

Un nuevo enfoque para el tratamiento de los términos difusivos de la ecuación de convección-difusión en el método de Galerkin discontinuo

H. Gómez, I. Colominas, F. Navarrina y M. Casteleiro

Grupo de Métodos Numéricos en Ingeniería, GMNI
Departamento de Métodos Matemáticos y de Representación
E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos, Universidad de A Coruña
Campus de Elviña, 15192 A Coruña, España
Tel.: 34 981 167 000; Fax: 34 981 167 170; e-mail:icolominas@udc.es

Resumen

Los modelos utilizados en la práctica para problemas de convección-difusión están habitualmente basados en la ley de Fick. En ciertas aplicaciones el uso de la ley de Fick lineal puede ser adecuado, a pesar de predecir velocidades de propagación infinitas. Sin embargo, en muchas otras aplicaciones es necesario el uso de modelos con velocidad finita de propagación¹. A lo largo de la historia se han propuesto varios modelos que intentan solventar este inconveniente y, sin duda, el modelo lineal más aceptado entre la comunidad científica es el propuesto por vez primera por Cattaneo en 1948^{2,3}.

El modelo de Cattaneo fue desarrollado para problemas de difusión pura. Sin embargo, en aplicaciones prácticas de ingeniería el transporte se produce conjuntamente por convección y por difusión. Por ello los autores han propuesto recientemente una generalización del modelo de Cattaneo aplicable a problemas convectivo-difusivos que da lugar a un modelo de ecuaciones hiperbólicas⁴.

Por otra parte, en el marco de los métodos de Galerkin discontinuo, la discretización de los términos difusivos es compleja y requiere la utilización de métodos híbridos. Sin embargo, el método de Galerkin discontinuo es más adecuado para la discretización del modelo hiperbólico de convección-difusión propuesto por los autores. Por ello, en este artículo se presenta una formulación de Galerkin discontinuo para el modelo hiperbólico de convección-difusión y se compara con el modelo parabólico discretizado mediante métodos de Galerkin discontinuo.

Palabras clave: *convección-difusión, ley de Cattaneo, hiperbólico, Galerkin discontinuo, velocidad infinita*

A NEW APPROACH FOR THE TREATMENT OF DIFFUSIVE TERMS OF THE CONVECTIVE-DIFFUSIVE TRANSPORT EQUATION IN THE DISCONTINUOUS GALERKIN METHOD

Summary

The models that are being used to solve convection-diffusion problems in engineering are normally based on Fick's law. In some applications the use of linear Fick's law is accurate enough in spite of predicting an infinite speed of propagation. However, there are many other applications where a model that predicts a finite speed of propagation is mandatory¹. A number of models have been proposed so far to eliminate the infinite speed paradox. The linear model that has been most commonly accepted by scientist and engineers is the one proposed initially by Cattaneo in 1948^{2,3}.

Cattaneo's law was originally proposed for pure-diffusive problems. However, in the context of most engineering applications it is important to consider both, diffusion and convection, phenomena since neither of these transport processes can be ignored. For this reason, the authors have recently proposed a generalization of Cattaneo's law that can be used in convective-diffusive problems. This constitutive equation, together with the mass conservation equation, leads to a hyperbolic model for convection-diffusion⁴.

On the other hand, in the framework of the discontinuous Galerkin methods, the discretization of the diffusive terms is by no means trivial and the use of hybrid methods is standard. However, the discontinuous Galerkin method is more appropriate for the discretization of the hyperbolic model. For this reason, we present herein a discontinuous Galerkin scheme for the hyperbolic convection-diffusion model. The numerical results are compared with those of the parabolic model solved by discontinuous Galerkin methods for parabolic problems.

Keywords: *convection-diffusion, Cattaneo's law, hyperbolic models, DGM, infinite velocity*

INTRODUCCIÓN

El método de Galerkin discontinuo (*Discontinuous Galerkin Method, DGM*) es normalmente atribuido a Reed y Hill⁵ 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 Galerkin discontinuo 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 método de Runge-Kutta/Galerkin discontinuo^{6,7,8,9,10}.

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 mallas muy distorsionadas y la posibilidad de paralelizar los cálculos obteniendo eficiencias muy altas. 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 (al menos en las zonas en las que la solución es suficientemente regular) para así beneficiarse de la convergencia espectral que se produce al aumentar el orden del polinomio interpolador¹¹. Estas son algunas de las causas del gran desarrollo de los métodos de Galerkin discontinuo en los últimos años.

La característica principal del método de Galerkin discontinuo es que la solución numérica puede ser discontinua en las caras de los elementos 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 Lax¹².

Al contrario que los métodos de elementos finitos continuos, el método de Galerkin discontinuo fue desarrollado en primer lugar para ecuaciones hiperbólicas. Esta técnica es muy adecuada para la discretización de problemas hiperbólicos, pero su extensión a problemas elípticos o parabólicos no es en absoluto trivial. Desde hace algunos años, se ha producido una intensa investigación en la extensión de los métodos de Galerkin discontinuo 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 Galerkin discontinuo a la discretización de los términos viscosos de las ecuaciones de Navier-Stokes fue llevado a cabo por Bassi y Rebay en 1997¹³. A este estudio le siguió el artículo de Cockburn y Shu¹⁴ en el que se introdujo el método de Galerkin discontinuo local (LDG) que es una generalización del método de Bassi-Rebay (BR). En general, en cualquier método de Galerkin discontinuo, para discretizar una ecuación de segundo orden es necesario descomponerla en un sistema equivalente de primer orden, de modo que la función incógnita y sus derivadas son tratadas como variables independientes. Los resultados obtenidos 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^{15,16,17,18,19}. Sin embargo, son necesarias todavía mejoras considerables en la aplicación de este método a problemas elípticos y parabólicos.

El modelo hiperbólico de convección-difusión propuesto por los autores en⁴ y basado en

la ley de Cattaneo se establece en términos de un sistema acoplado de 2 ecuaciones diferenciales en las que la concentración y el flujo de contaminante son las incógnitas. Este sistema de ecuaciones es totalmente hiperbólico, por lo que su discretización por el método de Galerkin discontinuo es muy eficiente, al no ser necesario discretizar ningún término de segundo orden. Este hecho constituye una ventaja del modelo de convección-difusión hiperbólico frente al modelo parabólico. En este artículo se comparan ambos modelos analizando su idoneidad para ser discretizados en el espacio por el método de Galerkin discontinuo.

El resto del artículo está organizado del siguiente modo: en el segundo apartado se revisa la formulación parabólica del problema de convección-difusión (se incluye también un término reactivo para generalizar la exposición). En el siguiente se presenta y revisa el modelo hiperbólico propuesto por los autores en⁴. Los apartados cuarto y quinto están dedicados a la discretización por el método de Galerkin discontinuo de los modelos de convección-difusión parabólico e hiperbólico respectivamente. Estos apartados se encuentran complementados con el siguiente en el que se analizan diferentes aspectos computacionales. En el séptimo apartado se presentan y discuten varios ejemplos numéricos utilizando ambas formulaciones. El apartado siguiente está dedicado al análisis de un ejemplo práctico en ingeniería. El ejemplo consiste en el estudio de la evolución de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. En este caso se estudia, además, la influencia en la solución de un término reactivo lineal.

FORMULACIÓN CLÁSICA DEL PROBLEMA DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN-REACCIÓN

Para obtener las ecuaciones que gobiernan el problema 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 proporcionan los niveles de contaminación. Por tanto, supondremos conocido el campo de velocidades, teniendo presente que debe verificar las ecuaciones de la hidrodinámica. Además, se asumirá 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 y suponiendo válida la ley de Fick, las ecuaciones que gobiernan el problema de convección-difusión-reacción son:

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

$$\mathbf{q} = -\mathbf{D}\nabla_{\mathbf{x}}(u) \quad (1.2)$$

donde (1.1) es la ecuación de conservación de masa de contaminante y (1.2) es la ecuación de Fick (ecuación constitutiva). En las ecuaciones anteriores u es la concentración de contaminante, $r(u)$ es un término reactivo, \mathbf{a} es el vector velocidad, \mathbf{q} es el flujo difusivo de contaminante por unidad de densidad de fluido y \mathbf{D} es el tensor de difusividad (se asume que es definido positivo). El sistema de ecuaciones (1) se puede desacoplar ya que es posible introducir (1.2) en (1.1) y resolver la ecuación escalar

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{D}\nabla_{\mathbf{x}}(u)) = r(u) \quad (2)$$

Por último, introduciremos la hipótesis de que el medio es homogéneo e isótropo (por tanto $\mathbf{D} = D\mathbf{I}$). Teniendo presente lo anterior, consideremos el transporte por convección-difusión-reacción en un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ con un contorno regular. Denotamos Γ a este contorno y \mathbf{n} a su normal exterior unitaria. Supongamos que el contorno está compuesto

por una parte Γ_D no vacía en la que se prescribe el valor de u (condición tipo Dirichlet) y una parte complementaria Γ_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} , dada la difusividad D y dadas las convenientes condiciones iniciales y de contorno, hallar $u: \Omega \times [0, T] \mapsto \mathbb{R}$ tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) - D\Delta_{\mathbf{x}}(u) = r(u) \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \quad (3.1)$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) \quad \text{en } \Omega \quad (3.2)$$

$$u = u_D \quad \text{en } \Gamma_D \times (0, T] \quad (3.3)$$

$$D\nabla_{\mathbf{x}}(u) \cdot \mathbf{n} = h \quad \text{en } \Gamma_N \times (0, T] \quad (3.4)$$

El problema (3) es un problema bien planteado en el sentido de Hadamard, pero se puede probar (ver ²⁰ ó ²¹ para una demostración) que predice velocidades de propagación infinitas.

UN MODELO HIPERBÓLICO PARA EL PROBLEMA DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN-REACCIÓN

Ecuaciones fundamentales

El modelo más comúnmente aceptado para describir la difusión lineal evitando la paradoja del transporte de masa a velocidad infinita es el propuesto por Cattaneo. La ley de Cattaneo se puede escribir como:

$$\mathbf{q} + \tau \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = -D\nabla_{\mathbf{x}}(u) \quad (4)$$

donde τ se denomina tensor de relajación y sus componentes tienen dimensiones de tiempo. La ley de Cattaneo fue propuesta para problemas de difusión pura y no se puede utilizar en su forma original para problemas de convección-difusión. Sin embargo, en las aplicaciones en ingeniería el transporte se produce conjuntamente por convección y por difusión. Por esta razón, los autores han propuesto recientemente la siguiente generalización de la ley de Cattaneo (ver ²² o la referencia posterior ²³)

$$\mathbf{q} + \tau \left(\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{q}) \mathbf{a} \right) = -D\nabla_{\mathbf{x}}(u) \quad (5)$$

Por tanto, la formulación completa del problema del transporte por convección-difusión-reacción en un medio incompresible y utilizando un modelo de transporte con velocidad de propagación finita es la siguiente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(u) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{q}) = r(u) \quad (6.1)$$

$$\mathbf{q} + \tau \left(\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{q}) \mathbf{a} \right) = -D\nabla_{\mathbf{x}}(u) \quad (6.2)$$

donde (6.1) es la ecuación de conservación de masa de contaminante y (6.2) 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 (6.2) se recuperan las ecuaciones clásicas.

Como se demostrará a continuación, el sistema (6) es totalmente hiperbólico. Además, en el caso de difusión pura ($\mathbf{a} = 0$) y bajo las hipótesis de homogeneidad e isotropía ($\tau = \tau \mathbf{I}$,

$\mathbf{D} = D\mathbf{I}$) el sistema (6) se puede escribir como una ecuación hiperbólica con carácter dispersivo (relación de dispersión no lineal) donde la velocidad máxima de propagación de las perturbaciones viene dada por ²⁰:

$$c = \sqrt{D/\tau} \quad (7)$$

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

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 (6) se puede escribir (bajo la hipótesis de que el medio es homogéneo e isótropo y, por tanto, $\tau = \tau\mathbf{I}$, $\mathbf{D} = D\mathbf{I}$) del siguiente modo:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = \mathbf{S} \quad (8)$$

donde

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u \\ \tau q_1 \\ \tau q_2 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} ua_1 + q_1 & ua_2 + q_2 \\ \tau q_1 a_1 + Du & \tau q_1 a_2 \\ \tau q_2 a_1 & \tau q_2 a_2 + Du \end{pmatrix}; \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} r(u) \\ -q_1 \\ -q_2 \end{pmatrix} \quad (9)$$

Para establecer las propiedades básicas de la ecuación (8) es necesario escribirla en forma no conservativa. De este modo, si denominamos \mathbf{F}_i a la columna i -ésima de la matriz \mathbf{F} , definimos las matrices jacobianas \mathbf{A}_1 , \mathbf{A}_2 como

$$\mathbf{A}_1 = \nabla_{\mathbf{U}}(\mathbf{F}_1) = \begin{pmatrix} a_1 & 1/\tau & 0 \\ D & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & a_1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{A}_2 = \nabla_{\mathbf{U}}(\mathbf{F}_2) = \begin{pmatrix} a_2 & 0 & 1/\tau \\ 0 & a_2 & 0 \\ D & 0 & a_2 \end{pmatrix} \quad (10)$$

e introducimos la hipermatriz $\mathbf{A}^T = (\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2)$, la ecuación (8) se puede reescribir como

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{A} \cdot \nabla_{\mathbf{x}})\mathbf{U} = \mathbf{S} \quad (11)$$

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 (11) es totalmente hiperbólico si la ecuación

$$\det(\omega\mathbf{I} - \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\kappa}) = 0 \quad (12)$$

tiene tres soluciones reales diferentes ω para valores arbitrariamente prescritos de $\boldsymbol{\kappa}$ ²⁴. Es fácil probar que las soluciones de (12) son

$$\omega_1 = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (13a)$$

$$\omega_2 = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\kappa} - c \quad (13b)$$

$$\omega_3 = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\kappa} + c \quad (13c)$$

Y, por tanto, (8) es un sistema totalmente hiperbólico. Además, las soluciones de (12) 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,

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & c & c \\ \kappa_2 & -D\kappa_1 & D\kappa_1 \\ -\kappa_1 & -D\kappa_2 & D\kappa_2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

En consecuencia, sea $\mathbf{\Lambda}$ 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

$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\kappa} = \mathbf{C} \mathbf{\Lambda} \mathbf{C}^{-1} \quad (15)$$

Es importante notar que, aunque las matrices \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_2 son diagonalizables, el sistema (8) no lo es, ya que \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_2 son diagonalizables en diferentes bases. En consecuencia, los cuasi-invariantes de Riemann²⁴ no se pueden definir en 2D.

En este punto, es útil definir el número adimensional

$$H = \frac{\|\mathbf{a}\|}{c} \quad (16)$$

que es el homólogo del número de Mach²⁵ en problemas de flujo compresible o del número de Froude²⁶ en flujos con superficie libre. La definición (16) 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 (8) no es trivial y una elección inadecuada puede provocar que la solución no exista o que no sea única. 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 Γ^{in} para el contorno de entrada de flujo (aquel que verifica $\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} < 0$) y Γ^{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 ²⁴), 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. Procediendo de este modo, se encuentran tres velocidades de propagación diferentes:

$$\omega_1 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} \quad (17a)$$

$$\omega_2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} - c \quad (17b)$$

$$\omega_3 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} + c \quad (17c)$$

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 (17). 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 (8). Por tanto, el problema bidimensional del transporte por convección-difusión-reacción formulado con la ley de Cattaneo, se puede plantear como sigue: dados D , $\tau > 0$, 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

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{F}) = \mathbf{S} \quad \text{en } \Omega \times (0, T) \quad (18a)$$

$$\mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_0(x) \quad \text{en } \Omega \quad (18b)$$

$$\mathbf{U}^{\text{in}} = \mathbf{U}_D^{\text{in}} \quad \text{en } \Gamma_D \times (0, T] \quad (18c)$$

$$\mathbf{F}^{\text{in}} \mathbf{n} = \mathbf{F}_N \quad \text{en } \Gamma_N \times (0, T] \quad (18d)$$

siendo \mathbf{F} y \mathbf{S} los vectores definidos en (9), \mathbf{U}^{in} las componentes entrantes de \mathbf{U} y \mathbf{F}^{in} las componentes entrantes de la matriz de flujo.

EL MÉTODO DE GALERKIN DISCONTINUO PARA EL MODELO PARABÓLICO DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN-REACCIÓN

Como se ha dicho anteriormente, para aplicar el método de Galerkin discontinuo a la ecuación de convección-difusión-reacción es necesario obtener la forma débil a partir del sistema (1) (en general para aplicar el método de Galerkin discontinuo a una ecuación de segundo orden es necesario escribirla como un sistema mayor de primer orden).

Sea K un subconjunto de Ω con contorno regular ∂K . Si denotamos \mathbf{n}_K a su normal unitaria exterior, la forma débil de (1) se escribe como:

$$\int_K v \frac{\partial u}{\partial t} d\mathbf{x} = \int_K u \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(v) d\mathbf{x} + \int_K \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(v) d\mathbf{x} + \int_K vr(u) d\mathbf{x} - \int_{\partial K} v u \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_K d\mathbf{x} - \int_{\partial K} v \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_K d\mathbf{x} \quad (19.1)$$

$$\int_K \mathbf{w} \cdot \mathbf{q} d\mathbf{x} = \int_K u D \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{w}) d\mathbf{x} - \int_{\partial K} u D \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_K d\mathbf{x} \quad (19.2)$$

A continuación procedemos a utilizar el método de Galerkin discontinuo. Sea $\Omega_h = \{K\}$ una partición de Ω . Definimos los *espacios rotos* $\mathcal{V}(\Omega_h)$ y $\Sigma(\Omega_h)$ como los espacios de funciones cuya restricción a cada elemento K pertenece a los espacios de Sobolev $H^1(K)$ y $(H^1(K))^2$. De este modo

$$\mathcal{V} = \{v \in \mathcal{L}^2(\Omega) : v|_K \in H^1(K), \forall K \in \Omega_h\} \quad (20a)$$

$$\Sigma = \{\mathbf{w} \in (\mathcal{L}^2(\Omega))^2 : \mathbf{w}|_K \in (H^1(K))^2, \forall K \in \Omega_h\} \quad (20b)$$

A continuación introducimos los subespacios de elementos finitos $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ y $\Sigma_h \subset \Sigma$

$$\mathcal{V}_h = \{v \in \mathcal{L}^2(\Omega) : v|_K \in \mathcal{P}^m(K), \forall K \in \Omega_h\} \quad (21a)$$

$$\Sigma_h = \{\mathbf{w} \in (\mathcal{L}^2(\Omega))^2 : \mathbf{w}|_K \in (\mathcal{P}^m(K))^2, \forall K \in \Omega_h\} \quad (21b)$$

En la expresión anterior $\mathcal{P}^m(K)$ es el espacio de polinomios de grado menor o igual que m . Nótese que los espacios discretos \mathcal{V}_h y Σ_h no implican continuidad \mathcal{C}^0 de la solución y que, en general, m puede ser diferente en cada elemento.

Teniendo presente lo anterior, el problema se reduce a obtener $u_h \in \mathcal{V}_h$, $\mathbf{q}_h \in \Sigma_h$ tales que:

$$\int_K v \frac{\partial u_h}{\partial t} d\mathbf{x} = \int_K u_h \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(v) d\mathbf{x} + \int_K \mathbf{q}_h \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(v) d\mathbf{x} + \int_K vr(u_h) d\mathbf{x} - \sum_{e \subset \partial K} \int_e v \mathbf{h}_c^{u,e} \cdot \mathbf{n}_K d\mathbf{x} - \sum_{e \subset \partial K} \int_e v \mathbf{h}_d^{q,e} \cdot \mathbf{n}_K d\mathbf{x} \quad \forall v \in \mathcal{V}_h, \forall K \in \Omega_h \quad (22.1)$$

$$\int_K \mathbf{w} \cdot \mathbf{q}_h d\mathbf{x} = \int_K u_h D\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{w}) d\mathbf{x} - \sum_{e \subset \partial K} \int_e h_d^{u,e} D\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_K \quad \forall \mathbf{w} \in \Sigma_h, \forall K \in \Omega_h \quad (22.2)$$

donde las sumas recorren las caras e del elemento K y los flujos numéricos $\mathbf{h}_c^{u,e}$, $\mathbf{h}_d^{q,e}$, $h_d^{u,e}$ son aproximaciones de $\mathbf{a}u|_e$, $\mathbf{q}|_e$ y $u|_e$ respectivamente. La elección del flujo numérico convectivo $\mathbf{h}_c^{u,e}$ es trivial, ya simplemente se toma una de las funciones *upwind* estándar del método de volúmenes finitos. Por contra, la elección de los flujos numéricos difusivos ($\mathbf{h}_d^{q,e}$ y $h_d^{u,e}$) es crucial para la estabilidad y la precisión del esquema, así como para los dominios de dependencia del método que determinarán la eficiencia de una eventual paralelización. Para definir los flujos numéricos difusivos seguiremos a Arnold *et al*²⁷. Sea de nuevo e una cara compartida por los elementos K_1 y K_2 y sean \mathbf{n}_1 y \mathbf{n}_2 las normales exteriores a K_1 y K_2 respectivamente. Sea v una función definida en $K_1 \cup K_2$ posiblemente discontinua sobre e . Definimos $v_i = (v|_{K_i})|_e$, $i = 1, 2$. Para una función escalar v se define

$$\{v\} = \frac{1}{2}(v_1 + v_2), \quad \llbracket v \rrbracket = v_1 \mathbf{n}_1 + v_2 \mathbf{n}_2 \quad (23)$$

y para una función vectorial \mathbf{w}

$$\{\mathbf{w}\} = \frac{1}{2}(\mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_2), \quad \llbracket \mathbf{w} \rrbracket = \mathbf{w}_1 \cdot \mathbf{n}_1 + \mathbf{w}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \quad (24)$$

Con la notación anterior los flujos numéricos se escriben como:

$$h_d^{u,e} = \{u_h\} + \gamma^e \cdot \llbracket u_h \rrbracket \quad (25)$$

$$\mathbf{h}_d^{q,e} = \{\mathbf{q}_h\} - \boldsymbol{\alpha}^e (\llbracket u_h \rrbracket) + \boldsymbol{\beta}^e \llbracket \mathbf{q}_h \rrbracket \quad (26)$$

En las expresiones anteriores $\boldsymbol{\beta}^e$ y γ^e son funciones vectoriales definidas en e . A menudo son constantes y, de hecho, para varios métodos ambas son nulas. En el caso más sencillo el término $\boldsymbol{\alpha}^e (\llbracket u_h \rrbracket)$ se calcula como

$$\boldsymbol{\alpha}^e (\llbracket u_h \rrbracket) = \eta^e \llbracket u_h \rrbracket \quad (27)$$

siendo η^e una constante. En este artículo se analizarán el método de Bassi-Rebay y el método de Galerkin discontinuo local. El primero de los métodos se obtiene tomando $\gamma^e = \boldsymbol{\beta}^e = 0$ y $\eta^e = 0$. Para obtener el método de Galerkin discontinuo local se eligen $\gamma^e = -\boldsymbol{\beta}^e$ con

$$\boldsymbol{\beta}^e = \frac{1}{2}(S_{12}\mathbf{n}_1 + S_{21}\mathbf{n}_2) \quad (28)$$

donde $S_{12}, S_{21} \in \{0, 1\}$ y verifican la relación $S_{12} + S_{21} = 1$. Para la constante η^e se toma un valor positivo. Los ejemplos que se presentan en este artículo se han resuelto tomando el valor $\eta^e = 1$.

EL MÉTODO DE GALERKIN DISCONTINUO PARA EL MODELO HIPERBÓLICO DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN-REACCIÓN

Para obtener la forma débil de (8) procederemos del mismo modo que en la sección. Si K es un subconjunto de Ω con contorno regular ∂K y normal exterior unitaria \mathbf{n}_K , la forma débil de (8) resulta:

$$\int_K \mathbf{w} \cdot \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\mathbf{x} - \int_K \mathbf{F} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{w}) d\mathbf{x} + \int_{\partial K} \mathbf{w} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{x} = \int_K \mathbf{w} \cdot \mathbf{S} d\mathbf{x} \quad (29)$$

Consideremos de nuevo la partición Ω_h y sea \mathcal{W} el espacio roto

$$\mathcal{W} = \{\mathbf{w} \in (\mathcal{L}^2(\Omega))^3 : \mathbf{w}|_K \in (H^1(K))^3, \forall K \in \Omega_h\} \quad (30)$$

Denominamos \mathcal{W}_h a su espacio discreto asociado

$$\mathcal{W}_h = \{\mathbf{w} \in (\mathcal{L}^2(\Omega))^3 : \mathbf{w}|_K \in (\mathcal{P}^m(K))^3, \forall K \in \Omega_h\} \quad (31)$$

El problema se reduce, por tanto, a obtener $\mathbf{U}_h \in \mathcal{W}_h$, tal que

$$\int_K \mathbf{w} \cdot \frac{\partial \mathbf{U}_h}{\partial t} d\mathbf{x} - \int_K \mathbf{F}_h \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{w}) d\mathbf{x} + \sum_{e \subset \partial K} \int_e \mathbf{w} \cdot \mathbf{H}_C^{U,e} d\mathbf{x} = \int_K \mathbf{w} \cdot \mathbf{S}_h d\mathbf{x} \quad \forall \mathbf{w} \in \mathcal{W}_h, \forall K \in \Omega_h \quad (32)$$

siendo $\mathbf{H}_C^{U,e}$ un flujo numérico convectivo *upwind*. Para determinar el flujo numérico $\mathbf{H}_C^{U,e}$ supongamos que la cara e es compartida por los elementos K_1 y K_2 donde $K_1 = K$. Con esta notación el flujo numérico se puede escribir como

$$\mathbf{H}_C^{U,e} = \mathbf{A}_+^e \mathbf{U}_1^e + \mathbf{A}_-^e \mathbf{U}_2^e \quad (33)$$

donde las matrices \mathbf{A}_+^e y \mathbf{A}_-^e vienen definidas por

$$\mathbf{A}_\pm^e \mathbf{C}^e = \mathbf{C}^e \mathbf{\Lambda}_\pm^e \quad (34)$$

donde

$$\mathbf{\Lambda}_\pm^e = \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} \pm |\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}|}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} - c \pm |\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} - c|}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} + c \pm |\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} + c|}{2} \end{pmatrix} \quad (35)$$

La matriz \mathbf{C} ha sido definida en (14) para una dirección arbitraria $\boldsymbol{\kappa}$.

OTROS ASPECTOS COMPUTACIONALES

Integración numérica

La integración numérica se lleva a cabo en todos los casos mediante cuadraturas de Gauss-Legendre. En todos los ejemplos se utilizarán elementos Lagrangianos bicuadráticos, por lo que para la integración numérica se emplearán 3 puntos de integración en cada dirección. Para las integrales de línea se utilizan también 3 puntos para cada cara.

Integración temporal

Tanto para el modelo parabólico como para el modelo hiperbólico, ensamblando todas las contribuciones elementales, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que gobierna la evolución temporal de las ecuaciones discretas. Este sistema se puede escribir en ambos casos como

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{R}(\mathbf{U}) \quad (36)$$

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. 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 ²⁸). Sin embargo, en este trabajo 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.

El sistema semidiscreto (36) se puede integrar utilizando el método TVD-Runge-Kutta de tercer orden propuesto por Shu y Osher²⁹. 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

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{(1)} &= \mathbf{U}^n + \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^n) \\ \mathbf{U}^{(2)} &= \frac{3}{4} \mathbf{U}^n + \frac{1}{4} \mathbf{U}^{(1)} + \frac{1}{4} \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^{(1)}) \\ \mathbf{U}^{n+1} &= \frac{1}{3} \mathbf{U}^n + \frac{2}{3} \mathbf{U}^{(2)} + \frac{2}{3} \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{U}^{(2)}) \end{aligned} \quad (37a)$$

En las ecuaciones anteriores el operador $\mathbf{L}(\cdot)$ representa la derivada temporal del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (36), 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.

Condiciones de contorno

Los métodos de Galerkin discontinuo permiten la imposición de las condiciones de contorno tipo Dirichlet en forma débil. En la bibliografía es muy habitual que las condiciones de contorno se impongan de forma débil tanto en los contornos de salida de flujo como en los contornos de entrada de flujo. Muchos autores consideran la imposición de las condiciones de contorno en forma débil más eficiente en los contornos de salida de flujo³⁰, ya que de este modo se evitan las oscilaciones que se obtienen al intentar resolver numéricamente una capa límite. Sin embargo, la imposición en forma débil de las condiciones Dirichlet en los contornos de entrada de flujo no ofrece ventajas claras³¹. En este artículo todas las condiciones de contorno se imponen de forma fuerte ya que no se aprecian inestabilidades significativas en ninguno de los contornos.

EJEMPLOS NUMÉRICOS. COMPARACIÓN DE LOS MODELOS PARABÓLICO E HIPERBÓLICO

A continuación se resolverán varios de los problemas clásicos de convección-difusión utilizando tanto el modelo hiperbólico como el modelo parabólico. En ninguno de los ejemplos de esta sección se considerarán términos reactivos.

Convección oblicua a la malla

El planteamiento del problema se presenta en la Figura 1. El problema se resuelve en el dominio cuadrado $[0, 1] \times [0, 1]$. Sobre este dominio se define una malla regular 20×20 elementos Lagrangianos bicuadráticos, por lo que la longitud de las caras de los elementos es $h = 0,05$. En consecuencia, el número de Peclet elemental es $P_e = \|\mathbf{a}\|h/(2D) = 25000$. Se resolverá el problema para $\alpha = \pi/4$ (ver Figura 1). Para el modelo hiperbólico se deben

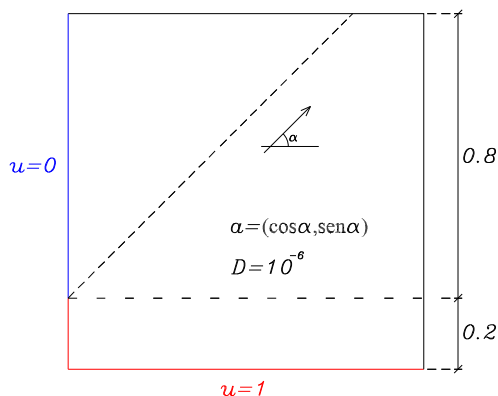


Figura 1. Convección oblicua a la malla. Planteamiento del problema. $D = 10^{-6}$, $\mathbf{a} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$. Para el modelo hiperbólico se toma $\tau = 1$.

prescribir todas la incógnitas en el contorno de entrada de flujo, mientras que no se debe imponer ninguna condición en el contorno de salida de flujo. En el contorno de entrada de flujo se ha impuesto la condición $\mathbf{q} = 0$ junto con la condición discontinua de concentraciones que se encuentra dibujada en la Figura 1. Para el modelo parabólico es necesario imponer una condición de contorno en todos los puntos de la frontera del dominio. En el contorno de salida de flujo se ha impuesto la condición $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$, mientras que en el contorno de entrada de flujo se prescribe la misma condición discontinua de concentraciones que se ha impuesto para el modelo hiperbólico. Las soluciones estacionarias utilizando los métodos de Bassi-Rebay, Galerkin discontinuo local y el modelo hiperbólico se encuentran en la Figura 2. Como se puede observar, las soluciones numéricas son prácticamente iguales. Esto se debe

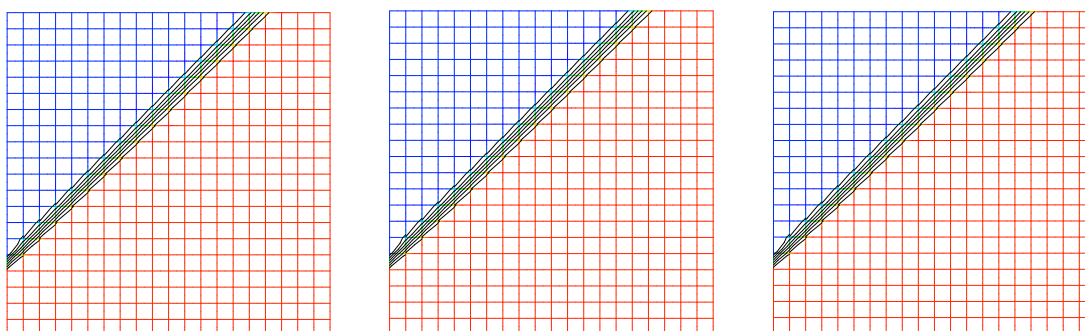


Figura 2. Convección oblicua a la malla. Solución estacionaria. Bassi-Rebay (izquierda), LDG (centro) y modelo hiperbólico (derecha). $D = 10^{-6}$, $\mathbf{a} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$, $\alpha = \pi/4$. Para el modelo hiperbólico se toma $\tau = 1$

a la condición de contorno que se ha impuesto para el modelo parabólico en el contorno de salida de flujo. Si se impusiese para el modelo parabólico una condición tipo Dirichlet en el contorno de salida de flujo la solución numérica del modelo hiperbólico sería claramente más precisa que las soluciones del modelo parabólico.

Convección de un senoide en una rotación pura

En esta sección se resuelve un problema de flujo circular alrededor del centro del dominio cuadrado $[-1, 1] \times [-1, 1]$. Este es un test clásico de precisión de un método numérico (ver, por ejemplo, ³²). El planteamiento del problema se encuentra en la Figura 3. El campo de velocidades viene dado por la expresión $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$. La difusividad es $D = 10^{-6}$ y para el modelo hiperbólico se toma un tiempo de relajación $\tau = 1$. Por tanto, el problema está claramente dominado por la convección. Utilizaremos una malla regular de 30×30 elementos Lagrangianos bicuadráticos, por lo que el número de Peclet elemental es $P_e \approx 23570,22$.

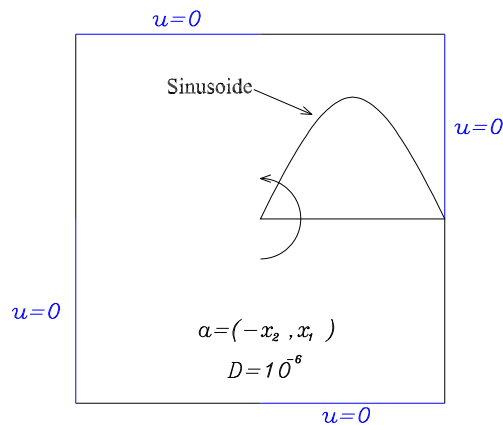


Figura 3. Convección de un senoide en una rotación pura. Planteamiento del problema. $D = 10^{-6}$, $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$. Para el modelo hiperbólico se toma $\tau = 1$.

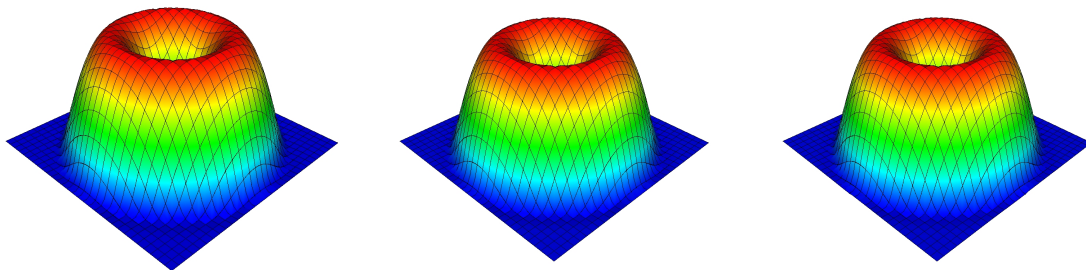


Figura 4. Convección de un senoide en una rotación pura. Solución estacionaria. Bassi-Rebay (izquierda), LDG (centro) y modelo hiperbólico (derecha). $D = 10^{-6}$, $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$. Para el modelo hiperbólico se toma $\tau = 1$.

En cuanto a las condiciones de contorno, para el modelo parábólico se impone la condición $u = 0$ en todo el contorno y en el segmento $x_2 = 0$, $0 \leq x_1 \leq 1$ se impone $u(x_1, 0) = \text{sen}(\pi x_1)$. Para el modelo hiperbólico 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 3. La solución exacta es esencialmente una convección pura de esta condición de contorno a lo largo de las líneas de corriente. En la Figura 4 se representan las soluciones estacionarias utilizando el modelo parábólico y los métodos de Bassi-Rebay y de Galerkin discontinuo local y el modelo hiperbólico y el método de Galerkin discontinuo

propuesto. En la Figura 5 se dibujan las soluciones en $x_2 = 0$. Todas las soluciones son muy precisas y no existe difusión apreciable fuera de las líneas de corriente.

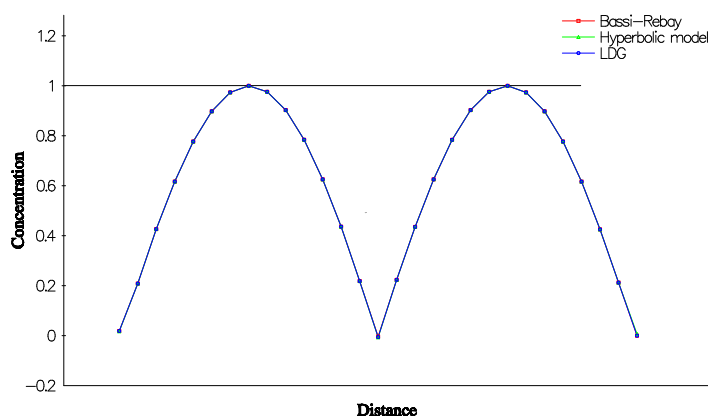


Figura 5. Convección de un senoide en una rotación pura. Solución estacionaria en $x_2 = 0$. Bassi-Rebay (rojo), LDG (azul) y modelo hiperbólico (verde). $D = 10^{-6}$, $\mathbf{a} = (-x_2, x_1)$. Para el modelo hiperbólico se toma $\tau = 1$.

UN EJEMPLO DE APLICACIÓN PRÁCTICA: VERTIDO DE UN CONTAMINANTE EN EL PUERTO DE A CORUÑA

En esta sección se simulará la evolución de un vertido accidental en el puerto de A Coruña³³. El dominio del problema será la zona del espejo de agua del puerto, según se puede apreciar en las Figuras 6 y 7. Se simulará la evolución de un vertido en la zona de los pantalanos 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 el esquema de la Figura 8 (izquierda). 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 8.

Como se puede apreciar en esta figura se han introducido algunas modificaciones respecto al dominio real representado en la Figura 7. 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 pantalanos del muelle de petroleros

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



Figura 6. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Fotografía digital de la zona.

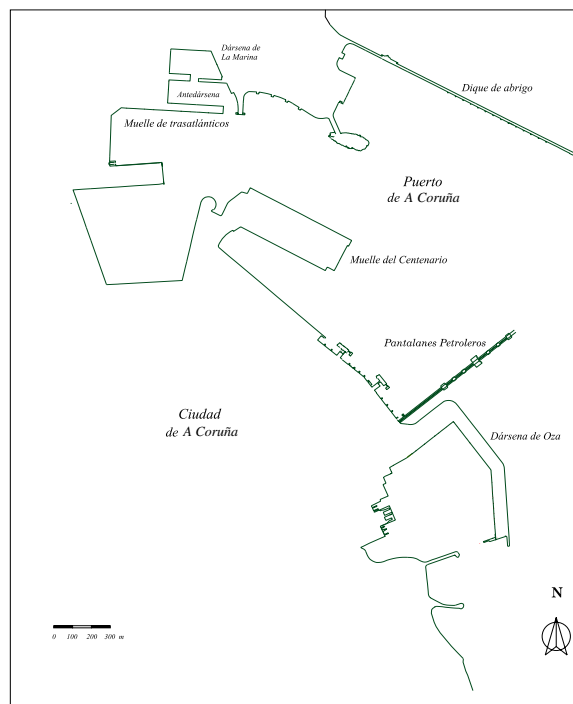


Figura 7. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Esquema en planta del puerto.

También en la Figura 8 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 8 muestra el campo de velocidades utilizado para este problema. El flujo está caracterizado por un valor máximo del número H [ver la definición en (16)] que viene dado por $H_{\text{máx}} = 0,3237$, por lo que estamos en condiciones de flujo subcrítico en todo el dominio. El tiempo se mide mediante la variable adimensional $t^* = t/\tau$.

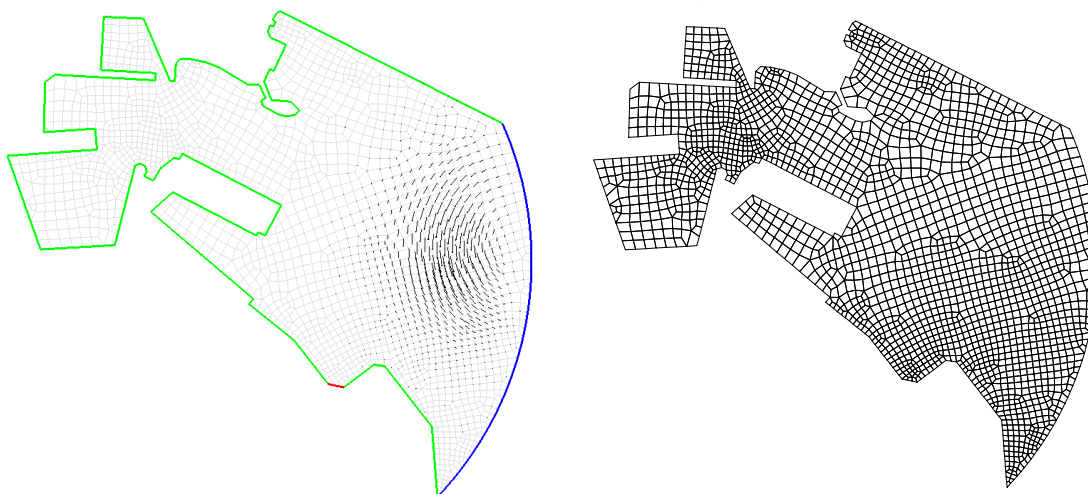


Figura 8. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Campo de velocidades y tipos de contornos (izquierda) y malla de elementos finitos (derecha). En la parte izquierda de la figura el contorno tipo pared se ha coloreado en verde; el contorno donde se produce el vertido en rojo; y el contorno de mar abierto se encuentra dibujado en azul. La malla de cálculo consta de 2023 elementos Lagrangianos bicuadráticos y ha sido generada con el código GEN4U³⁴.

Transporte por convección-difusión

En primer lugar se ha resuelto el problema sin tener en cuenta ningún término reactivo. De este modo se pretende ver los efectos del vertido en el caso más desfavorable posible. En las Figuras 9–10 se muestra la condición inicial de concentraciones y las soluciones de concentraciones para $t^* = 25$, $t^* = 50$, $t^* = 75$, $t^* = 100$, $t^* = 150$, $t^* = 200$ y $t^* = 400$.

Transporte por convección-difusión-reacción

En esta sección se analiza la influencia en la solución de un término reactivo lineal del tipo $r(u) = -\lambda u$, $\lambda > 0$. La inclusión de este tipo de términos reactivos es muy importante desde el punto de vista práctico, ya que uno de los métodos paliativos que se utilizan en situaciones de vertidos marinos consiste en forzar reacciones químicas para que el contaminante se extienda lo menos posible. La intensidad de la reacción con respecto a la convección

viene dada por el número de Damköhler, esto es,

$$D_a = \frac{\lambda h}{\|\mathbf{a}\|} \quad (38)$$

donde h es una longitud característica de la malla³⁵. El número de Damköhler mínimo para el problema que se ha resuelto es $D_a \approx 3,942 \cdot 10^{-2}$. En la Figura 11 se comparan las soluciones estacionarias con término reactivo y sin término reactivo. Se puede observar que los efectos del vertido son mucho menores cuando se considera el término reactivo.

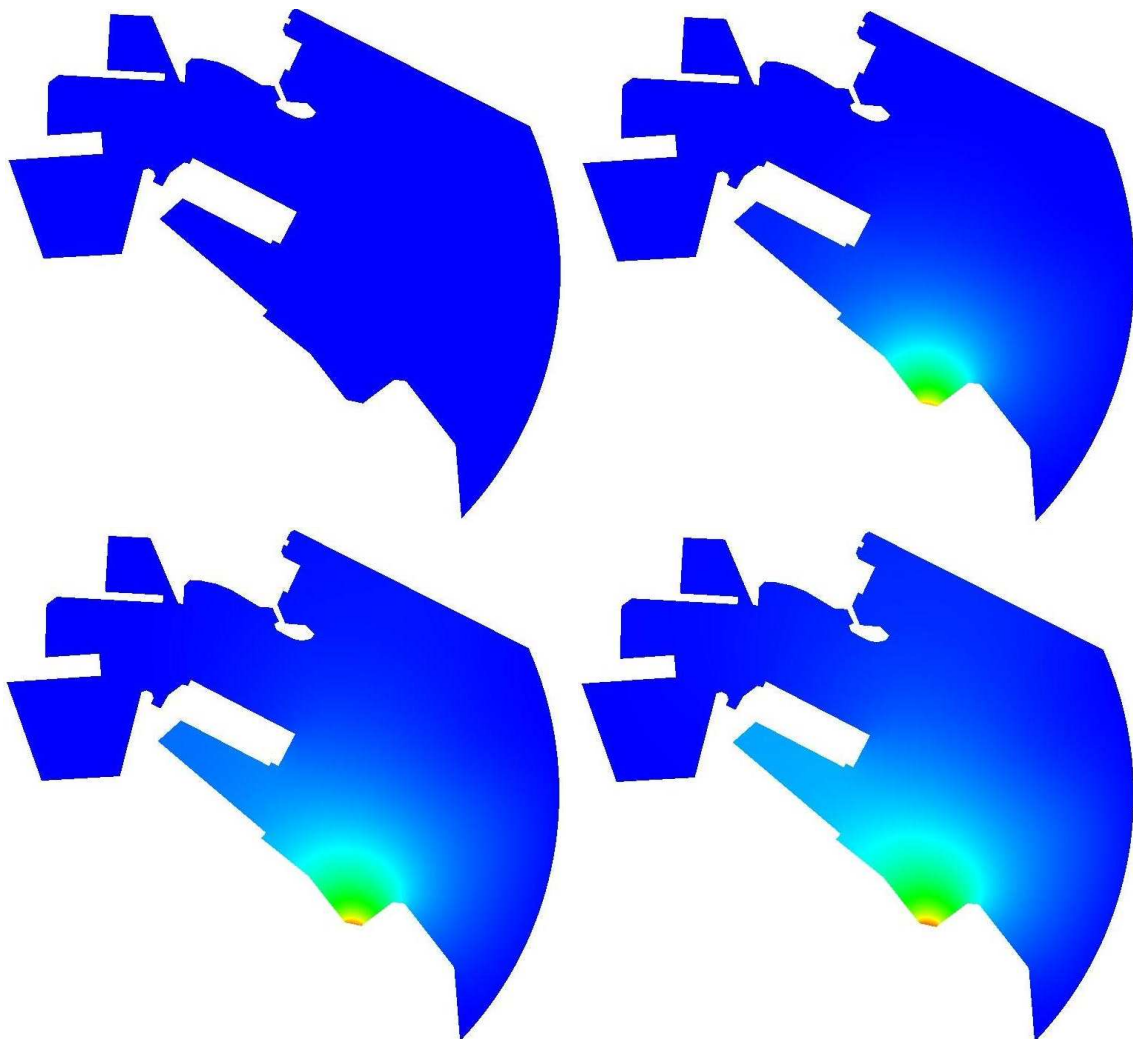


Figura 9. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Se presentan (de izquierda a derecha y de arriba a abajo) la condición inicial de concentraciones y las soluciones de concentración para los tiempos adimensionales $t^* = 25$, $t^* = 50$ y $t^* = 75$.

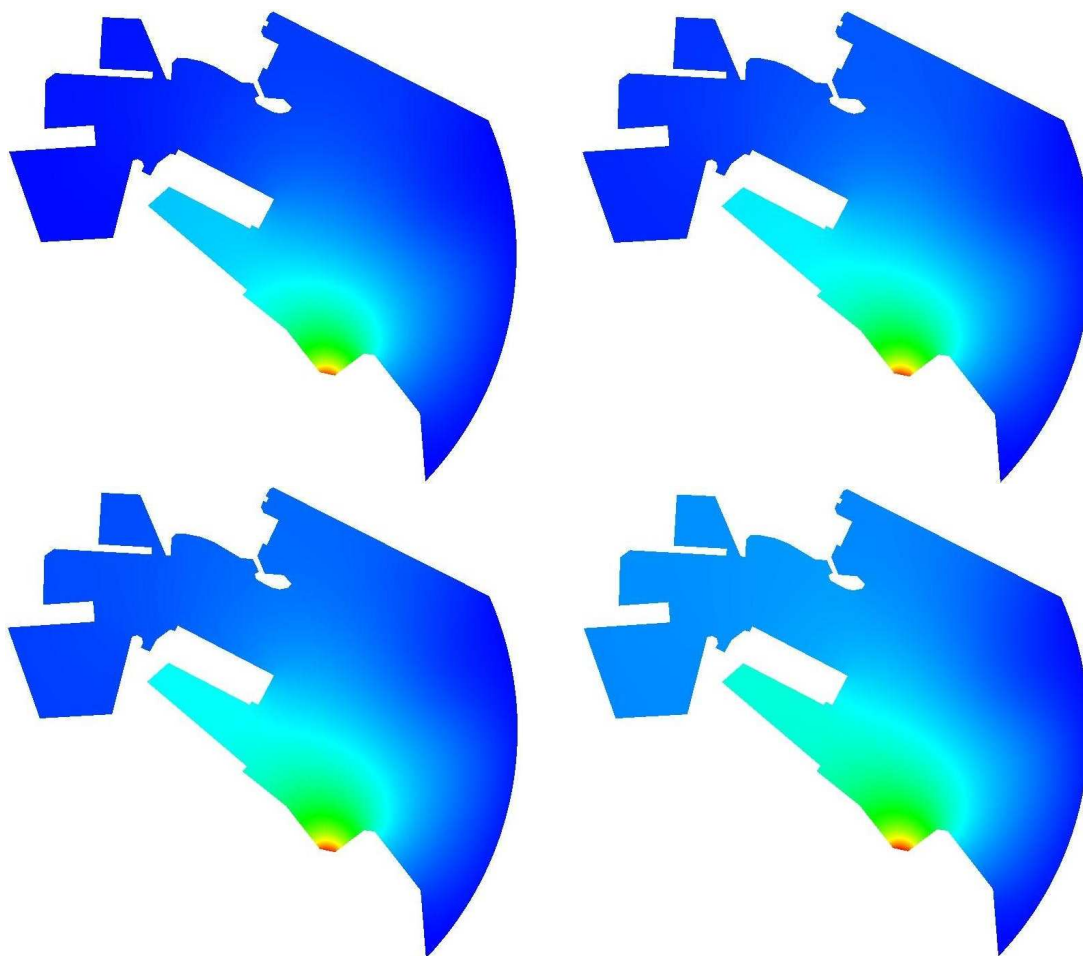


Figura 10. Simulación de un vertido accidental en el puerto de A Coruña. Se presentan (de izquierda a derecha y de arriba a abajo) las soluciones de concentración para los tiempos adimensionales $t^* = 100$, $t^* = 150$, $t^* = 200$ y $t^* = 400$.

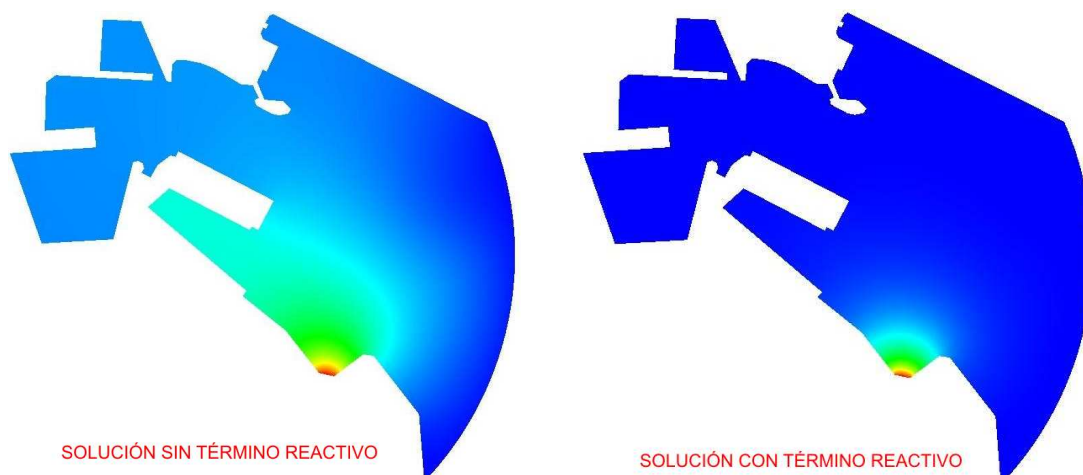


Figura 11. Comparación de las soluciones estacionarias con y sin término reactivo

CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS DE DESARROLLO

En este artículo se ha presentado un nuevo enfoque para el tratamiento de los términos difusivos de la ecuación de convección-difusión en el método de Galerkin discontinuo. El procedimiento está basado en la utilización de un modelo hiperbólico para el problema de convección-difusión que ha sido recientemente propuesto por los autores. Este modelo tiene, con respecto al modelo parabólico, la ventaja de que predice una velocidad finita de propagación para el contaminante. Además, el modelo propuesto puede ser discretizado de forma muy eficiente mediante el método de Galerkin discontinuo ya que se puede escribir como un sistema de ecuaciones en forma conservativa.

Desde el punto de vista numérico, la metodología de cálculo presentada (modelo matemático hiperbólico junto con el método de Galerkin discontinuo propuesto) compete (tanto en coste computacional como en calidad de resultados) con el empleo del modelo parabólico junto con la utilización de los modelos de Galerkin discontinuo más avanzados, como son los métodos de Bassi-Rebay y Galerkin discontinuo local.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la *Subdirección Xeral de I+D de la Xunta de Galicia* (Proyectos PGIDIT05PXIC118002PN y PGDIT06TAM11801PR), el Ministerio de Educación y Ciencia (Proyectos DPI2004-05156 y DPI2006-15275), la Universidad de A Coruña y la Fundación de la Ingeniería Civil de Galicia.

REFERENCIAS

- 1 A. Compte, "The generalized Cattaneo equation for the description of anomalous transport processes", *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. **30**, pp. 7277–7289, (1997).
- 2 M.C. Cattaneo, "Sulla conduzione de calore", *Atti del Semin. Mat. e Fis. Univ. Modena*, Vol. **3**, pp. 83–101, (1948).
- 3 M.C. Cattaneo, "Sur une forme de l'équation de la chaleur éliminant le paradoxe d'une propagation instantané", *Comptes Rendus de L'Academie des Sciences: Series I-Mathematics*, Vol. **247**, pp.431–433, (1958).
- 4 H. Gómez, I. Colominas, F. Navarrina, M. Casteleiro, "A finite element formulation for a convection-diffusion equation based on Cattaneo's law", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. **196**, pp.1757-1766, (2007).
- 5 W.H. Reed, T.R. Hill, "Triangular mesh methods for the neutron transport equation", Technical Report LA-UR-73-479, Los Alamos Scientific Laboratory, (1973).
- 6 B. Cockburn, G.E. Karniadakis, C-W. Shu, (Eds.), "*Discontinuous Galerkin methods. Theory, computation and applications*", Springer, (1999).
- 7 B. Cockburn, S-Y. Lin, C-W. Shu, "TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws III: one-dimensional systems", *Journal of Computational Physics*, Vol. **84**, pp. 90–113, (1989).
- 8 B. Cockburn, . Shu, "TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws II: general framework", *Mathematics of Computation*, Vol. **52**, pp. 411–435, (1989).
- 9 B. Cockburn B, C-W. Shu, "The Runge-Kutta discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws V: multidimensional systems", *Journal of Computational Physics*, Vol. **141**, pp. 199–224, (1998).

- 10 B. Cockburn, C-W. Shu, “Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods for convection dominated flows”, *Journal of Scientific Computing*, Vol. **16**, N° 3, pp. 173–261, (2001).
- 11 T. Barth, “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).
- 12 P.D. Lax, “*Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*”, SIAM, Philadelphia, (1973).
- 13 F. Bassi, S. Rebay, “A high-order accurate discontinuous finite element method for the numerical solution of the compressible Navier-Stokes equations”, *Journal of Computational Physics*, Vol. **131**, pp. 267–279, (1997).
- 14 B. Cockburn, C-W. Shu, “The local discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems”, *SIAM Journal of Numerical Analysis*, Vol. **35**, N° 6, pp. 2440–2463, (1998).
- 15 C.E. Baumann, J.T. Oden, “A discontinuous *hp* finite element method for convection-diffusion problems”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. **175**, pp. 311–341, (1999).
- 16 C.E. Baumann, J.T. Oden, “A discontinuous *hp* finite element method for the Euler and the Navier-Stokes equations”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. **31**, pp. 79–95, (1999).
- 17 P. Castillo, “Performance of discontinuous Galerkin methods for elliptic PDEs”, *SIAM Journal of Scientific Computing*, Vol. **24**, N° 2, pp. 524–547, (2002).
- 18 P. Castillo, B. Cockburn, I. Perugia, D. Schötzau, “An a priori error analysis of the local discontinuous Galerkin method for elliptic problems”, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. **38**, N° 5, pp. 1676–1706, (2000).
- 19 S.J. Sherwin, R.M. Kirby, J. Peiró, R.L. Taylor, O.C. Zienkiewicz, “On 2D elliptic discontinuous Galerkin methods”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **65**, pp. 752–784, (2006).
- 20 H. Gómez, “Una formulación hiperbólica para el problema de convección-difusión en mecánica de fluidos computacional”, Tesis Doctoral, Universidad de A Coruña, <http://www.tesisenred.net>, (2006).
- 21 S. Antontsev, J.I. Díaz, S. Shmarev, “*Energy methods for free boundary problems. Applications to nonlinear PDEs and Fluid Mechanics*”, Series Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications, No. 48, Birkäuser, (2002).
- 22 Gómez H, “Una nueva formulación para el problema del transporte por convección-difusión”, Proyecto Técnico, Universidad de A Coruña, (2003).
- 23 C.I. Christov, P.M. Jordan, “Heat conduction paradox involving second-sound propagation in moving media”, *Physical Review Letters*, Vol. **94**, N° 15, pp. 4301–4304, (2005).
- 24 R. Courant, D. Hilbert, “*Methods of mathematical physics. Vol II.*”, John Wiley & Sons, (1989).
- 25 R. Courant, K.O. Friedrichs, “*Supersonic flow and shock waves*”, Springer Verlag, (1999).
- 26 G.B. Whitham, “*Linear and nonlinear waves*”, John Wiley & Sons, (1999).
- 27 D.N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn, L.D. Marini, “Unified Analysis of Discontinuous Galerkin Methods for Elliptic Problems”, *SIAM Journal Numerical Analysis*, Vol. **39**, pp.1749–1779, (2002).
- 28 H. Luo, J.D. Baum, R. Löhner, “A *p*-multigrid discontinuous Galerkin method for the Euler equations on unstructured grids”, *Journal of Computational Physics*, Vol. **211**, pp. 767–783, (2006).

- 29 C-W. Shu, S. Osher, “Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes”, *Journal of Computational Physics*, Vol. **77**, pp. 439-471, (1988).
- 30 Y. Bazilevs, T.J.R. Hughes, “Weak imposition of Dirichlet boundary conditions in fluid mechanics”, *Computers & Fluids*, Vol. **36**, N° 1, pp. 12-26, (2007).
- 31 T.J.R. Hughes, G. Scovazzi, P.B. Bochev, A. Buffa, “A multiscale discontinuous Galerkin method with the computational structure of a continuous Galerkin method”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. **195**, pp. 2761-2787, (2006).
- 32 A. Brooks, T.J.R. Hughes, “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*, Vol. **32**, N° (1-3), pp. 199-259, (1982).
- 33 C.A. Figueroa, I. Colominas, G. Mosqueira, F. Navarrina, M. Casteleiro, “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).
- 34 J. Sarrate, A. Huerta, “Efficient unstructured quadrilateral mesh generation”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **49**, pp. 1327-1350, (2000).
- 35 G. Hauke, “A simple subgrid scale stabilized method for the advection-diffusion-reaction equation”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **191**, pp. 2925-2947, (2002).