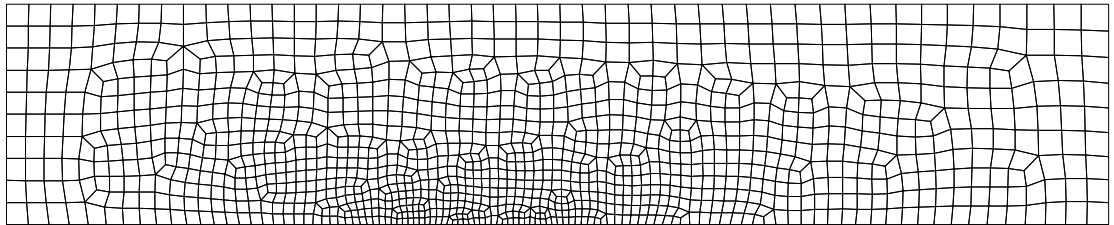


Figura 4.11: Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo subcrítico. Malla de cálculo de 1254 nodos y 1166 elementos bilineales.

por el lateral como se indica en la figura 4.10. El flujo normal de contaminante en la zona de la inyección tiene un valor de  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -2 \cdot 10^{-2}$ . En el resto de los contornos laterales se impone una condición estándar de pared (flujo normal nulo). En el contorno de entrada de flujo se impone concentración nula y flujo tangencial nulo; en el contorno de salida de flujo se impone flujo normal nulo. El campo de velocidades del fluido viene dado por la expresión  $\mathbf{a}(x_1, x_2) = (x_2(2 - x_2), 0)^T$  de modo que  $\|\mathbf{a}\|_{\text{máx}} = 1$ . Los valores de los parámetros son  $k = 2$  y  $\tau = 1$ , por lo que el flujo es subcrítico en todo el dominio. El problema se ha resuelto utilizando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden y la malla de 1166 elementos bilineales dibujada en la figura 4.11. En la figura 4.12 se presentan de arriba a abajo la condición inicial de concentraciones, las soluciones obtenidas para  $t = 4.82$  s.,  $t = 9.62$  s.,  $t = 14.42$  s.,  $t = 19.22$  s. y la solución estacionaria. Estos resultados han sido obtenidos empleando un paso de tiempo de  $\Delta t = 0.02$ . En esta figura se observa que al tratarse de un problema en flujo subcrítico el contaminante se puede propagar tanto hacia aguas arriba del vertido como hacia aguas abajo del mismo.

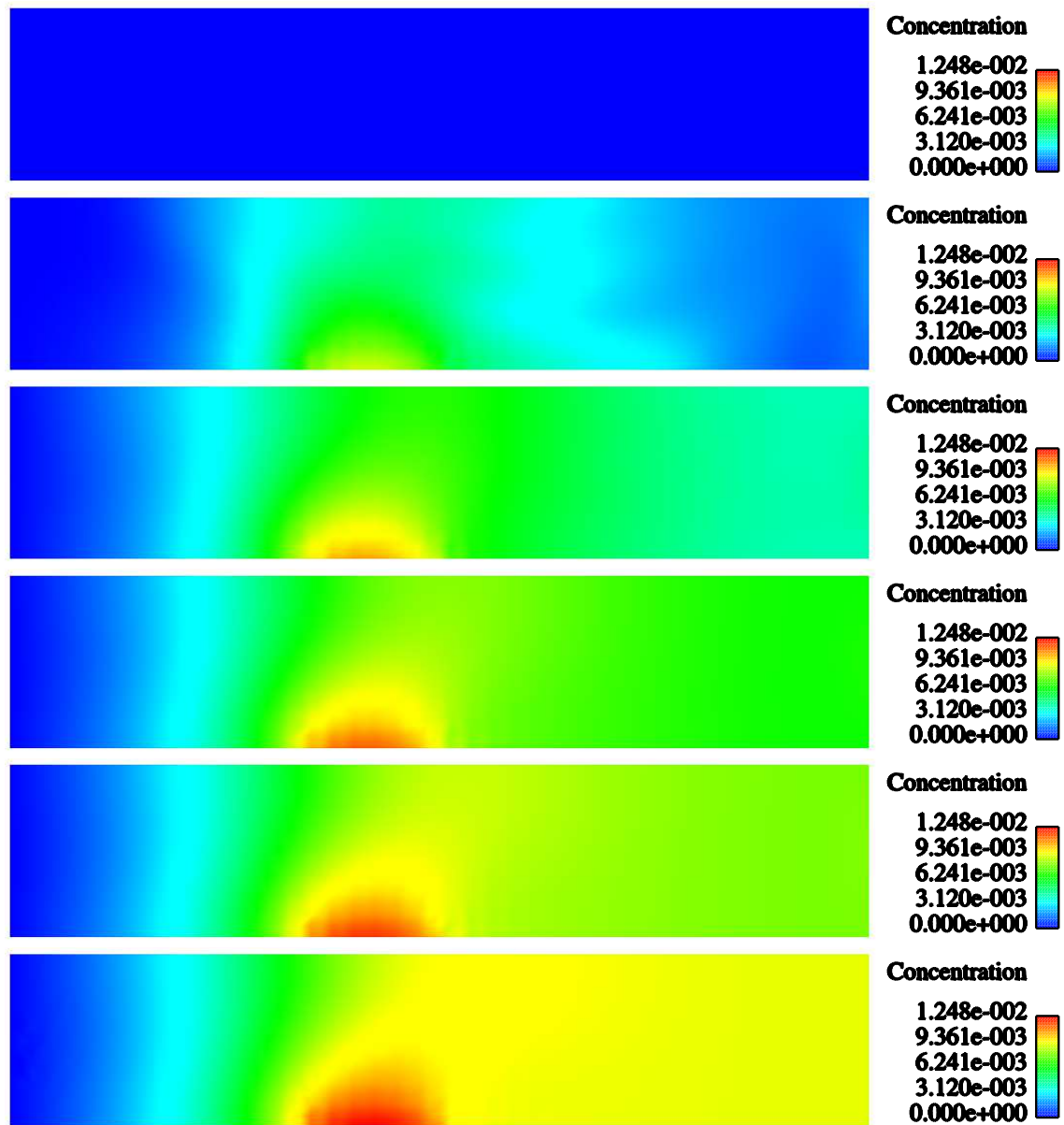


Figura 4.12: Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo subcrítico. De arriba a abajo condición inicial de concentraciones y soluciones para  $t = 4.82$  s.,  $t = 9.62$  s.,  $t = 14.42$  s.,  $t = 19.22$  s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden.

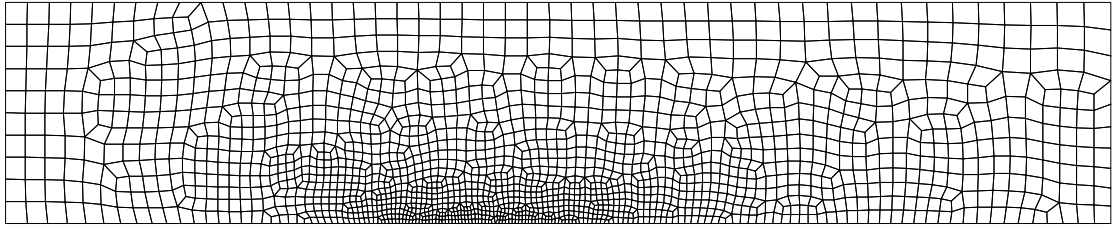


Figura 4.13: Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo supercrítico. Malla de cálculo de 1824 nodos y 1711 elementos bilineales.

#### 4.5.5. Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo supercrítico

En esta sección se resuelve un problema similar al de la sección anterior, pero en este caso el flujo es supercrítico. El dominio, el campo de velocidades y el tiempo de relajación del problema son los mismos que en el apartado anterior. Las condiciones de contorno en los contorno laterales (superior e inferior) son también las mismas excepto que el flujo normal prescrito es ahora  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -10^{-2}$ . La difusividad toma un valor de  $k = 10^{-2}$ , lo que hace que el flujo sea supercrítico en prácticamente todo el dominio. Por ello, es necesario prescribir todas las variables en el contorno de entrada de flujo y no prescribir ninguna en el contorno de salida de flujo. El problema se ha resuelto utilizando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden y la malla de 1711 elementos bilineales representada en la figura 4.13. En la figura 4.14 se presentan de arriba a abajo la condición inicial de concentraciones, las soluciones obtenidas para  $t = 3$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 9$  s.,  $t = 12$  s.,  $t = 15$  s. y la solución estacionaria. Estos resultados han sido obtenidos empleando un paso de tiempo de  $\Delta t = 0.02$ . En esta figura se observa que al tratarse de un problema en condiciones de flujo supercrítico el contaminante no es capaz de remontar el flujo y siempre es arrastrado hacia “aguas abajo”.

## 4.6. Conclusiones

En este capítulo se ha desarrollado un modelo numérico bidimensional para las ecuaciones del transporte propuestas. Los esquemas numéricos empleados están basados en los métodos de Taylor-Galerkin de segundo y tercer orden. Utilizando estos esquemas numéricos se han resuelto varios problemas prácticos de ingeniería como, por ejemplo, un vertido accidental en un puerto. Los resultados obtenidos por los métodos de segundo y tercer orden son muy similares por lo que se recomienda el uso del método de segundo orden ya que tiene un coste computacional inferior.

Mediante estos ejemplos se ha mostrado que la formulación presentada es aplicable

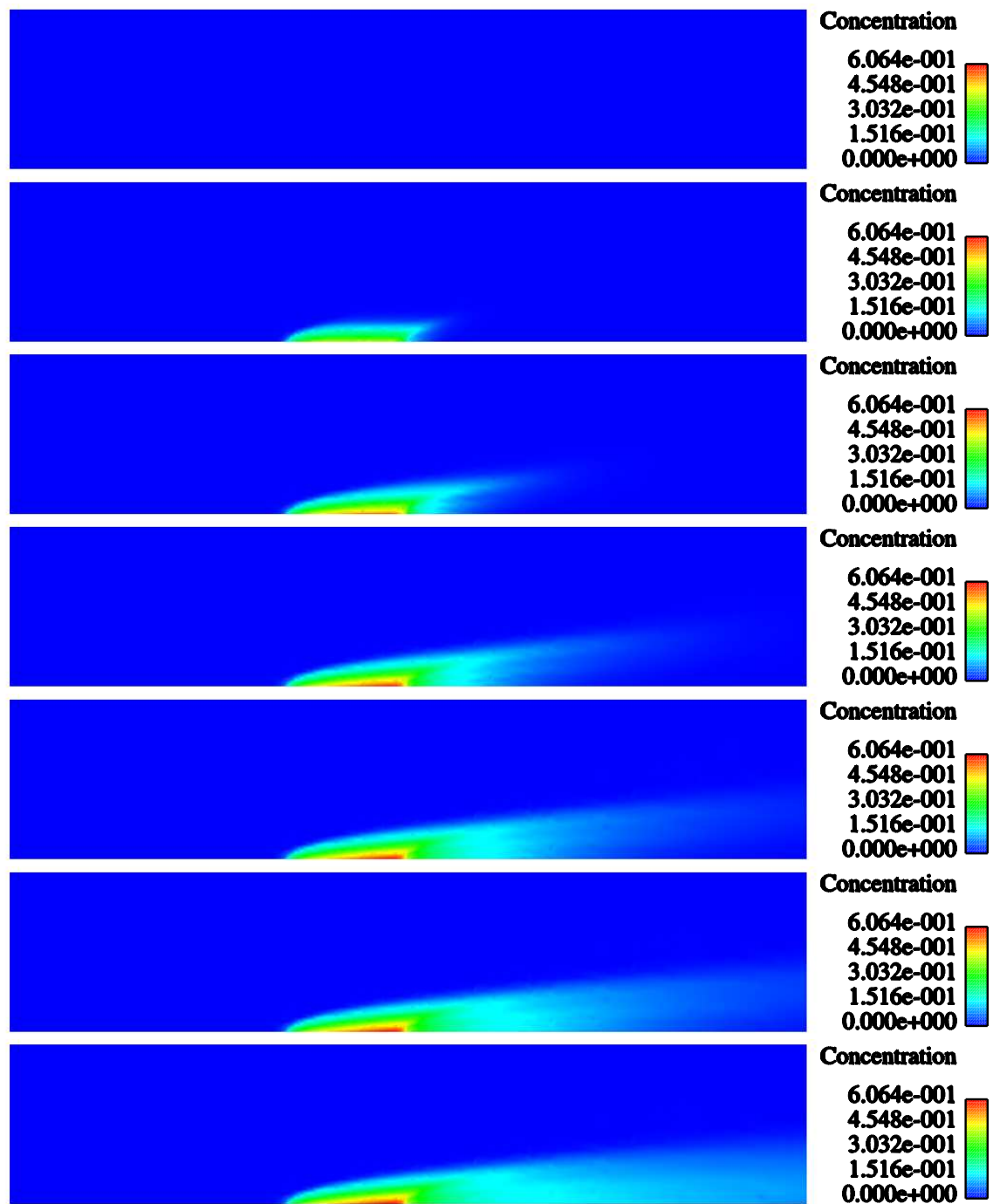


Figura 4.14: Inyección lateral de contaminante en un canal en flujo supercrítico. De arriba a abajo condición inicial de concentraciones y soluciones para  $t = 3$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 9$  s.,  $t = 12$  s.,  $t = 15$  s. y estacionario usando el método de Taylor-Galerkin de segundo orden.

en problemas reales de ingeniería. Sin embargo, todavía es necesario tratar ciertos aspectos. Claramente, son necesarios estudios que permitan una estimación fiable del tiempo de relajación  $\tau$ . Por otra parte, la discretización espacial centrada (tipo Galerkin) que en el problema unidimensional era suficiente para obtener buenos resultados numéricos presenta ciertas limitaciones en problemas bidimensionales. Por este motivo, en el siguiente capítulo se presentará un modelo numérico más adecuado para estas ecuaciones como es el método de *discontinuous Galerkin*. Como se verá a continuación los resultados numéricos empleando este último método son excelentes.

## Capítulo 5

# Formulación numérica basada en el método de Discontinuous Galerkin

### 5.1. Introducción

En esta sección se introduce un modelo numérico tipo *discontinuous Galerkin* para resolver las ecuaciones del transporte con velocidad finita. El método de *discontinuous Galerkin* es normalmente atribuido a Reed y Hill [111] y fue desarrollado para resolver la ecuación del transporte de neutrones. Aunque la relevancia del método fue advertida inmediatamente, la actual popularidad de los esquemas de *discontinuous Galerkin* se debe en gran medida a los trabajos de Cockburn y Shu. Desde finales de los años 80 y durante la década de los 90 publicaron (con la colaboración de otros autores) una serie de artículos relativos a lo que se conoce como *Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Method* (RKDG) [31, 32, 33, 35].

El gran desarrollo de estos métodos en los últimos años se debe a que poseen la flexibilidad de un método de elementos finitos continuo (es posible modelar geometrías complejas con mallas no estructuradas), una gran estabilidad, la capacidad de proporcionar soluciones con orden de convergencia arbitrario en casi cualquier malla y la posibilidad de paralelizar los cálculos obteniendo eficiencias altísimas. Es cierto que, desde un punto de vista teórico, los métodos de volúmenes finitos son capaces de proporcionar soluciones de alto orden sin aumentar el número de grados de libertad del problema. Sin embargo, en la práctica, cuando se utilizan mallas no estructuradas estos métodos acaban convirtiéndose en métodos cuadráticos o en el mejor de los casos en métodos de orden entre 2 y 3. La tendencia actual en dinámica de fluidos computacional es la de utilizar métodos de orden muy alto para así beneficiarse de la convergencia exponencial que se produce al aumentar el orden



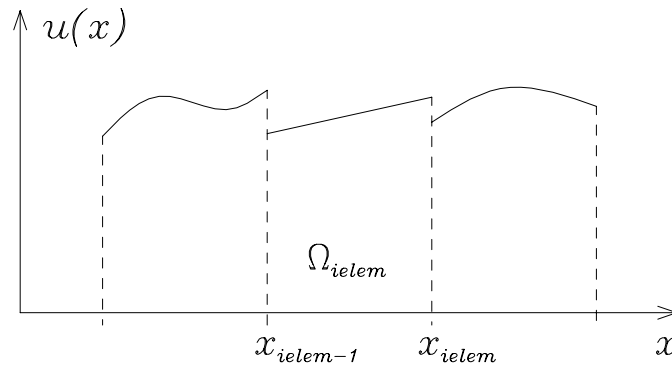


Figura 5.1: Esquema de la solución que proporciona el método de *discontinuous Galerkin*. Obsérvese que si la interpolación es de tipo polinómico el grado del polinomio puede ser diferente en cada elemento.

del polinomio interpolador [7]. Estas son algunas de las causas del espectacular desarrollo de los métodos de *discontinuous Galerkin* en los últimos años.

La característica principal del método de *discontinuous Galerkin* es que la solución puede ser discontinua en las caras de los elementos (ver figura 5.1) quedando éstos acoplados mediante los *flujos numéricos* característicos de los métodos de volúmenes finitos. Del mismo modo que las funciones interpolantes, las funciones de test son también discontinuas por lo que se puede definir una función de test que tome valor unitario dentro del elemento y nulo en el resto del dominio asegurando de este modo que la discretización obtenida es conservativa. En consecuencia, si el esquema numérico es convergente, convergerá hacia una solución débil del problema en virtud del teorema de Lax [90].

Al contrario que los métodos de elementos finitos continuos, el método de *discontinuous Galerkin* fue desarrollado en primer lugar para ecuaciones hiperbólicas. Desde hace algunos años, se ha producido una intensa investigación en la extensión de los métodos de *discontinuous Galerkin* para ecuaciones parabólicas y elípticas con el fin de utilizarlos para la discretización de los términos viscosos de las ecuaciones de Navier-Stokes. Probablemente el primer intento satisfactorio de aplicar una técnica de *discontinuous Galerkin* a la discretización de los términos viscosos de las ecuaciones de Navier-Stokes fue llevado a cabo por Bassi y Rebay en 1997 [8]. A este estudio le siguió el artículo de Cockburn y Shu en el que se introdujo el *Local Discontinuous Galerkin Method* (LDG) que es una generalización del método de Bassi y Rebay. Estos dos métodos consisten en descomponer el sistema de segundo orden que constituyen las ecuaciones de Navier-Stokes (o en general cualquier otra ecuación con términos convectivos y difusivos) en un sistema de primer orden, de modo que una función y sus derivadas son tratadas como variables independientes. Los resultados ob-

tenidos mediante estos métodos son buenos pero el coste computacional aumenta de forma considerable debido al aumento del número de incógnitas. Por ello, en los últimos años se han publicado una gran cantidad de artículos en los que se aborda el tratamiento de los términos difusivos [9, 10, 20, 21, 121]. Sin embargo, el debate sigue todavía abierto.

Un tipo similar de descomposiciones de un sistema de segundo orden en un sistema mayor de primer orden también ha sido utilizado en el ámbito de los volúmenes finitos [5]. En este último caso el sistema de primer orden no es exactamente equivalente al sistema original sino que es asintóticamente equivalente a través de un parámetro.

En lo que sigue se presentará un modelo de *discontinuous Galerkin* para las ecuaciones del transporte por convección-difusión propuestas. Estas ecuaciones constituyen un sistema totalmente hiperbólico y, por tanto, no es necesario discretizar ningún término de tipo elíptico. Este hecho constituye una clara ventaja del modelo de convección-difusión presentado frente al modelo estándar ya que la discretización de este tipo de términos en el método de *discontinuous Galerkin* todavía debe ser mejorada considerablemente. Sin embargo, es cierto que es necesaria la discretización de un término fuente que puede llegar a ser *stiff* para valores del tiempo de relajación  $\tau$  muy pequeños. En el ámbito de los volúmenes finitos existen ciertas dificultades en la discretización de los términos fuente [57], por lo que se han realizado varios estudios específicos [5] sobre sistemas de ecuaciones hiperbólicos con términos fuente tipo *stiff*. Sin embargo, los resultados numéricos para este tipo de problemas con el método de *discontinuous Galerkin* son normalmente muy buenos [94]. Como se verá posteriormente los resultados numéricos para las ecuaciones de convección-difusión propuestas son excelentes y se obtienen los órdenes de convergencia óptimos.

## 5.2. Formulación 1D

En esta sección resolveremos de nuevo el problema (3.27), empleando ahora una formulación tipo *discontinuous Galerkin*. Para ello, definimos una partición del intervalo  $[0, L]$  de modo que  $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{nelem} = L$ . Mediante esta partición definimos el elemento  $\Omega_{ielem} = [x_{ielem-1}, x_{ielem}]$ ,  $\forall ielem = 1, \dots, nelem$ . A continuación aplicaremos el método de residuos ponderados a la ecuación principal de (3.27). En el método de *discontinuous Galerkin*, la formulación en residuos ponderados se plantea independientemente en cada elemento, así

$$\int_{\Omega_{ielem}} w \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} dx + \int_{\Omega_{ielem}} w \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} dx = \int_{\Omega_{ielem}} w \mathbf{S} dx \quad (5.1)$$

donde  $w$  representa una función de test genérica. En un método de elementos finitos continuo tendríamos ahora que ensamblar las matrices elementales a que da lugar la expresión (5.1),

ya que los elementos están automáticamente acoplados por la exigencia de continuidad en la solución. Sin embargo, en el método de *discontinuous Galerkin* no se requiere que la solución sea continua en los contornos de los elementos y en lugar de ensamblar las contribuciones elementales se procede a integrar por partes el segundo término de la ecuación (5.1), de modo que

$$\int_{\Omega_{ielem}} w \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} dx = \int_{\Omega_{ielem}} \left( \frac{\partial w}{\partial x} \mathbf{F} + w \mathbf{S} \right) dx - w \mathbf{F} \Big|_{x_{ielem-1}}^{x_{ielem}} \quad (5.2)$$

La expresión (5.2) requiere la evaluación del flujo  $\mathbf{F}$  en las caras de cada elemento. Dado que la base interpoladora es discontinua en las caras de los elementos, el flujo también lo es. Por ello, es necesario definir lo que se conoce como *flujo numérico*.

### 5.2.1. Flujo numérico

El flujo numérico empleado debe presentar un carácter *upwind*, para que la discretización tenga en cuenta la estructura subyacente ondulatoria del problema. En términos generales, podemos hablar de dos grandes familias de métodos *upwind*, en función del tipo de flujo numérico no viscoso empleado: los métodos de tipo “descomposición del vector de flujo” (*flux vector splitting*), y los de tipo “descomposición de la diferencia de flujo” (*flux difference splitting*). Dado que el vector de flujo de las ecuaciones de convección-difusión propuestas es una función homogénea de grado 1 de las variables conservadas, es posible emplear un método de tipo *flux vector splitting*. Este método tiene un coste computacional menor que los métodos de tipo *flux difference splitting* y ha dado buenos resultados en sistemas de ecuaciones totalmente hiperbólicos como pueden ser las ecuaciones de Euler. Por tanto, cabe esperar que este método proporcione buenos resultados para las ecuaciones estudiadas en esta tesis que constituyen un sistema lineal totalmente hiperbólico. Por ello, el método de *flux vector splitting* es el que se utiliza en esta tesis para calcular los flujos numéricos. Para aplicar este método, escribiremos el flujo  $\mathbf{F}$  como

$$\mathbf{F} = \mathbf{A}\mathbf{U}, \text{ donde } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & 1/\tau \\ k & a \end{pmatrix}$$

Dado que el sistema de ecuaciones es totalmente hiperbólico, siempre existe la descomposición  $\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1}$ , siendo  $\mathbf{D}$  una matriz diagonal con autovalores reales y diferentes. En particular, las matrices  $\mathbf{C}$  y  $\mathbf{D}$  tienen la expresión dada en (2.14) que repetimos aquí por completitud

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \tau c & -\tau c \end{pmatrix}; \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} a+c & 0 \\ 0 & a-c \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

Asimismo, la matriz  $\mathbf{D}$  se puede descomponer del siguiente modo

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^+ + \mathbf{D}^- \text{ donde } \mathbf{D}^\pm = \begin{pmatrix} \frac{a+c\pm|a+c|}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a-c\pm|a-c|}{2} \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Por tanto,

$$\mathbf{A} = \mathbf{C}(\mathbf{D}^+ + \mathbf{D}^-)\mathbf{C}^{-1} = \underbrace{\mathbf{C}\mathbf{D}^+\mathbf{C}^{-1}}_{\mathbf{A}^+} + \underbrace{\mathbf{C}\mathbf{D}^-\mathbf{C}^{-1}}_{\mathbf{A}^-} \quad (5.5)$$

Utilizando las definiciones anteriores, definimos el flujo numérico en la interfaz de los elementos  $\Omega_{i\text{elem}}$  y  $\Omega_{i\text{elem}+1}$  del siguiente modo:

$$\mathbf{F}(x_{i\text{elem}}) = \mathbf{A}^+\mathbf{U}(x_{i\text{elem}}^-) + \mathbf{A}^-\mathbf{U}(x_{i\text{elem}}^+) \quad (5.6)$$

donde  $x_{i\text{elem}}^\pm = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} x_{i\text{elem}} \pm \varepsilon^2$ .

Además, se verifica que  $\mathbf{S} = \mathbf{B}\mathbf{U}$  siendo  $\mathbf{B}$  la matriz definida en (3.31).

### 5.2.2. Interpolación

A continuación, se realiza una interpolación estándar basada en el método de elementos finitos. Consideremos un elemento de  $n\text{node}$  nodos (donde, en principio,  $n\text{node} = 2$  ó  $3$  para el caso unidimensional) y denominemos  $\mathbf{U}^{i\text{elem}}$  al vector de  $n\text{dofn} \cdot n\text{node}$  (donde  $n\text{dofn}$  es el número de grados de libertad en cada nodo, luego en este caso unidimensional  $n\text{dofn} = 2$ ) componentes que contiene las incógnitas del elemento  $\Omega_{i\text{elem}}$ . Asimismo, para una matriz cualquiera  $\mathbf{H}$  de tamaño  $n\text{dofn} \times n\text{dofn}$  y para un elemento  $\Omega_{i\text{elem}}$  definimos la siguientes matrices de tamaño  $n\text{dofn} \times n\text{dofn} \cdot n\text{node}$ :

$$\mathbf{N}_{\mathbf{H},i\text{elem}} = [N_{1,i\text{elem}}\mathbf{H} \ N_{2,i\text{elem}}\mathbf{H} \ \cdots \ N_{n\text{node},i\text{elem}}\mathbf{H}]^T \quad (5.7a)$$

$$\frac{d\mathbf{N}_{\mathbf{H},i\text{elem}}}{dx} = \left[ \frac{dN_{1,i\text{elem}}}{dx}\mathbf{H} \ \frac{dN_{2,i\text{elem}}}{dx}\mathbf{H} \ \cdots \ \frac{dN_{n\text{node},i\text{elem}}}{dx}\mathbf{H} \right]^T \quad (5.7b)$$

Con la definición (5.7a) podemos escribir la expresión interpolada de las variables en un punto cualquiera  $x$  del elemento  $\Omega_{i\text{elem}}$  como sigue:

$$\mathbf{U}^{i\text{elem}}(x) = \mathbf{N}_{\mathbf{I},i\text{elem}}(x)\mathbf{U}^{i\text{elem}} \quad (5.8)$$

Introduciendo en la forma débil del problema las expresiones interpoladas se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para cada elemento  $\Omega_{i\text{elem}}$ :

$$\mathbf{M}_{i\text{elem}} \frac{d}{dt}(\mathbf{U}^{i\text{elem}}) = \mathbf{K}_{i\text{elem}}^- \mathbf{U}^{i\text{elem}-1} + \mathbf{K}_{i\text{elem}} \mathbf{U}^{i\text{elem}} + \mathbf{K}_{i\text{elem}}^+ \mathbf{U}^{i\text{elem}+1} \quad (5.9)$$

donde las matrices  $\mathbf{M}_{ielem}$ ,  $\mathbf{K}_{ielem}^-$ ,  $\mathbf{K}_{ielem}$  y  $\mathbf{K}_{ielem}^+$  tienen las expresiones siguientes:

$$\mathbf{M}_{ielem} = \int_{\Omega_{ielem}} \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem} \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem}^T dx \quad (5.10a)$$

$$\mathbf{K}_{ielem}^- = \mathbf{N}_{\mathbf{A}^+,ielem}(x_{ielem-1}^+) \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem-1}^T(x_{ielem-1}^-) \quad (5.10b)$$

$$\mathbf{K}_{ielem} = \int_{\Omega_{ielem}} \left( \frac{d\mathbf{N}_{\mathbf{A},ielem}}{dx} + \mathbf{N}_{\mathbf{B},ielem} \right) \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem}^T dx \quad (5.10c)$$

$$+ \mathbf{N}_{\mathbf{A}^-,ielem}(x_{ielem-1}^+) \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem}^T(x_{ielem-1}^+)$$

$$- \mathbf{N}_{\mathbf{A}^+,ielem}(x_{ielem}^-) \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem}^T(x_{ielem}^-)$$

.

$$\mathbf{K}_{ielem}^+ = -\mathbf{N}_{\mathbf{A}^-,ielem}(x_{ielem}^-) \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem+1}^T(x_{ielem}^+) \quad (5.10d)$$

Ensamblando todas las contribuciones elementales, se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que gobierna la evolución temporal de las ecuaciones discretas. Este sistema se puede escribir como

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{R}(\mathbf{U}) \quad (5.11)$$

donde  $\mathbf{M}$  es la matriz de masas global,  $\mathbf{U}$  es el vector global de grados de libertad y  $\mathbf{R}(\mathbf{U})$  es el vector residuo. Como las funciones de forma sólo toman valores distintos de cero dentro del elemento correspondiente, la matriz de masas  $\mathbf{M}$  es diagonal por bloques<sup>1</sup>. Debido a esta estructura tan particular de la matriz de masas, podría calcularse la matriz  $\mathbf{M}^{-1}$  en el primer paso de tiempo para posteriormente resolver los sistemas de ecuaciones lineales pertinentes mediante una multiplicación (este procedimiento es bastante habitual en la bibliografía; ver por ejemplo [95]). Sin embargo, en esta tesis se ha optado por realizar la factorización de Cholesky de la matriz en el primer paso de tiempo y luego realizar en cada iteración posterior las correspondientes sustituciones hacia delante o hacia atrás. Dada la estructura de la matriz, la factorización de  $\mathbf{M}$  se obtiene ensamblando la factorización de cada uno de los bloques. Por tanto, esta operación tiene un coste computacional muy bajo.

<sup>1</sup>Se entiende por matriz diagonal por bloques, aquella matriz cuyos elementos de la diagonal principal son matrices cuadradas de cualquier tamaño (constante a lo largo de la diagonal) y los elementos de fuera de la diagonal principal son nulos.

### 5.2.3. Integración temporal

El sistema semidiscreto (5.11) se puede integrar utilizando el método TVD-Runge-Kutta de tercer orden propuesto por Shu y Osher [122]. Dadas las variables en el paso previo  $n$ ,  $\mathbf{U}^n$ , las variables  $\mathbf{U}^{n+1}$  se calculan de forma explícita en tres pasos

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{(1)} &= \mathbf{U}^n + \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^n) \\ \mathbf{U}^{(2)} &= \frac{3}{4} \mathbf{U}^n + \frac{1}{4} \mathbf{U}^{(1)} + \frac{1}{4} \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^{(1)}) \\ \mathbf{U}^{n+1} &= \frac{1}{3} \mathbf{U}^n + \frac{2}{3} \mathbf{U}^{(2)} + \frac{2}{3} \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^{(2)}) \end{aligned} \quad (5.12a)$$

En las ecuaciones anteriores el operador  $\mathbf{L}(\cdot)$  representa la derivada temporal del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (5.11), de modo que  $\mathbf{L}(\mathbf{U}) = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{R}(\mathbf{U})$ .

El método anterior es linealmente estable para números de Courant menores o iguales que  $1/(2p+1)$  donde  $p$  es el orden de los polinomios interpolantes. Esta condición es bastante restrictiva por lo que para computar soluciones estacionarias sería conveniente emplear métodos *multigrid* (véase la referencia clásica [80]) para acelerar la convergencia. Parecen especialmente adecuados para acoplar con las formulaciones de *discontinuous Galerkin* los métodos  $p$ -multigrid recientemente desarrollados [51, 95]. Esta idea constituye una de las líneas de investigación futura de esta tesis.

### 5.2.4. Estabilización

A pesar de que los métodos de *discontinuous Galerkin* presentan una estabilidad inherente, en la bibliografía se utilizan habitualmente técnicas de estabilización cuando se resuelven problemas donde aparecen fuertes discontinuidades no lineales o choques suficientemente fuertes. Dos de los procedimientos más habituales son: a) el uso de limitadores (como los propuestos por Cockburn y Shu en [33]) y b) la adición de términos de viscosidad artificial originalmente introducida por Hughes [19, 75] y Johnson [81] en el ámbito del *streamline upwind Petrov-Galerkin* y *streamline diffusion* y posteriormente aplicada a métodos de *discontinuous Galerkin* en [128] (ver también [69]). *En los resultados que se presentarán a continuación no se ha utilizado ningún tipo de estabilización*, ya que los resultados se consideran suficientemente buenos.

### 5.2.5. Condiciones de contorno

Los métodos de *discontinuous Galerkin* permiten la imposición de las condiciones de contorno en forma débil. En la bibliografía es muy habitual que las condiciones de contorno en los contornos de salida de flujo se impongan de forma débil para evitar la generación de

capas límite y la aparición de inestabilidades. Muchos autores imponen también de forma débil las condiciones de contorno en los contornos de entrada de flujo. En esta tesis todas las condiciones de contorno se imponen de forma fuerte ya que no se aprecian inestabilidades significativas en ninguno de los contornos.

### 5.3. Ejemplos numéricos 1D

En esta sección se presentarán algunos resultados numéricos obtenidos mediante el esquema presentado en la sección anterior. Esta sección tiene un doble objetivo:

- Comprobar que se alcanzan los órdenes de convergencia óptimos. En particular, se comprobará mediante ejemplos numéricos que se obtiene convergencia de orden  $p + 1$  cuando se realiza una interpolación con polinomios de orden  $p$  en cada elemento para  $p = 1$  y para  $p = 2$ .
- Comprobar que las soluciones numéricas son estables *para cualquier valor de la velocidad del fluido*.

Además, de los resultados numéricos se comprenderá la tendencia actual en dinámica de fluidos computacional de utilizar métodos de muy alto orden, ya que a igual número de grados de libertad (o coste computacional) el error en la solución numérica es menor cuanto mayor sea el orden de convergencia del método. Comprobaremos la afirmación anterior mediante un ejemplo en flujo subcrítico. El problema a resolver es (3.27) en el dominio  $\Omega = (0, 1)$  y con  $k = 1$ ,  $\tau = 1$  y  $a = 0.5$ . Las condiciones de contorno consideradas son  $u(0) = 0$ ,  $u(1) = 1$ . Se ha aplicado el algoritmo presentado anteriormente hasta alcanzar una solución estacionaria que será posteriormente comparada con la solución estacionaria exacta (3.9) para obtener el error. El paso de tiempo se toma suficientemente pequeño para que todo el error pueda atribuirse a la discretización espacial. Los cálculos se han realizado utilizando elementos lineales y cuadráticos. En la tabla 5.1 se encuentran los resultados de la concentración con elementos lineales y en la tabla 5.2 los correspondientes resultados de flujo. En las tablas 5.3 y 5.4 se presentan los resultados (concentración y flujo respectivamente) utilizando elementos cuadráticos.

Mediante los resultados presentados en estas tablas se ha mostrado que utilizando el algoritmo propuesto se alcanzan los órdenes de convergencia óptimos tanto en la concentración como en el flujo. En algunos casos no se alcanzan estrictamente los órdenes de convergencia óptimos, pero estos pequeños errores se puede atribuir a errores en la discretización temporal o a la propagación de errores de redondeo.

Elementos	$\ \mathbf{Error}\ _\infty$	Orden $\ \cdot\ _\infty$	$\ \mathbf{Error}\ _2$	Orden $\ \cdot\ _2$
5	$7.0149 \cdot 10^{-3}$	—	$2.9403 \cdot 10^{-3}$	—
10	$1.9811 \cdot 10^{-3}$	1.83	$7.9018 \cdot 10^{-4}$	1.90
20	$5.2591 \cdot 10^{-4}$	1.92	$2.1538 \cdot 10^{-4}$	1.88
40	$1.3885 \cdot 10^{-4}$	1.93	$5.6566 \cdot 10^{-5}$	1.93
80	$3.5664 \cdot 10^{-5}$	1.96	$1.4493 \cdot 10^{-5}$	1.97

Tabla 5.1: Error en la concentración en norma  $\|\cdot\|_\infty$ , error en la concentración en norma  $\|\cdot\|_2$  y órdenes de convergencia. Elementos lineales.  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.5$ .

Elementos	$\ \mathbf{Error}\ _\infty$	Orden $\ \cdot\ _\infty$	$\ \mathbf{Error}\ _2$	Orden $\ \cdot\ _2$
5	$1.5607 \cdot 10^{-2}$	—	$9.1734 \cdot 10^{-3}$	—
10	$3.8745 \cdot 10^{-3}$	2.01	$2.3406 \cdot 10^{-3}$	1.97
20	$1.0109 \cdot 10^{-3}$	1.94	$5.9517 \cdot 10^{-4}$	1.98
40	$2.6091 \cdot 10^{-4}$	1.96	$1.5010 \cdot 10^{-4}$	1.99
80	$6.6288 \cdot 10^{-5}$	1.98	$3.7693 \cdot 10^{-5}$	2.00

Tabla 5.2: Error en el flujo en norma  $\|\cdot\|_\infty$ , error en el flujo en norma  $\|\cdot\|_2$  y órdenes de convergencia. Elementos lineales.  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.5$ .

Elementos	$\ \mathbf{Error}\ _\infty$	Orden $\ \cdot\ _\infty$	$\ \mathbf{Error}\ _2$	Orden $\ \cdot\ _2$
5	$1.2313 \cdot 10^{-4}$	—	$6.5825 \cdot 10^{-5}$	—
10	$1.5790 \cdot 10^{-5}$	2.96	$8.6646 \cdot 10^{-6}$	2.93
20	$2.0916 \cdot 10^{-6}$	2.92	$1.1112 \cdot 10^{-6}$	2.96
40	$2.6937 \cdot 10^{-7}$	2.96	$1.4100 \cdot 10^{-7}$	2.98
80	$3.4207 \cdot 10^{-8}$	2.98	$1.7967 \cdot 10^{-8}$	2.98

Tabla 5.3: Error en la concentración en norma  $\|\cdot\|_\infty$ , error en la concentración en norma  $\|\cdot\|_2$  y órdenes de convergencia. Elementos cuadráticos.  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.5$ .

Elementos	$\ \mathbf{Error}\ _\infty$	Orden $\ \cdot\ _\infty$	$\ \mathbf{Error}\ _2$	Orden $\ \cdot\ _2$
5	$1.4723 \cdot 10^{-4}$	—	$5.0684 \cdot 10^{-5}$	—
10	$1.8043 \cdot 10^{-5}$	3.03	$5.7567 \cdot 10^{-6}$	3.14
20	$2.3157 \cdot 10^{-6}$	2.97	$6.3246 \cdot 10^{-7}$	3.19
40	$2.9365 \cdot 10^{-7}$	2.98	$7.2585 \cdot 10^{-8}$	3.13
80	$3.7256 \cdot 10^{-8}$	2.98	$8.5612 \cdot 10^{-9}$	3.08

Tabla 5.4: Error en el flujo en norma  $\|\cdot\|_\infty$ , error en el flujo en norma  $\|\cdot\|_2$  y órdenes de convergencia. Elementos cuadráticos.  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.5$ .



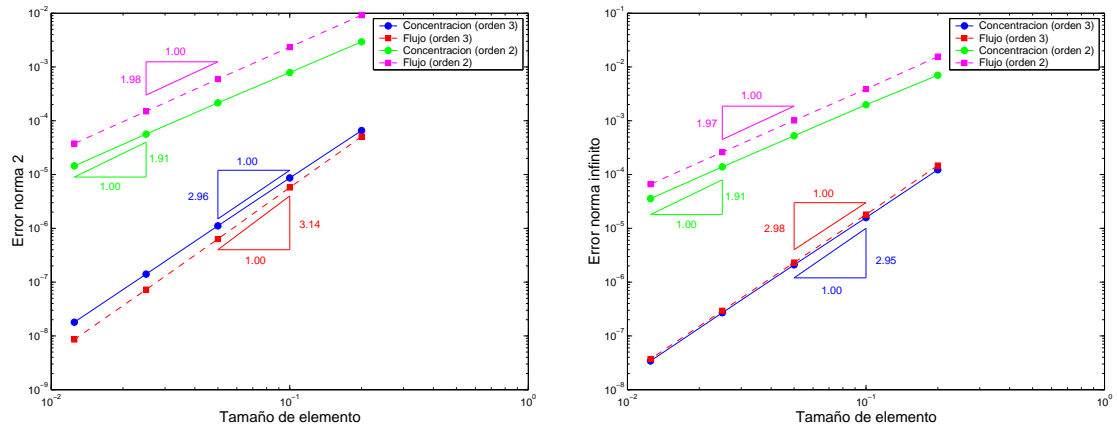


Figura 5.2: Error en norma  $\|\cdot\|_2$  (izquierda) y en norma  $\|\cdot\|_\infty$  (derecha) frente a tamaño de elemento. El orden de convergencia se obtiene mediante un ajuste por mínimos cuadrados.  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.5$ .

A continuación, en las figura 5.2, se han representado gráficamente los resultados anteriores y se ha calculado un orden de convergencia global mediante un ajuste por mínimos cuadrados. De esta gráfica se deduce fácilmente que a igual número de elementos, el método de tercer orden es más preciso que el método de segundo orden, aunque (lógicamente) también más costoso desde un punto de vista computacional. Para justificar la utilización de métodos de alto orden se presentan las gráficas 5.3 y 5.4 donde se representa el error en la solución frente al número de grados de libertad y el coste computacional por paso de tiempo respectivamente. En la gráfica 5.4 el coste computacional por paso de tiempo se supone proporcional a  $nevab^2 \times nelem$ , siendo  $nevab$  el número de variables elementales. Con estas gráficas queda clara la conveniencia de utilizar métodos de alto orden para este tipo de problemas.

A continuación se presentan resultados numéricos para valorar la estabilidad del algoritmo presentado. Se resolverá el mismo problema en el que se han estudiado los órdenes de convergencia pero ahora con un valor de la velocidad de  $a = 0.99999999$ . Se utilizará una malla de 20 elementos iguales. Como se ha comentado en el capítulo 3, cuando se utilizan las ecuaciones de convección-difusión hiperbólicas el número adimensional que indica el espesor de las capas límite que se forman en la solución es  $H_e$  en lugar del número de Peclet  $P_e$ . Para este problema  $H_e = 1.25 \cdot 10^6$ . Por tanto, si utilizamos la fórmula propuesta en [107] (cf. [118]) para aproximar el espesor de la capa límite  $\eta$  resulta  $\eta \approx 9.21 \cdot 10^{-8}$ . Obviamente, la solución numérica en una malla de 20 elementos no puede capturar una capa límite de este espesor, pero como se puede ver en las gráficas 5.5 (interpolación lineal) y 5.6 (interpolación parabólica), la capa límite se captura de forma estable y *sin ningún nodo en ella, tanto con*

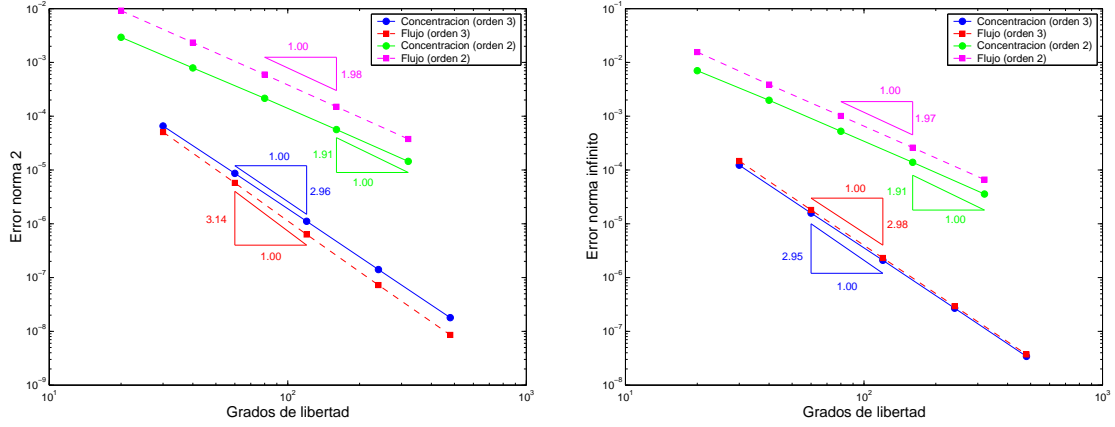


Figura 5.3: Error en norma  $\|\cdot\|_2$  (izquierda) y en norma  $\|\cdot\|_\infty$  (derecha) frente a número de grados de libertad. El orden de convergencia se obtiene mediante un ajuste por mínimos cuadrados.  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.5$ .

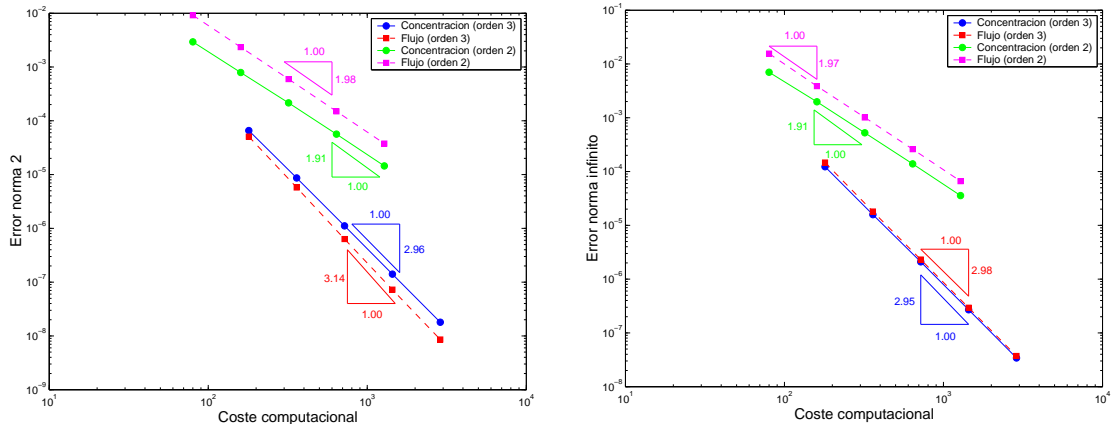


Figura 5.4: Error en norma  $\|\cdot\|_2$  (izquierda) y en norma  $\|\cdot\|_\infty$  (derecha) frente a coste computacional por paso de tiempo. El orden de convergencia se obtiene mediante un ajuste por mínimos cuadrados.  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.5$ .

elementos lineales como con elementos cuadráticos. Aparentemente, la única diferencia es que la capa límite a que da lugar la interpolación cuadrática es más fina. Este resultado es lógico, ya que aunque el número de elementos es el mismo (20) el número de nodos es mayor en el caso de interpolación cuadrática.

## 5.4. Formulación multidimensional

En esta sección, se presenta un modelo multidimensional tipo *discontinuous Galerkin* para las ecuaciones del transporte con velocidad finita. El modelo es muy similar para problemas 2D y 3D, por lo que nos centraremos en el modelo bidimensional para simplificar el desarrollo. Las ecuaciones a resolver son (4.1) con las condiciones iniciales y de contorno pertinentes. Al igual que en el problema unidimensional, el primer paso para discretizar las ecuaciones mediante un método de *discontinuous Galerkin* es aplicar el método de residuos ponderados en un elemento cualquiera  $\Omega_{ielem}$ . Para ello, hacemos uso de unas funciones de test estándar  $w$ . De este modo, tenemos la siguiente ecuación integral para cada elemento:

$$\iint_{\Omega_{ielem}} w \frac{\partial U}{\partial t} d\Omega_{ielem} + \iint_{\Omega_{ielem}} w \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) d\Omega_{ielem} = \iint_{\Omega_{ielem}} w \mathbf{S} d\Omega_{ielem} \quad (5.13)$$

Aplicando el teorema de la divergencia al segundo término de la expresión anterior, podemos reescribir (5.13) como

$$\iint_{\Omega_{ielem}} w \frac{\partial U}{\partial t} d\Omega_{ielem} - \iint_{\Omega_{ielem}} \mathbf{F} \nabla_{\mathbf{x}} (w) d\Omega_{ielem} + \int_{\Gamma_{ielem}} w \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} d\Gamma_{ielem} = \iint_{\Omega_{ielem}} w \mathbf{S} d\Omega_{ielem} \quad (5.14)$$

### 5.4.1. Flujo numérico

De nuevo, en la expresión (5.14) es necesario definir el flujo numérico  $\mathbf{F} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} U = (\mathbf{A}_1 n_1 + \mathbf{A}_2 n_2) U$  donde  $\mathbf{A}$  es la hipermatriz  $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2)$  y  $\mathbf{A}_1$  y  $\mathbf{A}_2$  son las matrices Jacobianas definidas en (2.25). La integral de contorno de (5.14) se puede descomponer en una integral sobre cada cara  $L_{iedge}$  del elemento  $\Omega_{ielem}$  y sobre cada una de estas caras es posible (debido a la hiperbolicidad del sistema) realizar la siguiente descomposición

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}_{iedge} = \mathbf{C}_{iedge} \mathbf{D}_{iedge} \mathbf{C}_{iedge}^{-1} \quad (5.15)$$

donde  $\mathbf{n}_{iedge}$  es la normal exterior a la cara  $L_{iedge}$  del elemento  $\Omega_{ielem}$  y las matrices  $\mathbf{C}$  y  $\mathbf{D}$  han sido definidas en (2.29) y (2.30) para una dirección genérica  $\boldsymbol{\kappa}$ . Ahora, siguiendo la misma idea que en el problema unidimensional, descompondremos la matriz  $\mathbf{D}_{iedge}$  como la

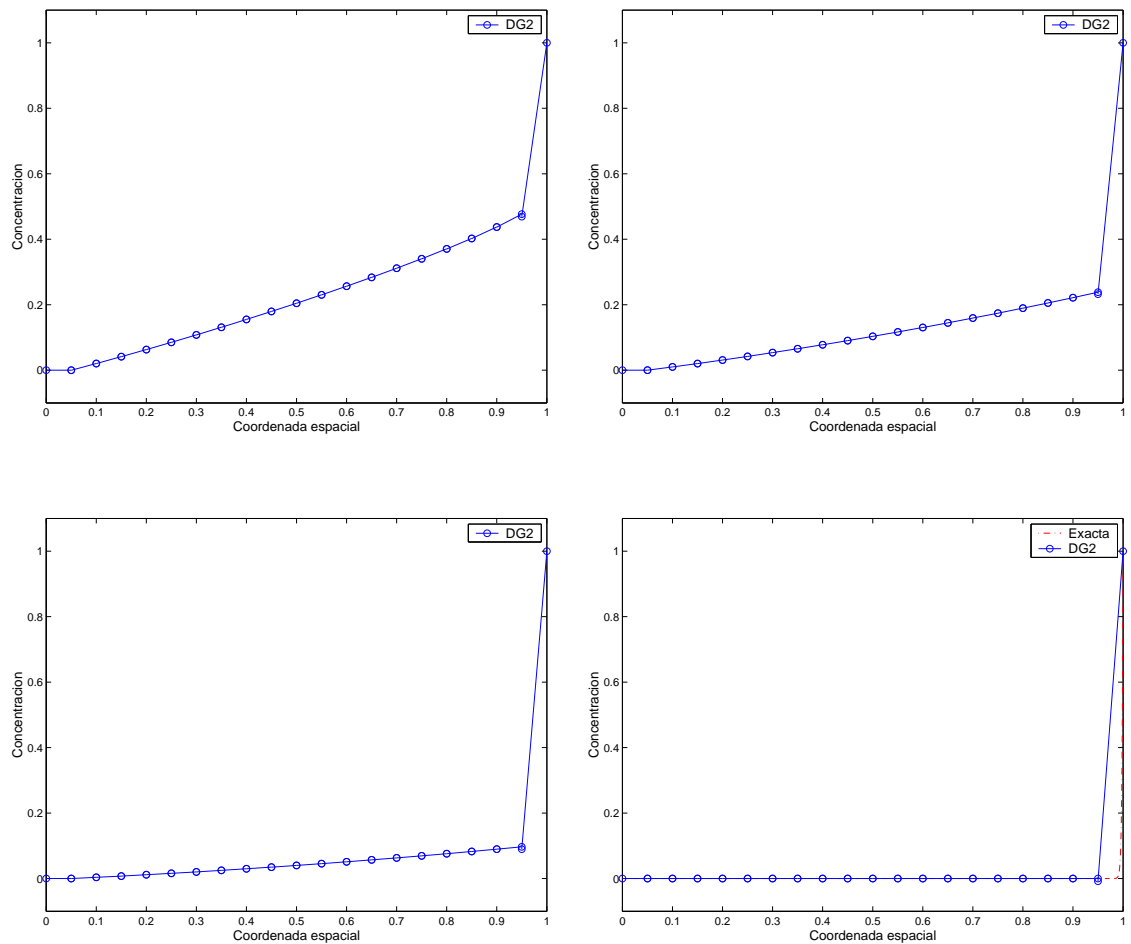


Figura 5.5: Problema de convección-difusión en flujo subcrítico. Soluciones numéricas en una malla de 20 elementos lineales para  $t = 0.5$  s. (arriba izquierda),  $t = 2$  s. (arriba derecha) y  $t = 4$  s. (abajo izquierda). En el estacionario (abajo derecha) se dibuja la solución numérica en una malla de 20 elementos lineales frente a la solución exacta. Los valores de los parámetros son  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.99999999$ .

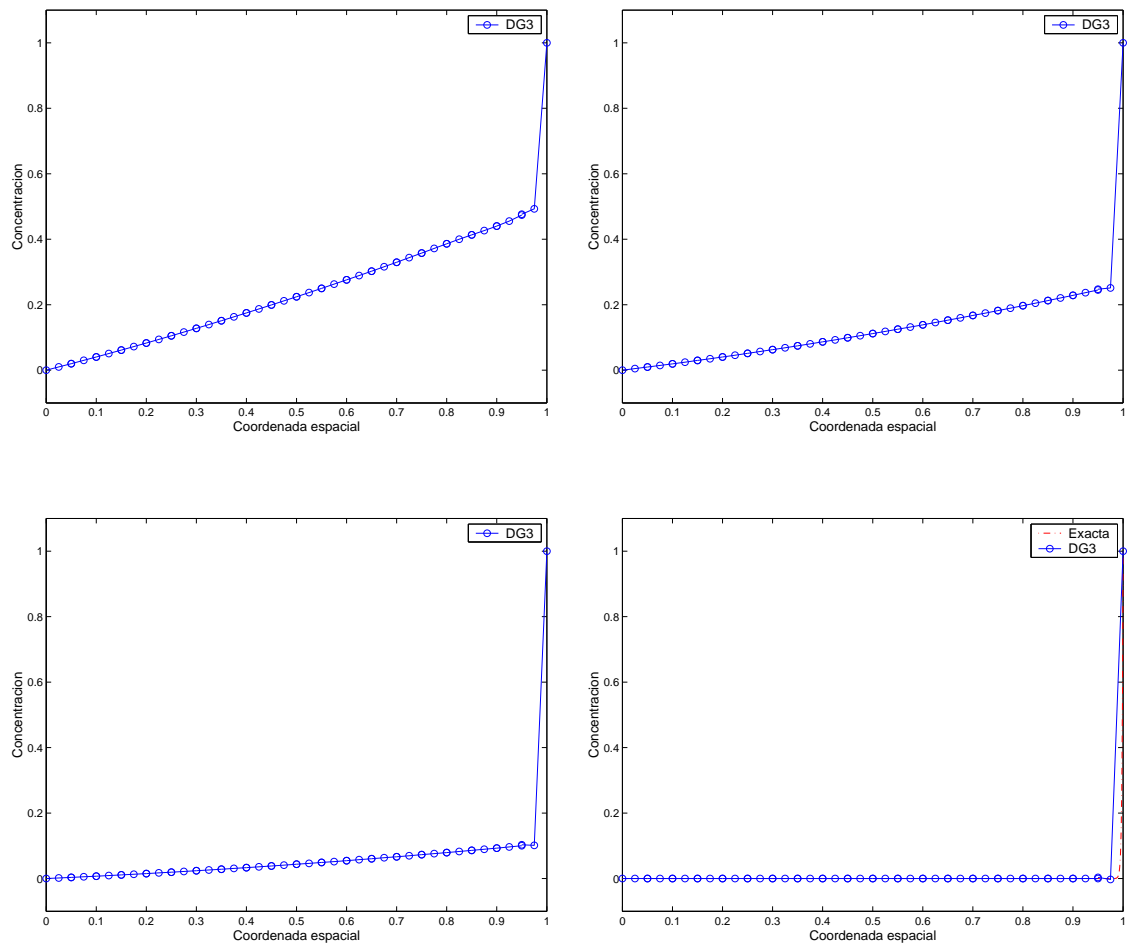


Figura 5.6: Problema de convección-difusión en flujo subcrítico. Soluciones numéricas en una malla de 20 elementos cuadráticos para  $t = 0.5$  s. (arriba izquierda),  $t = 2$  s. (arriba derecha) y  $t = 4$  s. (abajo izquierda). En el estacionario (abajo derecha) se dibuja la solución numérica en una malla de 20 elementos cuadráticos frente a la solución exacta. Los valores de los parámetros son  $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ,  $a = 0.99999999$ .

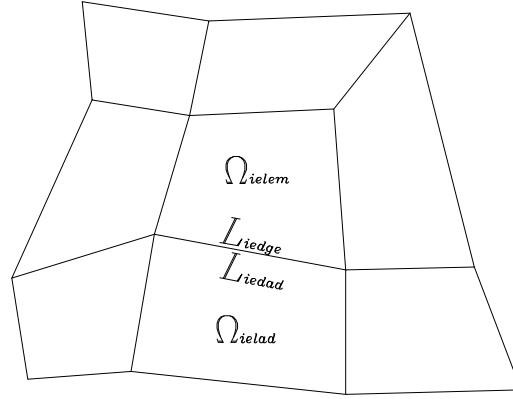


Figura 5.7: Elemento que interviene en el cálculo del flujo numérico en la cara  $L_{iedge}$  del elemento  $\Omega_{ielem}$ .

suma de dos matrices que contienen respectivamente los autovalores positivos y negativos de  $D_{iedge}$ :

$$D_{iedge} = D_{iedge}^+ + D_{iedge}^- \quad (5.16)$$

donde

$$D_{iedge}^\pm = \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_{iedge} \pm |\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_{iedge}|}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_{iedge} - c \pm |\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_{iedge} - c|}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_{iedge} + c \pm |\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_{iedge} + c|}{2} \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

De este modo,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}_{iedge} = \underbrace{\mathbf{C}_{iedge} D_{iedge}^+ \mathbf{C}_{iedge}^{-1}}_{\mathbf{A}_{iedge}^+} + \underbrace{\mathbf{C}_{iedge} D_{iedge}^- \mathbf{C}_{iedge}^{-1}}_{\mathbf{A}_{iedge}^-} \quad (5.18)$$

y el flujo numérico queda totalmente definido por la expresión

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}_{iedge} \mathbf{U} = \mathbf{A}_{iedge}^+ \mathbf{U}^{ielem} + \mathbf{A}_{iedge}^- \mathbf{U}^{ielad} \quad (5.19)$$

donde  $\Omega_{ielad}$  es el elemento adyacente a la cara  $L_{iedge}$  del elemento  $\Omega_{ielem}$  tal y como se observa en la figura 5.7.

#### 5.4.2. Interpolación

Utilizando una interpolación estándar para un elemento bidimensional de  $nnode$  nodos y  $nedge$  caras se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales para cada elemento:

$$\mathbf{M}_{ielem} \frac{d}{dt} (\mathbf{U}^{ielem}) = \mathbf{K}_{ielem} \mathbf{U}^{ielem} + \sum_{iedge=1}^{nedge} \left( \mathbf{K}_{iedge}^+ \mathbf{U}^{ielem} + \mathbf{K}_{iedge}^- \mathbf{U}^{ielad} \right) \quad (5.20)$$

donde las matrices elementales tienen la forma

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_{ielem} &= \iint_{\Omega_{ielem}} \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem} \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem}^T d\Omega_{ielem} \\
\mathbf{K}_{ielem} &= \iint_{\Omega_{ielem}} \left( \frac{\partial \mathbf{N}_{\mathbf{A}_1,ielem}}{\partial x_1} + \frac{\partial \mathbf{N}_{\mathbf{A}_2,ielem}}{\partial x_2} + \mathbf{N}_{\mathbf{B},ielem} \right) \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem}^T d\Omega_{ielem} \\
\mathbf{K}_{ielem}^+ &= - \int_{L_{iedge}} \mathbf{N}_{\mathbf{A}_{iedge}^+,ielem} \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem} dL_{iedge} \\
\mathbf{K}_{ielem}^- &= - \int_{L_{iedge}} \mathbf{N}_{\mathbf{A}_{iedge}^-,ielem} \mathbf{N}_{\mathbf{I},ielem} dL_{iedge}
\end{aligned}$$

siendo  $\mathbf{B}$  es la matriz definida en (4.5).

Ensamblando todas las contribuciones elementales se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias del tipo

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{R}(\mathbf{U}) \quad (5.22)$$

donde la matriz de masas  $\mathbf{M}$  cumple propiedades análogas a la matriz de masas del problema unidimensional.

### 5.4.3. Integración numérica

La integración numérica se lleva a cabo en todos los casos mediante cuadraturas de Gauss-Legendre. Se utilizan 3 puntos de integración en cada dirección. Para las integrales de línea se utilizan también 3 puntos para cada cara.

### 5.4.4. Integración temporal

La integración temporal se realizará de nuevo utilizando el método TVD Runge-Kutta de tercer orden propuesto por Shu y Osher [122]. La implementación se realiza del mismo modo que para el problema unidimensional.

### 5.4.5. Estabilización

Al igual que para el algoritmo unidimensional *no se utiliza en ningún caso ningún tipo de estabilización* ya que los resultados se consideran suficientemente buenos.

### 5.4.6. Condiciones de contorno

Por los motivos comentados en la sección 5.2.5 las condiciones de contorno se imponen de forma fuerte tanto en los contornos de entrada de flujo como en los contornos de salida de flujo.

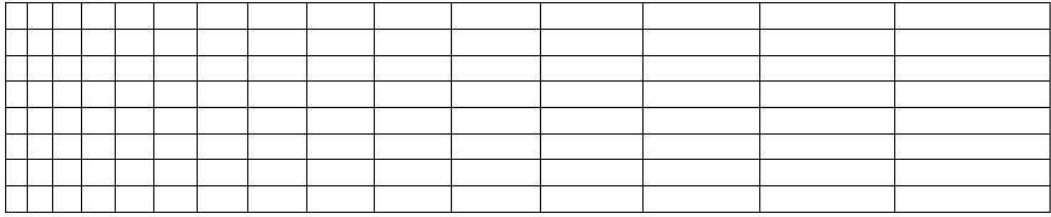


Figura 5.8: Flujo subcrítico en un canal. Malla de cálculo (120 elementos bicuadráticos).

## 5.5. Ejemplos numéricos 2D

A continuación se presentarán una serie de resultados numéricos obtenidos con el algoritmo presentado en la sección anterior. En todos los casos se utilizan elementos lagrangianos bicuadráticos. Las mallas no estructuradas se han generado mediante el código GEN4U basado en el algoritmo de Sarrate y Huerta [116].

### 5.5.1. Flujo subcrítico en un canal

En esta sección se resuelve, usando la formulación de *discontinuous Galerkin*, el mismo problema que se ha resuelto en la sección 4.5.1 por el método de Taylor-Galerkin. Se utilizan los mismos valores para los parámetros ( $k = 1$ ,  $\tau = 1$ ) y el mismo campo de velocidades. Las condiciones de contorno impuestas son también las mismas. La malla empleada se presenta en la figura 5.8. En la figura 5.9 se presentan (de arriba a abajo) la condición inicial de concentraciones, las soluciones para los instantes  $t = 3$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 9$  s.,  $t = 12$  s. y la solución estacionaria. Como se puede observar en la figura los resultados son excelentes a pesar de emplear una malla de tan sólo 120 elementos. Además, la solución es al menos tan buena como la presentada en la sección 4.5.1 a pesar de que la malla utilizada para el método de *discontinuous Galerkin* tiene aproximadamente la cuarta parte de elementos.

### 5.5.2. Flujo transcrito en un canal. Convección media

En esta sección se resuelve el problema presentado en la sección 4.5.2. Se utilizan los mismos valores de los parámetros ( $k = 10^{-2}$ ,  $\tau = 1$ ) y el mismo campo de velocidades. Las condiciones de contorno impuestas son también las mismas. La malla de cálculo está formada por 200 elementos cuadráticos y se presenta en la figura 5.10. En la figura 5.11 se presentan las soluciones en los instantes de tiempo  $t = 1.5$  s.,  $t = 3$  s.,  $t = 4.5$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 12$  s. y la solución estacionaria. Los resultados numéricos son excelentes a pesar de que la malla sólo cuenta con 200 elementos. La solución es mejor que la presentada en la sección 4.5.2 a



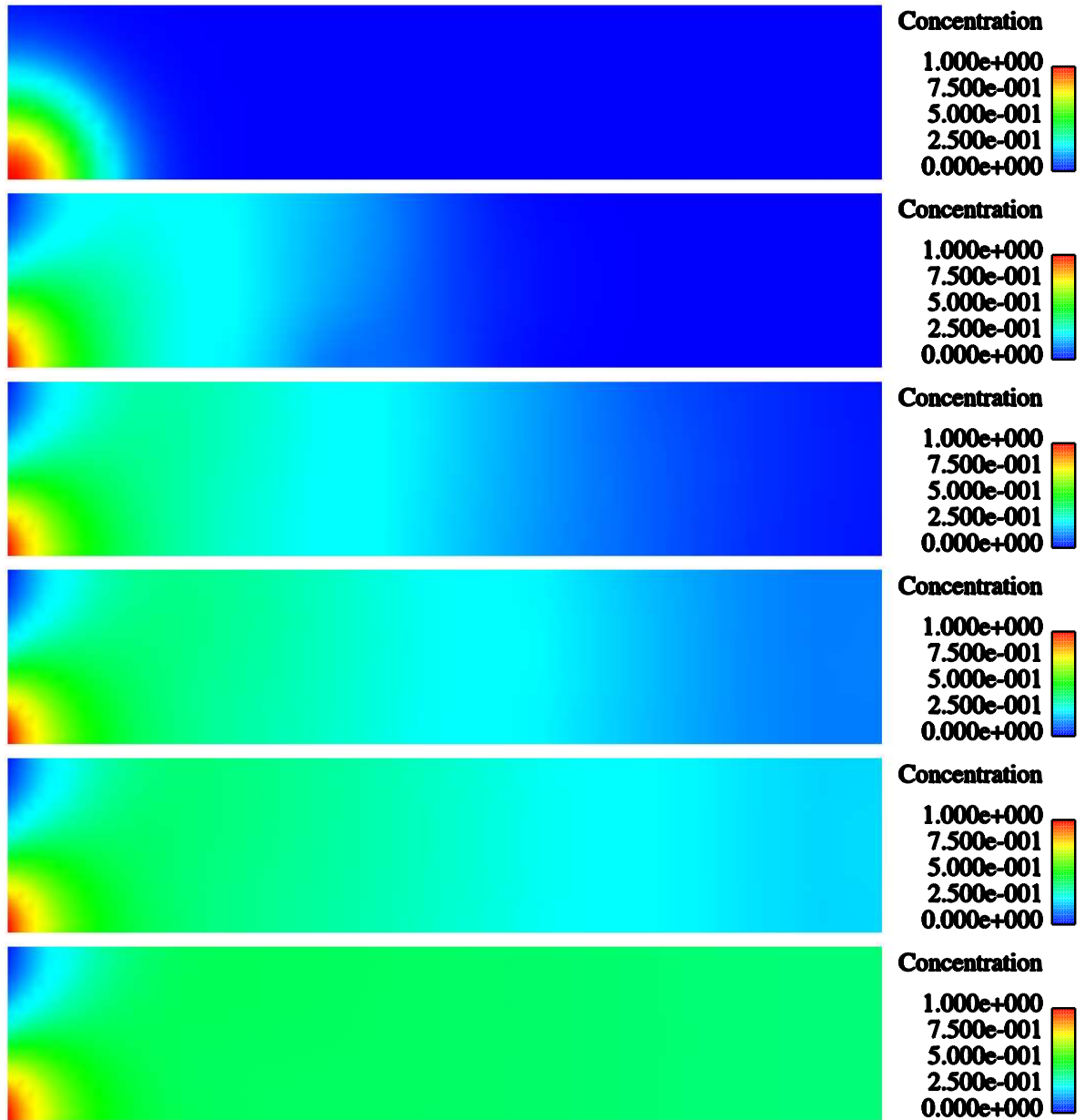


Figura 5.9: Flujo subcrítico en un canal. Condición inicial de concentraciones y soluciones para  $t = 3$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 9$  s.,  $t = 12$  s. y estacionario utilizando el método de *discontinuous Galerkin* y elementos bicuadráticos.

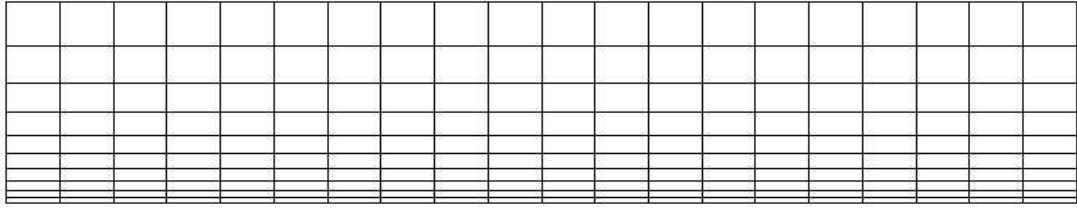


Figura 5.10: Flujo transcrito en un canal. Convección media. Malla de cálculo (200 elementos bicuadráticos).

pesar de que la malla tiene menos de la séptima parte de los elementos que tenía la malla de la sección 4.5.2.

### 5.5.3. Flujo transcrito en un canal. Convección alta

En esta sección se resuelve un problema similar al de la sección anterior. Los valores de los parámetros  $k$  y  $\tau$  son los mismos, pero el campo de velocidades se ha modificado para que el problema esté mucho más dominado por la convección. El campo de velocidades que se utiliza en este caso es

$$\mathbf{a} = (10000x_2(2 - x_2), 0)^T \tag{5.23}$$

La malla de cálculo está formada por 900 elementos rectangulares y se encuentra dibujada en la figura 5.12. Utilizando el valor anterior de la difusividad y el tamaño de malla se obtiene un valor máximo del número de Peclet de  $P_e \approx 123249$ , por lo que el problema es altamente convectivo. En la figura 5.13 se han dibujado las soluciones de concentraciones para los instantes  $t = 4 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 8 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 16 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 32 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 64 \cdot 10^{-4}$  s. y la solución estacionaria.

En la figura 5.14 se presenta un detalle de la solución para tiempo  $t = 0.0192$  s. En esta imagen se observa cómo hay una discontinuidad en la solución que se propaga por la malla de forma estable y es capturada prácticamente en un elemento. Por tanto, el algoritmo presentado apenas introduce difusividad numérica y es capaz de resolver de forma estable problemas altamente convectivos.

De los resultados anteriores podemos concluir que las ecuaciones del transporte propuestas resueltas por el método de *discontinuous Galerkin* presentado dan lugar a soluciones estables y precisas. Además, otra de las ventajas del modelo propuesto es que no se debe imponer ninguna condición de contorno en los contornos de salida de flujo supercríticos. Esta característica de las ecuaciones propuestas, aparte de ser lógica desde un punto de vista físico, evita el tradicional problema de la imposición de las llamadas condiciones de contorno de mar abierto, al menos en condiciones de flujo supercrítico. La solución que

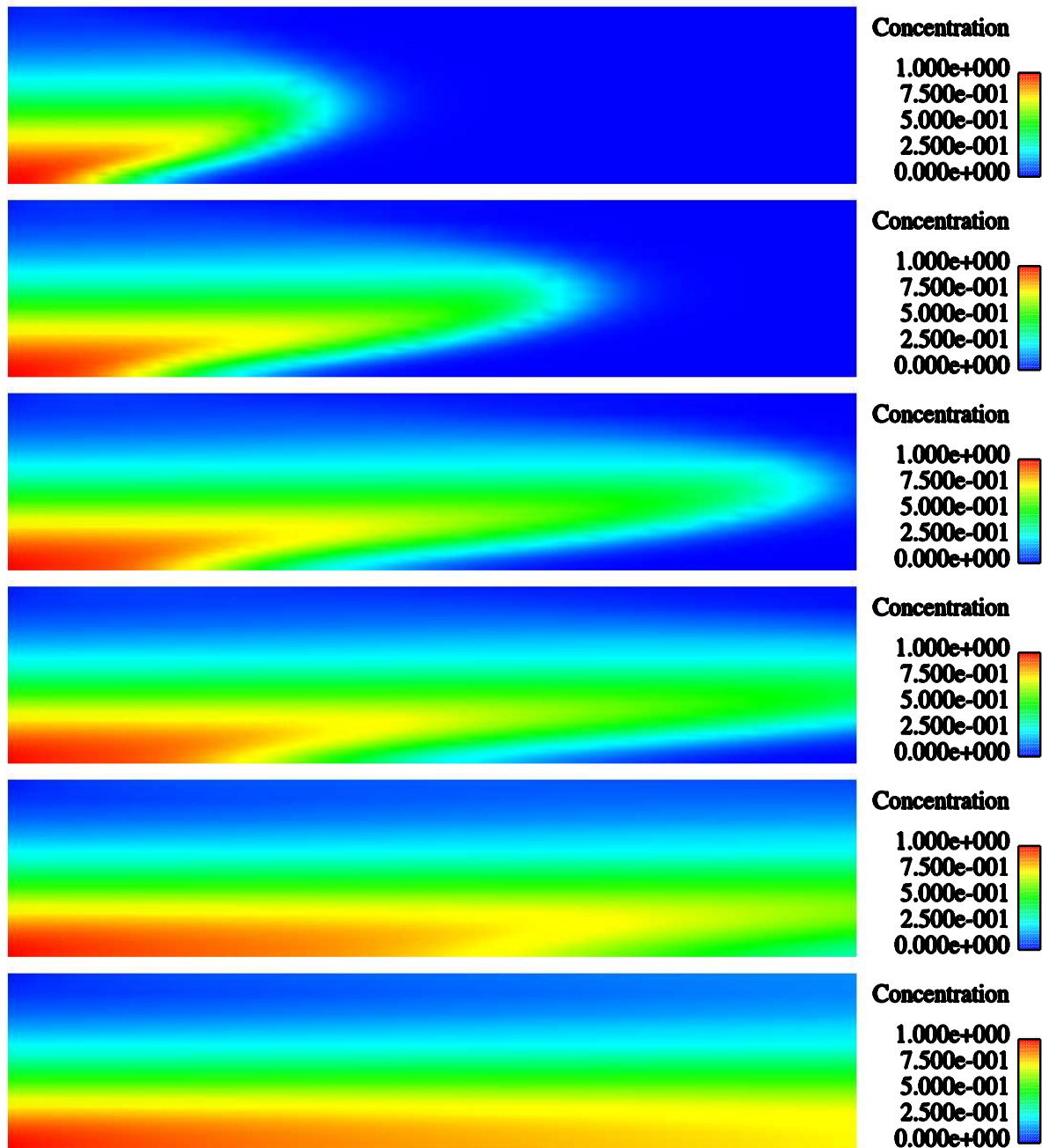


Figura 5.11: Flujo transcrito en un canal. Convección media. Soluciones para  $t = 1.5$  s.,  $t = 3$  s.,  $t = 4.5$  s.,  $t = 6$  s.,  $t = 12$  s. y estacionario usando el método de *discontinuous Galerkin* y elementos bicuadráticos.

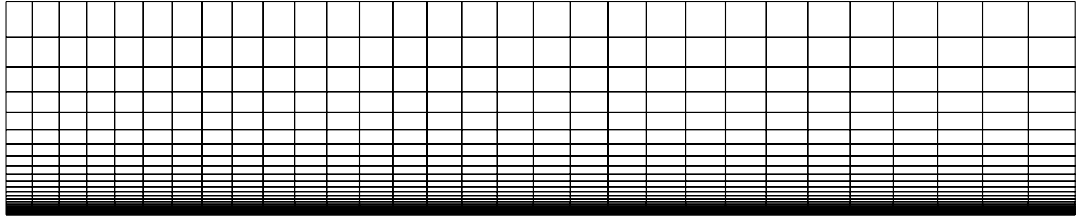


Figura 5.12: Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Malla de cálculo (900 elementos bicuadráticos).

se ha utilizado normalmente es emplear un dominio computacional mucho mayor que la zona de interés para así poder imponer una condición de contorno muy lejos de la zona que realmente se quiere calcular. De este modo, la solución en la parte de interés se verá, en principio, poco afectada por esa condición de contorno. Normalmente, la condición de contorno que se impone es la de flujo normal nulo, pero esta condición sólo es realista cuando se toman dominios muy grandes. Este procedimiento parece más o menos aceptable pero la utilización de dominios mucho más grandes que la zona de interés aumenta excesivamente el coste computacional. Cuando se utiliza el modelo propuesto no se debe imponer ninguna condición de contorno en los contornos de salida de flujo supercríticos, por lo que sólo es necesario modelar la parte que realmente se desea calcular. Para mostrar esto resolveremos el problema anterior utilizando un dominio de aproximadamente la mitad del tamaño. La malla de cálculo se ha dibujado en la figura 5.15 y está formada por 450 elementos bicuadráticos. Las soluciones para los instantes  $t = 4 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 8 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 16 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 32 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 64 \cdot 10^{-4}$  s. y la solución estacionaria se pueden ver en la figura 5.16. Se observa que los resultados son exactamente iguales a los obtenidos utilizando el dominio completo.

#### 5.5.4. Convección de un senoide en una rotación pura

En esta sección se resuelve un problema de flujo circular alrededor del centro del dominio cuadrado  $[-1, 1] \times [-1, 1]$ . El campo de velocidades viene dado por la expresión  $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ . El tiempo de relajación es  $\tau = 1$  y la difusividad es  $k = 10^{-6}$ . Por tanto, el problema está claramente dominado por la convección. Utilizaremos una malla de  $30 \times 30$  elementos cuadrados, por lo que el número de Peclet elemental es  $P_e \approx 23570.22$ . El flujo es supercrítico en todos los contornos del problema. En los contornos de entrada de flujo se imponen condiciones homogéneas para todas las variables y en los contornos de salida de flujo no se impone ninguna variable. Además, en el segmento  $x_2 = 0$ ,  $0 \leq x_1 \leq 1$  se impone  $u(x_1, 0) = \text{sen}(\pi x_1)$  tal y como se puede ver en la figura 5.17. La solución exacta es

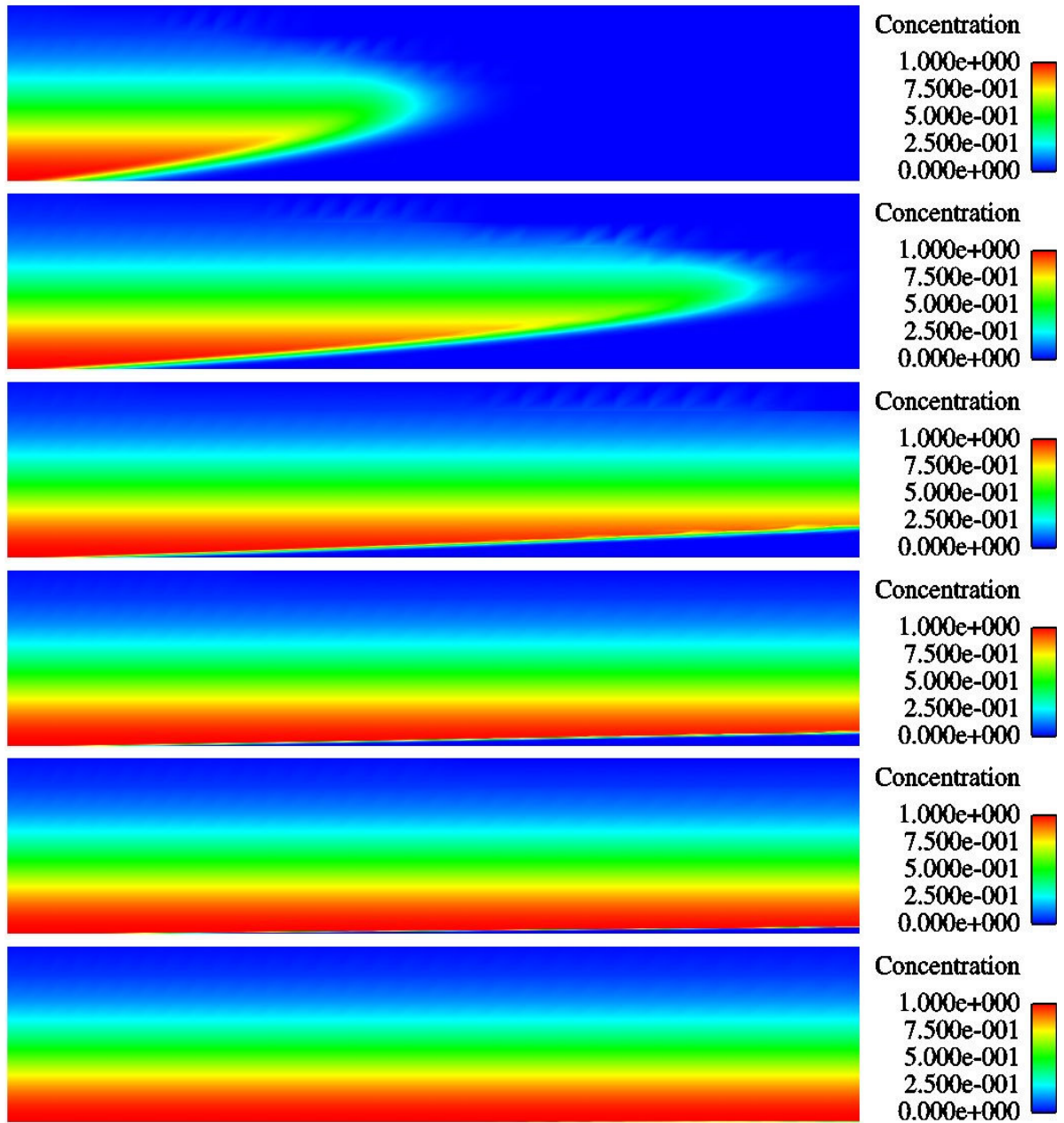


Figura 5.13: Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Soluciones para  $t = 4 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 8 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 16 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 32 \cdot 10^{-4}$  s.,  $t = 64 \cdot 10^{-4}$  s. y estacionario usando el método de *discontinuous Galerkin* y elementos bicuadráticos.

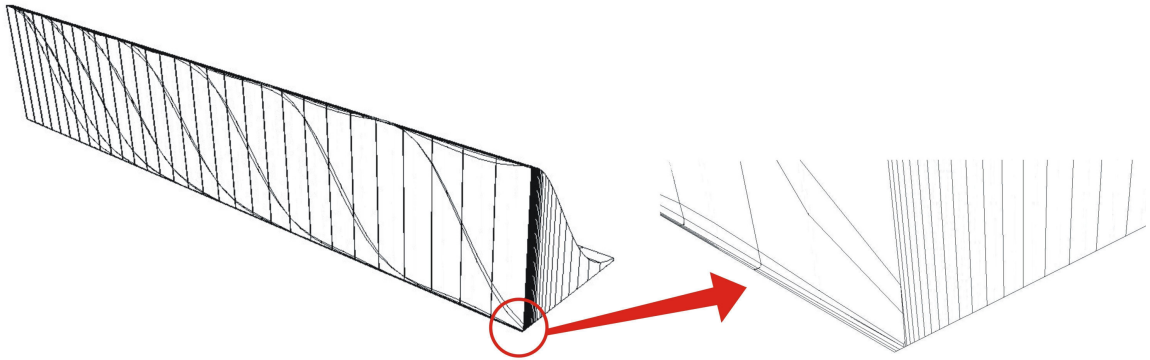


Figura 5.14: Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Detalle de la solución para  $t = 0.0192$  s. usando *discontinuous Galerkin* y elementos bicuadráticos.

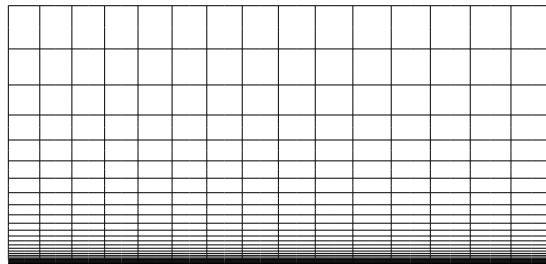


Figura 5.15: Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Malla de cálculo de la mitad del dominio (450 elementos bicuadráticos).

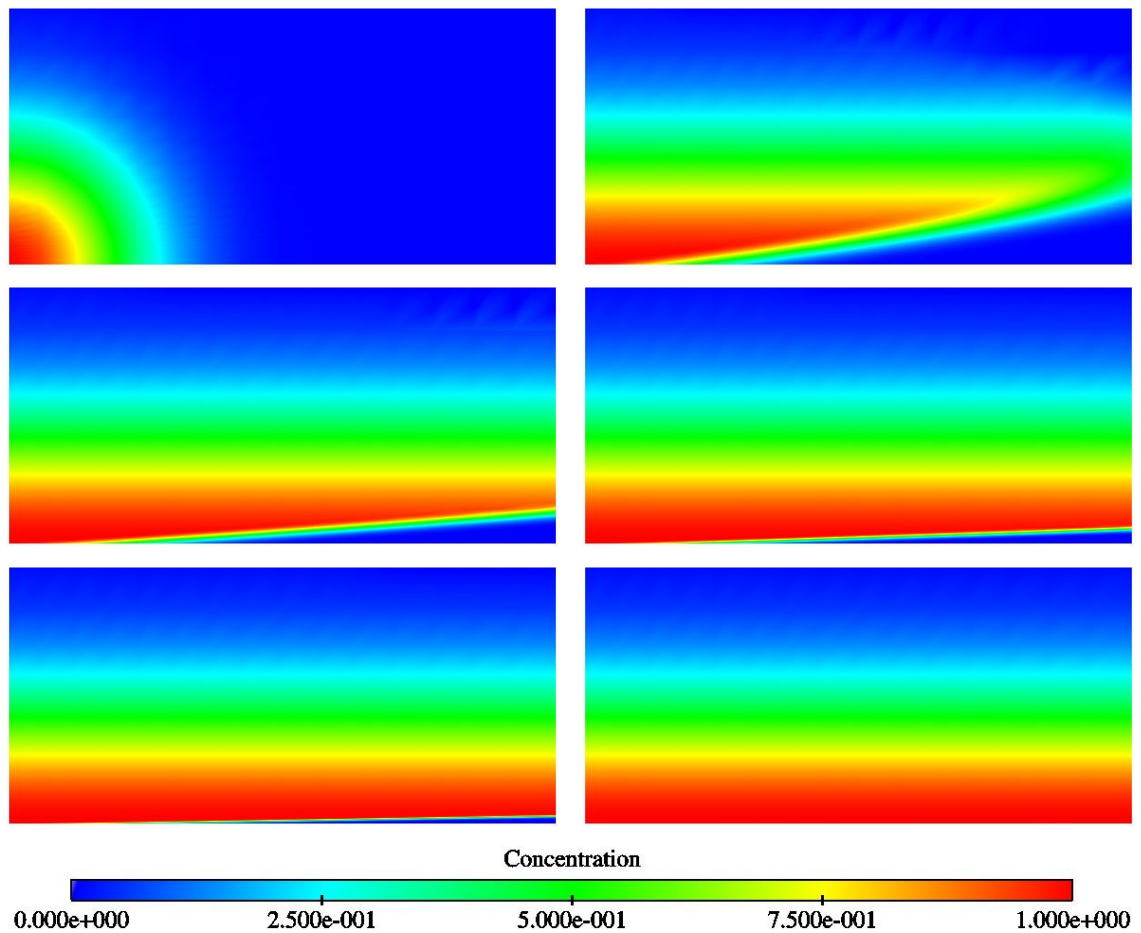


Figura 5.16: Flujo transcrito en un canal. Convección alta. Cálculo de la mitad del dominio. Condición inicial en concentraciones (arriba izquierda), soluciones para  $t = 4 \cdot 10^{-4}$  s. (arriba derecha),  $t = 8 \cdot 10^{-4}$  s. (centro izquierda),  $t = 16 \cdot 10^{-4}$  s. (centro derecha),  $t = 32 \cdot 10^{-4}$  s. (abajo izquierda) y solución estacionaria (abajo derecha) usando el método de *discontinuous Galerkin* y elementos bicuadráticos.

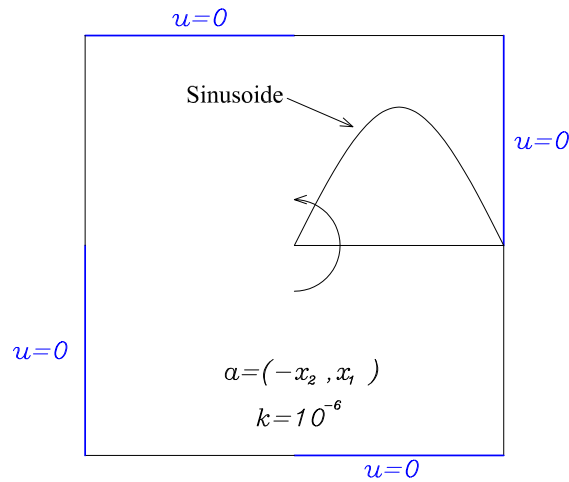


Figura 5.17: Convección de un senoide en una rotación pura. Planteamiento del problema.

esencialmente una convección pura de esta condición de contorno a lo largo de las líneas de corriente. En la figura 5.18 se representa la solución estacionaria de este problema.

### 5.5.5. Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura

En esta sección se resuelve un problema de test clásico pero en este caso utilizando las ecuaciones del transporte por convección-difusión con velocidad finita. El dominio del problema está definido en la figura 5.19. El campo de velocidades es una rotación pura de modo que  $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ . El valor del tiempo de relajación es  $\tau = 1$  y la difusividad es  $k = 10^{-6}$  por lo que el flujo es supercrítico en todo el dominio. Por tanto, en los contornos de entrada de flujo es necesario prescribir todas las variables y en los contornos de salida de flujo no hay que imponer ninguna condición de contorno. En todos los casos en las condiciones de contorno relativas al flujo de contaminante  $\mathbf{q}$  se imponen flujos nulos. Las condiciones de contorno impuestas en concentraciones se muestran también en la figura 5.19.

Resolveremos el problema en dos mallas diferentes (ver figura 5.20). La primera de ellas es una malla estructurada muy gruesa de 1875 elementos cuadrados. El tamaño de las caras de los elementos es  $h = 0.02$  lo que da lugar a un número de Peclet elemental  $Pe_e \approx 14142.35$ . La segunda malla es una malla no estructurada adaptada a la solución estacionaria. El número total de elementos (4601) no es muy superior al de la primera malla, pero en las discontinuidades los elementos son aproximadamente 4 veces más pequeños que en la malla inicial. El objetivo de este refinamiento es comprobar que, independientemente de la malla, las discontinuidades orientadas en la dirección de la red siempre se capturan



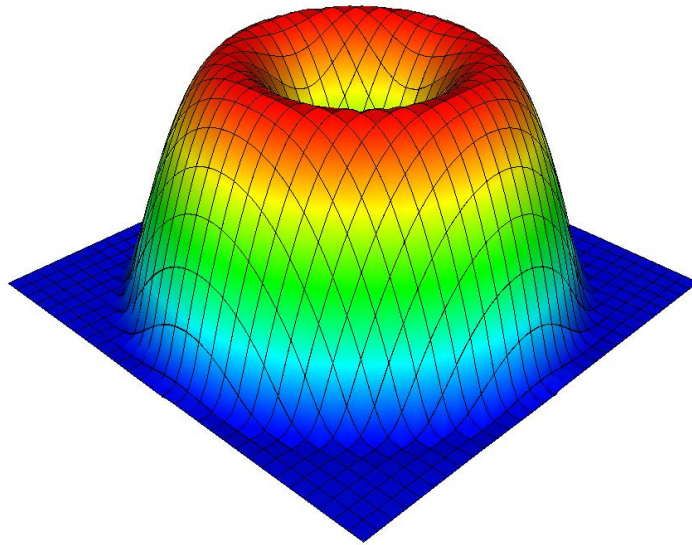


Figura 5.18: Convección de un senoide en una rotación pura. Solución estacionaria en una malla de  $30 \times 30$  elementos bicuadráticos.  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ .

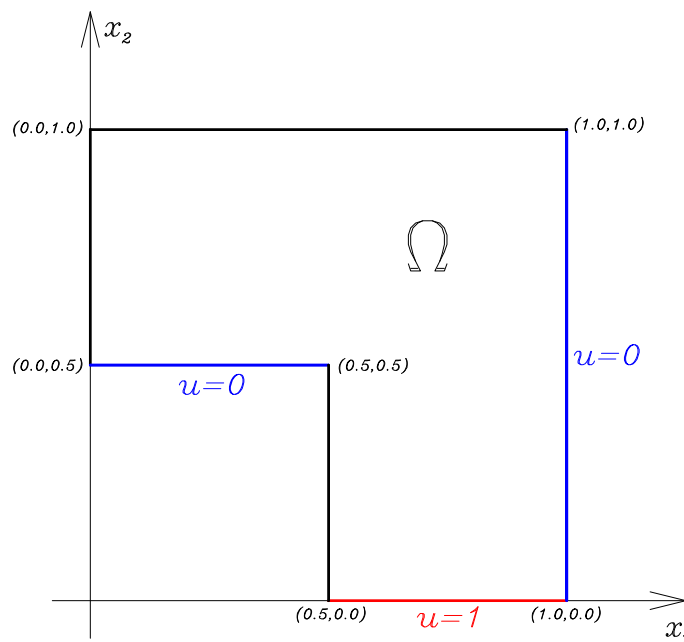


Figura 5.19: Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Planteamiento del problema.

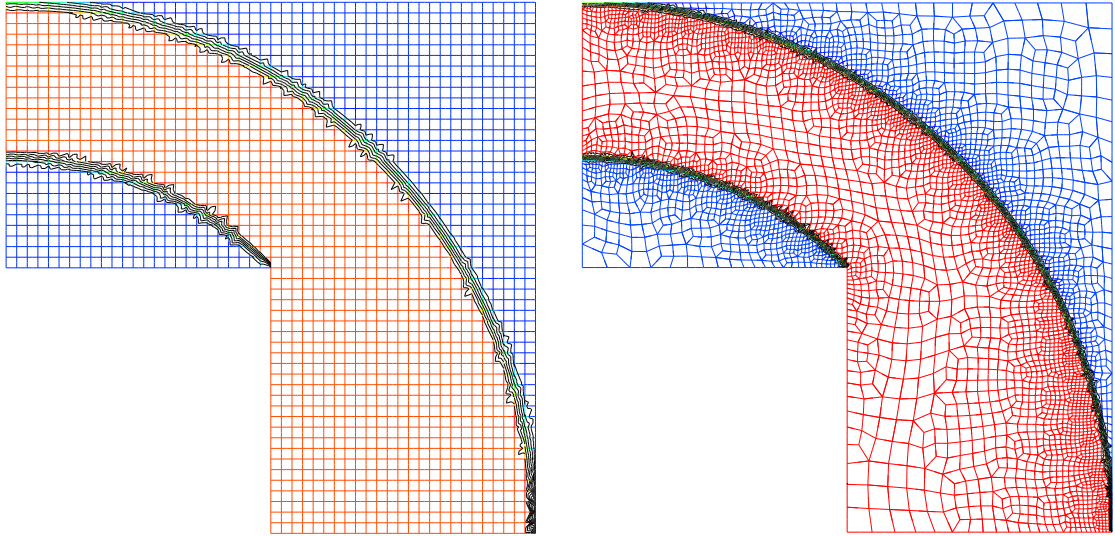


Figura 5.20: Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Solución estacionaria en la malla gruesa (1875 elementos, izquierda) y en la malla fina (4601 elementos, derecha). Las mallas se han generado mediante el sistema GEN4U [116].  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ .

en un solo elemento. En la figura 5.20 se presentan las soluciones estacionarias en cada una de las mallas. En esta figura se puede observar que las dos discontinuidades que se forman (una debido a la discontinuidad de las condiciones de contorno y la otra debido a la discontinuidad del contorno) son capturadas en una única celda, aparentemente sin ninguna difusión numérica. Se puede observar también como el hecho de no tener que imponer condiciones de frontera en los contornos de salida de flujo en situaciones de convección dominante evita la formación de capas límite en los contornos de salida.

En las figura 5.21 y 5.22 se comparan las soluciones en el contorno de entrada de flujo y en la esquina del dominio donde se genera una discontinuidad interior en la solución debido a la discontinuidad del dominio. En ambos casos se observa que las discontinuidades se capturan en un sólo elemento independientemente de la malla. Por último, en la figura 5.23 se muestran las soluciones en la malla gruesa para los instantes de tiempo  $t = 0.5$  s. y  $t = 0.75$  s. En ambos casos se observa como la discontinuidad se propaga por la malla de forma estable y capturada en un sólo elemento.

### 5.5.6. Condición de contorno discontinua en la frontera de entrada de flujo

Es esta sección resolveremos también un problema clásico para estudiar el comportamiento de la solución numérica ante discontinuidades interiores. Para ello, resolveremos un

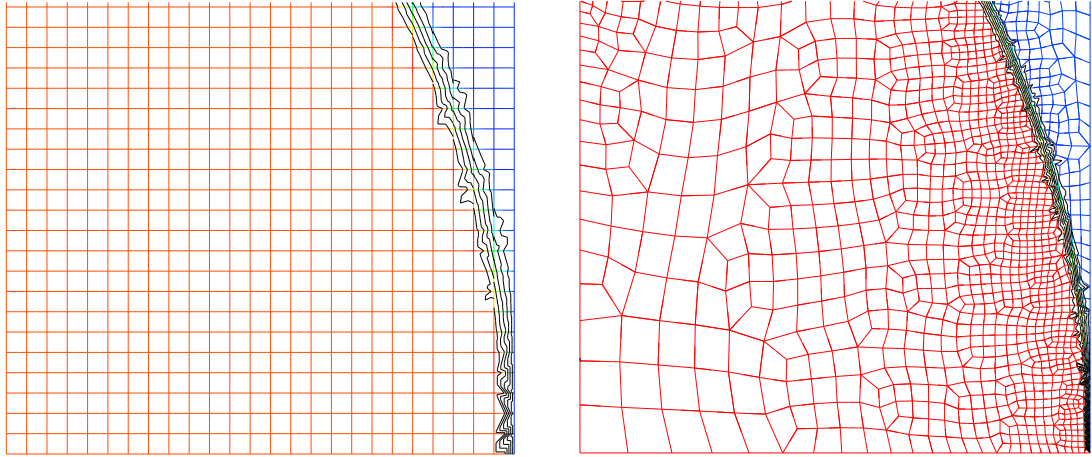


Figura 5.21: Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Detalle de la solución estacionaria en la malla gruesa (1875 elementos, izquierda) y en la malla fina (4601 elementos, derecha).  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ .

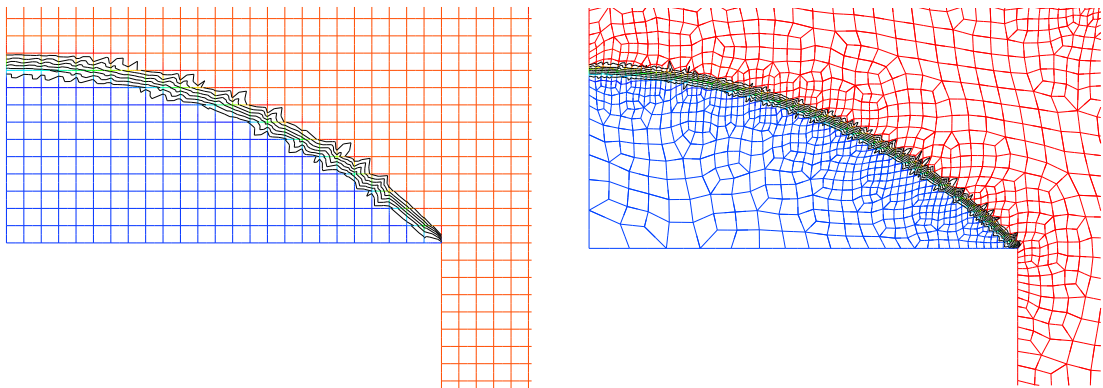


Figura 5.22: Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Detalle de la solución estacionaria en la malla gruesa (1875 elementos, izquierda) y en la malla fina (4601 elementos, derecha).  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$ .

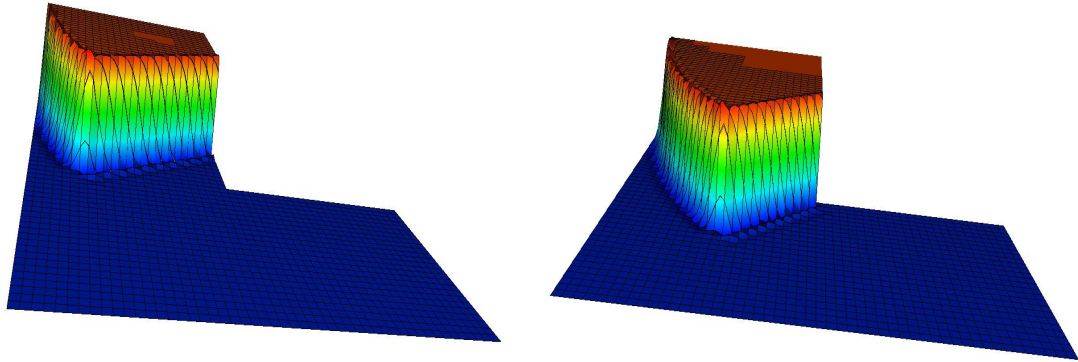


Figura 5.23: Flujo en un dominio irregular bajo una rotación pura. Solución en la malla gruesa para  $t = 0.5$  s. (izquierda) y  $t = 0.75$  s. (derecha).  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$

problema en el dominio rectangular  $\Omega = (0, 1) \times (0, 2)$  con una condición de frontera discontinua en el contorno de entrada de flujo. El campo de velocidades es constante y de valor  $\mathbf{a} = (1, 0)$ . El valor de tiempo de relajación es  $\tau = 0.1$ . Resolveremos el problema para dos valores diferentes de la difusividad:  $k = 0.02$  y  $k = 10^{-6}$ . Para cualquiera de estos valores de la difusividad el flujo es supercrítico en todo el dominio. Por tanto, en los contornos de entrada de flujo es necesario prescribir todas las variables y en los contornos de salida de flujo no hay que imponer ninguna condición de contorno. En todos los casos en las condiciones de flujo se imponen flujos nulos. En el contorno de entrada de flujo se impone la condición de contorno  $u(0, x_2) = -1, x_2 \leq 1$  y  $u(0, x_2) = 1, x_2 > 1$ . La condición de contorno se impone dándole a la discontinuidad un espesor de un elemento para poder comparar los resultados con los más abundantes en la literatura (los obtenidos mediante métodos de elementos finitos continuos). En la figura 5.24 se presentan las soluciones estacionarias para  $k = 0.02$  (izquierda) y  $k = 10^{-6}$  (derecha).

Es de destacar que en la solución para  $k = 10^{-6}$  se captura la discontinuidad de modo estable y no se introduce ninguna difusión numérica, ya que no se involucra en la discontinuidad ningún elemento más que el utilizado para imponer la condición de contorno. Se puede encontrar en la literatura este problema resuelto por el método de *Streamline/upwind Petrov-Galerkin* [88]. Se comprobará que se necesitan muchos más elementos para capturar la discontinuidad.

### 5.5.7. Convección oblicua a la malla

En esta sección resolvemos uno de los problemas clásicos de convección-difusión pero en este caso utilizando la formulación propuesta en esta tesis. El planteamiento del problema

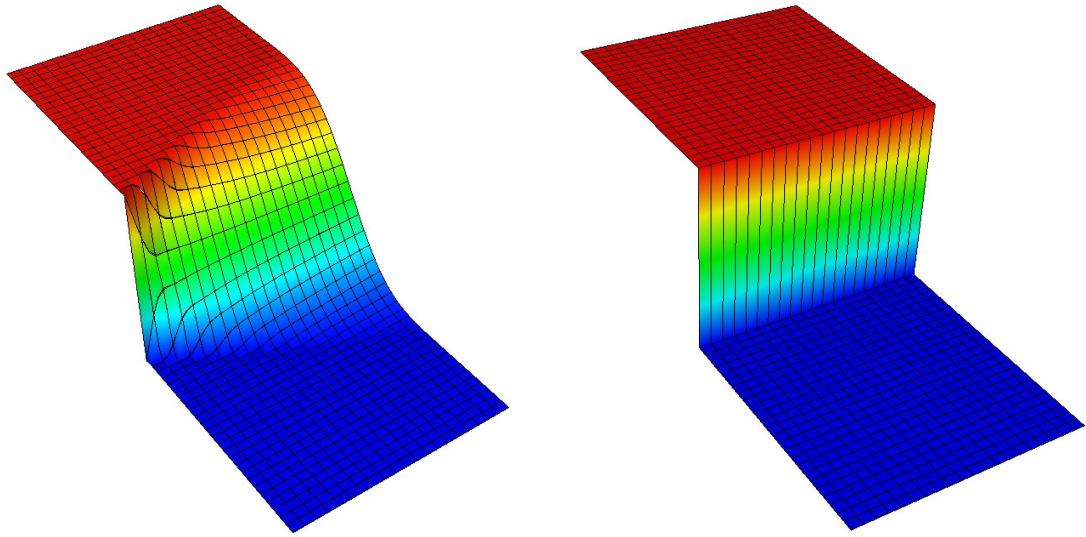


Figura 5.24: Condición de contorno discontinua en la frontera de entrada de flujo. Solución estacionaria para  $k = 0.02$  (izquierda) y para  $k = 10^{-6}$  (derecha).

se presenta en la figura 5.25. El problema se resuelve en el dominio cuadrado  $[0, 1] \times [0, 1]$ . Sobre este dominio se define una malla de  $20 \times 20$  elementos cuadrados, por lo que la longitud de las caras de los elementos es  $h = 0.05$ . En consecuencia, el número de Peclet elemental es  $Pe = \|\mathbf{a}\|h/(2k) = 25000$ . Se resolverá el problema para  $\alpha = \arctan(1) = 45^\circ$  y  $\alpha = \arctan(2) \approx 63.43^\circ$  (ver figura 5.25).

Debido al carácter discontinuo de la solución del método numérico empleado, es posible imponer la condición de contorno exactamente, es decir, de forma discontinua. Sin embargo, con el fin de comparar los resultados numéricos con los que más abundan en la literatura se ha resuelto también el problema imponiendo la condición de contorno de forma continua, dándole a la discontinuidad de las condiciones de contorno un espesor de un elemento.

Las soluciones estacionarias para los diferentes casos se pueden ver en las figuras 5.26–5.27. Los resultados son muy buenos en todos los casos.

En los dos gráficos superiores de las figuras 5.26 y 5.27 se observan pequeñas oscilaciones en el contorno de entrada de flujo, ya que las condiciones de contorno se imponen de forma discontinua y de forma fuerte. En ambos casos se puede observar que las discontinuidades interiores se capturan en un único elemento. Cuando a la discontinuidad de las condiciones de contorno se le da un espesor de un elemento no se observan oscilaciones y la discontinuidad interior se captura igualmente en un elemento. Incluso considerando el problema transitorio la discontinuidad interior se propaga por la malla de forma estable y capturada siempre con un solo elemento tal y como se puede ver en las figuras 5.28–5.31.



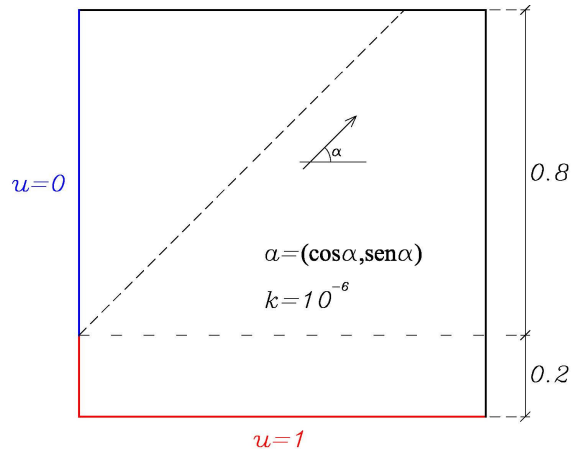


Figura 5.25: Convección oblicua a la malla. Planteamiento del problema.

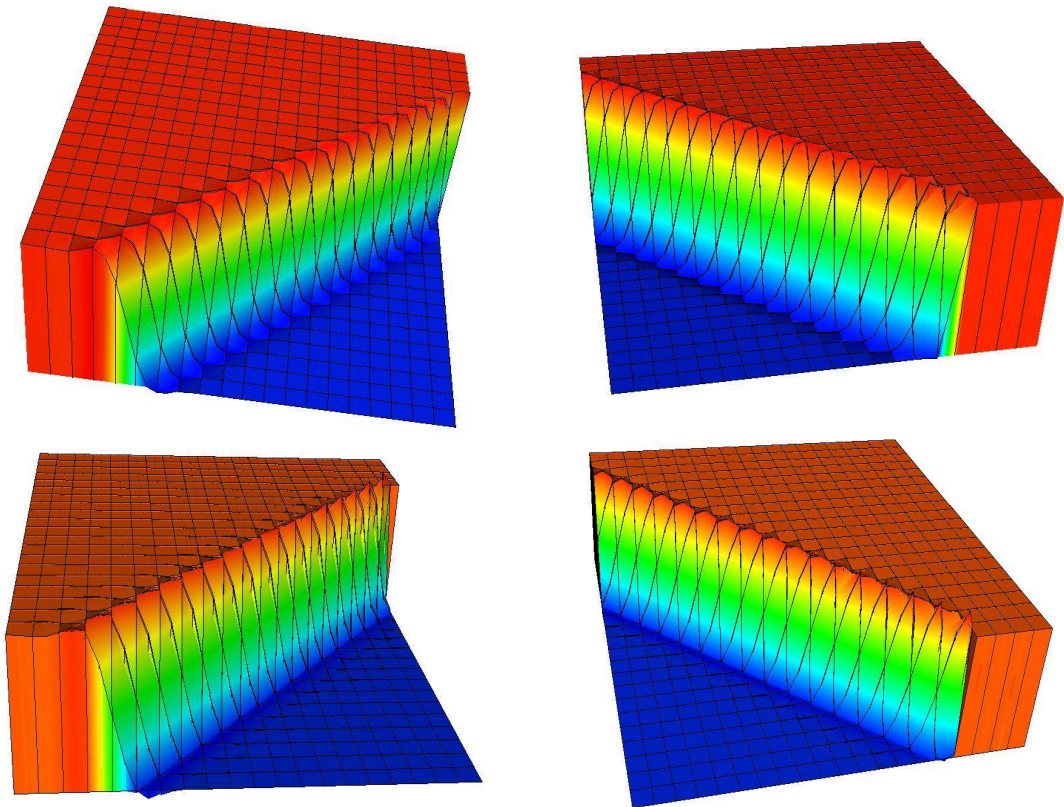


Figura 5.26: Convección oblicua a la malla. Solución estacionaria en una malla de  $20 \times 20$  elementos cuadrados. En las dos figuras superiores la discontinuidad de las condiciones de contorno se aproxima por una condición de contorno continua en la que el salto se realiza en un sólo elemento. En las dos figuras inferiores la discontinuidad de las condiciones de contorno se impone de forma exacta. Contorno de salida de flujo (izquierda) y contorno de entrada de flujo (derecha).  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = 45^\circ$

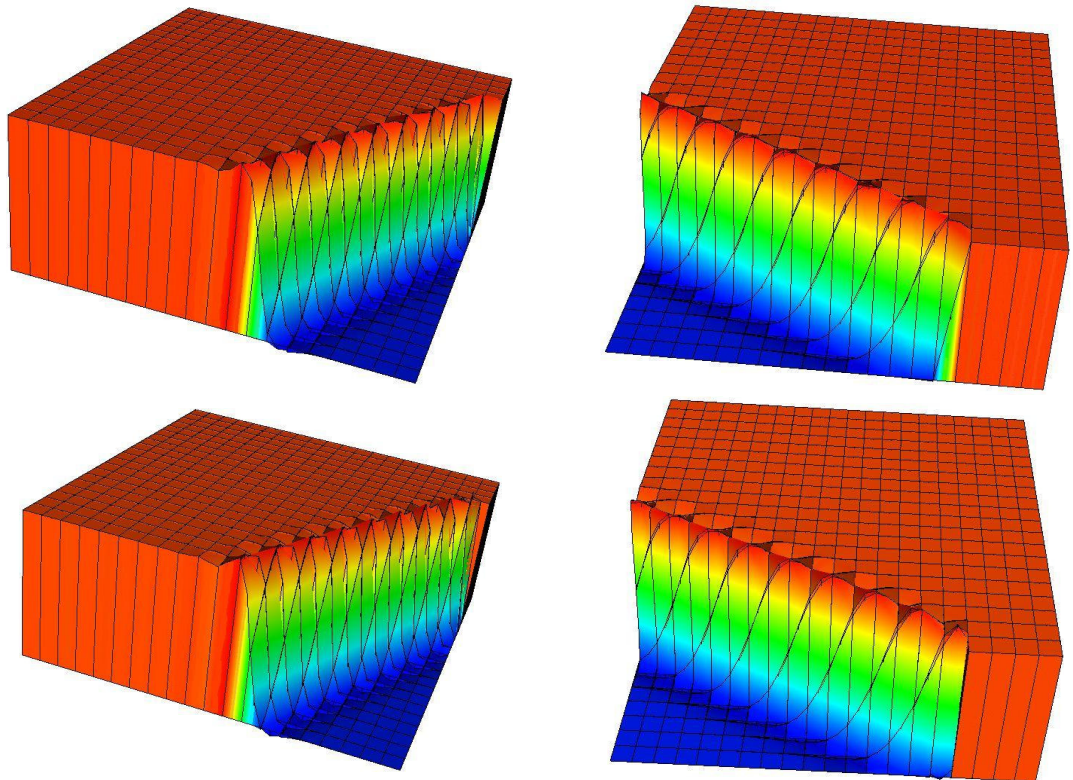


Figura 5.27: Convección oblicua a la malla. Solución estacionaria en una malla de  $20 \times 20$  elementos cuadrados. En las dos figuras superiores la discontinuidad de las condiciones de contorno se aproxima por una condición de contorno continua en la que el salto se realiza en un sólo elemento. En las dos figuras inferiores la discontinuidad de las condiciones de contorno se impone de forma exacta. Contorno de salida de flujo (izquierda) y contorno de entrada de flujo (derecha).  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$   $\alpha = \arctan(2) \approx 63.4^\circ$

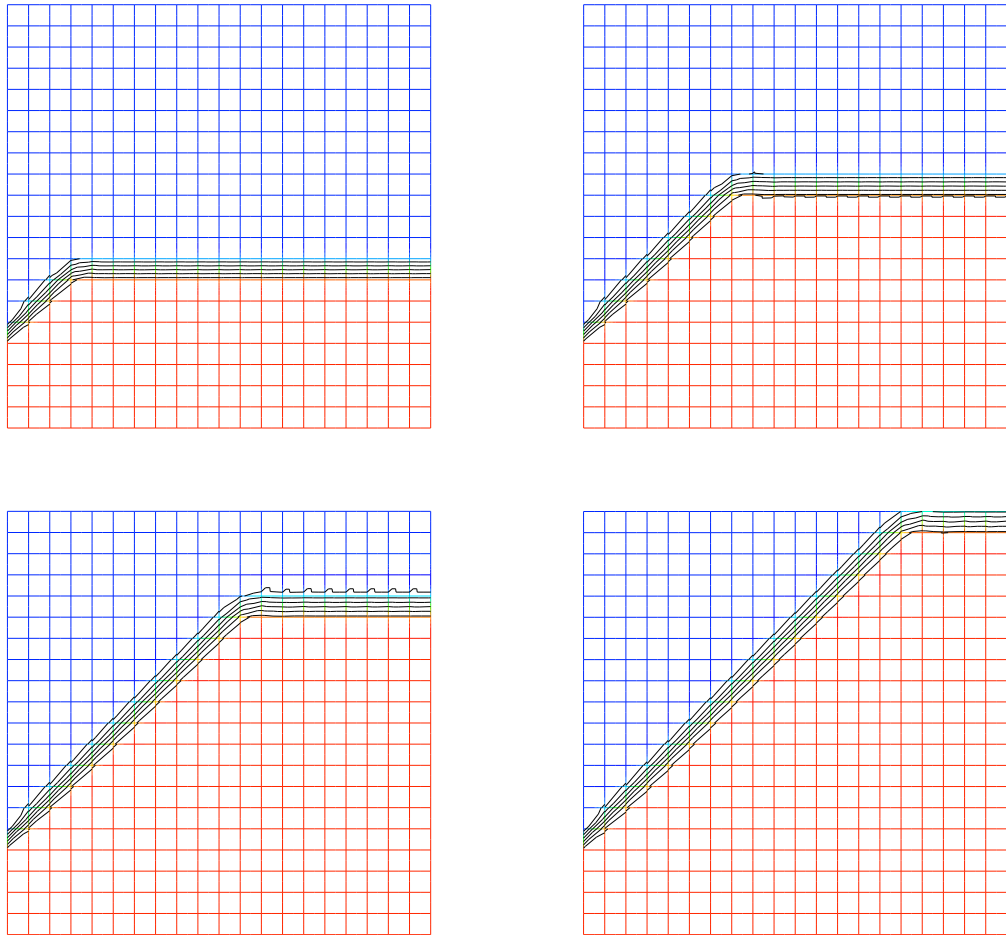


Figura 5.28: Convección oblicua a la malla. Solución transitoria en una malla de  $20 \times 20$  elementos. Solución para  $t = 0.217$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.496$  s. (arriba derecha),  $t = 0.784$  s. (abajo izquierda) y  $t = 1.072$  s. (abajo derecha). La discontinuidad de las condiciones de contorno se aproxima por una condición de contorno continua en la que el salto se realiza en un sólo elemento. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = 45^\circ$ .



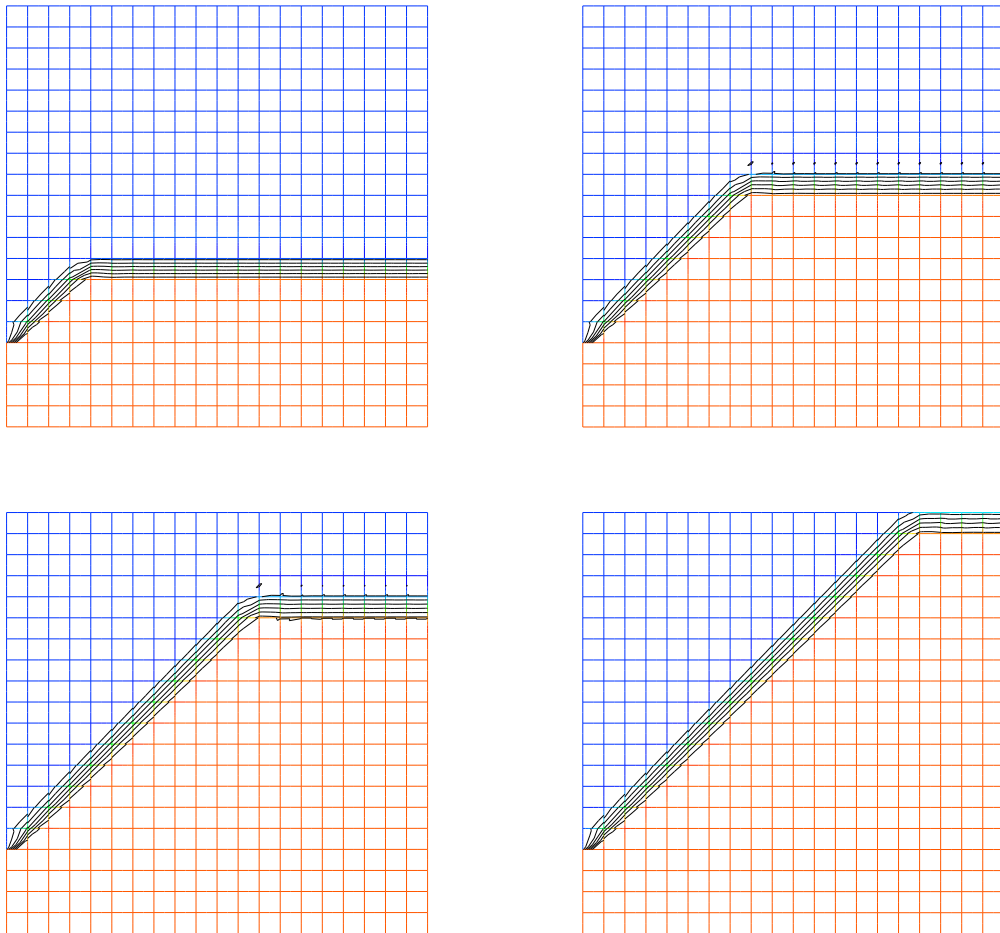


Figura 5.29: Convección oblicua a la malla. Solución transitoria en una malla de  $20 \times 20$  elementos. Solución para  $t = 0.249$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.536$  s. (arriba derecha),  $t = 0.816$  s. (abajo izquierda) y  $t = 1.100$  s. (abajo derecha). La discontinuidad de las condiciones de contorno se impone de forma exacta. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = 45^\circ$ .

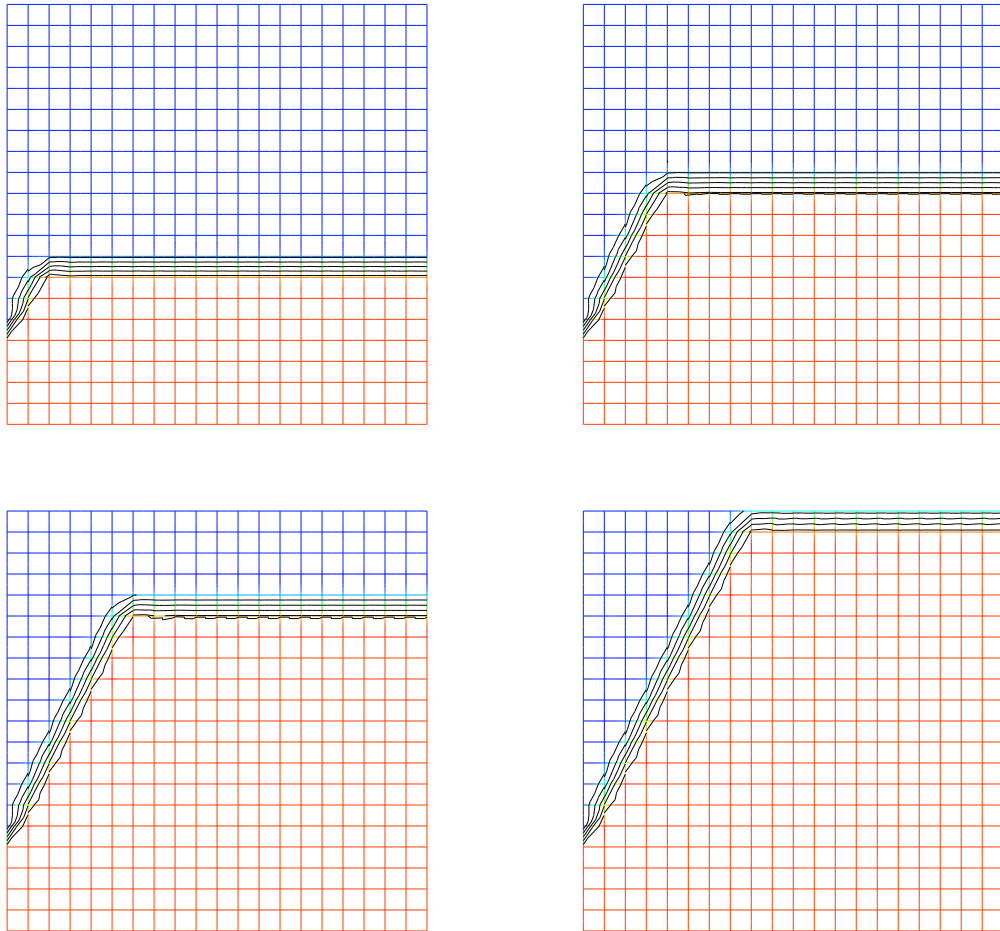


Figura 5.30: Convección oblicua a la malla. Solución transitoria en una malla de  $20 \times 20$  elementos. Solución para  $t = 0.169$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.392$  s. (arriba derecha),  $t = 0.616$  s. (abajo izquierda) y  $t = 0.848$  s. (abajo derecha). La discontinuidad de las condiciones de contorno se aproxima por una condición de contorno continua en la que el salto se realiza en un sólo elemento. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = \arctan(2) \approx 63.4^\circ$ .

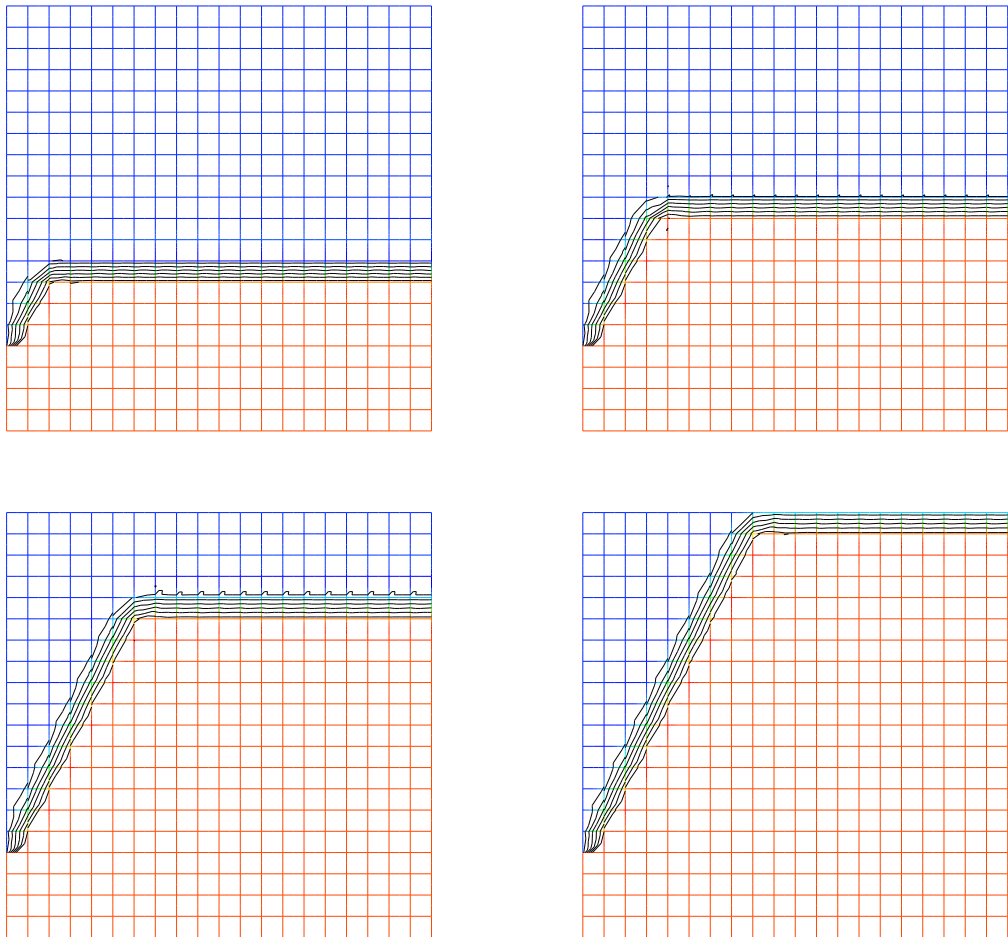


Figura 5.31: Convección oblicua a la malla. Solución transitoria en una malla de  $20 \times 20$  elementos. Solución para  $t = 0.193$  s. (arriba izquierda),  $t = 0.368$  s. (arriba derecha),  $t = 0.648$  s. (abajo izquierda) y  $t = 0.872$  s. (abajo derecha). La discontinuidad de las condiciones de contorno se impone de forma exacta. Los valores de los parámetros son  $k = 10^{-6}$ ,  $\tau = 1$ ,  $\alpha = \arctan(2) \approx 63.4^\circ$ .

### 5.5.8. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña

En esta sección se simulará la evolución de un vertido accidental en el puerto de A Coruña [52, 53]. En la figura 5.32 se pueden encontrar dos fotografías de situación de la zona de interés. El dominio del problema será la zona del espejo de agua del puerto de A Coruña, según se puede apreciar en las figuras 5.33 y 5.34. Se simulará la evolución de un vertido en la zona de los pantalaneros petroleros.

El objetivo de este ejemplo es demostrar que la metodología propuesta se puede aplicar a un problema real de ingeniería. Por ello, no se ha considerado necesario realizar una estimación de los parámetros del problema, lo que hubiese requerido la realización de ensayos experimentales y mediciones de campo. Del mismo modo, el campo de velocidades no se ha calculado sino que se ha supuesto un campo de velocidades solenoidal que sigue la dirección predominante de los vientos en la zona como se puede observar en la parte superior de la figura 5.35. Para limitar el dominio del problema se ha definido un contorno en mar abierto mediante un arco que va desde el extremo del dique de abrigo hasta el extremo del muelle de la Dársena de Oza. La malla del problema se presenta en la figura 5.35. Como se puede apreciar en esta figura se han introducido algunas modificaciones respecto al dominio real representado en la figura 5.34. Estos cambios se han realizado con el fin de mejorar las características geométricas de la malla. Se han modificado los siguientes elementos:

- Los espigones situados entre la Dársena de la Marina y la Antedársena
- Los pantalaneros del muelle de petroleros

Realmente, la supresión de estos últimos elementos no constituye una simplificación del dominio ya que, al ser estas estructuras diáfanas, permiten el paso de agua, por lo que a efectos del flujo es como si no existiesen.

También en la figura 5.35 se diferencian los tres tipos de contorno que existen en este problema: el contorno tipo pared se ha representado en color verde; el contorno donde se produce el vertido se ha representado en color rojo; y el contorno de mar abierto se ha dibujado en azul. En el contorno tipo pared se impone como condición de contorno que el flujo normal de contaminante sea nulo. En el contorno donde se produce el vertido se impone un flujo normal de valor  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -10^{-2}$ . Por último, en el contorno de mar abierto se impone la condición de tipo mixto  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = cu$ , donde  $c$  es la celeridad de la onda difusiva.

Asimismo, la figura 5.35 muestra el campo de velocidades utilizado para este problema. El flujo viene dado por un valor máximo de  $H$  (ver la definición en (2.31))  $H_{\text{máx}} = 0.3237$ , por lo que estamos en condiciones de flujo subcrítico en todo el dominio. El tiempo se mide mediante la variable adimensional  $t^* = t/\tau$ . En las figuras 5.36–5.39 se muestra la condición

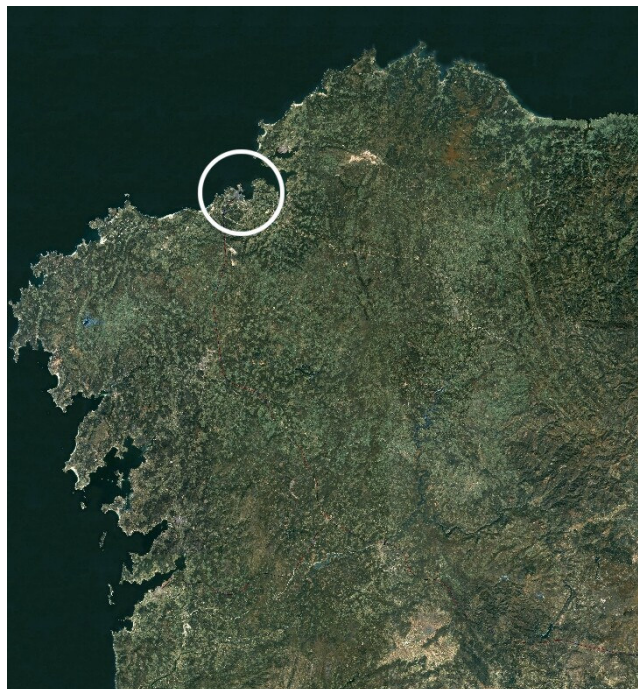


Figura 5.32: Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Situación geográfica del problema. Europa Occidental (arriba) y Galicia (abajo). La fotografía de Europa Occidental es cortesía del Instituto Nacional de Meteorología. La fotografía de Galicia es cortesía de Videalab, ETSICCP-UDC. En ambas fotografías se ha indicado con un círculo la situación de A Coruña.



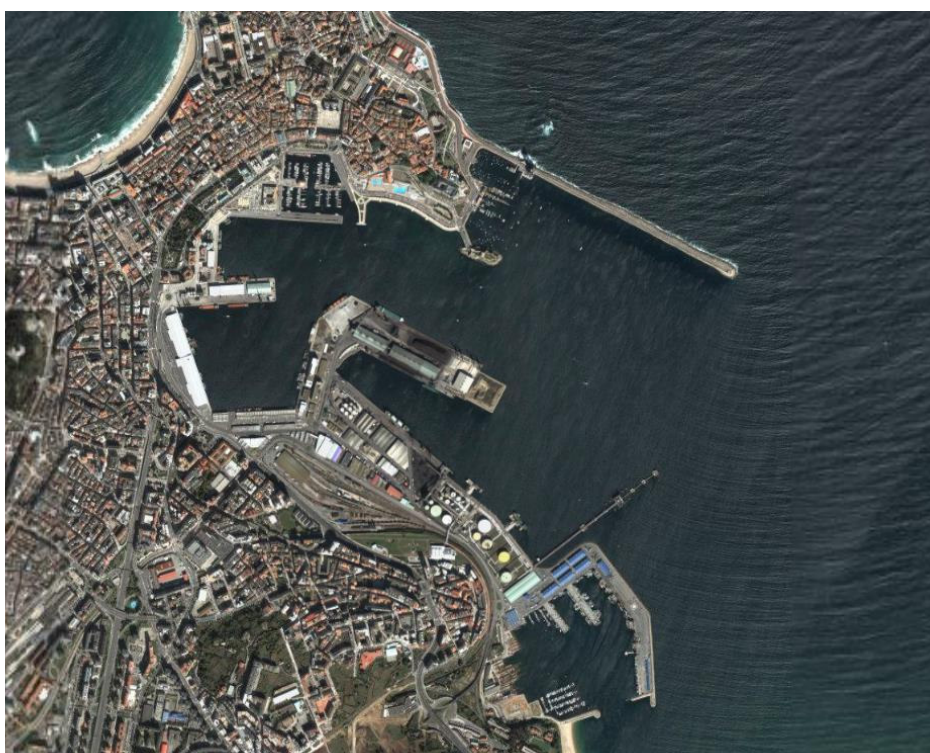
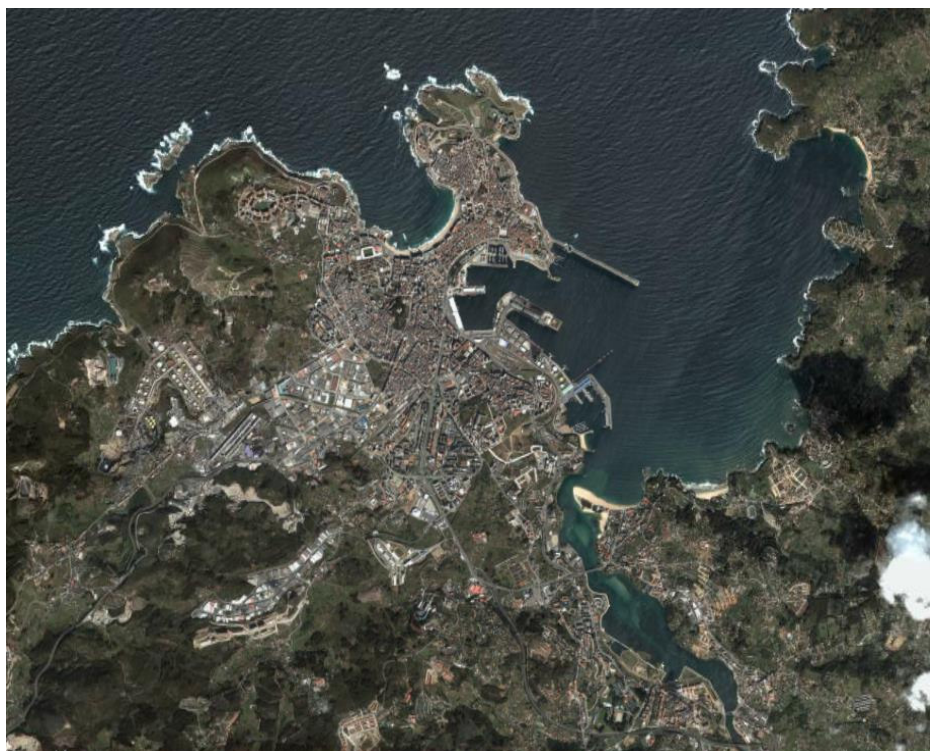


Figura 5.33: Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Fotografías de la ciudad de A Coruña (arriba) y del puerto de A Coruña (abajo).

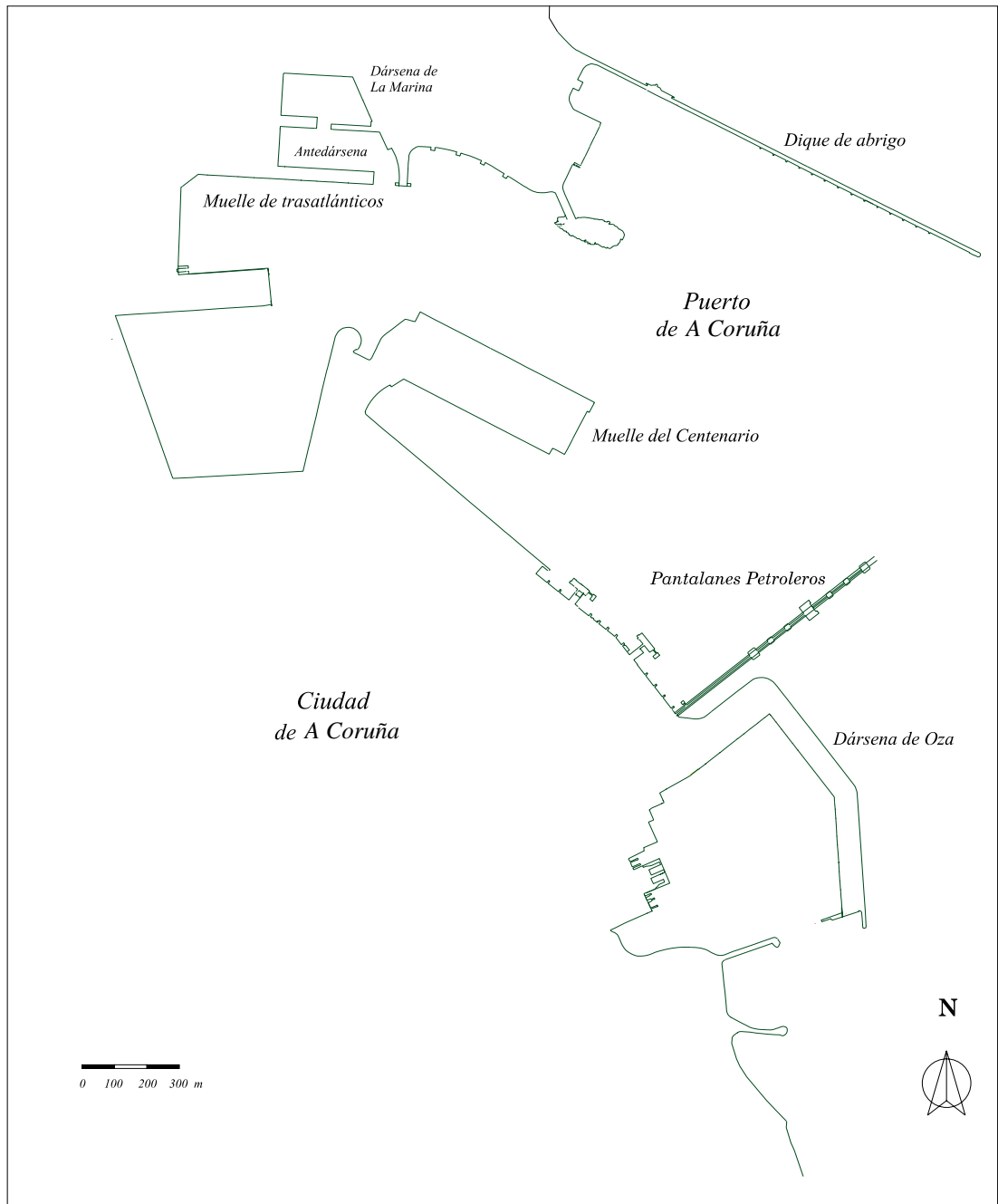


Figura 5.34: Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Dominio del problema constituido por los muelles y el contorno de mar abierto del puerto de A Coruña.

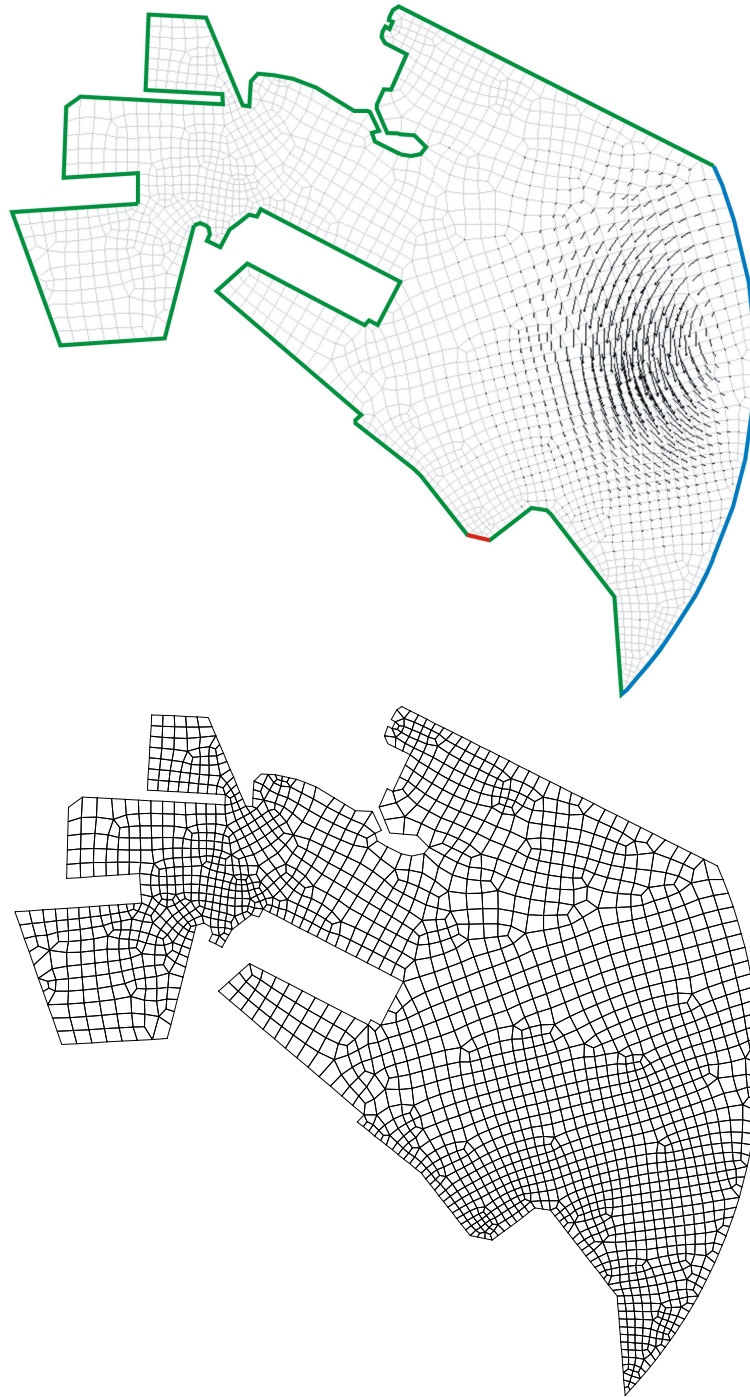


Figura 5.35: Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Campo de velocidades y tipos de contornos (arriba) y malla de cálculo (abajo). El contorno tipo pared se ha dibujado en color verde, el contorno en el que se produce el vertido se ha dibujado en color rojo y el contorno de mar abierto se ha dibujado en color azul. La malla de cálculo contiene 2023 elementos bicuadráticos y ha sido generada mediante el sistema GEN4U [116].



inicial de concentraciones y las soluciones de concentraciones para  $t^* = 25$ ,  $t^* = 50$ ,  $t^* = 75$ ,  $t^* = 100$ ,  $t^* = 150$ ,  $t^* = 200$  y  $t^* = 400$ .

## 5.6. Conclusiones

En este capítulo se ha presentado un modelo numérico de *discontinuous Galerkin* para las ecuaciones del transporte con velocidad difusiva finita. Se han resuelto ejemplos unidimensionales y bidimensionales, obteniéndose en ambos casos resultados excelentes. En los resultados numéricos presentados no se ha empleado ninguna técnica de viscosidad artificial ni ningún limitador, ya que los resultados son suficientemente buenos.

Mediante los ejemplos unidimensionales se ha probado que se alcanzan los órdenes de convergencia óptimos (orden  $p+1$  cuando se interpola en cada elemento con un polinomio de grado  $p$ ) y que la solución numérica es estable para cualquier valor de la velocidad. Mediante los ejemplos bidimensionales se ha comprobado la capacidad del modelo numérico para capturar discontinuidades de forma estable y precisa. En todos los ejemplos presentados las discontinuidades en la solución se capturan en una sola celda (en alguna ocasión, cuando la discontinuidad es oblicua a la malla se precisa 1 celda y media) de forma estable. Por tanto, el modelo numérico presentado se confirma como muy adecuado para la resolución de las ecuaciones de convección-difusión propuestas.

A modo de conclusión final se puede decir que la metodología general presentada para la resolución de problemas de transporte por convección-difusión de mecánica de fluidos en ingeniería compete con los métodos más eficientes disponibles en la actualidad, teniendo además las ventajas de predecir velocidades difusivas finitas y de no requerir ningún tipo de estabilización. Probablemente, uno de los métodos más eficientes para la resolución de las ecuaciones clásicas de convección-difusión en situaciones de convección dominante sea el *local discontinuous Galerkin* (LDG). Para aplicar este método es necesario realizar una descomposición del sistema de segundo orden que constituyen las ecuaciones de convección-difusión en un sistema mayor de primer orden, lo que aumenta mucho los grados de libertad del problema con respecto a otros métodos numéricos. Sin embargo, el dominio de dependencia local del método, la posibilidad de obtener soluciones de alto orden y la alta eficiencia en la paralelización compensa con mucho el número extra de grados de libertad según Cockburn y Shu [34]. El método presentado en esta tesis tiene soporte mínimo (sólo primeros vecinos), por lo que es altamente paralelizable, da lugar al mismo número de grados de libertad que el *local discontinuous Galerkin*, permite aumentar el orden de convergencia arbitrariamente (al menos desde un punto de vista formal), se puede implementar mediante una técnica de *flux vector splitting* (el sistema es totalmente hiperbólico y el flujo



Figura 5.36: Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Condición inicial de concentraciones (arriba) y solución de concentraciones para  $t^* = 25$  (abajo).

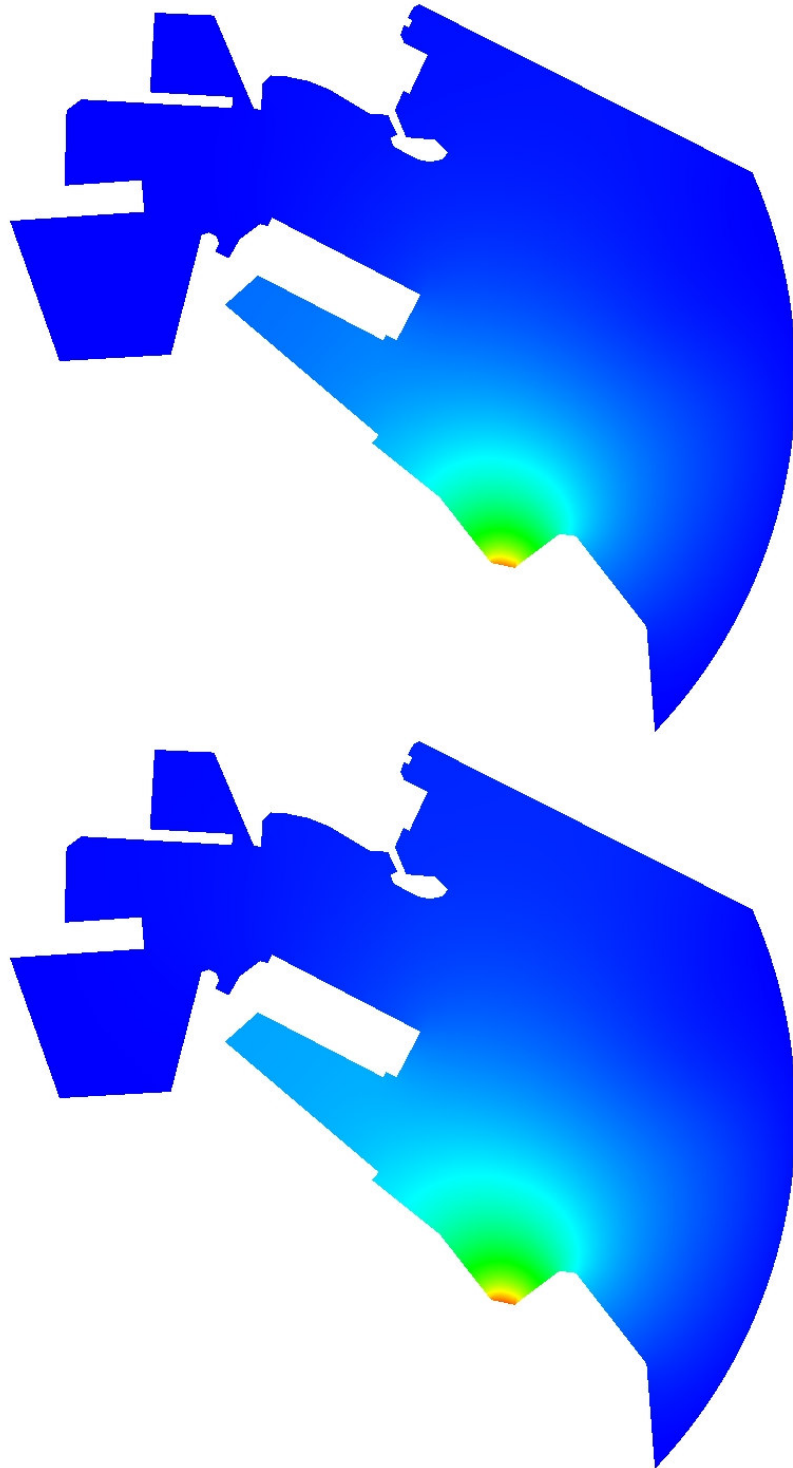


Figura 5.37: Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Soluciones para  $t^* = 50$  (arriba) y  $t^* = 75$  (abajo).

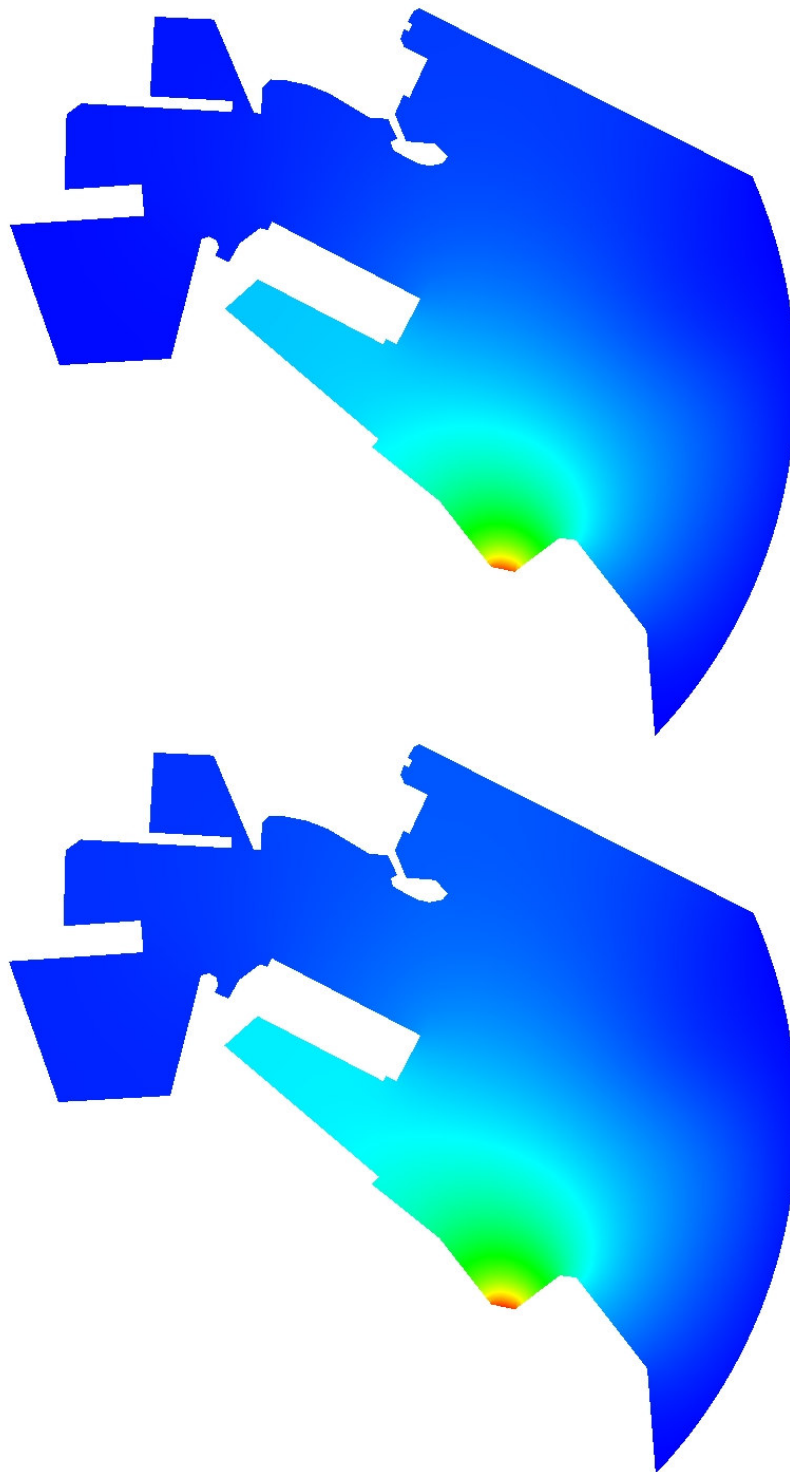


Figura 5.38: Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Soluciones para  $t^* = 100$  (arriba) y  $t^* = 150$  (abajo).

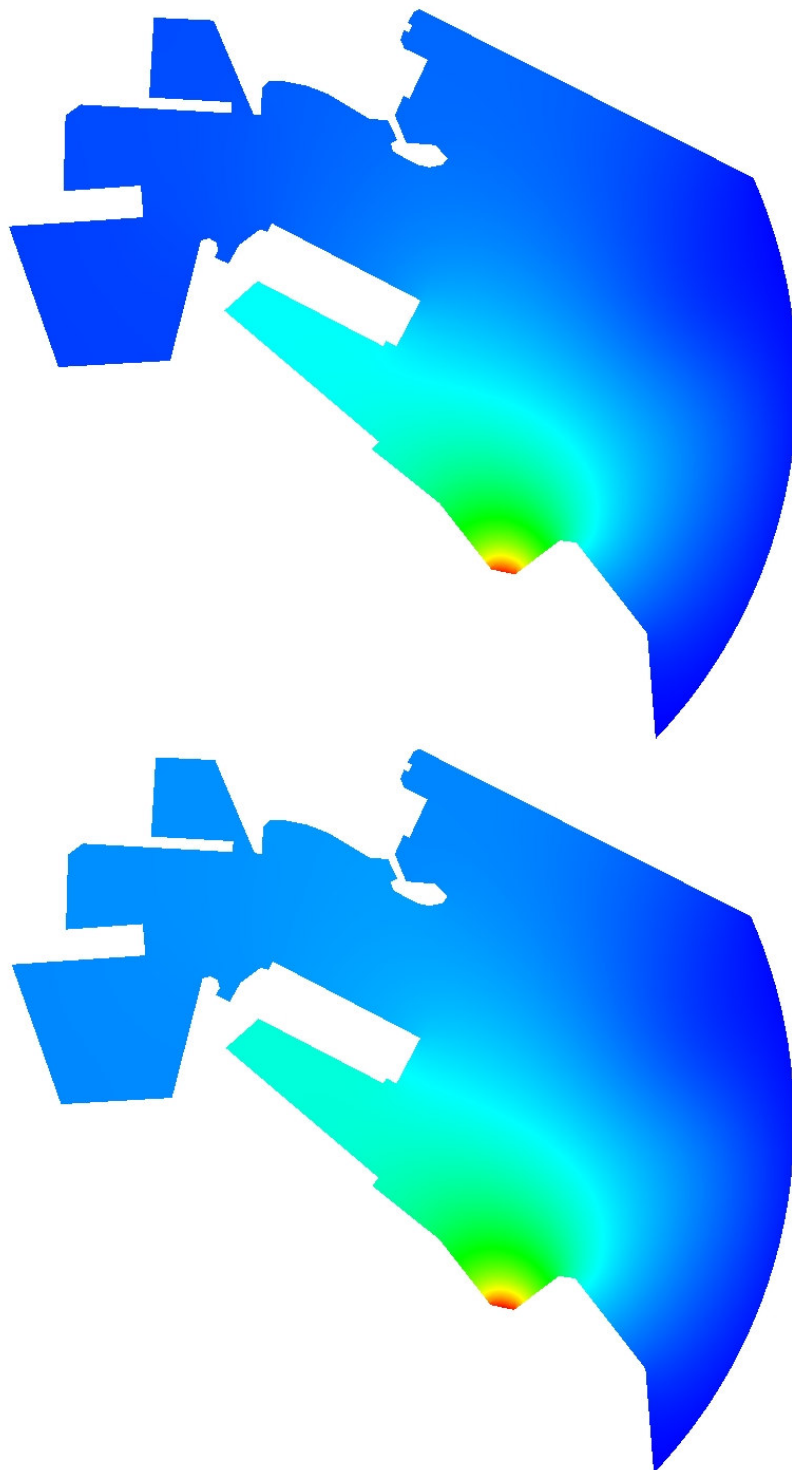


Figura 5.39: Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Soluciones para  $t^* = 200$  (arriba) y  $t^* = 400$  (abajo).

una función homogénea de las variables conservadas), no requiere la utilización de técnicas de difusividad artificial ni de limitadores y evita la imposición de condiciones de contorno en los contornos de salida de flujo en situaciones de convección dominante.

## Capítulo 6

# Conclusiones y futuras líneas de desarrollo

### 6.1. Conclusiones

#### 6.1.1. Resumen

En esta tesis se propone una nueva metodología (constituida por un modelo matemático y un modelo numérico) para la resolución de problemas de transporte por convección-difusión en ingeniería. La formulación propuesta está basada en una ecuación constitutiva desarrollada a partir de la ley de Cattaneo y elimina parte de las deficiencias de la formulación basada en la ley de Fick como puede ser la predicción de transporte a velocidad infinita. Esta es, en conocimiento del autor, la primera vez que se plantea un modelo con velocidad difusiva finita para problemas de convección-difusión.

Se han propuesto dos algoritmos para la resolución numérica del modelo matemático introducido. El primero de ellos está basado en el método de Taylor-Galerkin y el segundo es un esquema tipo *discontinuous Galerkin*. Mediante el primer método se resuelven varios casos de interés en ingeniería, probando de este modo que el modelo propuesto conduce a soluciones razonables desde un punto de vista ingenieril y que puede ser aplicado a problemas reales. Con el algoritmo de tipo *discontinuous Galerkin* se resuelven ejemplos clásicos de convección dominante, obteniéndose en todos los casos muy buenos resultados (soluciones estables con las discontinuidades capturadas en una sola celda) sin necesidad de realizar ningún tipo de estabilización. Además, se utiliza el algoritmo tipo *discontinuous Galerkin* para la simulación numérica de la evolución de un vertido accidental en una zona portuaria haciendo uso de la geometría real del puerto de A Coruña.

Finalmente, se propone la utilización del modelo matemático presentado junto con la formulación numérica tipo *discontinuous Galerkin* como una metodología eficaz para la resolución de problemas de convección-difusión en ingeniería.

### 6.1.2. Conclusiones particulares

En este apartado se desglosan las diferentes conclusiones que se han extraído a lo largo de la tesis. En la primera parte de la tesis y a partir del estudio del modelo matemático propuesto se concluye que:

- El modelo propuesto predice velocidades difusivas finitas, por lo que en ese sentido es más realista que el modelo basado en la ley de Fick.
- Las ecuaciones que constituyen la formulación propuesta se pueden escribir como un sistema (totalmente hiperbólico) de ecuaciones en forma conservativa.
- El modelo propuesto está bien fundamentado matemáticamente e incluye al modelo tradicional (basado en la ley de Fick) como un caso particular.

A partir del estudio numérico de la ecuación unidimensional estacionaria se concluye que:

- Bajo ciertas condiciones, la solución numérica (obtenida por el método de Galerkin con elementos lineales) del problema clásico es (para mallas suficientemente finas) igual a la solución exacta de las ecuaciones propuestas para un cierto valor del tiempo de relajación  $\tau$  que depende del tamaño de malla.
- Si se utiliza la formulación de Galerkin la solución numérica de las ecuaciones del transporte propuestas es estable para todos los valores posibles de la velocidad, excepto para un intervalo de tamaño  $I = h/\tau$ , donde  $h$  es el tamaño de malla. El tamaño  $I$  de este intervalo es inversamente proporcional al tiempo de relajación, por lo que a medida que aumenta  $\tau$  (a medida que nos alejamos de la ley de Fick) el rango de velocidades que da lugar a soluciones numéricas inestables es más pequeño. Por tanto, podemos concluir que usar la ley de Cattaneo en lugar de la ley de Fick conduce, en cierta manera, a soluciones numéricas más estables.

Los casos prácticos resueltos mediante el algoritmo basado en el método de Taylor-Galerkin permiten concluir que:

- El modelo propuesto permite obtener muy buenas soluciones y completamente razonables desde un punto de vista ingenieril.



- La formulación matemática propuesta junto con el algoritmo basado en el método de Taylor-Galerkin se puede aplicar a la resolución de problemas de interés en ingeniería.
- Es altamente conveniente desarrollar un algoritmo específicamente diseñado para problemas dominados por la convección.

Por este último motivo se propone aplicar un método de *discontinuous Galerkin* para la resolución del modelo matemático propuesto. Este algoritmo se utiliza para resolver problemas unidimensionales y bidimensionales, obteniéndose muy buenos resultados en todos los casos a pesar de no utilizar ninguna técnica de difusividad artificial ni ningún limitador. En particular, se extraen las siguientes conclusiones:

- Se alcanzan los órdenes de convergencia óptimos (orden  $p + 1$  cuando se utilizan interpolantes polinómicos de grado  $p$ ).
- Los resultados numéricos presentan una gran estabilidad, incluso en el análisis de casos muy convectivos.
- Las discontinuidades presentes en los casos analizados (tanto las capas límite como las discontinuidades interiores) se capturan de forma estable en una sola celda en prácticamente todos los casos.

### 6.1.3. Conclusión general

A modo de conclusión final se puede decir que la tecnología presentada para la resolución de problemas de transporte por convección-difusión en ingeniería compite con los métodos más eficientes disponibles en la actualidad, teniendo además las ventajas de predecir velocidades difusivas finitas, de no requerir ningún tipo de estabilización y de evitar la imposición de condiciones de contorno en los contornos de salida de flujo en situaciones de convección dominante. Probablemente, uno de los métodos más eficientes para la resolución de las ecuaciones clásicas de convección-difusión en situaciones de convección dominante sea el *local discontinuous Galerkin* (LDG). Para aplicar este método es necesario realizar una descomposición del sistema de segundo orden que constituyen las ecuaciones de convección-difusión en un sistema mayor de primer orden, lo que aumenta mucho los grados de libertad del problema con respecto a otros métodos numéricos. Sin embargo, el dominio de dependencia local del método, la posibilidad de obtener soluciones de alto orden y la alta eficiencia en la paralelización compensa con mucho el número extra de grados de libertad según Cockburn y Shu [34]. El método presentado en esta tesis:

- Tiene soporte mínimo (sólo primeros vecinos), por lo que es altamente paralelizable

- Da lugar al mismo número de grados de libertad que el *local discontinuous Galerkin*
- Permite aumentar el orden de convergencia arbitrariamente (al menos desde un punto de vista formal), obteniéndose los órdenes óptimos
- Se puede implementar mediante una técnica de *flux vector splitting* (el sistema es totalmente hiperbólico y el flujo una función homogénea de las variables conservadas)
- No requiere el uso de técnicas de difusividad artificial ni de limitadores

## 6.2. Algunas conjeturas

### 6.2.1. Estudio teórico sobre la capacidad del modelo numérico para capturar las discontinuidades en una sola celda

En todos los ejemplos numéricos que se han presentado en el capítulo 5 se observa que las discontinuidades de la solución se capturan en una sola celda. Este resultado indica que el método numérico propuesto mantiene un orden de convergencia alto en las discontinuidades, casi sin añadir disipación artificial. Una línea de investigación interesante sería tratar de demostrar, al menos con un ejemplo, que las discontinuidades se capturan siempre en una sola celda.

### 6.2.2. Relación de las ecuaciones propuestas con los métodos estabilizados de elementos finitos

En el capítulo 3 se ha demostrado que la solución a que da lugar la formulación de Galerkin (con elementos lineales) de un problema de transporte por convección-difusión unidimensional estacionario es la solución exacta de un problema de formulado con la ecuación de Cattaneo para un valor del tiempo de relajación  $\tau_{G-FEM}$  de valor

$$\tau_{G-FEM} = \frac{h}{a} \left( \frac{1}{2P_e} - \frac{1}{\ln\left(\frac{1+P_e}{1-P_e}\right)} \right) \quad (6.1)$$

Donde  $h$  es el tamaño de elemento,  $a$  la velocidad del fluido y  $P_e$  el número de Peclet. En lo que sigue demostraremos que, bajo ciertas hipótesis, la formulación de Galerkin del problema bidimensional del transporte utilizando la formulación propuesta es equivalente a una formulación *Streamline-upwind/Petrov-Galerkin* de la ecuación clásica para un cierto valor del parámetro de estabilización al que denotaremos  $\tau_{SUPG}$  en lugar de  $\tau$  (lo habitual en la bibliografía) ya que este símbolo lo hemos reservado para el tiempo de relajación.

Las ecuaciones del transporte por convección-difusión propuestas se pueden escribir de la forma (ver [61] para una demostración)

$$-\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (k \nabla_{\mathbf{x}}(u)) + \tau \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u)) + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) = 0 \quad (6.2)$$

para problemas estacionarios con un campo de velocidades constante. Supongamos ahora que queremos resolver la ecuación (6.2) con condiciones tipo Dirichlet en todo el contorno. Definamos del modo habitual un espacio de funciones de test que se anulan en el contorno y un espacio de funciones de prueba que verifican las condiciones tipo Dirichlet en toda la frontera. Haciendo uso de la relación

$$w \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u)) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (w \mathbf{a}(\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u))) - (\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(w))(\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u)) \quad (6.3)$$

se puede comprobar que la forma débil de (6.2) es

$$\int_{\Omega} k \nabla_{\mathbf{x}}(w) \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) d\Omega + \int_{\Omega} w \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) d\Omega - \int_{\Omega} (\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(w)) \tau (\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u)) d\Omega = 0 \quad (6.4)$$

que se debe satisfacer para cualquier función  $w$  que pertenezca al espacio de las funciones de test. Por otra parte, la formulación *Streamline-upwind/Petrov-Galerkin* de la ecuación clásica de convección-difusión es

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} k \nabla_{\mathbf{x}}(w) \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) d\Omega + \int_{\Omega} w \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) d\Omega \\ & + \sum_{ielem=1}^{nelem} \int_{\Omega_{ielem}} (\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(w)) \tau_{SUPG} [\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (k \nabla_{\mathbf{x}}(u))] d\Omega_{ielem} = 0 \end{aligned} \quad (6.5)$$

donde la integral del último término se extiende sólo a los interiores de los elementos con el fin de que tenga sentido cuando se emplean elementos con continuidad  $\mathcal{C}^0$ . Además, en el caso de que se utilicen interpolantes lineales (lo más habitual para este método), la segunda derivada de este término integral se anula y la formulación en este caso se reduce a

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} k \nabla_{\mathbf{x}}(w) \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) d\Omega + \int_{\Omega} w \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) d\Omega \\ & + \sum_{ielem=1}^{nelem} \int_{\Omega_{ielem}} (\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(w)) \tau_{SUPG} (\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u)) d\Omega_{ielem} = 0 \end{aligned} \quad (6.6)$$

que es igual equivalente a la expresión (6.4) cuando  $\tau_{SUPG} = -\tau \mathbf{I}$ .

### 6.3. Líneas futuras de investigación

#### 6.3.1. Utilización de un método $p$ -multigrad para la integración temporal

Probablemente, el principal inconveniente del algoritmo presentado en el capítulo 5 es la necesidad de utilizar discretizaciones muy finas en la integración temporal debido a la

condición de estabilidad del método de Runge-Kutta utilizado. Una de las alternativas para resolver este problema se encuentra en la utilización de técnicas  $p$ -multigrid, recientemente desarrolladas para los métodos de *discontinuous Galerkin* [51, 95]. Mediante estas técnicas es posible acelerar de forma muy significativa la convergencia hacia la solución estacionaria.

### 6.3.2. Utilización de métodos implícitos para la integración temporal

Por los mismos motivos expresados en la sección 6.3.1 sería conveniente desarrollar una formulación implícita para la integración temporal.

### 6.3.3. Aplicación del modelo a problemas con convección no lineal

El primer caso a estudiar sería el problema homólogo de la ecuación de Burgers pero con un término difusivo gobernado por la ecuación de Cattaneo. Las ecuaciones unidimensionales que gobiernan este problema en forma no conservativa son:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad (6.7)$$

donde

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \\ \tau q \end{pmatrix}; \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} u & 1/\tau \\ k & u \end{pmatrix}; \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -q \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

Lamentablemente, no es posible escribir estas ecuaciones en forma conservativa utilizando el flujo  $\mathbf{F} = \mathbf{A}\mathbf{U}$ , por lo que el esquema numérico desarrollado en el capítulo anterior ya no es válido. Sin embargo, es posible escribir las ecuaciones en forma conservativa tal y como sigue:

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x} = \mathcal{S} \quad (6.9)$$

donde

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} u \\ \tau(q - \frac{u^2}{2}) \end{pmatrix}; \quad \mathcal{F} = \begin{pmatrix} q + \frac{u^2}{2} \\ ku - \frac{\tau}{3}u^3 \end{pmatrix}; \quad \mathcal{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -q \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

El inconveniente de esta formulación es que el vector  $\mathcal{F}$  no es una función homogénea de grado 1 en las variables conservadas, por lo que no es posible utilizar una técnica tipo *flux vector splitting*. En este caso necesario recurrir a técnicas de *flux difference splitting* computacionalmente más costosas.

Una vez se haya desarrollado un esquema numérico para la ecuación (6.9) sería interesante estudiar si el esquema numérico sigue capturando las discontinuidades en un único elemento.

### 6.3.4. Aplicación del modelo a problemas de flujo compresible

El problema consiste en encontrar la densidad  $\rho$ , la velocidad del fluido  $\mathbf{a}$ , la presión  $p$ , la energía  $E$ , la concentración de contaminante  $u$  y el flujo de contaminante  $\mathbf{q}$  tales que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{a}) = 0 \quad (6.11)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{a})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{a} \otimes \mathbf{a} + p \mathbf{I}) = 0 \quad (6.12)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot ((\rho E + p) \mathbf{a}) = 0 \quad (6.13)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho u \mathbf{a} + \mathbf{q}) = 0 \quad (6.14)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{q})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{q} \otimes \mathbf{a}) + \frac{k}{\tau} \rho^2 \nabla_{\mathbf{x}} (u) + \frac{1}{\tau} \rho \mathbf{q} = 0 \quad (6.15)$$

y se verifique la ecuación de estado

$$E = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)} + \frac{1}{2} \|\mathbf{a}\|^2 \quad \text{con} \quad \gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad (6.16)$$

### 6.3.5. Aplicación de ecuaciones hiperbólicas para calcular los flujos térmicos de las ecuaciones de Navier-Stokes

Otra línea de investigación que se deriva de la presente tesis doctoral es la aplicación de la ecuación de Cattaneo para calcular los flujos térmicos de la ecuación de la energía de las ecuaciones de Navier-Stokes. En primer lugar deben desarrollarse las ecuaciones del modelo matemático y seguidamente plantear una formulación numérica para la resolución de estas ecuaciones.

# Bibliografía

- [1] Abeliuk, R., Wheeler, H.S., Parameter identification of solute transport models for unsaturated soils, *Journal of Hydrology*, **117**:199–224, 1990.
- [2] Abgrall, R., Mezone, M., Construction of second order accurate monotone and stable residual distribution schemes for unsteady flow problems, *Journal of Computational Physics*, **188**:16–55, 2003.
- [3] Abgrall, R., Mezone, M., Construction of second-order accurate monotone and stable residual distribution schemes for steady problems, *Journal of Computational Physics*, **195**:474–507, 2004.
- [4] Alcrudo, F., Esquemas de alta resolución de variación total decreciente para el estudio de flujos discontinuos de superficie libre, Tesis Doctoral, Universidad de Zaragoza, 1992.
- [5] Arora, M., *Explicit characteristic-based high resolution algorithms for hyperbolic conservation laws with stiff source terms*, PhD Thesis, University of Michigan, 1996.
- [6] Baiocchi, C., Brezzi, F., Franca L., Virtual bubbles and the Galerkin-least-squares method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **105**(1):125–141, 1993.
- [7] Barth, T., An introduction to upwind finite volume and finite element methods: some unifying themes, *VKI Lecture Series 2005 on Higher Order Discretization Methods in CFD*, 2005.
- [8] Bassi, F., Rebay, S., A high-order accurate discontinuous finite element method for the numerical solution of the compressible Navier-Stokes equations, *Journal of Computational Physics*, **131**:267–279, 1997.
- [9] Baumann, C.E., Oden, J.T., A discontinuous *hp* finite element method for convection-diffusion problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **175**:311–341, 1999.

- [10] Baumann, C.E., Oden, J.T., A discontinuous *hp* finite element method for the Euler and the Navier-Stokes equations, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **31**:79–95, 1999.
- [11] Baumann, C.E., Oden, J.T., An adaptative-order discontinuous Galerkin method for the solution of the Euler equations of gas dynamics, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **47**:61–73, 2000.
- [12] Bear, J., *Dynamics of fluids in porous media*, Dover Publications, 1972.
- [13] Belytschko, T., Eldib, I., Analysis of a finite element upwind scheme, *in*, T.J.R. Hughes, ed., *Finite element methods for convection dominated flows*, AMD, **34**, Presented at the Winter Annual Meeting of the ASME, New York, 195–200, 1979.
- [14] Bencala, K.E., McKnight, D.M., Zellweger, G.W., Characterization of transport in an acidic and metal-rich mountain stream based on a lithium tracer injection and simulations of transient storage, *Water Resouces Research*, **26**(5):989–1000, 1990.
- [15] Berger, M.J., Olinger, J., Adaptative mesh refinement for hyperbolic partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, **53**:484–512, 1984.
- [16] Brezzi, F., Franca, L., Russo, A., Further considerations on residual-free bubbles for advective-diffusive equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **166**(1–2):25–33, 1998.
- [17] Brezzi, F., Manzini, G., Marini, D. Russo, A., Discontinuous Galerkin approximations for elliptic problems. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, **16**:365–378, 1999.
- [18] Brezzi, F., Marini, D., Russo, A., Application of the pseudo residual-free bubbles to the stabilization of convection-diffusion problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **166**:51–63, 1998.
- [19] Brooks, A., Hughes, T.J.R., Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **32**(1–3):199–259, 1982.
- [20] Castillo, P., Performance of discontinuous Galerkin methods for elliptic PDEs, *SIAM Journal of Scientific Computing*, **24**(2):524–547, 2002.

- [21] Castillo, P., Cockburn, B., Perugia, I., Schötzau, D., An a priori error analysis of the local discontinuous Galerkin method for elliptic problems, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **38**(5):1676–1706, 2000.
- [22] Cattaneo, M.C., Sulla conduzione de calore, *Atti del Semin. Mat. e Fis. Univ. Modena*, **3**:83–101, 1948.
- [23] Cattaneo, M.C., Sur une forme de l’equation de la chaleur éliminant le paradoxe d’une propagation instantanéé, *Comptes Rendus de L’Academie des Sciences: Series I-Mathematics*, **247**:431–433, 1958.
- [24] Chester, M., Second sound in solids, *Physical Review*, **131**:2013–2015, 1963.
- [25] Christie, I., Griffiths, D.F., Mitchell, A.R., Zienkiewicz, O.C., Finite element methods for second order differential equations with significant first derivatives, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **10**(6):1389–1396, 1976.
- [26] Christov, C.I., Jordan, P.M., Heat conduction paradox involving second-sound propagation in moving media, *Physical Review Letters*, **94**(15)4301-4304, 2005.
- [27] Cockburn, B., Devising discontinuous Galerkin methods for non-linear hyperbolic conservation laws, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **128**:187–204, 2001.
- [28] Cockburn, B., Discontinuous Galerkin methods, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **83**(11):731–754, 2003.
- [29] Cockburn, B., Kanschat, G., Schötzau, D., The local discontinuous Galerkin method for linearized incompressible fluid flow: a review, *Computers & Fluids*, **34**:491–506, 2005.
- [30] Cockburn, B., Karniadakis, G.E., Shu, C.-W., (Eds.), *Discontinuous Galerkin methods. Theory, computation and applications*, Springer, 1999.
- [31] Cockburn, B., Lin, S.-Y., Shu, C.-W., TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws III: one-dimensional systems, *Journal of Computational Physics*, **84**:90–113, 1989.
- [32] Cockburn, B., Shu, C.-W., TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws II: general framework, *Mathematics of Computation*, **52**:411–435, 1989.



- [33] Cockburn, B., Shu, C.-W., The Runge-Kutta discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws V: multidimensional systems, *Journal of Computational Physics*, **141**:199–224, 1998.
- [34] Cockburn, B., Shu, C.-W., The local discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems, *SIAM Journal of Numerical Analysis*, **35**(6):2440–2463, 1998.
- [35] Cockburn, B., Shu, C.-W., Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods for convection dominated flows, *Journal of Scientific Computing*, **16**(3):173–261, 2001.
- [36] Codina, R., A finite element formulation for the numerical solution of the convection-diffusion equation, Technical Report 14, International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 1993.
- [37] Coirier, W.L., *Simulation of steady viscous flow on an adaptively refined cartesian grid*, PhD Thesis, University of Michigan, 1994.
- [38] Courant, R., Friedrichs, K.O., *Supersonic flow and shock waves*, Springer Verlag, 1999.
- [39] Courant R., Hilbert D. *Methods of mathematical physics. Vol II.*, John Wiley & Sons, 1989.
- [40] Davis, G.D.V., Mallinson, G., An evaluation of upwind and central difference approximations by a study of recirculating flow, *Computers and Fluids*, **4**:29–43, 1976.
- [41] De Zeeuw, D., Powell, K.G., An adaptively-refined cartesian mesh solver for the Euler equations, *Journal of Computational Physics*, **104**:56–68, 1993.
- [42] Dolejší, V., Feistauer, M., Sobotíková, V., Analysis of the discontinuous Galerkin method for nonlinear convection–diffusion problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **194**:2709–2733, 2005.
- [43] Donea, J., A Taylor-Galerkin method for convective transport problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **20**:101-120, 1984.
- [44] Donea, J., Huerta, A., *Finite element methods for flow problems*, John Wiley & Sons, 2003.
- [45] Donea, J., Quartapelle, L., An introduction to finite element methods for transient advection problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **95**(2):169–203, 1992.

- [46] Donea, J., Quartapelle, L., Selmin, V., An analysis of time discretization in the finite element solution of hyperbolic problems, *Journal of Computational Physics*, **70**(2):463–499, 1987.
- [47] Donea, J., Roig, B., Huerta, A., High-order accurate time-stepping schemes for convection-diffusion problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **182**(3–4):249–275, 2000.
- [48] Eymard, R., Gallouët, T., Herbin, R., Finite volume approximation of elliptic problems and convergence of an approximate gradient, *Appl. Numer. Math.*, **37**(1-2):31–53, 2001.
- [49] Farhat, C., Harari, I., Franca, L., The discontinuous enrichment method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**(48):6455–6479, 2001.
- [50] Fick, A., Uber diffusion, *Poggendorff's Annalen der Physik und Chemie*, **94**:59–86, 1855.
- [51] Fidkowski, K.J., Oliver, T.A., Lu, J., Darmofal, D.L.,  $p$ -Multigrid solution of high-order discontinuous Galerkin discretizations of the compressible Navier–Stokes equations, *Journal of Computational Physics*, **207**:92–113, 2005.
- [52] Figueroa, C.A., Colominas, I., Iglesias, G., Navarrina, F., Casteleiro, M., Aplicación de una formulación numérica de elementos finitos para el estudio de problemas de transporte convectivo en zonas portuarias, *Proceedings del IV Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería* (CDROM), eds. R. Abascal, J. Domínguez, G. Bugada, Sevilla, España, 1999.
- [53] Figueroa, C.A., Colominas, I., Mosqueira, G., Navarrina, F., Casteleiro, M., A stabilized finite element approach for advective-diffusive transport problems, *Proceedings of the XX Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering* (CDROM), eds. P.M. Pimenta, R. Brasil, E. Almeida, São Paulo, Brasil, 1999.
- [54] Fourier, J., *Théorie Analytique de la Chaleur*, Jacques Gabay, 1822.
- [55] Franca, L., Nesliturk, A., Stynes, M., On the stability of residual-free bubbles for convection-diffusion problems and their approximation by a two-level finite element method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **166**(1–2):35–49, 1998.

- [56] Fürth, R., Die Brownsche Bewegung bei Berücksichtigung einer Persistenz der Bewegungsrichtung. Mit Anwendungen auf die Bewegung lebender Infusorien, *Z. Physik*, **2**:244–256, 1920.
- [57] Gascón, Ll., Corberán, J.M., Construction of second-order TVD schemes for nonhomogeneous hyperbolic conservation laws, *Journal of Computational Physics*, **172**:261–297, 2001.
- [58] Goldstein, S., On diffusion by discontinuous movements, and on the telegraph equation, *Q. Jl. Mech. Appl. Math.*, **4**:129–156, 1951.
- [59] Gombosi, T.I., Powell, K.G., De Zeeuw, D., Axisymmetric modeling of cometary mass loading on an adaptively refined grid: MHD results, *Journal of Geophysical Research*, **99**:21525–21539, 1994.
- [60] Gomes Dutra do Carmo, E., Benitez, G., A new stabilized finite element formulation for scalar convection–diffusion problems: the streamline and approximate upwind/Petrov–Galerkin method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **192**:3379–3396, 2003.
- [61] Gómez, H., Una nueva formulación para el problema del transporte por convección-difusión, Proyecto Técnico, Universidad de A Coruña, 2003.
- [62] Gómez, H., Colominas, I., Navarrina, F., Casteleiro, M., An alternative formulation for the advective-diffusive transport problem, *7<sup>th</sup> Congress on Computational Methods in Engineering*, eds. C.A. Mota Soares, A.L. Batista, G. Bugeda, M. Casteleiro, J.M. Goicolea, J.A.C. Martins, C.A.B. Pina, H.C. Rodrigues, Lisbon, Portugal, 2004.
- [63] Gómez, H., Colominas, I., Navarrina, F., Casteleiro, M., On the intrinsic instability of the advection–diffusion equation, *Proc. of the 4<sup>th</sup> European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (CDROM)*, eds. P. Neittaanmäki, T. Rossi, S. Korotov, E. Oñate, J. Périaux y D. Knörzer, Jyväskylä, Finland, 2004.
- [64] Gómez, H., Colominas, I., Navarrina, F., Casteleiro, M., A generalized method for advective-diffusive computations in engineering, *Fluid structure interaction and moving boundary problems*, S.K., Chakrabarti, S. Hernández, C.A. Brebbia (Eds.), 563–573, 2005.
- [65] Gottlieb, S., Shu, C.-W., Total variation diminishing Runge-Kutta schemes, *Mathematics of Computation*, **67**(221):73–85, 1998.

- [66] Griffiths, D.F., Mitchell, A.R., On generating upwind finite element methods, *in*, T.J.R. Hughes, ed., *Finite element methods for convection dominated flows*, AMD, **34**, Presented at the Winter Annual Meeting of the ASME, New York, 91–104, 1979.
- [67] Gresho, P.M., Lee, R.L., On the theory of semi-implicit projection methods for viscous incompressible flow and its implementation via a finite element method that also introduces a nearly consistent mass matrix. I. Theory, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **11**(5):587–620, 1976.
- [68] Gurtin, M.E., Pipkin, A.C., A General Theory of Heat Conduction with Finite Wave Speed, *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **31**:113–126, 1968.
- [69] Hartmann, R., Houston, P., Adaptive discontinuous Galerkin finite element methods for compressible Euler equations, *Journal of Computational Physics*, **183**(2):508–532, 2002.
- [70] Hartnett, M., Cawley, A.M., Mathematical modelling of the effects of marine aquaculture developments on certain water quality parameters, *Proceedings of First International Conference on Water Pollution: Modelling, Measuring and Prediction*, eds. L.C. Wrobel and C.A. Brebbia, 279–299, 1991.
- [71] Heinrich, J.C., Zienkiewicz, O.C., The finite element method and “upwinding” techniques in the numerical solution of convection dominated flow problems, *en*, T.J.R. Hughes, ed., *Finite element methods for convection dominated flows*, AMD, **34**, Presented at the Winter Annual Meeting of the ASME, New York, 105–136, 1979.
- [72] Hughes, T.J.R., A simple scheme for developing “upwind” finite elements, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **12**(9):1359–1365, 1978.
- [73] Hughes, T.J.R., Multiscale phenomena: Green’s functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of the stabilized methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **127**(1–4):387–401, 1995.
- [74] Hughes, T.J.R., *The finite element method. Linear static and dynamic finite element analysis*, Dover Publications, 2000.
- [75] Hughes, T.J.R., Brooks, A., A theoretical framework for Petrov-Galerkin methods with discontinuous weighting functions: application to the streamline-upwind procedure, *in*, R.H. Gallagher, D.H. Norrie, J.T. Oden and O.C. Zienkiewicz, eds, *Finite Elements in Fluids*, **4**, Selected papers for the Third International Conference on Finite Elements in

- Flow Problems, Banff, Alberta, Canada, June 10–13, John Wiley & Sons, New York, 47–65, 1982.
- [76] Hughes, T.J.R., Brooks, A., A multidimensional upwind scheme with no crosswind diffusion, *in*, T.J.R. Hughes, ed., *Finite element methods for convection dominated flows*, AMD, **34**, Presented at the Winter Annual Meeting of the ASME, New York, 19–35, 1979.
- [77] Hughes, T.J.R., Feijóo, G.R., Mazzei, L., Quincy, J.B., The variational multiscale method - a paradigm for computational mechanics, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **166**(1–2):3–24, 1998.
- [78] Hughes, T.J.R., Franca, L.P., Hulbert, G.M., A new finite element formulation for computational fluid dynamics. VIII. The Galerkin/least-squares method for advective-diffusive equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **73**(2):173–189, 1989.
- [79] Isaacson, E., Keller, H.B., *Analysis of numerical methods*, John Wiley & Sons, 1966.
- [80] Jameson, A., Solution of the Euler equations for two dimensional transonic flow by a multigrid method, *Applied Mathematics and Computation*, **13**:327–355, 1983.
- [81] Johnson, C., Finite element methods for convection-diffusion problems, *in*, R. Glowinski and J.L. Lions, eds., *Computing methods in applied sciences and engineering*, 1982.
- [82] Johnson, C., Nävert, U., Pitkäranta, J., Finite element methods for linear hyperbolic equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **45**(1–3):285–312, 1984.
- [83] Joseph, D.D., Preziosi, L., Heat waves, *Reviews of Modern Physics*, **61**(1):41–73, 1989.
- [84] Joseph, D.D., Preziosi, L., Addendum to the paper “Heat waves”, *Reviews of Modern Physics*, **62**(2):375–391, 1990.
- [85] Kaliski, S., Wave equation for heat conduction, *Bull. Acad. Pol. Sci.* XIII, **4**:211–219, 1965.
- [86] Kelly, D.W., Nakazawa, S., Zienkiewicz, O.C., Heinrich, J.C., A note on upwinding and anisotropic balancing dissipation finite element approximations to convective diffusion problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **15**:1705–1711, 1980.

- [87] Kohno, H., Bathe, K.J., Insight into the flow-condition-based interpolation finite element approach: solution of steady-state advection–diffusion problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **63**:197–217, 2005.
- [88] Kopteva, N., How accurate is the streamline-diffusion FEM inside characteristic (boundary and interior) layers?, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**:4875–4889, 2004.
- [89] Landau, L., The theory of superfluidity of helium II, *J. Phys.*, **5**:71–90, 1941.
- [90] Lax, P.D., *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*, SIAM, Philadelphia, 1973.
- [91] Leonard, B.P., A survey of finite differences of opinion on numerical muddling of the incomprehensible defective convection equation, in, T.J.R. Hughes, ed., *Finite element methods for convection dominated flows*, AMD, **34**, Presented at the Winter Annual Meeting of the ASME, New York, 1–17, 1979.
- [92] Heinrich, J.C., Huyakorn, P.S., Zienkiewicz, O.C., Mitchell, A.R., An “upwind” finite element scheme for two-dimensional convective transport equation, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **11**(1):131–143, 1977.
- [93] LeVeque, R.J., *Finite volume methods for hyperbolic problems*, Cambridge University Press, 2002.
- [94] Lowrie, R.B., Morel, J.E., Discontinuous Galerkin for hyperbolic systems with stiff relaxation. En *Discontinuous Galerkin methods. Theory, computation and applications*, Cockburn, B., Karniadakis, G.E., Shu, C.-W., (Eds.), 1999.
- [95] Luo, H., Baum, J.D., Löhner, R., A  $p$ -multigrid discontinuous Galerkin method for the Euler equations on unstructured grids, *Journal of Computational Physics*, **211**:767–783, 2006.
- [96] Maceiras, V., Utilización de métodos estocásticos en el seguimiento (análisis Lagrangiano) de partículas contaminantes. Estudio de la inestabilidad de la ecuación de difusión-convección, Proyecto Técnico, Universidad de A Coruña, 2000.
- [97] Manzari, M.T., Manzari, M.T., On numerical solution of hyperbolic heat equation, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, **15**:853–866, 1999.

- [98] Navarrina, F., Colominas, I., Casteleiro, M., Cueto-Felgueroso, L., Gómez, H., Fe, J., Soage, A., A numerical model for high impact environmental areas: analysis of hydrodynamic and transport phenomena at the Arosa Ria, *Proceedings of the 8<sup>th</sup> Congress on Moving Boundary Problems*, A Coruña, 2005.
- [99] Nävert, U., *A finite element method for convection-diffusion problems*, PhD Thesis, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 1982.
- [100] Neumann, J. von, Richtmyer, R.D., A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks, *Journal of Applied Physics*, **21**:232–237, 1950.
- [101] Ni, R.-H., A multiple grid scheme for solving the Euler equations, *AIAA Journal*, **20**:1565:1571, 1981.
- [102] Oñate, E., Derivation of stabilized equations for numerical solution of advective-diffusive transport and fluid flow problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **151**(1–2):233–265, 1998.
- [103] Onsager, L., Reciprocal relations in irreversible processes. I, *Physical Review*, **37**:405–426, 1931.
- [104] Özisik, M.N., Tzou, D.Y., On the wave theory in heat conduction, *ASME J. Heat Transf.*, **116**:526–535, 1994.
- [105] Palaniapan, J., Haber, R.B., Jerrard, R.L., A spacetime discontinuous Galerkin method for scalar conservation laws, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**:3607–3631, 2004.
- [106] Patyn, J., Ledoux, E., Bonne, A., Geohydrological research in relation to radioactive waste disposal in an argillaceous formation, *Journal of Hydrology*, **109**(3–4):267–285, 1989.
- [107] Peraire, J., *A finite element method for convection dominated flows*, PhD Thesis, University of Wales, 1986.
- [108] Peraire, J., Zienkiewicz, O.C., Morgan, K., Shallow water problems: A general explicit formulation, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **22**:547–574, 1986.
- [109] Peshkov, V., Second sound in helium II, *J. Phys.*, **8**:381–386, 1944.

- [110] Quirk, J.J., A contribution to the great Riemann solver debate, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **18**:555–574, 1994.
- [111] Reed, W. H., Hill, T. R. Triangular mesh methods for the neutron transport equation, Technical Report LA-UR-73-479, Los Alamos Scientific Laboratory, 1973.
- [112] Ricchiuto, M., Csík, A., Deconinck, H., Residual distribution for general time-dependent conservation laws, *Journal of Computational Physics*, **209**:249–289, 2005.
- [113] Roe, P.L., Fluctuations and signals, a framework for numerical evolution problems, *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, 219–257, 1982.
- [114] Roe, P.L., Linear advection schemes on triangular meshes, CoA Report 8720, Cranfield Institute of Technology, 1987.
- [115] Rudgyard, M., Cell-vertex methods for steady inviscid flow. En *VKI LS 1993-04, Computational Fluid Mechanics*, 1993.
- [116] Sarrate, J., Huerta, A., Efficient unstructured quadrilateral mesh generation, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **49**:1327–1350, 2000.
- [117] Savenije, H.H.G., Salt intrusion model for high-water slack, low-water slack, and mean tide on spread sheet, *Journal of Hydrology*, **107**:9–18, 1989.
- [118] Schlichting, H., Boundary layer theory, McGraw Hill, 1968.
- [119] Selmin, V., Third-order finite element schemes for the solution of hyperbolic problems, Technical Report 707, The French National Institute for Research in Computer Science and Control (INRIA), 1987.
- [120] Sermeus, K., Deconinck, H., An entropy fix for multi-dimensional upwind residual distribution schemes, *Computers & Fluids*, **34**:617–640, 2005.
- [121] Sherwin, S.J., Kirby, R.M., Peiró, J., Taylor, R.L., Zienkiewicz, O.C., On 2D elliptic discontinuous Galerkin methods, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **65**:752–784, 2006.
- [122] Shu, C.-W., Osher, S., Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, *Journal of Computational Physics*, **77**:439-471, 1988.
- [123] Slattery, J.C., *Advanced transport phenomena*, Cambridge University Press, 1999.



- [124] Strouboulis, T., Babuška, I., Copps, K., The design and analysis of the generalized finite element method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **181**(1–3):43–69, 2000.
- [125] Taylor, G.I., Diffusion by continuous movements, *Proc. Lond.Math. Soc.* **20**(2):196–212, 1921.
- [126] Tu, S., Aliabadi, S., A slope limiting procedure in discontinuous Galerkin finite element method for gasdynamics applications, *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, **2**(2):163–178, 2005.
- [127] Uhlenbeck, G.E., Ornstein, L.S., *On the theory of brownian motion*, *Phys. Rev.*, **36**:823–841, 1930.
- [128] Vegt, J. van der, Ven, H. van der, Space-time discontinuous Galerkin finite element method with dynamic grid motion for inviscid compressible flows, I. General formulation, *Journal of Computational Physics*, **182**:546–585, 2002.
- [129] Vernotte, P., Les paradoxes de la théorie continue de l'équation de la chaleur, *Comptes Rendus De L'Académie des Sciences: Series I-Mathematics*, **246**:3154-3155, 1958.
- [130] Warming, R.F., Hyett, R., The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite difference method, *Journal of Computational Physics*, **14**:159–179, 1974.
- [131] Wesseling, P., *Principles of computational fluid dynamics*, Springer, 2000.
- [132] Whitham, G.B., *Linear and nonlinear waves*, John Wiley & Sons, 1999.
- [133] Zauderer, E., *Partial differential equations of applied mathematics*, John Wiley & Sons, 1989.
- [134] Zhang, M., Shu, C.-W., An analysis of three different formulations of the discontinuous Galerkin methods for diffusion equations, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, **13**(3):395–413, 2003.
- [135] Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L., *The finite element method. Volume 3: Fluid Dynamics*, Butterworth-Heinemann, 2000.