



UNIVERSITAT POLITÈCNICA
DE CATALUNYA
BARCELONATECH

Programa de Doctorado en ANÁLISIS ESTRUCTURAL

**APROXIMACIÓN DEL TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN
AGUAS SOMERAS MEDIANTE ELEMENTOS FINITOS DE ALTO
ORDEN**

Tesis Doctoral realizada por:

Angel Patricio Villota Cadena

Dirigida por:

Dr. Ramon Codina Rovira

Escola Tècnica Superior d'Enginyers de Camins, Canals i Ports de Barcelona

Departament d'Enginyeria Civil i Ambiental

Marzo 2020

*Dedicado a mi esposa Luisa Elena,
a mis hijos: Cristina, Paulina y David,
a mis yernos: Andrés y Diego,
y a mi nieta Elena.*

RESUMEN

El objetivo de la tesis doctoral es realizar la aproximación numérica de la ecuación vectorial transitoria de convección-difusión-reacción (CDR) en 2D con elementos finitos de alto orden, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden, mediante métodos de elementos finitos estabilizados del tipo VMS (Variational Multi-Scale) como el ASGS y OSS, probados en los últimos años para resolver la ecuación vectorial transitoria de CDR cuando existe el fenómeno de convección o reacción dominantes y agravado por la no linealidad sea del término convectivo o del término de reacción.

El método estándar de elementos finitos de Galerkin aplicado a la ecuación escalar transitoria de CDR presenta inestabilidades en la solución cuando los términos convectivo y de reacción son dominantes frente al término difusivo. Esta dificultad la resolvemos por dos métodos de elementos finitos basados en subescalas, estos son los conocidos métodos llamados ASGS (Algebraic Sub-Grid Scale) y OSS (Orthogonal Subscale Stabilization), que fundamentalmente consisten en descomponer la variable escalar continua desconocida en dos componentes, una que es resuelta en el espacio de los elementos finitos y otra que no puede ser capturada por la malla de elementos finitos y por lo tanto pertenece a otro espacio de funciones que lo llamamos espacio de subescalas. Precisamente, la elección del espacio de subescalas es el que impone la diferencia entre los métodos ASGS y OSS.

Experimentaremos con el parámetro de estabilización sugerido en la literatura para elementos lineales, realizando una ampliación del mismo parámetro para tomar en cuenta el orden de interpolación para tratar con elementos finitos de alto orden. Igualmente, en el cálculo de la subescala con elementos triangulares de cuarto orden para el método OSS hemos propuesto la modificación del elemento triangular estándar y con el fin de tener una regla de integración cerrada con los puntos de integración en los nodos. En cuanto a la discretización temporal y espacial, primero discretizamos en el tiempo, y luego para cada instante de tiempo hacemos la aproximación y estabilización espacial incluyendo en dicha estabilización la derivada temporal.

También presentamos la aproximación y estabilización de la ecuación vectorial transitoria de CDR para la solución de problemas con más de una variable. Igual que en el caso escalar, el método estándar de Galerkin presenta inestabilidades

cuando el término difusivo es pequeño en relación con los términos convectivo y de reacción, y que en algunos problemas puede estar agravado por la no linealidad de dichos términos. El considerar igual interpolación para todas las variables, el diseño de la matriz diagonal de parámetros de estabilización, la determinación del espacio de las subescalas, la inclusión de las derivadas temporales en la estabilización y el tratamiento de la no linealidad son aspectos a considerarse en las formulaciones ASGS y OSS.

Para confirmar la robustez de los métodos con elementos finitos de alto orden analizados, se han realizado varias pruebas de convergencia en malla con soluciones analíticas conocidas, así como pruebas de capas límite para la ecuación escalar transitoria de CDR, ejemplos de la aproximación del movimiento de un fluido en aguas poco profundas, como el flujo a través de un obstáculo elíptico y el flujo de la rotura de una presa, el transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada, la distribución del transporte de un contaminante en el golfo de Creus y en la desembocadura del río Guadalquivir, y la distribución de la densidad de población en el modelo depredador-presa. Son algunos ejemplos que confirman la robustez de las formulaciones estabilizadas presentadas con elementos finitos de alto orden para resolver la ecuación general convección-difusión-reacción vectorial transitoria incluyendo no linealidad en los términos de convección o de reacción.

ABSTRACT

The objective of the doctoral thesis is to perform the numerical approximation of the transient convection-diffusion-reaction (CDR) vector equation in 2D with high order finite elements, quadratic, cubic and fourth order, using stabilized finite element methods of the type VMS (Variational Multi-Scale) such as ASGS and OSS, tested in recent years to solve the transient vector equation of CDR when there is the phenomenon of dominant convection or reaction and aggravated by the nonlinearity of either the convective term or the term reaction.

The standard Galerkin finite element method applied to the CDR transient scalar equation presents instabilities in the solution when the convective and reaction terms are dominant versus the diffusive term. We solve this difficulty by two finite element methods based on subscales, these are the known methods called ASGS (Algebraic Sub-Grid Scale) and OSS (Orthogonal Subscale Stabilization), which basically consist of decomposing the unknown continuous scalar variable into two components, one that is resolved in the finite element space and the other that cannot be captured by the finite element mesh and therefore belongs to another function space that we call subscale space. It is precisely the choice of the subscale space that imposes the difference between the ASGS and OSS methods.

We will experiment with the stabilization parameter suggested in the literature for linear elements, making an extension of the same parameter to take into account the interpolation order to deal with high order finite elements. Likewise, in the calculation of the subscale with fourth order triangular elements for the OSS method, we have proposed the modification of the standard triangular element in order to have a closed integration rule with the integration points in the nodes. As for temporal and spatial discretization, we first discretize in time, and then for each instant of time we make the spatial approximation and stabilization including the temporal derivative in said stabilization.

We also present the approximation and stabilization of the transient vector equation of CDR for solving problems with more than one variable. As in the scalar case, the standard Galerkin method presents instabilities when the diffusive term is small in relation to the convective and reaction terms, and that in some problems it may be aggravated by the nonlinearity of these terms. The considering equal interpolation for all the variables, the design of the diagonal matrix of stabilization parameters, the determination of the space of the subscales, the inclusion

of the time derivatives in the stabilization and the treatment of nonlinearity are aspects to be considered in the ASGS and OSS formulations.

To confirm the robustness of the analyzed high-order finite element methods, several mesh convergence tests have been performed with known analytical solutions, as well as boundary layer tests for the CDR transient scalar equation, examples of the approximation of the motion of a fluid in shallow water, such as the flow through an elliptical obstacle and the flow of a dam rupture, the transport of a pollutant in a square cavity, the distribution of the transport of a pollutant in the Gulf of Creus and in the mouth of the Guadalquivir river, and the distribution of population density in the predator-prey model. These are some examples that confirm the robustness of the stabilized formulations presented with high order finite elements to solve of the general transient convection-diffusion-reaction vector equation including non-linearity in terms of convection or reaction.

Agradecimientos

En primer lugar agradezco a mi Dios Jheová por darme la vida, la salud, cuidarme y bendecirme siempre. En segundo lugar a mi esposa y a mis hijos por su apoyo incondicional y sus palabras de aliento y cariño para continuar hasta el final. Agradezco a mis compañeros y a todas las personas de la Universidad Politécnica de Cataluña que de una u otra manera me apoyaron y me compartieron sus conocimientos. En especial a Ramon Codina por su ayuda, paciencia y dedicación durante estos casi 8 años para desarrollar mi trabajo de tesis doctoral. Finalmente, agradezco el financiamiento recibido de la Escuela Politécnica Nacional, así como también la beca otorgada por la Secretaría Nacional de Ciencia y Tecnología del Ecuador.

Índice general

1	Introducción	19
2	La ecuación escalar transitoria de CDR	23
2.1	Introducción	23
2.2	Planteamiento del problema	25
2.2.1	Problema de contorno	25
2.2.2	Forma variacional o débil del problema	26
2.2.3	Aproximación numérica con el método estándar de Galerkin	27
2.2.4	Métodos de estabilización numérica	29
2.3	Elemento finito modificado de cuarto orden	38
2.3.1	Introducción	38
2.3.2	Descripción del elemento P_4 modificado	40
2.3.3	Integral exacta	40
2.3.4	Integral numérica	41
2.3.5	Cuadratura cerrada para integración exacta de un polinomio de cuarto grado	43
2.3.6	Cuadratura cerrada para integración exacta de un polinomio de quinto grado	44
2.4	Resultados de los experimentos numéricos	46
2.4.1	Pruebas de convergencia en malla	46
2.4.2	Pruebas con capas límite	49
2.4.3	Transporte de una concentración	54
2.5	Conclusiones	61

3	Las ecuaciones de aguas someras	65
3.1	Introducción	66
3.2	Planteamiento del problema	68
3.2.1	Ecuaciones de gobierno	68
3.2.2	Cambio de variables	70
3.2.3	Discretización en el tiempo y linealización	71
3.2.4	Forma vectorial	72
3.3	Aproximación espacial y estabilización numérica	74
3.3.1	Forma diferencial del problema	75
3.3.2	Forma débil del problema estacionario	76
3.3.3	Método estándar de Galerkin para el problema estacionario	77
3.3.4	Método de las subescalas, problema estacionario	79
3.3.5	Ecuación de CDR vectorial transitoria	87
3.4	Resultados de los experimentos numéricos	93
3.4.1	Pruebas de convergencia en malla	94
3.4.2	Flujo a través de un obstáculo elíptico	100
3.4.3	Flujo de la rotura de una presa a través de una compuerta de esclusa	107
3.5	Conclusiones	114
4	Transporte de contaminantes	115
4.1	Introducción	116
4.2	Planteamiento del problema	119
4.2.1	Ecuaciones de gobierno	119
4.2.2	Cambio de variables	122
4.2.3	Discretización en el tiempo y linealización	122
4.2.4	Forma vectorial	124
4.3	Aproximación espacial y estabilización numérica	127

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	11
4.4 Resultados de los experimentos numéricos	130
4.4.1 Pruebas de convergencia en malla	130
4.4.2 Transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada .	133
4.4.3 Transporte de un contaminante en el golfo de Roses y en la desembocadura del río Guadalquivir	136
4.4.4 Modelo depredador-presa	141
4.5 Conclusiones	149
5 Conclusiones y trabajos futuros	157
5.1 Resultados y conclusiones	157
5.2 Trabajos futuros	159

Índice de figuras

2.1	Elemento P4-modificado con los 3 nodos interiores móviles	40
2.2	Posición de los 15 puntos de integración numérica	41
2.3	Pesos para los 15 puntos de integración numérica	42
2.4	Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares y cuadrangulares. $k = 10^{-3}$, $\mathbf{a} = [\cos 60^\circ, \text{sen}60^\circ]$, $s = 10^{-3}$	50
2.5	Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares y cuadrangulares. $k = 10^{-3}$, $\mathbf{a} = [\cos 60^\circ, \text{sen}60^\circ]$, $s = 1$	51
2.6	Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares y cuadrangulares. $k = 10^{-3}$, $\mathbf{a} = [\cos 60^\circ, \text{sen}60^\circ] * 10^{-3}$, $s = 1$	52
2.7	Capas límite con ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. $k = 10^{-5}$, $\mathbf{a} = [0, 1]$, $s = 0$, $f = 1$ y condiciones de Dirichlet homogéneas en todo el contorno.	55
2.8	Capas límite con ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. $k = 10^{-5}$, $\mathbf{a} = [\text{sen}60^\circ, \text{cos}60^\circ]$, $s = 0$, $f = 0$ y condiciones de Dirichlet homogéneas en todo el contorno.	56
2.9	Capas límite con ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. $k = 10^{-5}$, $\mathbf{a} = [\text{sen}60^\circ, \text{cos}60^\circ]$, $s = 0$, $f = 1$ y condiciones de Dirichlet homogéneas en todo el contorno.	57
2.10	Capas límite con ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. $k = 10^{-5}$, $\mathbf{a} = [\text{sen}30^\circ, \text{cos}30^\circ]$, $s = 1$, $f = 1$ y condiciones de Dirichlet homogéneas en todo el contorno.	58
2.11	Comparación ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. Cortes longitudinales y transversales del ejemplo de la Figura 2.7.	59
2.12	Ducto en 3D	60

2.13	Ducto en 2D	60
2.14	Ejemplo práctico	62
3.1	Convergencia en malla ASGS-OSS, elementos triangulares, velocidad U_1	97
3.2	Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares, velocidad U_2	98
3.3	Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares, elevación η de la superficie libre del agua.	98
3.4	Convergencia ASGS-OSS, elementos cuadrangulares, velocidad U_1	99
3.5	Convergencia ASGS-OSS, elementos cuadrangulares, velocidad U_2	99
3.6	Convergencia ASGS-OSS, elementos cuadrados, elevación η de la superficie libre del agua.	100
3.7	Flujo a través de un obstáculo elíptico. Ilustración del domino computacional y de la batimetría.	101
3.8	Flujo a través de un obstáculo elíptico. Contornos 2D de la superficie libre del agua η	103
3.9	Flujo a través de un obstáculo elíptico. Contornos 2D de la superficie libre del agua η	104
3.10	Flujo a través de un obstáculo elíptico. Contornos 3D de la superficie libre del agua η , con elementos Q_2 . (a) Resultados del presente estudio, (b) resultados de Shin-Jye Liang y Ying-Chih Chen [30].	105
3.11	Flujo a través de un obstáculo elíptico. Contornos 2D de la superficie libre del agua de: (a) resultados de Shin-Jye y Ying-Chih Chen [30] con elementos Q_2 cuadrado de 9 nodos, (b) resultados de Ying-Chih Chen [34] con elementos P_1 triángulos de 3 nodos, (c) resultados de Akoh et al [35] con elementos P_1	107
3.12	Flujo de la rotura de una presa. (a) Geometría y condiciones iniciales del problema. (b) Malla con elementos triangulares P_1 con 3733 nodos.	108
3.13	Flujo de la rotura de una presa. Contornos 3D y 2D de la superficie libre del agua en 7.2 s. Comparación de: (a) Estudio presente, (b) ELRBFCM [48], (c) FVM-esquema de primer orden [50], (d) FVM-esquema de segundo orden [50].	109

3.14	Flujo de la rotura de una presa. Contornos 2D y corte longitudinal de la superficie libre del agua en 7.2 s. Comparación de: (a) Estudio presente, (b) ELRBFCM [48].	110
3.15	Flujo de la rotura de una presa. Contornos 2D y corte longitudinal de la velocidad en la dirección x en 7.2 s. Comparación de (a) Estudio presente, (b) ELRBFCM [48].	111
3.16	Flujo de la rotura de una presa. Contornos 3D de la superficie libre del agua, para los instantes de tiempo $t = 1.5$ s, $t = 3.5$ s, $t = 5.5$ s y $t = 7.2$ s. Comparación de: (a) Estudio presente, (b) ELRBFCM [48].	112
3.17	Flujo de la rotura de una presa. Corte longitudinal de la superficie libre del agua en $t = 4.5$ s. Comparación del refinamiento para P_1 , P_2 , P_3 y P_4	113
4.1	Convergencia en malla ASGS-OSS, elementos triangulares, velocidad U_1	134
4.2	Convergencia en malla ASGS-OSS, elementos triangulares, concentración φ	134
4.3	Contornos 3D (izquierda) y distribución del contaminante (derecha) a lo largo de la diagonal de la cavidad cuadrada, con elementos Q2.	137
4.4	Golfo de Roses. Geometría y malla de elementos finitos	138
4.5	Flujo alrededor del Golfo de Roses. (a) velocidad (máx: 0.29 m/s), (b) elevación (INCOG3), superficie libre del agua (máx: 2.52 mm, mín: -4.05 mm).	139
4.6	Flujo alrededor del Golfo de Roses. (a) vector de velocidad, (b) concentración del transporte de un contaminante (INGOG 4).	140
4.7	Desembocadura del río Guadalquivir. Geometría y malla de elementos finitos	142
4.8	Flujo en la desembocadura del Guadalquivir. (a) velocidad (máx: 0.83 m/s), (b) elevación (INCOG3), superficie libre del agua (máx: 1.97 cm, mín: -1.42 cm).	143
4.9	Flujo en la desembocadura del Guadalquivir. (a) vector de velocidad, (b) concentración del transporte de un contaminante (INGOG 4).	144

4.10	Condición inicial de la densidad de población de la presa (izquierda) y del depredador (derecha).	147
4.11	Caso1. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).	150
4.12	Caso2. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).	151
4.13	Caso3. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).	152
4.14	Caso4. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).	153
4.15	Caso5. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).	154

Índice de tablas

2.1	Cuadratura cerrada del elemento P_4 modificado	46
2.2	Refinamiento para elementos triangulares y cuadrangulares	47
3.1	Refinamiento para elementos triangulares y cuadrangulares	96
3.2	Flujo a través de un obstáculo elíptico. Picos de elevación máxima	106
4.1	Refinamiento para elementos triangulares y cuadrangulares	131
4.2	Valores máximos y mínimos de concentración de contaminante en la cavidad cuadrada para $t = 9600$ s.	136
4.3	Casos de prueba del modelo depredador-presa para diferentes coe- ficientes de reacción	148
4.4	Densidad de población de la presa (u_1)	149
4.5	Densidad de población del depredador (u_2)	149

Capítulo 1

Introducción

La ecuación escalar transitoria de convección-difusión-reacción (CDR) y más ampliamente la ecuación general vectorial transitoria de CDR, es el marco de referencia de los modelos matemáticos que estudian problemas en diversos campos como la dinámica de fluidos, transferencia de calor, física de semiconductores, ingeniería de materiales, química, biología, dinámica de poblaciones, astrofísica, ingeniería biomédica, matemáticas financieras entre otros, y cualquier problema modelado en ecuaciones diferenciales o sistemas de ecuaciones diferenciales parciales u ordinarias de segundo orden.

El contar con equipos computacionales más robustos tanto en memoria RAM como en velocidad de los procesadores ha permitido entre otras cosas incentivar a numerosos investigadores al estudio de métodos numéricos complejos en fluidos que abordan modelos constitutivos cada vez más reales, buscando resolver las ecuaciones sin hacer hipótesis de simplificación por su complejidad. Dentro de este marco, en particular, la ecuación de CDR es un modelo matemático de simulación del transporte de una magnitud física, que se utiliza entre otras cosas en la simulación del transporte de contaminantes cuya aplicación hoy en día frente a los problemas de contaminación ambiental del planeta tiene importancia estratégica. El desarrollo de métodos numéricos más robustos y eficientes así como el cálculo de las velocidades de un fluido en un flujo turbulento en aguas poco profundas, permitirán implementar modelos más reales del transporte y difusión de contaminantes.

Las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas se obtienen a partir de las ecuaciones de Euler para fluidos invíscidos o a partir de las ecua-

ciones de Navier-Stokes para fluidos con viscosidad; estas ecuaciones describen el movimiento en una capa delgada de fluido de densidad constante en equilibrio hidrostático, limitada en su parte inferior por la topografía del terreno y por arriba por una superficie libre, y promediando las variables a lo largo de la profundidad. Estas ecuaciones son una buena aproximación del comportamiento de un fluido cuando la profundidad del dominio estudiado es pequeña con respecto al tamaño global del dominio. Es por esto que dichas ecuaciones describen bien el flujo en canales, ríos, lagos y lagunas, flujos de marea, corrientes marinas, avance de un frente de onda, arrastre de sedimentos, variación de concentración salina, flujo en la rotura de presas, flujos atmosféricos, transporte de contaminantes y tsunamis, entre otros; véase por ejemplo [36, 40, 41, 42].

Por otro lado, un contaminante es aquel componente que está presente en el agua a niveles perjudiciales para la vida de los seres humanos, plantas y animales (Zlatev 1995, U.S. Environmental Protection Agency 2006). La simulación del transporte de contaminantes para la predicción de la distribución y concentración de contaminantes en ríos, lagos, lagunas y regiones costeras tiene importancia estratégica en el análisis y soluciones de los problemas de contaminación ambiental del planeta.

En el fenómeno físico del movimiento de contaminantes, se deben distinguir dos procesos: la difusión y la convección. Difusión es el proceso físico debido al cual el contaminante se mueve como resultado del movimiento intermolecular de las partículas de ambas sustancias, el fluido que la transporta (agua) y el contaminante. La convección es el movimiento del soluto (contaminante) debido al movimiento del agua, y por lo tanto, si el agua permanece en reposo no hay convección.

La formulación del problema del transporte de contaminantes se fundamenta como la de todos los fenómenos físicos en las ecuaciones de equilibrio y las ecuaciones constitutivas. Las ecuaciones del transporte de sustancias disueltas o en suspensión en el flujo se basan en el principio de conservación de la masa de dichas sustancias.

Los modelos de flujos del campo de velocidades en aguas someras y del transporte y difusión de contaminantes tienen características de la ecuación de CDR, motivo por el cual en el presente trabajo abordaremos formulaciones de elementos finitos basados en subescalas como el ASGS correspondiente a las siglas en inglés (Algebraic Sub-Grid Scale) y OSS (Orthogonal Subscale Stabilization) con ele-

mentos finitos de alto orden cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden para resolver la ecuación general vectorial transitoria de CDR.

El trabajo de tesis doctoral ha sido organizado en cinco capítulos. El segundo capítulo del trabajo, *La ecuación Escalar Transitoria de CDR*, está dedicado a describir resumidamente las formulaciones estabilizadas ASGS y OSS para la aproximación y estabilización numérica de la ecuación escalar convección-difusión-reacción transitoria con elementos finitos de alto orden cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden. En este capítulo también presentamos el estudio del elemento triangular modificado de cuarto orden (P_4), con el cual se obtiene una regla de integración con los puntos de integración en los nodos del elemento triangular y que integra de manera exacta hasta un polinomio completo de quinto grado. Este elemento triangular modificado de cuarto orden (P_4), será utilizado en el mallado de todos los ejemplos de la tesis. Varios ejemplos numéricos prueban la robustez y exactitud de las formulaciones.

En el tercer capítulo de la tesis, *Las Ecuaciones de aguas someras*, presentamos la aproximación de la ecuación general vectorial transitoria de CDR con elementos finitos de alto orden y usando los métodos variacionales multiescala ASGS y OSS y particularizando al problema del movimiento de un fluido en aguas poco profundas. Los ejemplos numéricos que se presentan son pruebas de convergencia en malla, el flujo a través de un obstáculo elíptico y el flujo de la rotura de una presa. Estos ejemplos numéricos que prueban la convergencia y estabilidad de los métodos presentados en la solución de problemas de convección dominante, que el método estándar de Galerkin no es capaz de resolver.

El cuarto capítulo está dedicado a la aproximación del sistema acoplado de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas con la ecuación del transporte de contaminantes mediante elementos finitos de alto orden y usando los métodos variacionales de subescalas descrito en el capítulo anterior. Como ejemplos de prueba presentamos: la convergencia en malla, transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada, transporte de un contaminante en el golfo de Creus y en la desembocadura del río Guadalquivir. Además, presentamos como un ejemplo de la no linealidad en el término de reacción la aproximación del modelo depredador-presa.

Finalizamos el trabajo con el capítulo cinco, donde presentamos algunas conclusiones y la apertura de investigaciones futuras.

Los capítulos del presente trabajo de tesis doctoral están sustentados en las si-

guientes publicaciones:

1. Capítulo 2. A. Villota and R. Codina, Approximation of the scalar convection-diffusion-reaction equation with stabilized finite element formulations of high order, *Rev. int. métodos numér. cálc. diseño ing.* (2019). Vol. 35, (1), 6,

URL https://www.scipedia.com/public/Villota_Codina_2018a. DOI:10.23967/j.rimni.2019.01.003.

2. Capítulo 3. A. Villota and R. Codina, Approximation of the shallow water equations with higher order finite elements and variational multiscale methods, *Rev. int. métodos numér. cálc. diseño ing.* (2018). Vol. 34, 1, 28,

URL https://www.scipedia.com/public/Villota_Codina_2017a. DOI:10.23967/j.rimni.2018.02.001.

3. Capítulo 4. A. Villota and R. Codina, Aproximación del transporte de contaminantes con términos de reacción en aguas someras mediante elementos finitos de alto orden. Presentado para publicación a la *Revista Internacional de Métodos Numéricos para el Cálculo y Diseño en Ingeniería*.

Capítulo 2

Aproximación de la ecuación escalar transitoria de convección-difusión-reacción con formulaciones estabilizadas de elementos finitos de alto orden

En este capítulo presentamos formulaciones estabilizadas de elementos finitos para resolver la ecuación escalar convección-difusión-reacción para los casos de convección y reacción dominantes. Por un lado, resumimos las formulaciones ASGS y OSS basadas en los conceptos de los métodos variacionales multiescala. Por otro lado, discutimos aspectos del uso de elementos finitos de alto orden, enfocando nuestros experimentos numéricos sobre elementos finitos cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden tanto para elementos triangulares como cuadrangulares. Igualmente, la aplicación del método OSS, requiere la introducción de una proyección, para lo cual introducimos una modificación del elemento simplicial de cuarto orden con una regla de integración numérica asociada.

2.1 Introducción

El contar con equipos computacionales más robustos tanto en memoria RAM como en velocidad de los procesadores ha permitido entre otras cosas incentivar

a numerosos investigadores al estudio de métodos numéricos complejos en fluidos que abordan modelos constitutivos cada vez más reales, buscando resolver las ecuaciones sin hacer hipótesis de simplificación por su complejidad. Dentro de este marco, la ecuación de convección-difusión-reacción (CDR) es un modelo matemático de simulación del transporte de una magnitud física, que se utiliza entre otras cosas en la simulación del transporte de contaminantes.

Es bien conocido que el método estándar de elementos finitos de Galerkin aplicado a la ecuación CDR presenta inestabilidades en la solución cuando el término convectivo es dominante frente al término difusivo, motivo por el cual distintos autores han desarrollado formulaciones estabilizadas. Dicha estabilización consiste en añadir términos que dependen de la malla de elementos finitos a los términos de Galerkin. Así, se pueden encontrar en la literatura diferentes métodos, como el método Streamline-upwind/Petrov-Galerkin (SUPG) [12, 13, 14], el método de Galerkin-mínimos cuadrados (GLS) [15, 16, 7], el método de las características-Galerkin (CG) [17] y el método de Taylor-Galerkin (TG) [18], entre otros. Una descripción y comparación de estos métodos se puede encontrar en [9], en donde se expone que todos los métodos esencialmente consisten en la adición de un término de estabilización a la formulación original de Galerkin, y que fundamentalmente excepto por menores modificaciones este término se puede escribir como un parámetro numérico, denominado tiempo intrínseco, multiplicado al producto L^2 entre el residuo de la ecuación diferencial a ser resuelta y un operador aplicado a la función de prueba.

En este capítulo nos centraremos en los métodos llamados variacionales multiescalas (VMS, por Variational Multi-Scale), introducidos por Hughes y otros [1, 2], (véase [19] para una revisión de esta teoría). En particular, nos centraremos en la versión más común, a la que nos referiremos como método ASGS (por Algebraic Sub-Grid Scale), y al llamado método OSS (por Orthogonal Subscale Stabilization) [3, 33, 4, 5, 6].

Además de describir resumidamente los métodos ASGS y OSS, la contribución fundamental en este capítulo es analizar su comportamiento con elementos finitos de alto orden, en particular cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden, en todos los casos de clase C^0 . Para estudiar dicho comportamiento, presentaremos resultados de convergencia en malla usando soluciones manufacturadas y analizaremos cómo son de robustos estos métodos en presencia de capas límite de la solución. Asimismo, en el caso del método OSS es necesario llevar a cabo una proyección

en el espacio de elementos finitos, para lo cual resulta especialmente conveniente usar reglas de integración numérica con los puntos de integración en los nodos. Para elementos simpliciales de cuarto orden esto nos lleva a proponer una modificación del elemento estándar, que describimos en detalle par el caso del elemento triangular.

El capítulo está organizado como sigue. En la siguiente sección, se describe el problema a resolver y las aproximaciones y formulaciones de los métodos variacionales estabilizados ASGS y OSS. En la Sección 2.3 presentamos el elemento finito triangular de cuarto orden modificado. Las pruebas de convergencia en malla con soluciones analíticas conocidas y las pruebas de estabilidad con capas límite así como un ejemplo práctico se presentan en la Sección 2.4. Finalmente en base a los resultados obtenidos se extraen algunas conclusiones en la Sección 2.5.

2.2 Planteamiento del problema, aproximación y estabilización numérica

En esta sección vamos a describir la aproximación y estabilización numérica de la ecuación escalar transitoria de CDR, con condiciones de contorno y condiciones iniciales conocidas.

2.2.1 Problema de contorno

Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^d ($d = 1, 2, 3$) y sea $\gamma = [0, T]$, con $T > 0$, el dominio temporal. El problema que nos planteamos consiste en encontrar $u : \Omega \times \gamma \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$\partial_t u + \mathcal{L}(u) = f, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times \gamma, \quad (2.2.1)$$

con

$$\mathcal{L}(u) := -k\partial_i\partial_i u + a_i\partial_i u + su, \quad (2.2.2)$$

sujeta a condiciones de contorno de Dirichlet

$$u = u_D, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_D \times \gamma,$$

condiciones de contorno de Neumann

$$kn_i \partial_i u = \varphi, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_N \times \gamma,$$

y condiciones iniciales

$$u = u_0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = 0.$$

En estas ecuaciones, ∂_t denota la derivada temporal y ∂_i la derivada con respecto a la i -ésima coordenada cartesiana ($i = 1, \dots, d$). Hemos usado la notación de Einstein, de manera que los índices repetidos indican suma sobre todas las coordenadas espaciales. Los coeficientes en (2.2.2) son $k > 0$ la difusión, a_i la componente en la dirección i del campo convectivo de velocidades $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^d$ (para flujo incompresible $\nabla \cdot \mathbf{a} = 0$) y $s \geq 0$ el coeficiente de reacción. f es el término fuente conocido y n_i es la componente i -ésima de la normal unitaria a la frontera, denotada por $\partial\Omega$, la cual está dada por $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$. Las condiciones de contorno de Dirichlet u_D y las condiciones de contorno de Neumann φ son conocidas en las fronteras $\partial\Omega_D$ y $\partial\Omega_N$, respectivamente. Las condiciones iniciales y de contorno de Dirichlet verifican la siguiente condición de compatibilidad $u_0(\mathbf{x})|_{\partial\Omega_D} = u_D(\mathbf{x}, 0)$.

2.2.2 Forma variacional o débil del problema

Sea \mathcal{W} el espacio de funciones de $H^1(\Omega)$ (funciones en $L^2(\Omega)$ con derivadas en $L^2(\Omega)$) que se anulan en $\delta\Omega_D$, y sea $L^2(0, T; \mathcal{W})$ el espacio de funciones en $\Omega \times \gamma$ tales que la norma $H^1(\Omega)$ es $L^2(\gamma)$. Para simplificar la exposición, supongamos que $u_D = 0$.

Multiplicando (2.2.1) por una función $v \in \mathcal{W}$ e integrando el término de difusión por partes, se obtiene la forma débil o variacional del problema la cual consiste en encontrar $u \in L^2(0, T; \mathcal{W})$ tal que

$$(\partial_t u, v) + B(u, v) = \langle f, v \rangle + \langle \varphi, v \rangle_{\partial\Omega_N} \quad \forall v \in \mathcal{W}, \quad (2.2.3)$$

donde

$$B(u, v) = \int_{\Omega} k \partial_i v \partial_i u + \int_{\Omega} v a_i \partial_i u + \int_{\Omega} v s u,$$

$$(\partial_t u, v) = \int_{\Omega} v \partial_t u,$$

$$\langle f, v \rangle = \int_{\Omega} v f,$$

$$\langle \varphi, v \rangle_{\partial\Omega_N} = \int_{\partial\Omega_N} v \varphi,$$

y cumpliéndose la condición inicial $u = u_0$ en $t = 0$ en $L^2(\Omega)$. En lo que sigue, tomaremos $\varphi = 0$ para simplificar la notación.

2.2.3 Aproximación numérica con el método estándar de Galerkin

La ecuación (2.2.3) es la que aproximamos numéricamente en el espacio usando una formulación de elementos finitos. La discretización temporal la llevaremos a cabo mediante un método de diferencias finitas. En principio, podríamos discretizar primero en espacio o en tiempo indistintamente, aunque en nuestro caso llevaremos a cabo primero la discretización temporal.

Discretización temporal en diferencias finitas

Consideremos una partición uniforme del intervalo de tiempo $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^N = T$, con $\delta t = t^{n+1} - t^n$, siendo δt el tamaño del paso de tiempo, considerado constante. Aquí y en adelante, usaremos el superíndice n para indicar el nivel de tiempo n .

Aunque la discretización en el tiempo puede realizarse mediante cualquier aproximación de la derivada temporal en diferencias finitas o elementos finitos, aquí utilizaremos la regla trapezoidal generalizada. Para una función genérica f , sea

$$f^{n+\theta} = \theta f^{n+1} + (1 - \theta) f^n, \quad 0 \leq \theta \leq 1. \quad (2.2.4)$$

Aproximaremos

$$\delta_t^n f := \frac{1}{\delta t}(f^{n+1} - f^n) = \frac{1}{\theta \delta t}(f^{n+\theta} - f^n) \approx (\partial_t f)^{n+\theta}.$$

Esta aproximación es de segundo orden en δt en el caso en que $\theta = 1/2$ (método de Crank-Nicolson) y de primer orden si $\theta \neq 1/2$. Para $\theta = 1$ corresponde al método de Euler implícito o el método de diferencias hacia atrás de primer orden, a menudo abreviado como BDF1. Puesto que nuestro interés se centra en la aproximación espacial con elementos finitos de alto orden, en los ejemplos numéricos hemos usado este último método.

En cada paso de tiempo, el problema (2.2.3) discretizado en el tiempo, consiste en: dado $u^n \in \mathcal{W}$, encontrar $u^{n+1} \in \mathcal{W}$ tal que

$$(\delta_t^n u, v) + B(u^{n+\theta}, v) = \langle f^{n+\theta}, v \rangle \quad \forall v \in \mathcal{W}. \quad (2.2.5)$$

Discretización de Galerkin en el espacio

Para aproximar numéricamente la ecuación (2.2.5) en el espacio por el método de elementos finitos, consideremos una partición del dominio Ω , de manera que $\bigcup_{e=1}^{n_{el}} \Omega^e = \Omega$ y $\Omega^{e_1} \cap \Omega^{e_2} = \emptyset$ para cualesquiera $e_1, e_2, e_1 \neq e_2$, donde n_{el} es el número de elementos de la partición y Ω^e es el dominio del elemento e .

Si \mathcal{W}_h es un espacio conforme de elementos finitos para aproximar \mathcal{W} ($\mathcal{W}_h \subset \mathcal{W}$), entonces el problema discreto que se conoce como el método estándar de Galerkin, que resuelve la ecuación escalar transitoria de CDR (2.2.1) con condiciones de Dirichlet y de Neumann homogéneas en la frontera, consiste en: dado $u_h^n \in \mathcal{W}_h$, encontrar $u_h^{n+1} \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$(\delta_t^n u_h, v_h) + B(u_h^{n+\theta}, v_h) = \langle f^{n+\theta}, v_h \rangle \quad \forall v_h \in \mathcal{W}_h, \quad (2.2.6)$$

para $n = 0, 1, \dots, N-1$, siendo u_h^0 conocido proyectando la condición inicial en \mathcal{W}_h (con el producto escalar de $L^2(\Omega)$).

donde

$$B(u_h^{n+\theta}, v_h) = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (k \partial_i v_h \partial_i u_h^{n+\theta} + v a_i \partial_i u_h^{n+\theta} + v s u_h^{n+\theta}), \quad (2.2.7)$$

$$(\delta_t^n u_h, v_h) = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} v_h \delta_t^n u_h,$$

$$\langle f^{n+\theta}, v_h \rangle = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} v_h f^{n+\theta}.$$

2.2.4 Métodos de estabilización numérica

Como se mencionó anteriormente, el método estándar de Galerkin presenta inestabilidades numéricas cuando el término convectivo es dominante con respecto al término difusivo. Los métodos que vamos a utilizar para la estabilización numérica se pueden enmarcar en el método variacional multiescalas (MVS) [1, 2]. En particular, veremos dos opciones, correspondientes a dos elecciones del espacio de subescalas (véase también [3, 4, 5]).

El método variacional multiescalas (VMS)

Aunque el método VMS puede considerar un número arbitrario de escalas en la solución, en la mayoría de las ocasiones basta con considerar dos escalas para diseñar un método de estabilización. La idea básica es descomponer para cada instante de tiempo la variable continua desconocida $u(\cdot, t) \in \mathcal{W}$ en una parte resoluble en el espacio de elementos finitos $u_h(\cdot, t) \in \mathcal{W}_h$, con $\mathcal{W}_h \subset \mathcal{W}$, y una parte en la escala de una submalla $\tilde{u}(\cdot, t) \in \tilde{\mathcal{W}}$, con $\tilde{\mathcal{W}} \subset \mathcal{W}$, la cual no puede ser capturada por la malla de elementos finitos, siendo $\mathcal{W} = \mathcal{W}_h \oplus \tilde{\mathcal{W}}$, donde $\tilde{\mathcal{W}}$ es cualquier espacio para completar \mathcal{W}_h en \mathcal{W} . Para evitar tecnicismos, podemos pensar de \mathcal{W} y $\tilde{\mathcal{W}}$ como espacios dimensionalmente finitos, con una dimensión grande. Puesto que $\tilde{\mathcal{W}}$ representa la componente de \mathcal{W} que no es reproducida por el espacio de elementos finitos, la llamamos espacio de las subescalas. De este modo, la variable continua desconocida podemos escribirla como $u = u_h + \tilde{u}$, donde u_h es la componente de u en el espacio de elementos finitos y \tilde{u} es su componente en el complemento (con respecto a un cierto producto interno) de \mathcal{W} . La misma descomposición es aplicable a las funciones de test.

Aplicando la descomposición mencionada a la ecuación continua (2.2.3) se obtiene:

$$(\partial_t(u_h + \tilde{u}), v_h + \tilde{v}) + B(u_h + \tilde{u}, v_h + \tilde{v}) = \langle f, v_h + \tilde{v} \rangle \quad \forall v_h \in \mathcal{W}_h, \forall \tilde{v} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (2.2.8)$$

Utilizando la linealidad de las formas involucradas, la ecuación (2.2.8) se puede descomponer en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$(\partial_t u_h, v_h) + (\partial_t \tilde{u}, v_h) + B(u_h, v_h) + B(\tilde{u}, v_h) = \langle f, v_h \rangle \quad \forall v_h \in \mathcal{W}_h, \quad (2.2.9)$$

$$(\partial_t u_h, \tilde{v}) + (\partial_t \tilde{u}, \tilde{v}) + B(u_h, \tilde{v}) + B(\tilde{u}, \tilde{v}) = \langle f, \tilde{v} \rangle \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (2.2.10)$$

Para simplificar el método resultante, vamos a asumir que $\partial_t \tilde{u} = 0$, lo cual implica que la variación temporal de las subescalas en (2.2.9) y (2.2.10) es despreciable comparada con el resto de términos. En [6] las subescalas que satisfacen esta condición son llamadas cuasi-estáticas. La inclusión o no de la derivada temporal de las subescalas se analiza en detalle en [20], donde se muestra que es esencial para evitar las inestabilidades que pueden producirse para pasos de tiempo pequeños, que en este capítulo no consideraremos.

Con esta suposición el sistema de ecuaciones (2.2.9) y (2.2.10) se escribe de la siguiente manera:

$$(\partial_t u_h, v_h) + B(u_h, v_h) + B(\tilde{u}, v_h) = \langle f, v_h \rangle \quad \forall v_h \in \mathcal{W}_h, \quad (2.2.11)$$

$$(\partial_t u_h, \tilde{v}) + B(u_h, \tilde{v}) + B(\tilde{u}, \tilde{v}) = \langle f, \tilde{v} \rangle \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (2.2.12)$$

La ecuación (2.2.11) corresponde a la escala resoluble u_h en el espacio de elementos finitos y tiene tres términos a su lado izquierdo, donde el primero y segundo términos son la contribución temporal y espacial de u_h del método estándar de Galerkin y el tercero toma en cuenta la influencia de la subescala en u_h .

De la ecuación (2.2.12) se obtiene \tilde{u} que es la contribución de la subescala sobre la componente en el espacio de elementos finitos. Para evitar aproximar derivadas de \tilde{u} , podemos considerar la siguiente integración por partes en cada elemento:

Es decir, utilizando la ecuación (2.2.7) en el tercer término del lado izquierdo de la ecuación (2.2.11), tenemos

$$B(\tilde{u}, v_h) = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (k \partial_i v_h \partial_i \tilde{u} + v_h a_i \partial_i \tilde{u} + v_h s \tilde{u}),$$

e integrando por partes dentro de cada elemento tenemos

$$\begin{aligned}
B(\tilde{u}, v_h) &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-k \partial_i (\partial_i v_h) \tilde{u} - \partial_i v_h a_i \tilde{u} + v_h s \tilde{u}) \\
&\quad + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} k \partial_i v_h n_i \tilde{u} + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} v_h n_i a_i \tilde{u}, \quad (2.2.13)
\end{aligned}$$

sea \mathcal{L}^* el adjunto del operador \mathcal{L} , dado por

$$\mathcal{L}^*(v_h) = -k \partial_i (\partial_i v_h) - a_i \partial_i v_h + s v_h. \quad (2.2.14)$$

la ecuación (2.2.13) se puede escribir como

$$B(\tilde{u}, v_h) = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \mathcal{L}^*(v_h) \tilde{u} + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} k \partial_i v_h n_i \tilde{u} + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} v_h n_i a_i \tilde{u}. \quad (2.2.15)$$

Reemplazando (2.2.15) en la ecuación (2.2.11), esta se puede escribir como

$$\begin{aligned}
(\partial_t u_h, v_h) + B(u_h, v_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \mathcal{L}^*(v_h) \tilde{u} + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} k \partial_i v_h n_i \tilde{u} + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} v_h n_i a_i \tilde{u} \\
= \langle f, v_h \rangle \quad \forall v_h \in \mathcal{W}_h. \quad (2.2.16)
\end{aligned}$$

Ahora bien, integrando por partes los términos $B(u_h, \tilde{v})$ y $B(\tilde{u}, \tilde{v})$ de la ecuación (2.2.12), ésta se puede escribir como

$$\begin{aligned}
&\sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} k \tilde{v} n_i \partial_i (u_h + \tilde{u}) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tilde{v} \mathcal{L}(\tilde{u}) \\
&= \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tilde{v} [f - \mathcal{L}(u_h)] - \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tilde{v} \partial_t u_h \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (2.2.17)
\end{aligned}$$

Observemos que el primer término de la ecuación (2.2.17) se anula, ya que en la frontera de los elementos las componentes normales de los flujos de u son iguales pero de signo contrario, debido a que los flujos difusivos deben ser continuos a

través de los contornos inter-elementales. Como resultado de esto, la ecuación (2.2.17) es equivalente a encontrar $\tilde{u} \in \tilde{\mathcal{W}}$ tal que

$$\mathcal{L}(\tilde{u}) = f - \mathcal{L}(u_h) - \partial_t u_h + v_{h,ort}, \quad \text{en } \Omega^e \quad \forall v_{h,ort} \in \tilde{\mathcal{W}}^\perp, \quad (2.2.18)$$

$$\tilde{u} = \tilde{u}_{esq}, \quad \text{en } \partial\Omega^e, \quad (2.2.19)$$

para $e = 1, \dots, n_{el}$ y para una cierta función \tilde{u}_{esq} que le llamamos el esqueleto de u . Es importante observar que la ecuación (2.2.18) se verifica para cualquier elemento $v_{h,ort}$ ortogonal a $\tilde{\mathcal{W}}$. La presencia del elemento $v_{h,ort}$ en la ecuación (2.2.18) garantiza que $\mathcal{L}(\tilde{u}) - [f - \mathcal{L}(u_h)] + \partial_t u_h$ pertenezca a $\tilde{\mathcal{W}}^\perp$, que es lo que implica la ecuación (2.2.17) sin el primer término. En otras palabras $v_{h,ort}$ garantiza que \tilde{u} pertenezca al espacio de subescalas $\tilde{\mathcal{W}}$ (y no a todo el espacio \mathcal{W}).

Las ecuaciones (2.2.16), (2.2.18) y (2.2.19) equivalen exactamente al sistema de ecuaciones (2.2.11) y (2.2.12), en donde hasta ahora no hemos hecho ninguna aproximación. El siguiente paso es hacer una selección de las funciones \tilde{u}_{esq} , $v_{h,ort}$ y una solución aproximada de la ecuación (2.2.18). La manera de escoger dichas funciones da lugar a las formulaciones ASGS y OSS que describimos más adelante. Los pasos comunes los describimos a continuación.

Para seleccionar \tilde{u}_{esq} vamos a usar el siguiente argumento. Para tener una aproximación discreta óptima de u que de valores nodales exactos, se podría pedir que las subescalas se anulen en los contornos de los elementos. En problemas unidimensionales esto da condiciones de contorno homogéneas para el problema (2.2.18) y (2.2.19) en los extremos de cada elemento. Para los casos de más de una dimensión espacial, esto no es posible, puesto que la solución del problema continuo u tendría que ser polinómica en los contornos de los elementos para que pudiera coincidir con u_h . Sin embargo, imponer que $\tilde{u}_{esq} = 0$ puede pensarse como una aproximación.

Suponer que $\tilde{u}_{esq} = 0$ equivale a considerar el espacio de las subescalas $\tilde{\mathcal{W}}$ como un espacio de funciones burbuja, es decir, un espacio de funciones que se anulan en los contornos de los elementos (véase [7, 8]). Con esta aproximación, los términos con las integrales en los contornos de los elementos de la ecuación (2.2.16) desaparecen, por lo cual el problema a ser resuelto consiste en encontrar para

cada instante de tiempo t una función $u_h(\cdot, t) \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$(\partial_t u_h, v_h) + B(u_h, v_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \mathcal{L}^*(v_h) \tilde{u} = \langle f, v_h \rangle \quad \forall v_h \in \mathcal{W}_h, \quad (2.2.20)$$

en donde todavía hace falta determinar \tilde{u} . Para ello, tenemos que resolver de forma aproximada el problema (2.2.18) y (2.2.19) en el espacio de las subescalas $\tilde{\mathcal{W}}$ de funciones burbuja. Formalmente podemos escribir:

$$\tilde{u} = \mathcal{L}^{-1} [f - \mathcal{L}(u_h) - \partial_t u_h + v_{h,ort}], \quad (2.2.21)$$

en cada elemento, donde \mathcal{L}^{-1} es el operador inverso del operador \mathcal{L} con condiciones de Dirichlet homogéneas. De la ecuación (2.2.20) vemos que solo se necesita la componente de \tilde{u} sobre el espacio $\mathcal{L}(\mathcal{W}_h)$, donde $\mathcal{L}(\mathcal{W}_h)$ es el espacio de funciones de la forma $\mathcal{L}(v_h)$, con $v_h \in \mathcal{W}_h$. Esto sugiere aproximar (2.2.21) como

$$\tilde{u} \approx \tau^e [f - \mathcal{L}(u_h) - \partial_t u_h + v_{h,ort}], \quad \text{en } \Omega^e, \quad (2.2.22)$$

donde τ^e es el parámetro de estabilización y que se calcula dentro del dominio de cada elemento. Es una aproximación algebraica al operador \mathcal{L}^{-1} .

El diseño de τ^e es una de las piedras angulares en el desarrollo de los métodos de elementos finitos estabilizados. Algunas formulaciones algebraicas para el diseño del parámetro de estabilización para la ecuación escalar de CDR en 1D, basadas en el principio del máximo discreto, pueden encontrarse en [1, 2, 9]. Un posible argumento para obtener τ^e es el análisis de Fourier que se presenta en [6, 10, 11]. En este capítulo, para abordar la utilización de elementos finitos de alto orden, el diseño del τ que adoptaremos es:

$$\tau^e = \left[c_1 \frac{k}{\left(\frac{h^e}{p^2}\right)^2} + c_2 \frac{|\mathbf{a}|}{\frac{h^e}{p}} + c_3 s \right]^{-1}, \quad (2.2.23)$$

donde c_1, c_2, c_3 son constantes algorítmicas, y que para los ejemplos numéricos hemos adoptado $c_1 = 12, c_2 = 2$ y $c_3 = 1$, k es coeficiente de difusión, $|\mathbf{a}|$ es la norma de la velocidad, s es el coeficiente de reacción, h^e es el diámetro del elemento y p es el orden polinomial de interpolación.

A falta de determinar la función $v_{h,ort}$, y por consiguiente el espacio de subescalas, el problema para la función u_h se obtiene reemplazando la ecuación (2.2.22) en (2.2.20) y usando la expresión (2.2.23).

El método ASGS (Algebraic Sub-Grid Scales)

La idea del método ASGS es tomar como espacio de subescalas el espacio de funciones que son residuos de funciones de elementos finitos, es decir, el espacio de funciones de la forma $f - \mathcal{L}(v_h) - \partial_t v_h$, con $v_h \in \mathcal{W}_h$. Esto nos lleva a que $v_{h,ort} = 0$.

El problema que finalmente obtenemos a partir de (2.2.22) y (2.2.20) con $v_{h,ort} = 0$ es:

$$(\partial_t u_h, v_h) + B(u_h, v_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(v_h)) \tau^e [\partial_t u_h + \mathcal{L}(u_h) - f] = \langle f, v_h \rangle \quad (2.2.24)$$

para todo $v_h \in \mathcal{W}_h$. Esta ecuación variacional discreta, a la cual hay que añadirle las condiciones iniciales, la podemos ahora discretizar en el tiempo usando por ejemplo la regla trapezoidal descrita anteriormente. Para ello, habrá que sustituir $\partial_t u_h$ por $\delta_t^n u_h$ y evaluar el resto de funciones dependientes del tiempo que aparecen en $t^{n+\theta}$.

El parámetro de estabilización τ^e para elementos finitos de alto orden está dado por la ecuación (2.2.23), el operador \mathcal{L} por (2.2.2) y el operador \mathcal{L}^* por la ecuación (2.2.14).

El método OSS (Orthogonal Subcales Stabilization)

En este caso, el espacio de subescalas no será el espacio de residuos de elementos finitos como en el caso anterior, sino que se toma como espacio $\tilde{\mathcal{W}}$ el espacio ortogonal en el sentido de L^2 al espacio de elementos finitos, es decir,

$$\tilde{\mathcal{W}} = \mathcal{W}_h^\perp, \quad (2.2.25)$$

que es una legítima elección que cumple con $\mathcal{W} = \mathcal{W}_h \oplus \tilde{\mathcal{W}}$.

Tomando en cuenta (2.2.25), de (2.2.18) se sigue que

$$v_{h,\text{ort}} \in \mathcal{W}_h, \quad \tilde{u} \in \mathcal{W}_h^\perp,$$

lo que significa que $v_{h,\text{ort}}$ es una función del espacio de elementos finitos y por lo tanto numéricamente calculable, mientras que \tilde{u} estará en el espacio ortogonal a \mathcal{W}_h . A este espacio \mathcal{W}_h^\perp escogido para las subescalas \tilde{u} lo denominamos espacio de subescalas ortogonales.

Puesto que $\tilde{u} \in \mathcal{W}_h^\perp$, de (2.2.22) se tiene

$$0 = \int_{\Omega} \tilde{u} v_h d\Omega \approx \sum_{e=1}^{n_{\text{el}}} \int_{\Omega^e} \tau^e [f - \mathcal{L}(u_h) - \partial_t u_h] v_h + \sum_{e=1}^{n_{\text{el}}} \int_{\Omega^e} \tau^e (v_{h,\text{ort}}) v_h \quad (2.2.26)$$

para todo $v_h \in \mathcal{W}_h$. Si llamamos $\mathbf{\Pi}_\tau$ la proyección L^2 sobre el espacio de elementos finitos pesada con τ^e dentro de cada elemento, de (2.2.26) se tiene que

$$v_{h,\text{ort}} = -\mathbf{\Pi}_\tau [f - \mathcal{L}(u_h) - \partial_t u_h]. \quad (2.2.27)$$

Reemplazando (2.2.27) en (2.2.22) tenemos

$$\tilde{u} \approx \tau^e [f - \mathcal{L}(u_h) - \delta_t^n u_h - \mathbf{\Pi}_\tau [f - \mathcal{L}(u_h) - \partial_t u_h]]. \quad (2.2.28)$$

Sea ahora

$$\mathbf{\Pi}_\tau^\perp = \mathbf{I} - \mathbf{\Pi}_\tau, \quad (2.2.29)$$

donde \mathbf{I} es la identidad en \mathcal{W}_h y $\mathbf{\Pi}_\tau^\perp$ es la proyección sobre el espacio ortogonal al espacio de elementos finitos. La ecuación (2.2.28) se puede escribir entonces como

$$\tilde{u} \approx \tau^e \mathbf{\Pi}_\tau^\perp [f - \mathcal{L}(u_h) - \partial_t u_h]. \quad (2.2.30)$$

Podemos reemplazar esta expresión en (2.2.16) y usar el hecho de que las integrales sobre los contornos de los elementos son cero, con lo cual obtenemos la formulación estabilizada de elementos finitos OSS que resuelve la ecuación escalar de CDR transitoria, la cual consiste en encontrar $u(\cdot, t) \in \mathcal{W}_h$, en cada instante de tiempo tal que

$$(\partial_t u_h, v_h) + B(u_h, v_h) + \sum_{e=1}^{n_{\text{el}}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(v_h)) \tau^e \mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\partial_t u_h + \mathcal{L}(u_h) - f] = \langle f, v_h \rangle \quad (2.2.31)$$

para todo $v_h \in \mathcal{W}_h$. Podemos aplicar aquí los mismos comentarios que para (2.2.24). Sin embargo, hay una consideración importante a tener en cuenta, y es que puesto que $\partial_t u_h$ es una función que pertenece al espacio de elementos finitos \mathcal{W}_h , su componente en el espacio ortogonal es nula, esto es, la ecuación variacional discreta anterior se reduce a

$$(\partial_t u_h, v_h) + B(u_h, v_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(v_h)) \tau^e \mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\mathcal{L}(u_h) - f] d\Omega = \langle f, v_h \rangle \quad (2.2.32)$$

para todo $v_h \in \mathcal{W}_h$.

Propiedades de estabilidad y convergencia

Aunque los métodos ASGS y OSS difieren en la definición del espacio de subescalas, ambos tienen las mismas propiedades de estabilidad y convergencia. No es nuestro objetivo presentar el análisis numérico de estos métodos, el cual puede encontrarse en [21] (véase también [22, 23] y [24] para la teoría general), sino mostrar en qué sentido dichos métodos son estables y convergen, justificar la expresión del parámetro de estabilización (y en particular de su dependencia en p) e indicar cómo debe ser la integración numérica para preservar la convergencia asociada a la integración exacta. Explotaremos este último punto en el apartado siguiente.

Para simplificar la exposición, consideremos el problema estacionario, con coeficientes constantes, $s = 0$ y malla de elementos finitos uniforme, de tamaño h . En este caso, el parámetro de estabilización dado por (2.2.23) será el mismo en todos los elementos.

Los métodos ASGS y OSS se puede demostrar que son estables y convergentes en la norma:

$$||| v_h |||^2 := k \|\nabla v_h\|^2 + \tau \|\mathbf{a} \cdot \nabla v_h\|^2, \quad (2.2.33)$$

donde $\|\cdot\|$ es la norma de $L^2(\Omega)$. El punto clave para demostrar esta estabilidad es hacer uso del estimador inverso (ver por ejemplo [24])

$$\|\nabla v_h\| \leq C_{\text{inv}} \frac{p^2}{h} \|v_h\|,$$

válido para cualquier función de elementos finitos v_h , siendo C_{inv} una constante que depende de la forma de la malla, pero no de su tamaño h ni del orden de interpolación p . La potencia 2 de p^2 es precisamente quien obliga a dividir h por p^2 en la contribución del término difusivo en el parámetro de estabilización dado por (2.2.23). Con ello tenemos garantizada la estabilidad.

Para analizar la convergencia es necesario hacer uso de las propiedades de interpolación. Si $\|\cdot\|_{H^r}$ es la norma del espacio de Sobolev $H^r(\Omega)$, la solución u del problema continuo es suficientemente regular y \tilde{u}_h es su mejor aproximación en el espacio de elementos finitos, se tiene que

$$\|u - \tilde{u}_h\|_{H^r} \leq C \frac{h^{p+1-r}}{p^{p+1-r}} \|u\|_{H^{p+1}}, \quad (2.2.34)$$

donde los casos de interés corresponden a $r = 0$ y $r = 1$. Aquí y en lo que sigue, C es una constante que no depende de la malla. Con este estimador de interpolación, es posible demostrar que la función de error de las formulaciones que consideramos, dada por

$$\begin{aligned} E(h) = & k^{1/2} \|\nabla u - \nabla \tilde{u}_h\| + \tau^{1/2} \sum_K \left\| -k\Delta(u - \tilde{u}_h) + \mathbf{a} \cdot \nabla(u - \tilde{u}_h) \right\|_K \\ & + \tau^{-1/2} \|u - \tilde{u}_h\|, \end{aligned}$$

se comporta como

$$E(h) = \left[k + \frac{|\mathbf{a}|h}{p} + \min \left(p^2, \frac{|\mathbf{a}|^2 h^2}{p^2 k^2} \right) k \right]^{1/2} \frac{h^p}{p^p} \|u\|_{H^{p+1}}. \quad (2.2.35)$$

Que $E(h)$ sea la función de error de los métodos ASGS y OSS en la norma (2.2.33) quiere decir que

$$\| \| u - u_h \| \| \leq CE(h).$$

En virtud de la expresión (2.2.33) de la norma de trabajo y de la función de error (2.2.35), se observa que el estimador de error presentado es óptimo tanto para advección dominante como para difusión dominante. Hay que notar sin embargo que si se considera la convergencia en p , hay un rango de parámetros en los que se pierde la optimalidad (véase [21]).

El objetivo de haber presentado los resultados de estabilidad y convergencia

en este capítulo es doble. Por un lado, justifica la validez de la expresión del parámetro de estabilización (2.2.23) para elementos de alto orden, que es el caso que nos ocupa. Por otro lado, nos permite observar que si la integración es numérica y no exacta (como obviamente siempre es el caso), hay un límite de exactitud mínimo para no perder orden de convergencia de la aproximación. En el apartado siguiente presentaremos una modificación del elemento triangular de cuarto orden con una cuadratura numérica asociada. En este caso, $p = 4$, con lo que de acuerdo con (2.2.35) la cuadratura debe ser como mínimo de cuarto orden en el caso de difusión dominante y de orden $9/2$ para convección dominante. De hecho, en presencia de término reactivo ($s > 0$) y con reacción dominante se obtiene que la cuadratura mínima debe ser de quinto orden. Este hecho lo usamos a continuación.

2.3 Elemento finito triangular modificado de cuarto orden

2.3.1 Introducción

En el método OSS, para calcular la proyección ortogonal del residuo en la ecuación (2.2.32), lo que hacemos es calcular la proyección del residuo en el espacio de elementos finitos. Suponiendo para simplificar que los parámetros de estabilización son iguales para todos los elementos, debemos resolver el sistema

$$\int_{\Omega} v_h \Pi_t = \int_{\Omega} v_h [\mathcal{L}(u_h) - f] \quad \forall v_h \in \mathcal{W}_h, \quad (2.3.1)$$

siendo $\Pi_{\tau} = \Pi_{\tau}(\mathcal{L}(u_h) - f)$. Cuando expresamos Π_{τ} en función de los valores nodales $\mathbf{\Pi}$ y tomamos v_h como las funciones de forma, (2.3.1) da lugar al sistema lineal

$$\mathbf{M}\mathbf{\Pi} = \mathbf{R}, \quad (2.3.2)$$

donde \mathbf{R} es conocido y \mathbf{M} es la matriz de masa de la partición de elementos finitos. Esta matriz de masa es en principio llena, por lo que es necesario resolver el sistema (2.3.2). Sin embargo, es bien sabido que \mathbf{M} se puede aproximar por una matriz diagonal \mathbf{M}_d usando una regla de integración numérica con los puntos

de integración en los nodos (cuadratura cerrada) en vez de la integral exacta que aparece en (2.3.1). Con ello la resolución del sistema que aproxima a (2.3.2) es trivial. El punto clave es que la exactitud de la regla de integración numérica debe preservar la de la aproximación de elementos finitos que se tendría con la integración exacta.

En ocasiones las matrices de masa diagonales obtenidas a través de una cuadratura cerrada presentan en su diagonal valores nulos, lo cual hace que no sean invertibles e imposibilita su uso. En elementos lineales como el P_1 (simplicial, es decir, triangular para $d = 2$ y tetraédrico para $d = 3$), esta matriz se obtiene directamente utilizando integración cerrada, con todos sus pesos distintos de cero. Lo mismo sucede para elementos cúbicos, mientras que los elementos cuadráticos tienen que subdividirse en elementos lineales y usar cuadratura nodal para la división resultante; con este procedimiento puede obtenerse una matriz de masa diagonal que, si bien reduciría el orden de convergencia en caso de que se reemplazara por ella la matriz de masa original, puede usarse como preconditionador para resolver el sistema (2.3.2).

Atención especial merece el elemento de cuarto orden P_4 simplicial. Veremos a continuación que es posible modificar el elemento convencional, en el sentido de alterar la posición de los nodos centrales, y plantear una regla de integración numérica con los puntos de integración en los nodos y los pesos distintos de cero, lo cual nos permitirá aproximar la matriz de masa por una matriz diagonal invertible. Además, dicha regla de integración veremos que es capaz de integrar de manera exacta hasta un polinomio completo de quinto grado, con lo que de acuerdo con la discusión del apartado anterior no se disminuirá el orden de aproximación de la formulación final.

Aunque es posible aplicar la modificación que proponemos tanto para $d = 2$ como para $d = 3$, haremos los desarrollos en el primer caso. Plantearemos el elemento P_4 modificado considerando móviles los tres nodos interiores del elemento P_4 original y parametrizando la posición de los mismos con una variable cuyo valor será incógnita, al igual que los pesos de la regla de integración nodal asociada; la posición de los 12 nodos restantes es la misma que la del elemento P_4 original.

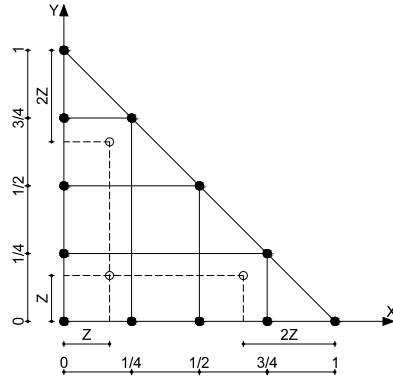


Figura 2.1: Elemento P_4 -modificado con los 3 nodos interiores móviles

2.3.2 Descripción del elemento P_4 modificado

En la Figura 2.1 se representa el elemento en el dominio de referencia, dado por el triángulo $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, $x + y \leq \sqrt{2}$. Las posiciones de los nodos sobre los lados es la del elemento estándar, pero hemos introducido una variable z para parametrizar la posición de los tres nodos interiores, obteniéndose así el elemento que llamaremos P_4 modificado, con los tres nodos interiores móviles en función del parámetro z . Obsérvese que con $z = 1/4$ tendríamos el elemento P_4 original.

2.3.3 Integral exacta

Consideremos un polinomio de grado n de la forma:

$$p(x, y) = \sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=1}^i a_{ij} x^{i-j} y^{j-1}, \quad (2.3.3)$$

donde los coeficientes a_{ij} son constantes. La integral exacta I_E de $p(x, y)$ sobre la región triangular de la Figura 2.1, está dada por:

$$I_E = \int_0^1 \int_0^{1-x} \sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=1}^i a_{ij} x^{i-j} y^{j-1} dy dx. \quad (2.3.4)$$

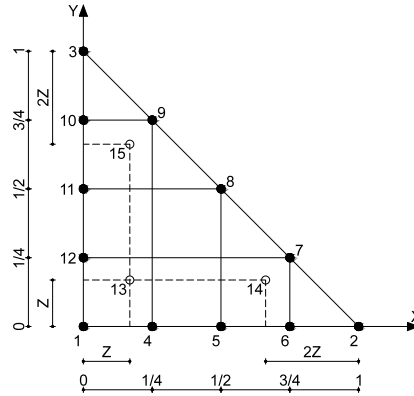


Figura 2.2: Posición de los 15 puntos de integración numérica

De la ecuación (2.3.4) tenemos:

$$I_E = \sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=1}^i a_{ij} \int_0^1 \int_0^{1-x} x^{i-j} y^{j-1} dy dx. \quad (2.3.5)$$

Sea

$$\alpha_{ij} = \int_0^1 \int_0^{1-x} x^{i-j} y^{j-1} dy dx \quad \forall i = 1, 2, \dots, n + 1, \quad \forall j = 1, 2, \dots, i. \quad (2.3.6)$$

Reemplazando (2.3.6) en (2.3.5) tenemos:

$$I_E = \sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=1}^i a_{ij} \alpha_{ij}. \quad (2.3.7)$$

2.3.4 Integral numérica

La Integral exacta I_E vamos a aproximarla mediante una cuadratura cerrada sobre una región triangular con 15 puntos distribuidos de la siguiente manera: 3 puntos (1, 2, 3) en los vértices del triángulo, 9 puntos numerados del 4 al 12 distribuidos simétricamente en los lados del triángulo y los 3 puntos móviles interiores restantes (13, 14, 15) distribuidos simétricamente como se ve en la Figura 2.2.

Los pesos w_1, w_2, w_3 y w_4 están asociados a los puntos detallados en la Figura

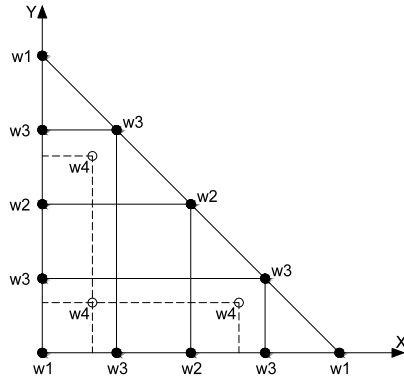


Figura 2.3: Pesos para los 15 puntos de integración numérica

2.3 para los 15 puntos de integración. Estos pesos, junto con el parámetro z , son las incógnitas a determinar.

Con las posiciones y los pesos de los 15 puntos de integración que se detallan en las Figuras 2.2 y 2.3, planteamos la integral numérica I_N , como sigue:

$$\begin{aligned}
 I_N = & \sum_{k=1}^3 w_1 p(x_k, y_k) + \sum_{k=1}^3 w_2 p(x_{3k+2}, y_{3k+2}) + \sum_{k=1}^3 w_3 p(x_{3k+1}, y_{3k+1}) \\
 & + \sum_{k=1}^3 w_3 p(x_{3k+3}, y_{3k+3}) + \sum_{k=1}^3 w_4 p(x_{12+k}, y_{12+k}). \quad (2.3.8)
 \end{aligned}$$

De la ecuación (2.3.8), reemplazando $p(x, y)$ dado en la ecuación (2.3.3) y agrupando términos, obtenemos:

$$\begin{aligned}
 I_N = & \sum_{k=1}^3 \left(\sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=1}^i a_{ij} (w_1 x_k^{i-j} y_k^{j-1} + w_2 x_{3k+2}^{i-j} y_{3k+2}^{j-1} + w_3 x_{3k+1}^{i-j} y_{3k+1}^{j-1} \right. \\
 & \left. + w_3 x_{3k+3}^{i-j} y_{3k+3}^{j-1} + w_4 x_{12+k}^{i-j} y_{12+k}^{j-1}) \right) \\
 = & \sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=1}^i a_{ij} \sum_{k=1}^3 (w_1 x_k^{i-j} y_k^{j-1} + w_2 x_{3k+2}^{i-j} y_{3k+2}^{j-1} + w_3 x_{3k+1}^{i-j} y_{3k+1}^{j-1} \\
 & + w_3 x_{3k+3}^{i-j} y_{3k+3}^{j-1} + w_4 x_{12+k}^{i-j} y_{12+k}^{j-1}). \quad (2.3.9)
 \end{aligned}$$

Puesto queremos que la integral exacta y la integral numérica sean iguales, esto

es $I_E = I_N$, de las ecuaciones (2.3.7) y (2.3.9) se tiene que:

$$\alpha_{ij} = \sum_{k=1}^3 (w_1 x_k^{i-j} y_k^{j-1} + w_2 x_{3k+2}^{i-j} y_{3k+2}^{j-1} + w_3 x_{3k+1}^{i-j} y_{3k+1}^{j-1} + w_3 x_{3k+3}^{i-j} y_{3k+3}^{j-1} + w_4 x_{12+k}^{i-j} y_{12+k}^{j-1}), \quad (2.3.10)$$

para todo $i = 1, 2, \dots, n+1$, $j = 1, 2, \dots, i$, donde n es el grado del polinomio completo cuya integral exacta sobre una región triangular se quiere calcular numéricamente.

Las ecuaciones (2.3.6) y (2.3.10) nos permiten obtener un sistema de ecuaciones no lineal para determinar w_1 , w_2 , w_3 , w_4 y z . Recordemos que los puntos (x_k, y_k) , (x_{3k+1}, y_{3k+1}) , (x_{3k+2}, y_{3k+2}) , (x_{3k+3}, y_{3k+3}) , $k = 1, 2, 3$, son las coordenadas de los 12 puntos ubicados en los vértices y lados del triángulo respectivamente, y los puntos (x_{12+k}, y_{12+k}) , $k = 1, 2, 3$, son las coordenadas de los 3 puntos interiores cuya ubicación está parametrizada con la variable z .

2.3.5 Cuadratura cerrada para integración exacta de un polinomio de cuarto grado

Utilizando las ecuaciones (2.3.6) y (2.3.10) para $n = 4$, fácilmente se puede plantear el sistema no lineal de 15 ecuaciones para integrar exactamente un polinomio completo de cuarto grado. De las 15 ecuaciones, obtenemos tres ecuaciones linealmente independientes en términos del parámetro z , que son:

$$\frac{w_2}{16} + \frac{15}{128}w_3 + (-9z^4 + 13z^3 - 6z^2 + z)w_4 = \frac{1}{120},$$

$$\frac{w_2}{16} + \frac{9}{128}w_3 + (9z^4 - 8z^3 + 2z^2)w_4 = \frac{1}{180},$$

$$\frac{w_2}{8} + \frac{3}{16}w_3 + (3z^3 - 3z^2 + z)w_4 = \frac{1}{60}.$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones en términos del parámetro z , se tiene:

$$w_2 = \frac{72z^3 - 77z^2 + 27z - 3}{45z(2z - 1)}, \quad (2.3.11)$$

$$w_3 = \frac{-8(18z^3 - 23z^2 + 9z - 1)}{135z(2z - 1)}, \quad (2.3.12)$$

$$w_4 = \frac{-1}{360z^2(2z-1)}. \quad (2.3.13)$$

Para obtener la ecuación parametrizada para w_1 , podemos usar la primera ecuación del sistema de 15 ecuaciones mencionado anteriormente. Reemplazando $i = 1$, $j = 1$, en las ecuaciones (2.3.6) y (2.3.10) tenemos respectivamente:

$$\alpha_{11} = \int_0^1 \int_0^{1-x} dy dx = \frac{1}{2}, \quad (2.3.14)$$

$$\alpha_{11} = 3w_1 + 3w_2 + 6w_3 + 3w_4. \quad (2.3.15)$$

Igualando las ecuaciones (2.3.14) y (2.3.15) y reemplazando las ecuaciones (2.3.11), (2.3.12) y (2.3.13), tenemos:

$$w_1 = \frac{288z^3 - 224z^2 + 50z - 3}{1080z^2}. \quad (2.3.16)$$

Las ecuaciones parametrizadas (2.3.11), (2.3.12), (2.3.13) y (2.3.16), verifican las 11 ecuaciones restantes del sistema no lineal de 15 ecuaciones planteadas para $n = 4$. Por lo tanto, con las ecuaciones parametrizadas para w_1, w_2, w_3 y w_4 hemos obtenido un conjunto infinito de soluciones de parámetro z . Por ejemplo para $z = \frac{1}{6}$ tenemos: $w_1 = \frac{2}{135}$, $w_2 = \frac{11}{180}$, $w_3 = \frac{-4}{135}$, $w_4 = \frac{3}{20}$, donde observamos que todos los pesos son distintos de cero. Como observación, notemos que para $z = \frac{1}{4}$, nos da, $w_1 = 0$, $w_2 = -\frac{1}{90}$, $w_3 = \frac{2}{45}$, $w_4 = \frac{4}{45}$, que es la cuadratura cerrada con los puntos de integración numérica coincidiendo con los nodos del elemento P_4 original, donde no todos los pesos son distintos de cero.

2.3.6 Cuadratura cerrada para integración exacta de un polinomio de quinto grado

En el apartado anterior hemos obtenido un conjunto infinito de cuadraturas cerradas que integran en forma exacta hasta un polinomio completo de cuarto grado sobre una región triangular con puntos de integración coincidentes con los nodos del elemento P_4 modificado, con sus tres nodos interiores móviles dependientes del parámetro z , y con valores de z para los cuales todos los pesos son distintos de cero. Ahora nos proponemos obtener de este conjunto infinito de cuadraturas, al menos una cuadratura que integre exactamente un polinomio completo de quinto grado, también con todos los pesos distintos de cero.

Utilizando las ecuaciones (2.3.6) y (2.3.10) para $n = 5$, obtenemos 6 ecuaciones no lineales adicionales al sistema no lineal anterior de 15 ecuaciones. De estas 6 ecuaciones adicionales solo 1 es linealmente independiente con el sistema anterior, la misma que se obtiene reemplazando $i = 6$ y $j = 1$ en las ecuaciones (2.3.6) y (2.3.10):

$$w_1 + \frac{w_2}{16} + \frac{61}{128}w_3 + (2z^5 + (1 - 2z)^5)w_4 = \frac{1}{42}. \quad (2.3.17)$$

Reemplazando en la ecuación (2.3.17) las soluciones parametrizadas de w_1, w_2, w_3 y w_4 dadas por las ecuaciones (2.3.16), (2.3.11), (2.3.12) y (2.3.13) respectivamente, se obtiene la ecuación:

$$\frac{z^2}{2} - \frac{z}{3} + \frac{1}{21} = 0, \quad (2.3.18)$$

cuya solución es:

$$z = \frac{7 + \sqrt{7}}{21}, \quad z = \frac{7 - \sqrt{7}}{21}. \quad (2.3.19)$$

Reemplazando las soluciones parametrizadas de w_1, w_2, w_3 y w_4 en las 5 ecuaciones restantes, es decir, para $i = 6$ y $j = 2, 3, 4, 5, 6$ en las ecuaciones (2.3.6) y (2.3.10), se obtiene la misma ecuación (2.3.18), con lo cual la solución es única para todas las ecuaciones del sistema.

De las dos soluciones de z , vamos a encontrar la cuadratura cerrada para:

$$z = \frac{7 - \sqrt{7}}{21}. \quad (2.3.20)$$

Reemplazando el valor z de la ecuación (2.3.20) en las ecuaciones parametrizadas (2.3.16), (2.3.11), (2.3.12) y (2.3.13) se obtienen los pesos w_1, w_2, w_3 y w_4 , todos distintos de cero.

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{11\sqrt{7}}{15120} + \frac{1}{216}, & w_2 &= \frac{11\sqrt{7}}{630} - \frac{1}{30}, \\ w_3 &= \frac{4}{135} - \frac{4\sqrt{7}}{945}, & w_4 &= \frac{49}{360} - \frac{7\sqrt{7}}{720}. \end{aligned}$$

Con todo esto, hemos obtenido un elemento P_4 modificado, con la posiciones de los nodos interiores dadas por $z = \frac{7 - \sqrt{7}}{21}$, y cuya cuadratura cerrada sobre una región triangular con puntos de integración coincidentes con los nodos del elemento P_4 modificado integra de forma exacta hasta un polinomio completo de quinto grado, siendo todos los pesos distintos de cero.

$$a = \frac{11\sqrt{7}}{15120} + \frac{1}{216}, \quad b = \frac{11\sqrt{7}}{630} - \frac{1}{30},$$

$$c = \frac{4}{135} - \frac{4\sqrt{7}}{945}, \quad d = \frac{49}{360} - \frac{7\sqrt{7}}{720}.$$

Puntos	x	y	Pesos
1	0	0	a
2	1	0	a
3	0	1	a
4	1/4	0	c
5	1/2	0	b
6	3/4	0	c
7	3/4	1/4	c
8	1/2	1/2	b
9	1/4	3/4	c
10	0	3/4	c
11	0	1/2	b
12	0	1/4	c
13	$\frac{7-\sqrt{7}}{21}$	$\frac{7-\sqrt{7}}{21}$	d
14	$\frac{7+2\sqrt{7}}{21}$	$\frac{7-\sqrt{7}}{21}$	d
15	$\frac{7-\sqrt{7}}{21}$	$\frac{7+2\sqrt{7}}{21}$	d

Tabla 2.1: Cuadratura cerrada del elemento P_4 modificado

La matriz de masa aproximada que se obtiene con la cuadratura cerrada sobre el elemento P_4 modificado es una matriz diagonal con todos sus elementos distintos de cero. Este elemento P_4 modificado es el que utilizamos en todos nuestros ejemplos numéricos para el cálculo de la proyección ortogonal del residuo en el método OSS.

En la Tabla 2.1 presentamos la cuadratura cerrada del elemento P_4 modificado que acabamos de obtener.

2.4 Resultados de los experimentos numéricos

2.4.1 Pruebas de convergencia en malla

Las pruebas de convergencia en malla que hemos llevado a cabo consisten en calcular el error en norma L^2 , es decir, la norma L^2 de la diferencia entre la solución

Triángulos		Número de nodos			
$1/h$	elem.	$P1$	$P2$	$P3$	$P4$
15	450	256	961	2116	3721
20	800	441	1681	3721	6561
25	1250	676	2601	5776	10201
30	1800	961	3721	8281	14641
35	2450	1296	5041	11236	19881
40	3200	1681	6561	14641	25921
45	4050	2116	8281	18496	32761
50	5000	2601	10201	22801	40401

Cuadrados		Número de nodos			
$1/h$	elem.	$Q1$	$Q2$	$Q3$	$Q4$
15	225	256	961	2116	3721
20	400	441	1681	3721	6561
25	625	676	2601	5776	10201
30	900	961	3721	8281	14641
35	1250	1296	5041	11236	19881
40	1600	1681	6561	14641	25921
45	2025	2116	8281	18496	32761
50	2500	2601	10201	22801	40401

Tabla 2.2: Refinamiento para elementos triangulares y cuadrangulares

exacta y su aproximación numérica. Considerando solamente refinamiento en h , si el error del método se comporta como el error de interpolación, situación que puede considerarse óptima, este error debe comportarse como

$$e = \|u - u_h\|_{L^2} \leq ch^{p+1}, \quad (2.4.1)$$

que corresponde al mismo comportamiento que el error de interpolación (2.2.34) con $r = 0$ (y absorbiendo en la constante C la dependencia con p). Consideraremos los casos $1 \leq p \leq 4$.

Si graficamos la ecuación (2.4.1) (en el caso de la igualdad) en el plano, con $\log(e)$ en las ordenadas y $\log(h)$ en las abscisas, tenemos una línea recta en la que $p + 1$ es la pendiente teórica óptima de convergencia. Las pruebas de convergencia en malla consisten entonces en verificar que la pendiente calculada sea precisamente $p + 1$. Para ello, seleccionamos como solución exacta u a la función polinómica espacio-temporal

$$u(x, y, t) = x^6 y^6 (1 - x)^6 (1 - y)^6 t,$$

e imponemos el término fuente f en la ecuación escalar de CDR transitoria (2.2.1) para que esta sea precisamente la solución exacta del problema:

$$f = \partial_t u(x, y, t) - k \partial_i \partial_i u(x, y, t) + a_i \partial_i u(x, y, t) + s u(x, y, t),$$

donde las constantes de difusión k , las componentes de la velocidad de convección a_i y la reacción s están dadas en cada uno de los ejemplos, tomando $k = 10^{-3}$ para todos los casos. Elegimos también las condiciones de contorno (todas de Dirichlet) e iniciales para que la solución sea lo que hemos elegido.

En las Figuras 2.4, 2.5 y 2.6 presentamos los resultados de los experimentos numéricos de las pruebas de convergencia en malla con solución analítica conocida, tanto para el método ASGS como para el OSS. En cada gráfica se puede apreciar con línea continua la pendiente teórica de convergencia y con línea con apéndices sobre ella la pendiente calculada. Presentamos los resultados para los distintos grados polinómicos de las funciones de forma estudiados, es decir, elementos lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden triangulares P_1 , P_2 , P_3 , P_4 y elementos cuadrangulares Q_1 , Q_2 , Q_3 , Q_4 , respectivamente.

El dominio computacional es el cuadrado $[0, 1] \times [0, 1]$ y el intervalo de tiempo es $[0, 1]$. El tamaño del paso de tiempo lo hemos tomado como $\delta t = 0.2$. Como se verá a continuación, en este caso el error está dominado por la aproximación espacial, no se ve afectado por la aproximación de la discretización temporal. La malla de elementos finitos consiste en triángulos o cuadrados formando una malla regular. Para cada grado polinómico de las funciones de forma P_1 , P_2 , P_3 , P_4 o Q_1 , Q_2 , Q_3 , Q_4 , hemos calculado los errores en norma L^2 para ocho mallas de tamaño h , siendo $\frac{1}{h} = 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50$, el número de partes en que se ha dividido cada lado del cuadrado. En la Tabla 2.2 se muestra el número de elementos y el número de nodos para cada refinamiento, tanto para elementos triangulares como para elementos cuadrangulares. El integrador temporal utilizado es BDF1.

En el encabezado de las gráficas de las pruebas de convergencia en malla se adjuntan dos filas con los valores de las pendientes calculadas; la primera fila corresponde a los valores de las pendientes de las rectas que pasan por los primeros 5

puntos y la segunda fila son las pendientes de las rectas que pasan por los últimos 5 puntos de los 8 puntos del refinamiento de malla evaluados. De esta manera podemos visualizar numéricamente la tendencia de la convergencia de las pendientes calculadas hacia el valor teórico. Para el cálculo de dichas pendientes se ha utilizado el método de los mínimos cuadrados. La simbología $m(P1)$, $m(P2)$, $m(P3)$, $m(P4)$, corresponde a las pendientes para elementos triangulares lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden, respectivamente, mientras que para elementos cuadrangulares lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden la simbología es $m(Q1)$, $m(Q2)$, $m(Q3)$, $m(Q4)$. Los valores de las pendientes teóricas se corresponden con $m(P1) = m(Q1) = 2$, $m(P2) = m(Q2) = 3$, $m(P3) = m(Q3) = 4$, $m(P4) = m(Q4) = 5$.

Los experimentos numéricos que presentamos son los siguientes: en la Figura 2.4 convección dominante $|\mathbf{a}| = 1$ y una pequeña reacción $s = 10^{-3}$, en la Figura 2.5 convección y reacción del mismo orden, con $|\mathbf{a}| = 1$ y $s = 1$, y en la Figura 2.6 una pequeña convección $|\mathbf{a}| = 10^{-3}$ y reacción dominante $s = 1$. Para todos los ejemplos tomamos $k = 10^{-3}$, como se ha indicado anteriormente.

Para los dos métodos de estabilización ASGS y OSS, los valores de las constantes algorítmicas c_i , $i = 1, 2, 3$ se han calibrado a $c_1 = 12$, $c_2 = 2$, $c_3 = 1$. También es necesario indicar que para el método OSS con elementos triangulares de cuarto orden P_4 , hemos usado en el mallado el elemento P_4 modificado mencionado en la Sección 2.3.

En las gráficas de las figuras de convergencia en malla se observa tanto gráfica como numéricamente que las pendientes calculadas son mayores o tienden al valor de la pendiente teórica $p + 1$. Los resultados muestran claramente que las formulaciones ASGS y OSS son capaces de aproximar correctamente el problema de CDR escalar transitorio con todas las combinaciones de convección y reacción dominantes.

2.4.2 Pruebas con capas límite

A continuación presentamos un grupo de pruebas cualitativas para observar la estabilidad de los métodos de elementos finitos ASGS y OSS, en la ecuación escalar transitoria de CDR. Se analizan cuatro casos en el dominio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, $\gamma = [0, 1]$, combinando los valores de término fuente $f = 1$, $f = 0$ y con

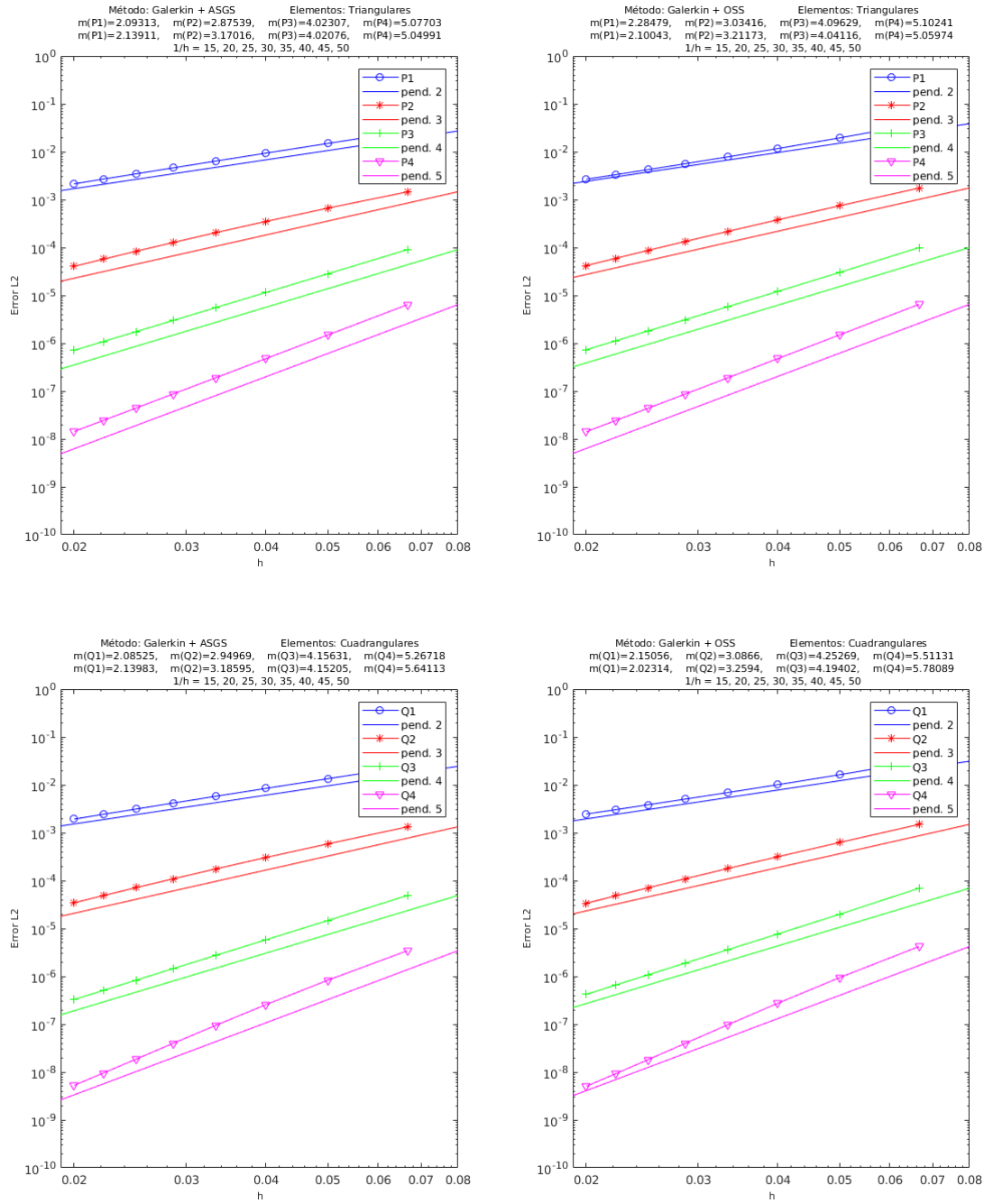


Figura 2.4: Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares y cuadrangulares. $k = 10^{-3}$, $\mathbf{a} = [\cos 60^\circ, \sin 60^\circ]$, $s = 10^{-3}$.

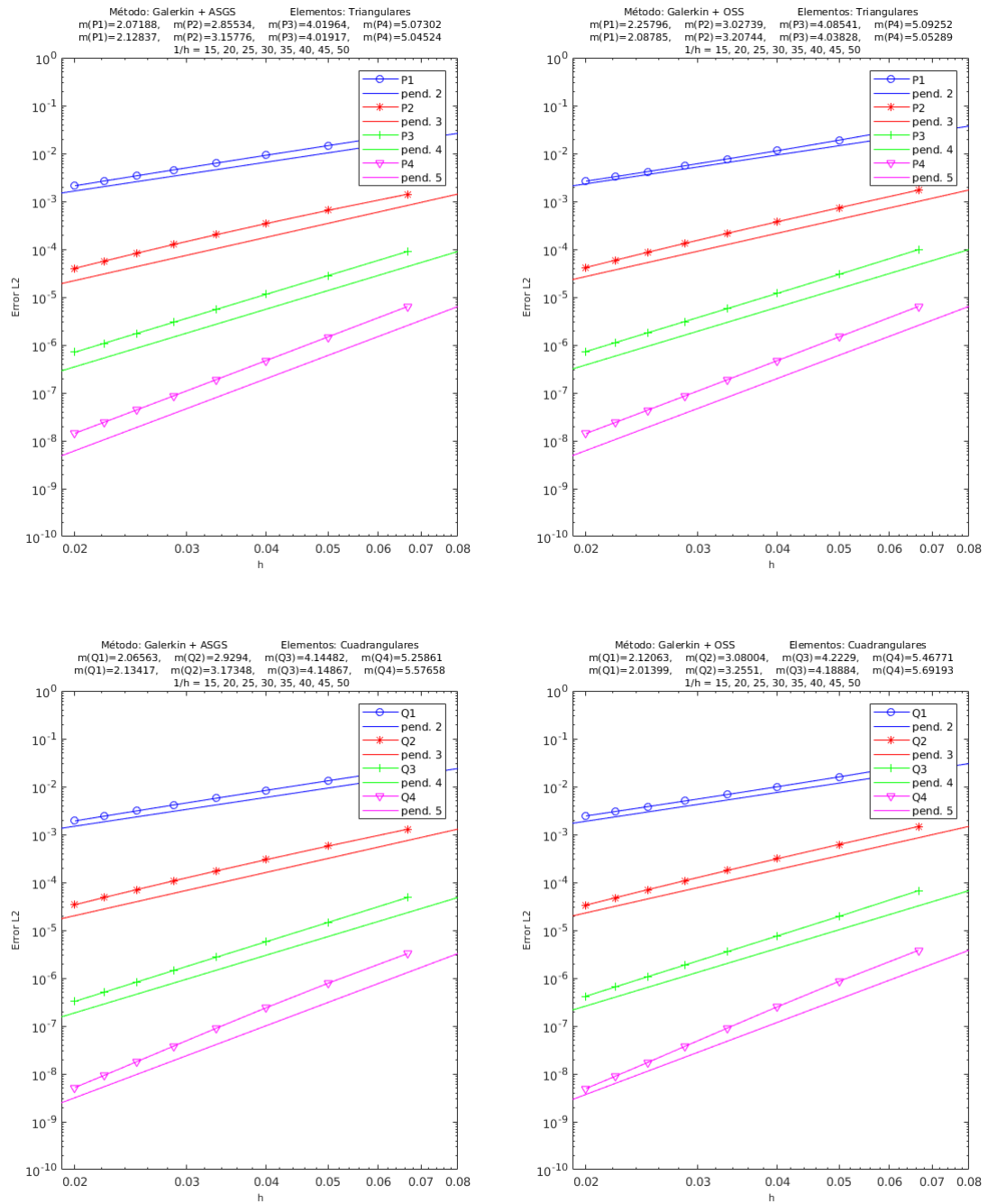


Figura 2.5: Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares y cuadrangulares. $k = 10^{-3}$, $\mathbf{a} = [\cos 60^\circ, \text{sen}60^\circ]$, $s = 1$.

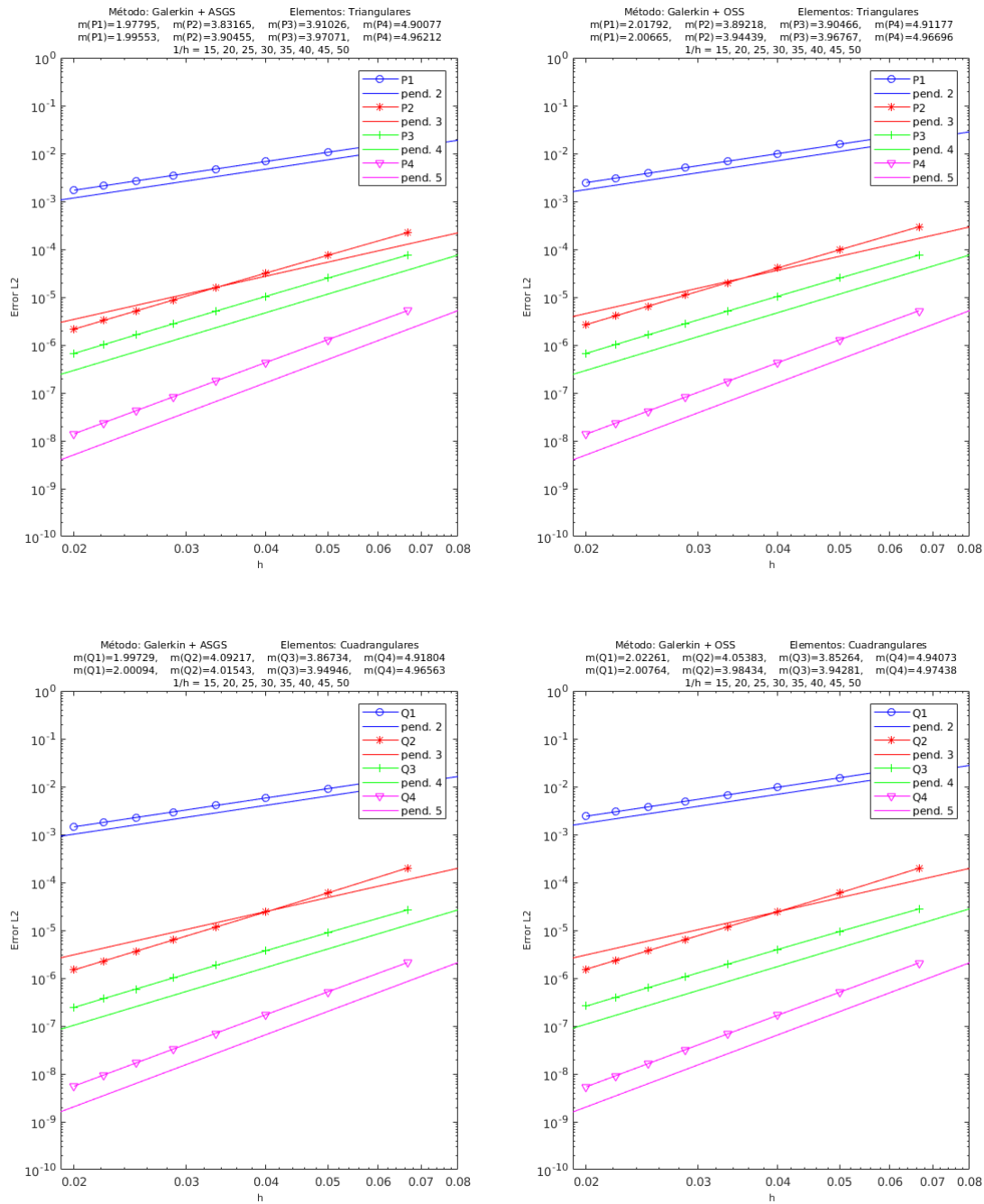


Figura 2.6: Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares y cuadrangulares. $k = 10^{-3}$, $\mathbf{a} = [\cos 60^\circ, \text{sen}60^\circ] * 10^{-3}$, $s = 1$.

el coeficiente de reacción $s = 0$, $s = 1$, y además variando la dirección de la velocidad, considerando un valor de $|\mathbf{a}| = 1$ en todos los casos. El valor del coeficiente de difusión es $k = 10^{-5}$ para todos los ejemplos, con el fin de tener convección dominante y poder probar la estabilidad de los métodos. El tamaño del paso de tiempo considerado constante es $\delta t = 0.2$ y el tamaño del elemento para todas las figuras es $1/h = 20$. En todos los casos, excepto el caso de la Figura 2.8 se imponen condiciones de Dirichlet homogéneas observando inestabilidades locales en el contorno, como era de esperar, pero siendo las soluciones globalmente estables. Para el caso de la Figura 2.8, las condiciones de Dirichlet en el contorno son: $u(x, 0, t) = 1$ en $0 \leq x \leq 0.3$, $u(x, 0, t) = 0$ en $0.3 < x \leq 1$, $u(0, y, t) = 1$, $u(1, y, t) = 0$, $u(1, x, t) = 0$. La condición inicial para todos los casos es $u(\mathbf{x}, 0) = 0$ en todo Ω .

En cada figura se presentan ocho gráficos que corresponden a los cuatro grados polinómicos de las funciones de forma analizadas para cada método estabilizado de elementos finitos ASGS y OSS. La solución se presenta en $t = 1$, tiempo en el cual se ha alcanzado el estado estacionario usando el integrador temporal BDF1.

En la Figura 2.7 presentamos el caso con término fuente $f = 1$, velocidad de convección en la dirección del eje y $\mathbf{a} = [0, 1]$, coeficiente de reacción $s = 0$ y condiciones de Dirichlet homogéneas. En la Figura 2.8 se encuentra el caso con término fuente $f = 0$, velocidad de convección inclinada $\mathbf{a} = [\text{sen}60^\circ, \text{cos}60^\circ]$, coeficiente de reacción $s = 0$, y las condiciones de Dirichlet en el contorno dadas anteriormente. En la Figura 2.9 encontramos el caso con término fuente $f = 1$, velocidad de convección inclinada $\mathbf{a} = [\text{sen}60^\circ, \text{cos}60^\circ]$, coeficiente de reacción $s = 0$ y condiciones de Dirichlet homogéneas. Y finalmente, en la Figura 2.10 tenemos el caso con término fuente $f = 1$, velocidad de convección inclinada $\mathbf{a} = [\text{sen}30^\circ, \text{cos}30^\circ]$, coeficiente de reacción $s = 1$ y condiciones de Dirichlet homogéneas.

En todas las figuras se observa que el comportamiento es el esperado en concordancia con los datos de cada figura. Además observamos que en todas las figuras existen inestabilidades en los bordes correspondientes a las capas límite, las cuales es importante notar que se atenúan al incrementar el refinamiento polinómico.

En la Figura 2.11 encontramos una comparación de los métodos ASGS y OSS, realizando cortes sobre las gráficas de capas límite para los dos métodos ASGS y OSS del ejemplo de la Figura 2.7, y graficando los dos cortes sobre un mismo plano cartesiano. Los cortes que encontramos en la Figura (2.2.1) son cortes

longitudinales y cortes transversales. Como era de esperar, aparecen oscilaciones localizadas en las capas límites que no se propagan al interior del dominio. Para eliminarlas habría que introducir algún método de captura de discontinuidades. Se observa también que los picos espúreos del método OSS son mayores que los del método ASGS. Este comportamiento es conocido, como también lo es la mayor exactitud del método OSS, y los resultados presentados aquí corroboran este hecho para elementos de alto orden.

2.4.3 Transporte de una concentración

Presentamos a continuación los resultados numéricos para un ejemplo menos académico, consistente en el transporte y difusión de una concentración en parte de la superficie de un ducto de directriz x . Suponemos que tenemos un flujo constante con velocidad unidireccional $\mathbf{a} = [1, 0]$ en un ducto, como se ilustra en la Figura 2.12. También asumimos que sobre una región de la pared superior del ducto tenemos una concentración constante $u = 1$ de una variable u , y sobre el resto de la periferia del ducto incluyendo la sección transversal a la entrada del flujo, asumimos el valor $u = 0$. Queremos estudiar como se propaga esta concentración dentro del flujo considerado.

Considerando el ancho mucho mayor que la altura y debido a que el flujo es constante en toda la sección transversal del ducto, podemos simplificar el planteamiento del problema a dos dimensiones como vemos en la Figura 2.13.

El modelo matemático que resuelve el problema planteado es:

$$\begin{aligned} \partial_t u - k \partial_i \partial_i u + a_i \partial_i u &= f, & \text{en } \Omega \times \gamma \\ u &= u_D, & \text{en } \partial\Omega_D \times \gamma, \\ \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, & \text{en } \partial\Omega_N \times \gamma, \\ u &= 0, & \text{en } \Omega \times \{0\}. \end{aligned}$$

Para nuestro problema $k = 10^{-3}$, $\mathbf{a} = [1, 0]$, $f = 0$, el dominio Ω es el rectángulo de dimensiones $l_x = 1$ y $l_y = 0.1$ y el intervalo de tiempo $\gamma = [0, 1]$.

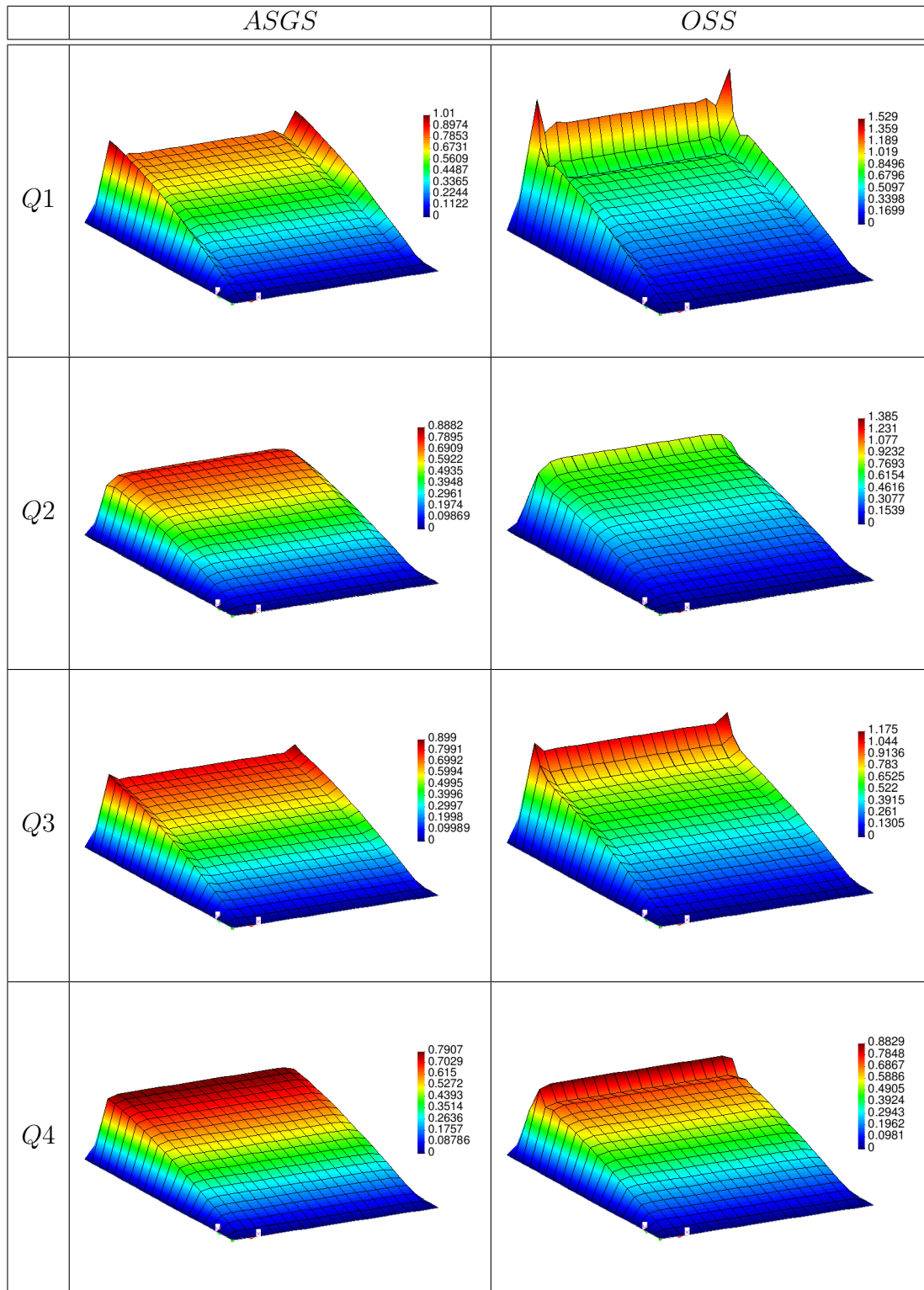


Figura 2.7: Capas límite con ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. $k = 10^{-5}$, $\mathbf{a} = [0, 1]$, $s = 0$, $f = 1$ y condiciones de Dirichlet homogéneas en todo el contorno.

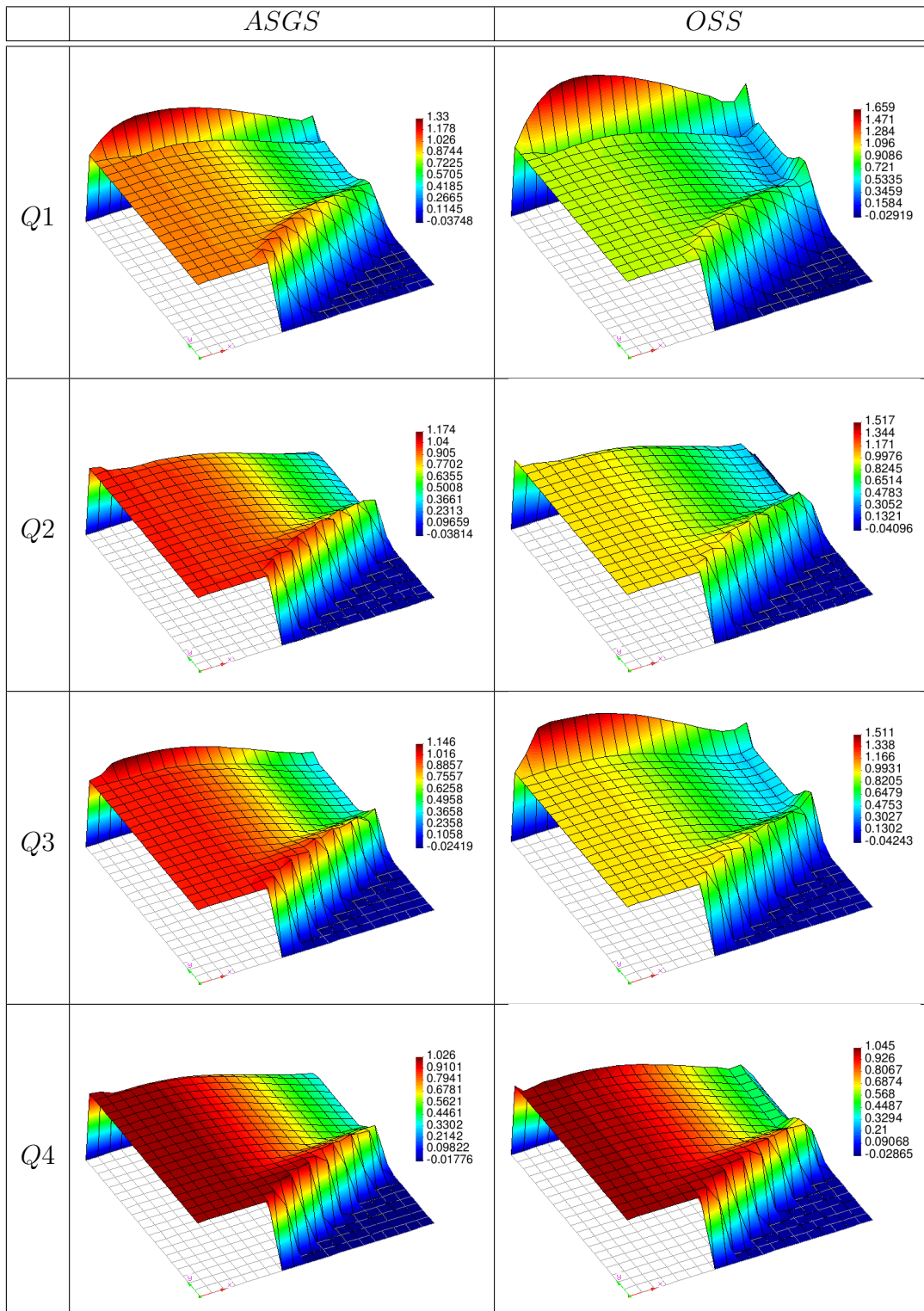


Figura 2.8: Capas límite con ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. $k = 10^{-5}$, $\mathbf{a} = [\text{sen}60^\circ, \text{cos}60^\circ]$, $s = 0$, $f = 0$ y condiciones de Dirichlet homogéneas en todo el contorno.

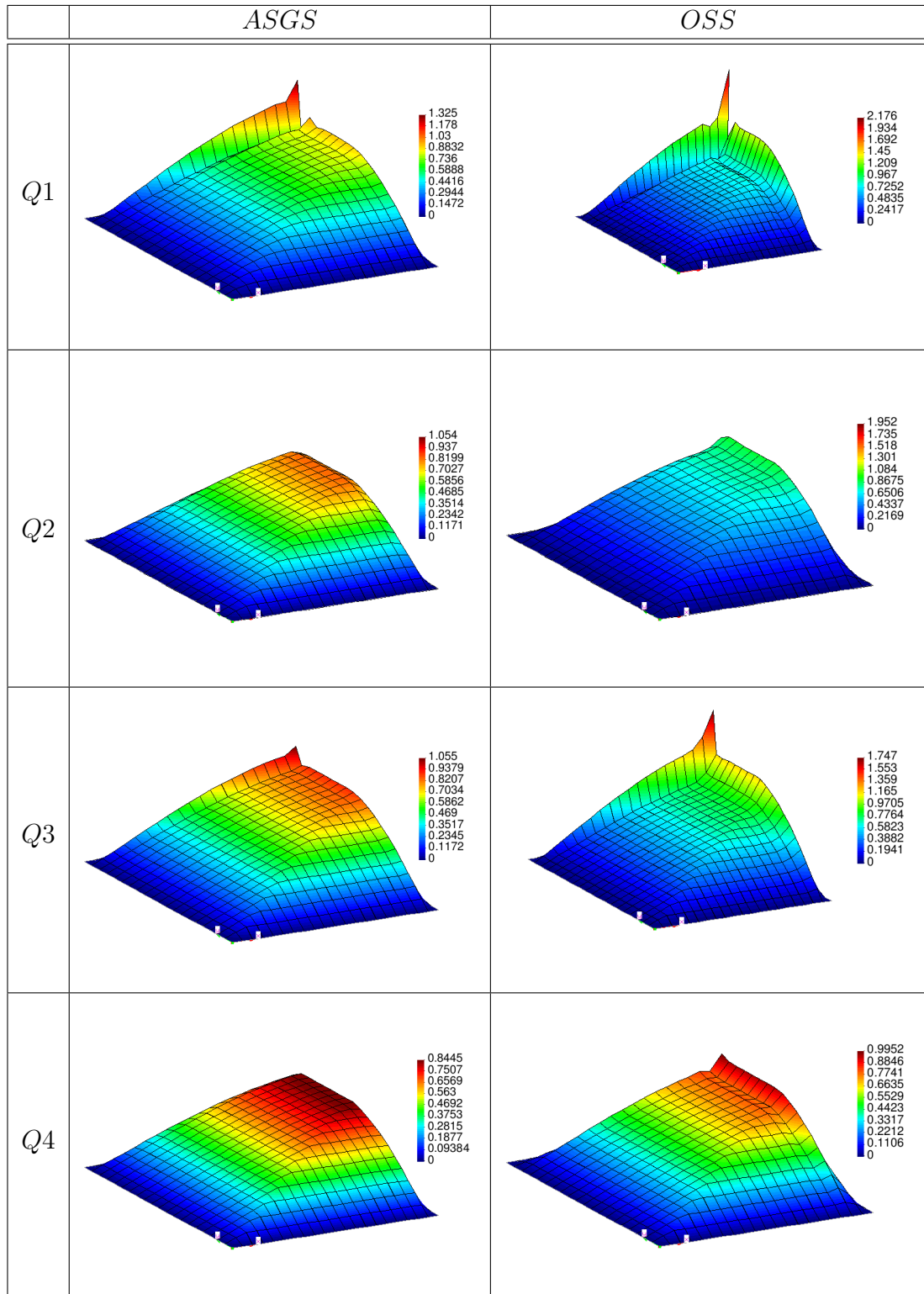


Figura 2.9: Capas límite con ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. $k = 10^{-5}$, $\mathbf{a} = [\text{sen}60^\circ, \text{cos}60^\circ]$, $s = 0$, $f = 1$ y condiciones de Dirichlet homogéneas en todo el contorno.

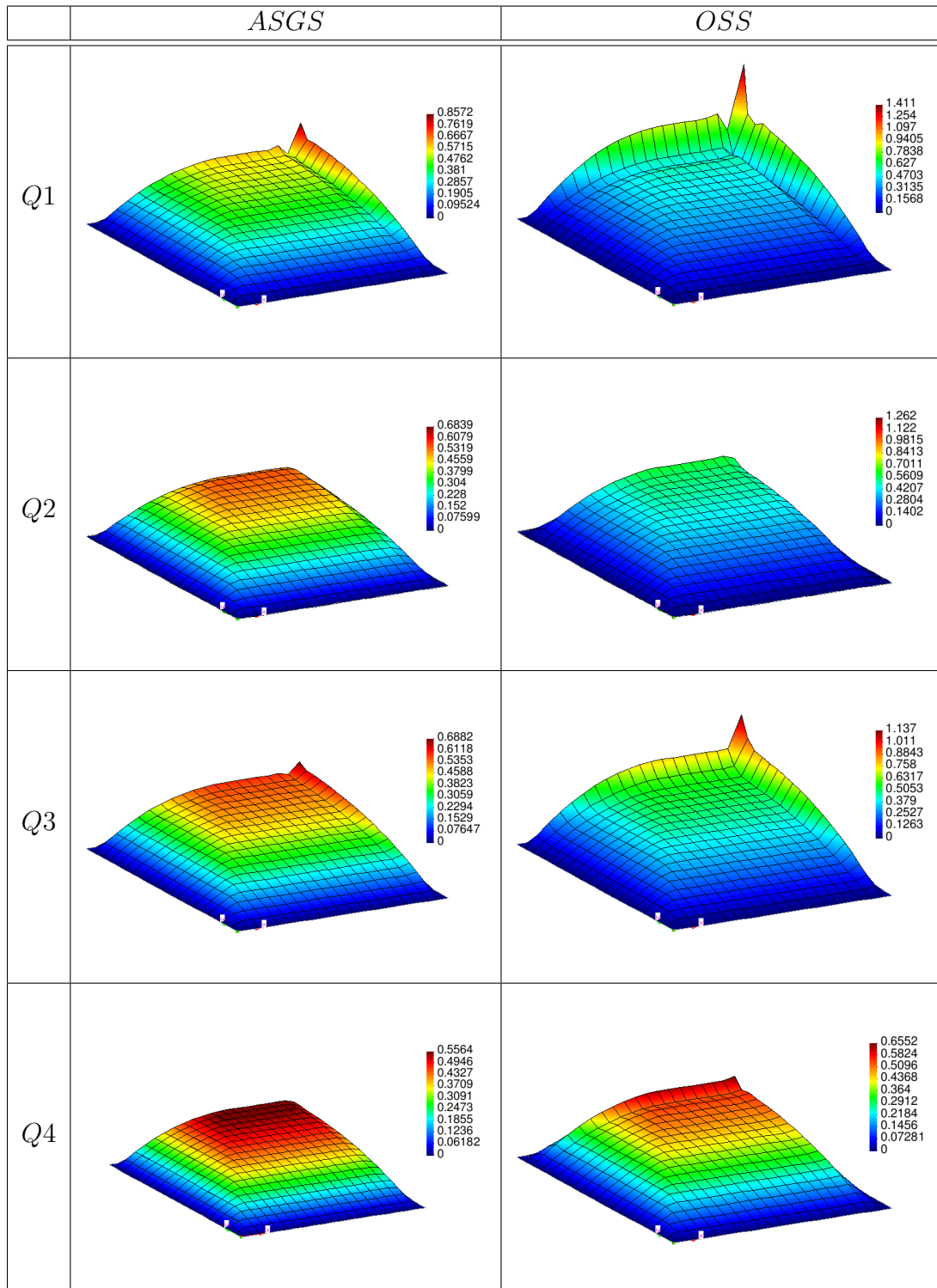


Figura 2.10: Capas límite con ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. $k = 10^{-5}$, $\mathbf{a} = [\text{sen}30, \text{cos}30^\circ]$, $s = 1$, $f = 1$ y condiciones de Dirichlet homogéneas en todo el contorno.

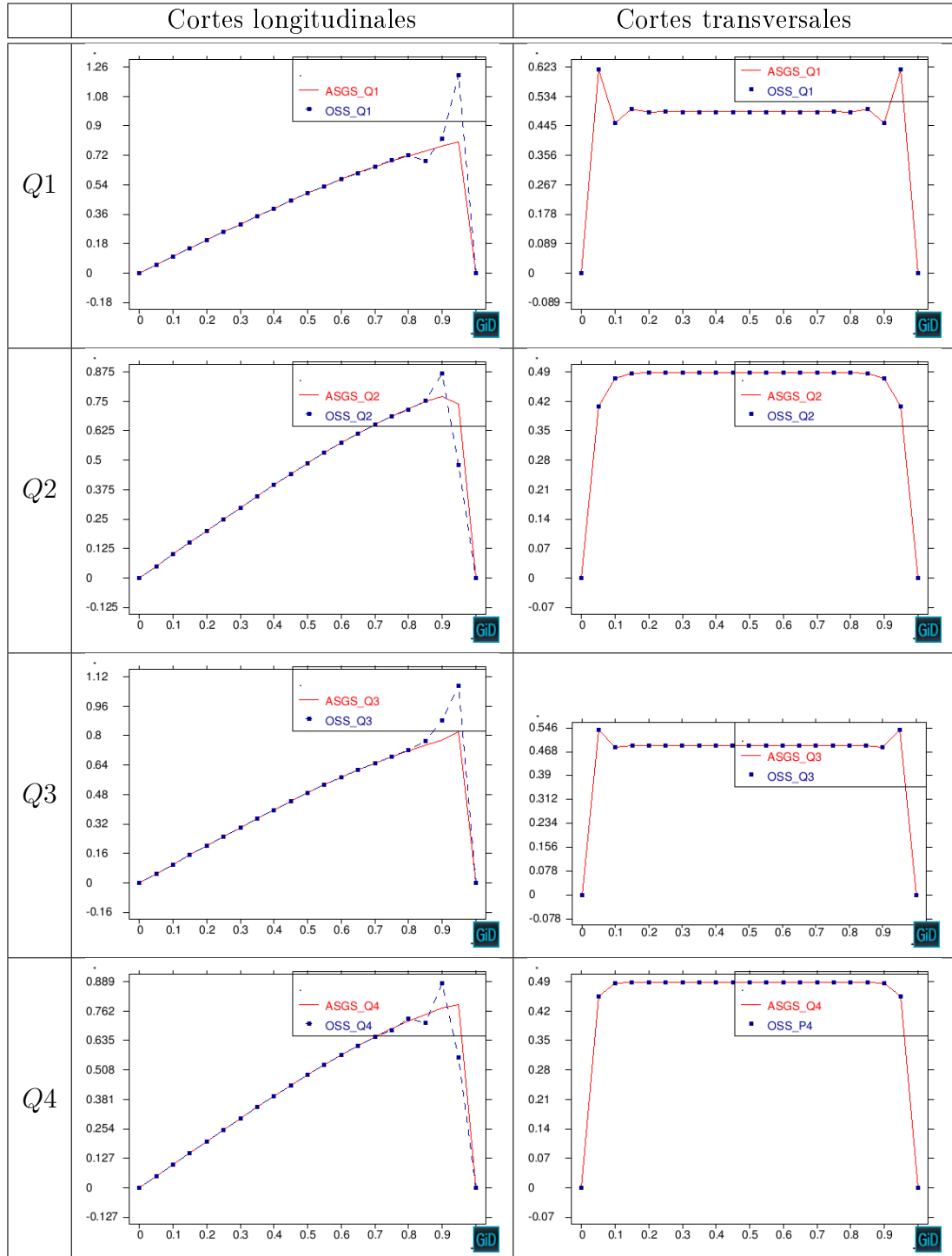


Figura 2.11: Comparación ASGS y OSS, elementos cuadrangulares. Cortes longitudinales y transversales del ejemplo de la Figura 2.7.

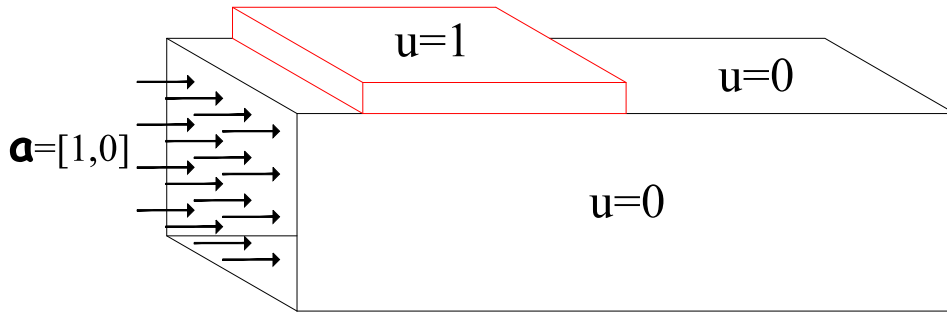


Figura 2.12: Ducto en 3D

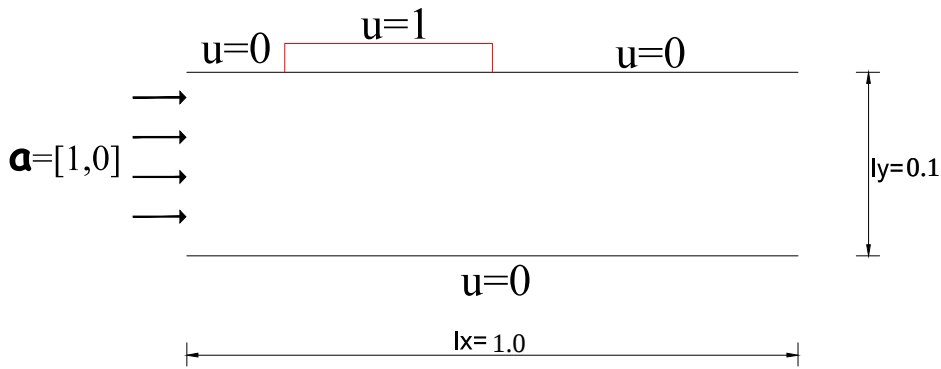


Figura 2.13: Ducto en 2D

Las condiciones de Dirichlet en el contorno $\partial\Omega_D$ donde se imponen son:

$$u_D(x, y, t) = \begin{cases} 0 & x \in [0, 1], y = 0, t \in [0, 1] \\ 0 & x = 0, y \in [0, 0.1], t \in [0, 1] \\ 0 & x \in [0, 0.05) \cup (0.5, 1], y = 0.1, t \in [0, 1] \\ 1 & x \in [0.05, 0.5], y = 0.1, t \in [0, 1] \end{cases} \quad (2.4.2)$$

En el extremo derecho ($\partial\Omega_N$) no se impone ninguna condición de Dirichlet, sino que se considera libre.

El intervalo de tiempo $[0, 1]$ se discretiza mediante una partición uniforme de tamaño $\delta t = 0.2$. Como en los ejemplos anteriores, el integrador temporal utilizado es BDF1. La malla de elementos finitos utilizada consiste de 850 elementos

cuadrangulares formando una malla regular con 918 nodos para el Q_1 , 3535 nodos para el Q_2 , 7852 nodos para el Q_3 y 13869 nodos para el Q_4 .

En la Figura 2.14 se muestran los resultados de la simulación numérica de este problema en $t = 1$ para los dos métodos ASGS y OSS y para los cuatro grados polinómicos de las funciones de forma, Q_1 , Q_2 , Q_3 , y Q_4 , observando en todos los casos que los resultados son los esperados en concordancia con los datos del problema. Se visualiza el efecto de la convección dominante, ya que se observa que la concentración u que se prescribe como condición de contorno se transporta al interior del dominio con poca difusión. En ninguno de los casos considerados se aprecian oscilaciones, que es el objetivo de los métodos de estabilización.

2.5 Conclusiones

En este capítulo hemos presentado una revisión de los métodos estabilizados ASGS y OSS y su estudio con elementos finitos de alto orden, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden, para resolver la ecuación escalar transitoria de CDR en problemas con convección y reacción dominantes. En el cálculo del parámetro de estabilización τ hemos incluido el grado del polinomio, para de esta manera poder utilizar elementos finitos de alto orden y mantener el orden de aproximación óptimo tanto en h como en p . Para poder usar de forma eficiente el método OSS con el elemento simplicial de cuarto orden, hemos presentado el procedimiento para construir un elemento P_4 modificado, el cual permite aproximar la matriz de masa por una matriz diagonal con todos sus elementos distintos de cero; hemos usado este elemento modificado en todos los ejemplos con elementos de cuarto orden con el método OSS.

Los experimentos numéricos de las pruebas de convergencia en malla para elementos lineales y de alto orden revelan que la convergencia de los dos métodos estabilizados es óptima, para todos los casos de convección y reacción dominantes, tanto para elementos triangulares como para elementos cuadrangulares, y para todos los grados polinómicos de las funciones de forma que hemos considerado. Hemos observado que las pendientes de convergencia del método OSS son ligeramente mayores que las del método ASGS, lo cual indica mayor precisión del método OSS. Además, también se concluye que para un número de nodos dado, los errores son menores cuando mayor es el grado del polinomio de forma utilizado, lo cual indica que para obtener un menor coste computacional para una

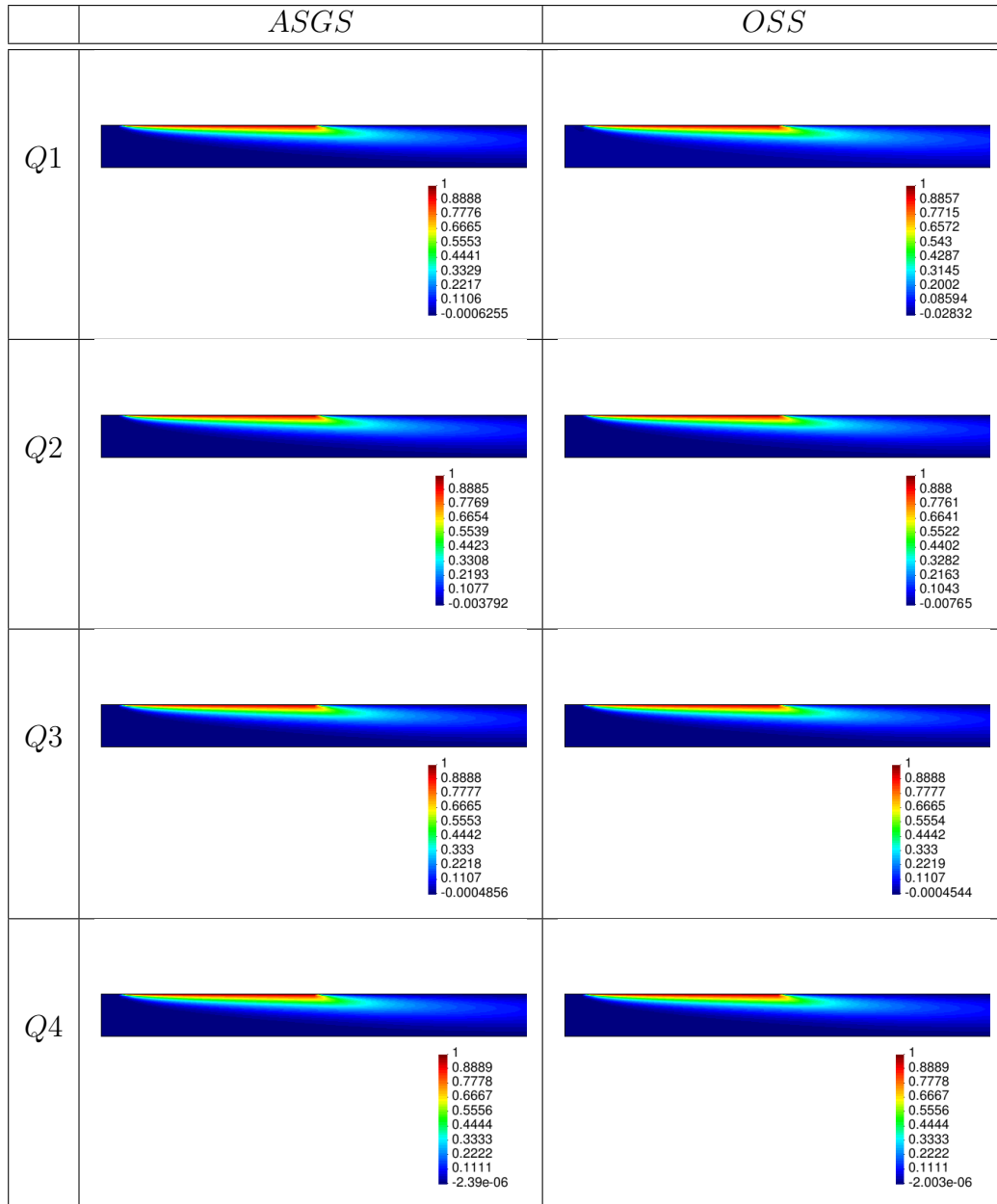


Figura 2.14: Ejemplo práctico

precisión dada podría ser conveniente utilizar elementos finitos de alto orden. Sin embargo, no ha sido nuestro objetivo estudiar con detalle el coste computacional de los métodos presentados.

En términos generales, los resultados de las pruebas de capas límite han sido los esperados y están en concordancia con las condiciones impuestas en cada caso. Asimismo, hemos observado que el método OSS produce más oscilaciones localizadas en las capas límites, como ya era conocido para el caso de elementos lineales y cuadráticos.

Finalmente, los resultados del ejemplo de la simulación numérica del transporte de una concentración han sido satisfactorios, de acuerdo con el fenómeno físico planteado. En este caso, las diferencias de los resultados entre los métodos ASGS y OSS son insignificantes.

Capítulo 3

Aproximación de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas con elementos finitos de alto orden mediante métodos variacionales multiescalas

En este capítulo, presentamos aproximaciones de elementos finitos de alto orden usando métodos variacionales multiescala estabilizados para aproximar las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas (shallow water equations, en inglés). Escribimos estas ecuaciones como un sistema de ecuaciones de tipo convección-difusión-reacción (CDR) no lineal y transitorio, y planteamos nuestros desarrollos en este marco general. Los métodos variacionales multiescala (VMS) se basan en la descomposición de las incógnitas del problema continuo en una parte resoluble en el espacio de elementos finitos y otra que no puede ser capturada por la malla de elementos finitos y que la denominamos subescala. La subescala se aproxima en términos de la solución de elementos finitos, obteniéndose un esquema numérico robusto, que permite en particular igual interpolación para todas las incógnitas y la posibilidad de tratar con flujos de convección dominante (no consideraremos la posibilidad de tratar con choques). Los métodos VMS que consideraremos son los llamados de subescalas algebraicas (ASGS, por Algebraic SubGrid Scales) y subescalas ortogonales (OSS, por Orthogonal Subgrid Scales)

3.1 Introducción

Las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas se obtienen a partir de las ecuaciones de Euler para fluidos invisidos o a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos con viscosidad. Estas ecuaciones describen el movimiento en una capa delgada de fluido de densidad constante en equilibrio hidrostático, limitada en su parte inferior por la topografía del terreno y por arriba por una superficie libre, y promediando las variables a lo largo de la profundidad. Son una buena aproximación del comportamiento de un fluido cuando la profundidad de este dominio estudiado es pequeña con respecto al tamaño global del dominio. Es por esto que dichas ecuaciones describen bien el flujo en canales, ríos, lagos y lagunas, flujos de marea, corrientes marinas, avance de un frente de onda, arrastre de sedimentos, variación de concentración salina, flujo en la rotura de presas, flujos atmosféricos, transporte de contaminantes y tsunamis, entre otros; véase por ejemplo [36, 40, 41, 42].

Se ha realizado una extensa investigación numérica en el área de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas, aplicando métodos de diferencias finitas [39], métodos de volúmenes finitos [35, 37, 43], métodos de elementos finitos [29, 30, 31, 32, 34], métodos tipo Godunov [38, 44] y métodos Boltzmann [45].

Las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas que vamos a utilizar son las obtenidas a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos viscosos, y que se encuentran descritas por ejemplo en [25], entre otras referencias. El problema que se debe resolver puede ser escrito en forma conservativa en términos de la profundidad del fluido y de las velocidades promediadas en la plano donde el flujo medio tiene lugar. La presencia del término fuente en la ecuación de momento, la consideración de batimetría variable, fricción en el fondo del lecho, tensión en la superficie libre del agua debida al viento, el efecto de Coriolis, son aspectos que se pueden tener en cuenta en el modelo físico.

En este capítulo vamos a realizar la aproximación de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas con elementos finitos de alto orden y usando los métodos VMS (Variational Multi-Scale) llamados ASGS (Algebraic SubGrid Scale) y OSS (Orthogonal Subgrid Scale). La contribución de este trabajo es tanto aplicar estas técnicas (por otro lado conocidas) al problema de flujo de aguas poco profundas como experimentar con elementos de orden elevado

(hasta cuarto orden).

Veremos en primer lugar cómo a través de un cambio de variables adecuado y linearizando las ecuaciones de partida, cada iteración del proceso no lineal puede escribirse como un sistema acoplado de ecuaciones de convección-difusión-reacción (CDR). Plantearemos la aproximación de este sistema general de ecuaciones, particularizándolo después al problema de aguas poco profundas.

La estrategia de discretización que plantearemos consiste en dos pasos. Primero procederemos a discretizar en el tiempo mediante un esquema de integración temporal en diferencias finitas, y luego realizaremos una aproximación de elementos finitos en el espacio. Este procedimiento desacopla los errores provenientes de la discretización temporal de los correspondientes a la discretización espacial. Sin embargo, se tiene que señalar que el enfoque más común es proceder a la inversa, es decir, primero discretizar en el espacio y luego aproximar el sistema resultante de ecuaciones diferenciales en el tiempo. Para el método convencional de Galerkin ambos caminos dan lugar al mismo problema discreto, pero no es así para todos los métodos de estabilización basados en VMS. En lo concerniente a la discretización temporal, usaremos la regla trapezoidal generalizada, que es el método en diferencias finitas más sencillo; sin embargo, podríamos aplicar cualquier otro esquema en diferencias finitas.

En cuanto a la discretización espacial, es bien conocido que el método estándar de Galerkin puede fallar por dos razones: la presencia del término convectivo (no-lineal) dominante con respecto al término viscoso, y la necesidad de usar diferentes interpolaciones de elementos finitos para la profundidad y las velocidades promediadas, similarmente a lo que ocurre para la presión y la velocidad en el clásico problema de Stokes; dicha necesidad se plantea en forma de condición inf-sup. Ambas pueden superarse mediante una formulación estabilizada. Aquí vamos a usar las formulaciones basadas en subescalas y, en particular, el enfoque introducido por Hughes y otros en [1, 2] para la ecuación de CDR escalar y generalizado a sistemas lineales en [4, 5] y que corresponde al método ASGS para resolver el problema CDR vectorial estacionario. La idea básica es aproximar el efecto de la componente de la solución continua que no puede ser resuelta por la malla de elementos finitos en términos de la solución en el espacio de elementos finitos. Una importante característica introducida en [6, 33] es que la componente no resuelta, denominada subescala, se considera ortogonal respecto del producto escalar de L^2 al espacio de elementos finitos, lo cual se explicará más adelante.

Esta idea fue primero introducida en [33] como una extensión de un método de estabilización originalmente introducido para el problema de Stokes en [46] y totalmente analizado para la ecuación estacionaria de Navier-Stokes en [47]. Con estas ideas aplicadas al problema CDR vectorial estacionario se obtiene el método OSS para resolver dicho problema. Finalmente, para el problema CDR vectorial transitorio, que es el que usamos directamente para resolver las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas, la formulación obtenida está basada en lo expuesto en [9, 10, 6]. Hay que hacer notar que no consideraremos el posible desarrollo de choques en la solución, es decir, discontinuidades que pueden llegar a producirse en el límite invíscido. Para su aproximación hay que recurrir a técnicas de captura de discontinuidades que no consideraremos en este trabajo.

El capítulo está organizado como sigue. En la siguiente sección se describe la física del problema que queremos resolver y la obtención de la ecuación vectorial de CDR transitoria que representa el problema del movimiento de un fluido en aguas poco profundas. Las aproximaciones y formulaciones numéricas están descritas en la Sección 3.3. En la Sección 3.4 se presentan pruebas numéricas de convergencia en malla con soluciones analíticas conocidas y ejemplos numéricos de referencia en la literatura. Finalmente, en base a los resultados obtenidos se extraen algunas conclusiones en la Sección 3.5.

3.2 Planteamiento del problema, linealización y discretización temporal

3.2.1 Ecuaciones de gobierno

Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^2 con coordenadas cartesianas $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$. Consideremos un fluido que se mueve durante el intervalo de tiempo $[0, T]$ en el dominio de \mathbb{R}^3 dado por $\Omega \times (-H(\mathbf{x}), \eta(\mathbf{x}, t))$, donde $x_3 = -H(\mathbf{x})$ representa la batimetría del terreno y $x_3 = \eta(\mathbf{x}, t)$ es la superficie libre del fluido, $\mathbf{x} \in \Omega$, $t \in [0, T]$, que será incógnita del problema. Consideraremos que $h(\mathbf{x}, t) := H(\mathbf{x}) + \eta(\mathbf{x}, t)$ es mucho menor que el diámetro de Ω , por lo que supondremos válida la aproximación de las ecuaciones de movimiento en aguas poco profundas, las cuales se obtienen por integración vertical de las ecuaciones generales de movimiento, bien sea de fluidos viscosos (ecuaciones de Navier-Stokes) o invíscidos (ecuaciones de

Euler); véase por ejemplo [25, 26]. En este capítulo vamos a utilizar las ecuaciones obtenidas a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido newtoniano incompresible e isotérmico, incluyendo la tensión superficial provocada por los efectos del viento, así como también los efectos de Coriolis. Dichas ecuaciones pueden escribirse en forma indicial como

$$\partial_t (hU_i) + \partial_j (hU_i U_j) + \partial_i \frac{1}{2} g (h^2 - H^2) - \partial_j \left(\frac{h}{\rho} \bar{\tau}_{ji} \right) + Q_i = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3.2.1)$$

$$\partial_t h + \partial_i (hU_i) = 0, \quad (3.2.2)$$

con

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu_H \left(\partial_j U_i + \partial_i U_j - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k U_k \right), \quad i, j = 1, 2, \quad (3.2.3)$$

$$Q_i = h \hat{f} (-\delta_{i1} U_2 + \delta_{i2} U_1) - g (h - H) \partial_i H + \frac{h}{\rho} \partial_i p_a - \frac{1}{\rho} \tau_{3i}^s + g U_i U_0 \text{Ch}^{-1} h^{-2}, \quad i = 1, 2, \quad (3.2.4)$$

y

$$U_0 = \sqrt{U_1^2 + U_2^2},$$

donde $U_i(\mathbf{x}, t)$ ($i = 1, 2$) son las componentes de la velocidad promediadas en la profundidad, δ_{ij} es la delta de Kronecker, ∂_t denota la derivada temporal y ∂_i la derivada con respecto a la i -ésima coordenada cartesiana ($i = 1, 2$) en Ω . En las ecuaciones anteriores y en lo que sigue, índices repetidos indican la notación de sumación de Einstein, y los subíndices i, j, k recorren desde 1 hasta 2. En las expresiones previas, g es la aceleración de la gravedad, ρ la densidad del fluido, $\bar{\tau}_{ij}$ son las tensiones viscosas promediadas, μ_H es el coeficiente de viscosidad dinámico, \hat{f} es el parámetro de Coriolis, p_a es la presión atmosférica, τ_{3i}^s ($i = 1, 2$) son las tensiones en la superficie libre del agua debidas al viento, Ch es el coeficiente de Chézy para el rozamiento en el fondo y U_0 es la norma euclídea de (U_1, U_2) . Las ecuaciones (3.2.1) y (3.2.2) representan un sistema de tres ecuaciones, cuyo vector de incógnitas es

$$\mathbf{U}^T = [U_1, U_2, h].$$

Dichas ecuaciones constituyen las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas

poco profundas. Se deben completar con condiciones iniciales y de contorno. Los valores iniciales para la elevación del agua y las velocidades promediadas deben ser conocidos como condiciones iniciales. Con respecto a las condiciones de contorno, es bien conocido que el problema está bien puesto si la velocidad promediada se especifica en el contorno de entrada del dominio computacional Ω , mientras que en el resto del contorno se prescribe la componente normal de las tensiones viscosas y la elevación del fluido.

Las ecuaciones para aguas poco profundas descritas anteriormente, en su forma conservativa, se presentaron en esta forma en las referencias [27, 28]. Debido a su complejidad, en la literatura existen muchas variantes de estas ecuaciones con distintas simplificaciones, tanto para las ecuaciones que parten de las ecuaciones de Euler [26], como para las ecuaciones obtenidas de las ecuaciones de Navier-Stokes [25].

En nuestro trabajo utilizaremos las ecuaciones 3.2.1 y 3.2.2 sin eliminar o hacer simplificaciones de ninguno de sus términos. Mediante un cambio de variables transformaremos las ecuaciones para poder escribirlas como una ecuación vectorial de convección-difusión-reacción (CDR) transitoria de la forma

$$\partial_t \mathbf{u} - \partial_i (\mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u}) + \partial_i (\mathbf{A}_i \mathbf{u}) + \mathbf{S} \mathbf{u} = \mathbf{F} \quad i, j = 1, 2, \quad (3.2.5)$$

para la que más adelante, en la Sección 3.3, presentaremos su aproximación numérica por elementos finitos mediante los métodos variacionales de subescalas ASGS y OSS. En las ecuaciones anteriores, \mathbf{u} es el vector de incógnitas, \mathbf{F} el vector de fuerzas conocido y \mathbf{K}_{ij} , \mathbf{A}_i , \mathbf{S} matrices dadas, que pueden depender de \mathbf{u} en problemas no lineales. Para una descripción general de cómo tratar el problema genérico descrito y sus aplicaciones en mecánica de fluidos, véase [19].

3.2.2 Cambio de variables

Realizando el cambio de variables $u_i := hU_i$ y $P := \frac{1}{2}g(h^2 - H^2)$, con $\partial_t P = hg\partial_t h$, las ecuaciones (3.2.1) y (3.2.2) se pueden escribir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \partial_t u_i + \partial_j (U_j u_i) + \partial_i P - \partial_j \frac{\mu_H}{\rho} \left[\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k u_k \right) \right. \\ \left. - \left(U_j \partial_i h + U_i \partial_j h - \frac{2}{3} \delta_{ij} U_k \partial_k h \right) \right] \end{aligned}$$

$$+\hat{f}(-\delta_{i1}u_2 + \delta_{i2}u_1) + gU_0Ch^{-1}h^{-3}u_i - g(h - H)\partial_i H + \frac{h}{\rho}\partial_i p_a - \frac{1}{\rho}\tau_{3i}^s = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3.2.6)$$

$$\frac{1}{hg}\partial_t P + \partial_i u_i = 0. \quad (3.2.7)$$

Las ecuaciones (3.2.6) y (3.2.7) se pueden escribir fácilmente en el formato de la ecuación (3.2.5), considerando esta como una ecuación no lineal, con las matrices de coeficientes dependientes de la incógnita. Sin embargo, detallaremos esta identificación en el caso del problema linealizado y discretizado en el tiempo.

3.2.3 Discretización en el tiempo y linealización

Para la discretización temporal de las ecuaciones de movimiento, consideremos una partición uniforme del intervalo de tiempo $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^N = T$, con $\delta t = t^{n+1} - t^n$, donde δt es el tamaño del paso de tiempo, considerado constante. Aquí y en adelante, usaremos el superíndice n para indicar el nivel de tiempo n .

Aunque la discretización en el tiempo puede realizarse mediante cualquier aproximación de la derivada temporal en diferencias finitas o elementos finitos, aquí utilizaremos la regla trapezoidal generalizada. Para una función genérica f , sea

$$f^{n+\theta} = \theta f^{n+1} + (1 - \theta) f^n, \quad 0 \leq \theta \leq 1. \quad (3.2.8)$$

Aproximaremos

$$\delta_t^n f := \frac{1}{\delta t}(f^{n+1} - f^n) = \frac{1}{\theta \delta t}(f^{n+\theta} - f^n) \approx (\partial_t f)^{n+\theta}.$$

Esta aproximación es de segundo orden en δt en el caso en que $\theta = 1/2$ (método de Crank-Nicolson) y de primer orden si $\theta \neq 1/2$. Para $\theta = 1$ corresponde al método de Euler implícito o el método de diferencias hacia atrás de primer orden, a menudo abreviado como BDF1.

En cuanto a la linealización, utilizaremos el método de punto fijo de Picard. En cada iteración de cada paso de tiempo, el problema a resolver es de la forma

$$\delta_t^n u_i + \partial_j (a_j u_i) + \partial_i p - \partial_j \hat{\tau}_{ji} + S_{ij} u_j + b_i = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3.2.9)$$

$$\frac{1}{h_0 g} \delta_t^n p + \partial_i u_i = 0. \quad (3.2.10)$$

Usando un superíndice adicional para el contador de iteraciones, las variables introducidas en (3.2.9)-(3.2.10) para la iteración i -ésima en el paso de tiempo n son

$$\begin{aligned} a_j &= U_j^{n+\theta, i-1}, & u_j &= (hU_j)^{n+\theta, i}, \\ h_0 &= h^{n+\theta, i-1}, & p &= P^{n+\theta, i}, \\ \delta_t^n p &= \frac{1}{\theta \delta t} (p - P^n), & \delta_t^n u_j &= \frac{1}{\theta \delta t} [u_j - (hU_j)^n], \\ \hat{\tau}_{ij} &= \frac{\mu_H}{\rho} \left(\partial_i u_j + \partial_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k u_k \right), & \tau_{ij}^* &= \frac{\mu_H}{\rho} \left(a_j \partial_i h_0 + a_i \partial_j h_0 - \frac{2}{3} \delta_{ij} a_k \partial_k h_0 \right), \\ S_{11} &= S_{22} = \text{Ch}^{-1} g U_0^{n+\theta, i-1} h_0^{-3}, & U_0^{n+\theta, i-1} &= \sqrt{\left(U_1^{n+\theta, i-1} \right)^2 + \left(U_2^{n+\theta, i-1} \right)^2}, \\ S_{12} &= -S_{21} = -\hat{f}, & b_i &= b_i^* + \partial_j \tau_{ji}^*, \\ b_i^* &= -g (h_0 - H) \partial_i H + \frac{1}{\rho} h_0 \partial_i p_a - \frac{1}{\rho} \tau_{3i}^S. \end{aligned}$$

Obsérvese que la forma linealizada de las tensiones viscosas $\bar{\tau}_{ij}$ dada en (3.2.3) corresponde a $\hat{\tau}_{ij} - \tau_{ij}^*$, donde $\hat{\tau}_{ij}$ está escrito en términos de las variables de la iteración actual, mientras que τ_{ij}^* se calcula con los valores de las variables correspondientes a la iteración anterior.

3.2.4 Forma vectorial

Para escribir las ecuaciones (3.2.9) y (3.2.10) en la forma vectorial (3.2.5), aunque discretizada en el tiempo, escribimos las mismas como un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas:

$$\begin{aligned} \delta_t^n u_1 - \frac{\mu_H}{\rho} \left(\frac{4}{3} \partial_1^2 u_1 + \frac{1}{3} \partial_1 \partial_2 u_2 + \partial_2^2 u_1 \right) + a_1 \partial_1 u_1 + a_2 \partial_2 u_1 + \partial_1 p + (\partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{11}) u_1 \\ + S_{12} u_2 + b_1^* + \partial_1 \tau_{11}^* + \partial_2 \tau_{21}^* = 0, \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

$$\delta_t^n u_2 - \frac{\mu_H}{\rho} \left(\partial_1^2 u_2 + \frac{1}{3} \partial_1 \partial_2 u_1 + \frac{4}{3} \partial_2^2 u_2 \right) + a_1 \partial_1 u_2 + a_2 \partial_2 u_2 + \partial_2 p + (\partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{22}) u_2$$

$$+S_{21}u_1 + b_2^* + \partial_1\tau_{12}^* + \partial_2\tau_{22}^* = 0, \quad (3.2.12)$$

$$\frac{1}{h_0g}\delta_t^n p + \partial_1 u_1 + \partial_2 u_2 = 0. \quad (3.2.13)$$

La forma vectorial discreta en el tiempo de (3.2.5) del sistema de ecuaciones (3.2.11), (3.2.12) y (3.2.13), linealizada con el método de Picard y escribiendo la divergencia del flujo convectivo como derivada convectiva, está entonces dada por

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \delta_t^n u_1 \\ \delta_t^n u_2 \\ \frac{1}{h_0g}\delta_t^n p \end{bmatrix} - \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} \frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \partial_1^2 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \end{bmatrix} - \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{6} & 0 \\ \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \partial_1 \partial_2 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \end{bmatrix} \\ & - \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \partial_2^2 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \end{bmatrix} - \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{6} & 0 \\ \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \partial_2 \partial_1 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 1 \\ 0 & a_1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \partial_1 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_2 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \partial_2 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{11} & S_{12} & 0 \\ S_{21} & \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -Q_1 \\ -Q_2 \\ 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

con

$$Q_1 = b_1^* + \partial_1\tau_{11}^* + \partial_2\tau_{21}^*,$$

$$Q_2 = b_2^* + \partial_1\tau_{12}^* + \partial_2\tau_{22}^*.$$

La ecuación (3.2.14) corresponde a la ecuación vectorial de CDR transitoria (3.2.5) del movimiento de un fluido en aguas poco profundas discretizada en el tiempo y linealizada. Las matrices \mathbf{K}_{ij} , \mathbf{A}_i , \mathbf{S} y \mathbf{F} son

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_{11} &= \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} \frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & \mathbf{K}_{12} = \mathbf{K}_{21} &= \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{6} & 0 \\ \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\
\mathbf{K}_{22} &= \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & \mathbf{A}_1 &= \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 1 \\ 0 & a_1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & \mathbf{A}_2 &= \begin{bmatrix} a_2 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \\
\mathbf{S} &= \begin{bmatrix} \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{11} & S_{12} & 0 \\ S_{21} & \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & \mathbf{F} &= \begin{bmatrix} -Q_1 \\ -Q_2 \\ 0 \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Obsérvese que las matrices \mathbf{K}_{ij} son simétricas. Los coeficientes de las matrices \mathbf{A}_i , \mathbf{S} y \mathbf{F} no todos son constantes, pues algunos dependen de las velocidades del flujo, elevación del nivel del agua, su batimetría y sus gradientes respectivamente, cuyos valores corresponden a la iteración anterior resultado de la linealización. El vector de incógnitas es

$$\mathbf{u}^T = [u_1, u_2, p].$$

3.3 Aproximación espacial y estabilización numérica

En esta sección vamos a describir la aproximación espacial mediante el método de los elementos finitos y estabilización numérica de la ecuación vectorial de CDR transitoria (3.2.5), considerando que las matrices de coeficientes están evaluadas con las incógnitas de una iteración anterior como resultado de la linealización. Esta aproximación la podremos aplicar directamente a (3.2.14), teniendo en cuenta que en este caso hemos discretizado el tiempo mediante un esquema de diferencias finitas y hemos escrito el término convectivo como $\mathbf{A}_i \partial_i \mathbf{u}$; las modificaciones necesarias por escribir así este término son obvias.

Es conocido que la aproximación de la ecuación estacionaria escalar de CDR por el método estándar de elementos finitos de Galerkin no es estable cuando el término convectivo es dominante con respecto al término difusivo. Para el caso vectorial sucede exactamente lo mismo, con el agravante de la no linealidad en los

términos convectivos y de la compatibilidad en la interpolación de las incógnitas. Para resolver estos problemas, introduciremos los métodos de elementos finitos estabilizados ASGS y OSS basados en la formulación VMS.

3.3.1 Forma diferencial del problema

La ecuación diferencial que vamos a aproximar numéricamente es la ecuación vectorial transitoria de CDR en 2D, con condiciones de contorno de Dirichlet, Neumann y condiciones iniciales conocidas. Aunque todo lo desarrollado en esta sección es fácilmente aplicable a 3D, hemos preferido restringirnos a 2D por su directa aplicación a las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas. El problema consiste en encontrar $\mathbf{u} : \Omega \times \gamma \rightarrow \mathbb{R}^{n_{inc}}$, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, $\gamma = [0, T]$ tal que

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{L}(\mathbf{u}) = \mathbf{F} \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times \gamma, \quad (3.3.1)$$

con

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}) := -\partial_i (\mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u}) + \partial_i (\mathbf{A}_i \mathbf{u}) + \mathbf{S} \mathbf{u} \quad (3.3.2)$$

sujeta a condiciones de contorno de Dirichlet

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_D \times \gamma,$$

condiciones de contorno de Neumann

$$n_i \mathbf{A}_i^f \mathbf{u} - n_i \mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u} = \boldsymbol{\varphi}, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_N \times \gamma, \quad (3.3.3)$$

y condiciones iniciales

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = 0.$$

Hemos considerado que la frontera de Ω (denotada por $\partial\Omega$) está dada por $\partial\Omega = \partial\Omega_D + \partial\Omega_N$ y las matrices de convección \mathbf{A}_i se pueden descomponer en dos términos, uno propiamente convectivo \mathbf{A}_i^c y otro que contribuye al flujo de la incógnita, \mathbf{A}_i^f , de manera que $\mathbf{A}_i = \mathbf{A}_i^c + \mathbf{A}_i^f$.

La ecuación (3.3.1) es un sistema de n_{inc} ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, con $n_{inc} = 3$ para las ecuaciones de aguas poco profundas. Las matrices de difusividad \mathbf{K}_{ij} , convección \mathbf{A}_i y de reacción \mathbf{S} son matrices cuadradas de orden $n_{inc} \times n_{inc}$, mientras que \mathbf{u} y \mathbf{F} son vectores de n_{inc} componentes.

Suponemos que las condiciones iniciales y de contorno de Dirichlet verifican la condición de compatibilidad $\mathbf{u}_0(\mathbf{x})|_{\partial\Omega_D} = \mathbf{u}_D(\mathbf{x}, 0)$.

3.3.2 Forma débil del problema estacionario

Para simplificar la exposición, empecemos considerando el problema estacionario de la ecuación vectorial de CDR, con condiciones de Dirichlet homogéneas en toda su frontera. Dicho problema consiste en hallar $\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n_{inc}}$ tal que

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}) := -\partial_i(\mathbf{K}_{ij}\partial_j\mathbf{u}) + \partial_i(\mathbf{A}_i\mathbf{u}) + \mathbf{S}\mathbf{u} = \mathbf{F}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3.3.4)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega. \quad (3.3.5)$$

Para escribir la forma débil del problema (3.3.4)-(3.3.5), sea \mathcal{W} el espacio donde la ecuación diferencial tiene sentido distribucional. Por ejemplo, si \mathbf{K}_{ij} define una forma cuadrática definida positiva (que no es el caso en las ecuaciones de aguas poco profundas), dicho espacio es $\mathcal{W} := (H_0^1(\Omega))^{n_{inc}}$, es decir, el espacio de funciones vectoriales cuyas componentes son funciones cuadrado integrable, que tienen primera derivada cuadrado integrable y que se anulan en la frontera $\partial\Omega$. Suponemos también que \mathbf{F} multiplicado por funciones de \mathcal{W} es integrable, y que las matrices \mathbf{K}_{ij} , \mathbf{A}_i y \mathbf{S} tienen coeficientes acotados.

Para determinar la forma débil o variacional del problema multiplicamos (3.3.4) por una función $\mathbf{v} \in \mathcal{W}$

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \partial_i(\mathbf{K}_{ij}\partial_j\mathbf{u}) \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \partial_i(\mathbf{A}_i^c\mathbf{u}) \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \partial_i(\mathbf{A}_i^f\mathbf{u}) \, d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{S}\mathbf{u} \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{F} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W}. \end{aligned}$$

Integrando por partes la ecuación anterior, no solo el término difusivo sino además

el término correspondiente a la matriz de flujo \mathbf{A}_i^f , tenemos:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \partial_i \mathbf{v}^T \mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u} \, d\Omega - \int_{\Omega} \partial_i (\mathbf{v}^T \mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u}) \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \partial_i (\mathbf{A}_i^c \mathbf{u}) \, d\Omega - \int_{\Omega} \partial_i \mathbf{v}^T \mathbf{A}_i^f \mathbf{u} \, d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \partial_i (\mathbf{v}^T \mathbf{A}_i^f \mathbf{u}) \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{S} \mathbf{u} \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{F} \, d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W}. \end{aligned}$$

Por último, aplicando el teorema de la divergencia, podemos ahora escribir la forma débil del problema (3.3.4)-(3.3.5) como sigue: hallar $\mathbf{u} \in \mathcal{W}$ tal que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \partial_i \mathbf{v}^T \mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \partial_i (\mathbf{A}_i^c \mathbf{u}) \, d\Omega - \int_{\Omega} \partial_i \mathbf{v}^T \mathbf{A}_i^f \mathbf{u} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{S} \mathbf{u} \, d\Omega \\ & = \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{F} \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}^T \mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u}) n_i \, d\Gamma - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}^T \mathbf{A}_i^f \mathbf{u}) n_i \, d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W}, \end{aligned} \tag{3.3.6}$$

donde n_i es la componente i -ésima de la normal unitaria a $\partial\Omega$.

Los dos últimos términos del lado derecho de la ecuación (3.3.6) son valores conocidos, pues o bien la función de test \mathbf{v} es nula en el caso en el que $\partial\Omega_D = \partial\Omega$ o bien usamos la condición de Neumann (3.3.3). Nos restringiremos al primer caso, como hemos indicado, con lo cual la forma variacional o débil del problema (3.3.4)-(3.3.5) consiste en encontrar $\mathbf{u} \in \mathcal{W}$ tal que

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v} \rangle \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W}, \tag{3.3.7}$$

donde la forma $B(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ y la forma lineal $\langle \mathbf{F}, \mathbf{v} \rangle$ están dadas por

$$\begin{aligned} B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \int_{\Omega} \partial_i \mathbf{v}^T \mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \partial_i (\mathbf{A}_i^c \mathbf{u}) \, d\Omega \\ &\quad - \int_{\Omega} \partial_i \mathbf{v}^T \mathbf{A}_i^f \mathbf{u} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{S} \mathbf{u} \, d\Omega, \end{aligned} \tag{3.3.8}$$

$$\langle \mathbf{F}, \mathbf{v} \rangle = \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{F} \, d\Omega. \tag{3.3.9}$$

3.3.3 Método estándar de Galerkin para el problema estacionario

Para aproximar numéricamente la ecuación (3.3.7) en el espacio por el método de los elementos finitos, consideremos una partición $\{\Omega^e\}$ de Ω , con $e = 1, \dots, n_{el}$, siendo n_{el} el número de elementos de la partición. Sea \mathcal{W}_h un espacio conforme

de elementos finitos para aproximar \mathcal{W} ($\mathcal{W}_h \subset \mathcal{W}$). El problema discreto que se conoce como el método estándar de Galerkin, que aproxima la ecuación vectorial de CDR estacionaria (3.3.4)-(3.3.5), consiste en hallar $\mathbf{u}_h \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h. \quad (3.3.10)$$

En general, es necesario que la interpolación de las incógnitas satisfaga ciertas condiciones de compatibilidad (usualmente expresadas en forma de condiciones inf-sup). Sin embargo, con la estabilización que introduciremos más adelante esto no es necesario, por lo que presentamos a continuación algunos aspectos de implementación usando igual interpolación.

Observemos primero que podemos escribir

$$B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) := \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \left(\partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u}_h + \mathbf{v}_h^T \partial_i (\mathbf{A}_i^c \mathbf{u}_h) - \partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{A}_i^f \mathbf{u}_h + \mathbf{v}_h^T \mathbf{S} \mathbf{u}_h \right) d\Omega, \quad (3.3.11)$$

$$\langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle := \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \mathbf{v}_h^T \mathbf{F} d\Omega. \quad (3.3.12)$$

Escribamos $\mathbf{u}_h = (\hat{u}^1, \hat{u}^2, \dots, \hat{u}^{n_{inc}})^T$. Si usamos las mismas funciones de interpolación de clase C^0 (lagrangianas) para todas las componentes de la incógnita, podemos escribir

$$\hat{u}^q(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M u_m^q N_m(\mathbf{x}), \quad q = 1, \dots, n_{inc}, \quad (3.3.13)$$

donde M es el número de nodos del elemento finito, $N_m(\mathbf{x})$ son las funciones de forma y u_m^q es el valor nodal de la componente q de la incógnita en el nodo m de la malla. Además, utilizando el método de Galerkin tomamos como funciones de prueba \mathbf{v}_h las dadas por:

$$\mathbf{v}_h^T = \mathbf{v}_{h,p}^T = (\delta_{1p} N_l, \delta_{2p} N_l, \dots, \delta_{n_{inc}p} N_l), \quad p = 1, \dots, n_{inc}, \quad l = 1, \dots, M, \quad (3.3.14)$$

donde δ_{ip} es la delta de Kronecker. Reemplazando (3.3.13) y (3.3.14) en (3.3.10), (3.3.11) y (3.3.12) se tiene:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \left(\partial_i N_l \sum_{q=1}^{n_{inc}} \left((K_{ij})_{pq} \partial_j \sum_{m=1}^M u_m^q N_m \right) \right) d\Omega \\
 & + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \left(N_l \sum_{q=1}^{n_{inc}} \left((A_i^c)_{pq} \partial_i \sum_{m=1}^M u_m^q N_m \right) \right) d\Omega \\
 & - \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \left(\partial_i N_l \sum_{q=1}^{n_{inc}} \left((A_i^f)_{pq} \sum_{m=1}^M u_m^q N_m \right) \right) d\Omega \\
 & + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \left(N_l \sum_{q=1}^{n_{inc}} \left(S_{pq} \sum_{m=1}^M u_m^q N_m \right) \right) d\Omega \\
 & = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} N_l f_p d\Omega \quad p = 1, \dots, n_{inc}, \quad l = 1, \dots, M. \tag{3.3.15}
 \end{aligned}$$

De la ecuación (3.3.15) tenemos:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{e=1}^{n_{el}} \sum_{q=1}^{n_{inc}} \sum_{m=1}^M \left[\int_{\Omega^e} \partial_i N_l (K_{ij})_{pq} \partial_j N_m d\Omega + \int_{\Omega^e} N_l (A_i^c)_{pq} \partial_i N_m d\Omega \right. \\
 & \left. - \int_{\Omega^e} \partial_i N_l (A_i^f)_{pq} N_m d\Omega + \int_{\Omega^e} N_l S_{pq} N_m d\Omega \right] u_m^q = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} N_l f_p d\Omega, \tag{3.3.16} \\
 & p = 1, \dots, n_{inc}, l = 1, \dots, M.
 \end{aligned}$$

En las expresiones (3.3.15) y (3.3.16), $(K_{ij})_{pq}$, $(A_i^c)_{pq}$, $(A_i^f)_{pq}$ y $(S)_{pq}$ son los coeficientes del elemento de fila p -ésima y columna q -ésima de las correspondientes matrices \mathbf{K}_{ij} , \mathbf{A}_i^c , \mathbf{A}_i^f y \mathbf{S} . El ensamblaje de la ecuación (3.3.16) da lugar, una vez impuestas las condiciones de contorno, a un sistema lineal de ecuaciones cuya solución proporciona los valores nodales de la aproximación numérica del problema estacionario (3.3.4)-(3.3.5)

3.3.4 Método de las subescalas, problema estacionario

Como ya dijimos antes, el método estándar de Galerkin presenta inestabilidades numéricas cuando el término convectivo es dominante con respecto al término difusivo y debido a las condiciones de compatibilidad entre la interpolación de

las variables. El método que vamos a utilizar para la estabilización numérica es el método variacional de subescalas (MVS) introducido por Hughes y otros en [1, 2] para resolver las inestabilidades numéricas del método de Galerkin en el problema de CDR escalar estacionario y generalizado en [4, 5] al problema de CDR vectorial estacionario.

La idea básica es descomponer la variable continua desconocida $\mathbf{u} \in \mathcal{W}$ en una parte resoluble en el espacio de elementos finitos $\mathbf{u}_h \in \mathcal{W}_h$, $\mathcal{W}_h \subset \mathcal{W}$ y una parte en la escala de una submalla $\tilde{\mathbf{u}} \in \tilde{\mathcal{W}}$, $\tilde{\mathcal{W}} \subset \mathcal{W}$, la cual no puede ser capturada por la malla de elementos finitos, siendo $\mathcal{W} = \mathcal{W}_h \oplus \tilde{\mathcal{W}}$, donde $\tilde{\mathcal{W}}$ es cualquier espacio para completar \mathcal{W}_h en \mathcal{W} . Para evitar tecnicismos, podemos pensar de \mathcal{W} y $\tilde{\mathcal{W}}$ como espacios dimensionalmente finitos, con una dimensión grande. Puesto que $\tilde{\mathcal{W}}$ representa la componente de \mathcal{W} que no puede ser capturada por el espacio de elementos finitos, la llamamos espacio de las subescalas. De este modo, la variable continua desconocida podemos escribirla como $\mathbf{u} = \mathbf{u}_h + \tilde{\mathbf{u}}$, donde \mathbf{u}_h es la componente de \mathbf{u} en el espacio de elementos finitos y $\tilde{\mathbf{u}}$ es su componente en el complemento (con respecto a un cierto producto interno) en \mathcal{W} .

Aplicando la descomposición mencionada a la ecuación continua (3.3.7) se obtiene:

$$B(\mathbf{u}_h + \tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h + \tilde{\mathbf{v}}) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h + \tilde{\mathbf{v}} \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \forall \tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (3.3.17)$$

Hemos considerado el problema linealizado, por lo cual B es una forma bilineal (para el tratamiento generalizado de problemas no lineales, véase [6, 51]). Utilizando este hecho, la ecuación (3.3.17) se puede descomponer en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \quad (3.3.18)$$

$$B(\mathbf{u}_h, \tilde{\mathbf{v}}) + B(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{v}}) = \langle \mathbf{F}, \tilde{\mathbf{v}} \rangle \quad \forall \tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (3.3.19)$$

La ecuación (3.3.18) corresponde a la escala resoluble \mathbf{u}_h en el espacio de elementos finitos y tiene dos términos a su lado izquierdo, el primero es la contribución del método de Galerkin y el segundo toma en cuenta la influencia de la subescala en \mathbf{u}_h . De la ecuación (3.3.19) debe obtenerse una aproximación a $\tilde{\mathbf{u}}$.

De forma análoga a la ecuación (3.3.11), para el segundo término del lado izquierdo de la ecuación (3.3.18) tenemos

$$B(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h) = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \left(\partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{K}_{ij} \partial_j \tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{v}_h^T \partial_i (\mathbf{A}_i^c \tilde{\mathbf{u}}) - \partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{A}_i^f \tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{v}_h^T \mathbf{S} \tilde{\mathbf{u}} \right) d\Omega, \quad (3.3.20)$$

e integrando por partes dentro de cada elemento y recordando que $\mathbf{A}_i = \mathbf{A}_i^c + \mathbf{A}_i^f$ tenemos

$$\begin{aligned} B(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h) &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \left(-\partial_j (\partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{K}_{ij}) \tilde{\mathbf{u}} - \partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{A}_i \tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{v}_h^T \mathbf{S} \tilde{\mathbf{u}} \right) d\Omega \\ &\quad + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} \partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{K}_{ij} n_j \tilde{\mathbf{u}} d\Gamma + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} \mathbf{v}_h^T n_i \mathbf{A}_i^c \tilde{\mathbf{u}} d\Gamma. \end{aligned} \quad (3.3.21)$$

Sea \mathcal{L}^* el adjunto del operador \mathcal{L} , dado por

$$(\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T = -\partial_j (\partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{K}_{ij}) - \partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{A}_i + \mathbf{v}_h^T \mathbf{S}, \quad (3.3.22)$$

donde hemos usado que en nuestro caso $\mathbf{K}_{ji}^T = \mathbf{K}_{ij}$. La ecuación (3.3.21) se puede escribir como

$$\begin{aligned} B(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h) &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \tilde{\mathbf{u}} d\Omega + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} \partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{K}_{ij} n_j \tilde{\mathbf{u}} d\Gamma \\ &\quad + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} \mathbf{v}_h^T n_i \mathbf{A}_i^c \tilde{\mathbf{u}} d\Gamma. \end{aligned} \quad (3.3.23)$$

Reemplazando 3.3.23 en la ecuación (3.3.18), ésta se puede escribir como

$$\begin{aligned} B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) &+ \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \tilde{\mathbf{u}} d\Omega + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} (\partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{K}_{ij} n_j \tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{v}_h^T n_i \mathbf{A}_i^c \tilde{\mathbf{u}}) d\Gamma \\ &= \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h. \end{aligned} \quad (3.3.24)$$

Ahora bien, integrando también por partes dentro de cada elemento los dos términos de la ecuación (3.3.19), ésta queda

$$\begin{aligned}
& \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} \tilde{\mathbf{v}}^T n_i \mathbf{K}_{ij} \partial_j (\mathbf{u}_h + \tilde{\mathbf{u}}) \, d\Gamma + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{v}}^T \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{u}}) \, d\Omega \\
& = \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{v}}^T [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)] \, d\Omega \quad \forall \tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{W}}. \tag{3.3.25}
\end{aligned}$$

Observemos que el primer término de la ecuación (3.3.25) se anula, ya que en la frontera de los elementos las componentes normales de los flujos de \mathbf{u} son iguales pero de signo contrario, debido a que los flujos difusivos deben ser continuos a través de los contornos inter-elementales. Como resultado de esto, la ecuación (3.3.25) es equivalente a encontrar $\tilde{\mathbf{u}} \in \tilde{\mathcal{W}}$ tal que

$$\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{u}}) = \mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) + \mathbf{v}_{h,ort} \text{ en } \Omega^e, \forall \mathbf{v}_{h,ort} \in \tilde{\mathcal{W}}^\perp, \tag{3.3.26}$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{u}}_{esq} \text{ en } \partial\Omega^e, \tag{3.3.27}$$

para $e = 1, \dots, n_{el}$, donde $\tilde{\mathbf{u}}_{esq}$ es la subescala evaluada en los contornos inter-elementales. Es importante observar que la ecuación (3.3.26) se verifica para cualquier elemento $\mathbf{v}_{h,ort}$ ortogonal a $\tilde{\mathcal{W}}$. La presencia del elemento $\mathbf{v}_{h,ort}$ en la ecuación (3.3.26) garantiza que $\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{u}}) - [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)]$ pertenece a $\tilde{\mathcal{W}}^\perp$, que es lo que implica la ecuación (3.3.25) sin el primer término. En otras palabras $\mathbf{v}_{h,ort}$ garantiza que $\tilde{\mathbf{u}}$ pertenezca al espacio de subescalas $\tilde{\mathcal{W}}$ (y no a todo el espacio \mathcal{W}).

Las ecuaciones (3.3.24), (3.3.26) y (3.3.27) equivalen exactamente a los problemas (3.3.18) y (3.3.19), ya que hasta ahora no hemos hecho ninguna aproximación. Veremos ahora posibles aproximaciones para poder calcular de forma efectiva $\tilde{\mathbf{u}}$, las cuales darán lugar a los métodos ASGS y OSS. En esencia, lo que debemos hacer es seleccionar las funciones $\tilde{\mathbf{u}}_{esq}$, $\mathbf{v}_{h,ort}$ y proponer una solución aproximada de la ecuación (3.3.26).

Método ASGS para el problema CDR vectorial estacionario

Un caso particular del método de las subescalas descrito anteriormente es el método denominado ASGS. Para seleccionar $\tilde{\mathbf{u}}_{esq}$ vamos a usar el siguiente argumento. Para tener una aproximación discreta óptima de \mathbf{u} que diera valores

nodales exactos, se podría pedir que las subescalas se anularan en los nodos. En problemas unidimensionales esto da condiciones de contorno homogéneas en (3.3.27). Para los casos de más de una dimensión espacial, la elección de $\tilde{\mathbf{u}}_{esq} = \mathbf{0}$ es solo una aproximación. En otras palabras, estamos tomando el espacio de las subescalas $\tilde{\mathcal{W}}$ como un espacio de funciones burbuja, es decir, el espacio de funciones que se anulan en los contornos de los elementos (véase [7, 8]). Esta aproximación, que adoptaremos en lo que sigue, no es sin embargo imprescindible (véase [52])

Con esta aproximación, el término de las integrales en los contornos de los elementos de la ecuación (3.3.24) se elimina, por lo cual el problema que debemos resolver es encontrar $\mathbf{u}_h \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \tilde{\mathbf{u}} \, d\Omega = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \quad (3.3.28)$$

en donde todavía hace falta determinar $\tilde{\mathbf{u}}$.

La siguiente aproximación del método ASGS es tomar $\mathbf{v}_{h,ort} = \mathbf{0}$, lo cual supone considerar que las subescalas están en el espacio de residuos, es decir, éste está compuesto por funciones de la forma $\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{v})$, con $\mathbf{v} \in \mathcal{W}$. Podemos entonces escribir simbólicamente la solución del problema (3.3.26)-(3.3.27), asumiendo $\tilde{\mathbf{u}}_{esq} = \mathbf{0}$ y considerando $\mathbf{v}_{h,ort} = \mathbf{0}$, como

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathcal{L}^{-1} [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)], \quad (3.3.29)$$

donde \mathcal{L}^{-1} es el operador inverso del operador \mathcal{L} con condiciones de Dirichlet homogéneas.

De (3.3.28) se observa que solo se necesita la componente de $\tilde{\mathbf{u}}$ sobre el espacio $\mathcal{L}(\mathcal{W}_h)$, donde $\mathcal{L}(\mathcal{W}_h)$ es el espacio de funciones de la forma $\mathcal{L}(\mathbf{v}_h)$, con $\mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h$; esto sugiere aproximar (3.3.29) como

$$\tilde{\mathbf{u}} \approx \boldsymbol{\tau}^e [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)], \quad (3.3.30)$$

donde $\boldsymbol{\tau}^e$ es una matriz de $n_{inc} \times n_{inc}$ componentes a la que denominamos matriz de parámetros de estabilización y que se calcula dentro del dominio de cada elemento. El diseño de la matriz $\boldsymbol{\tau}^e$ es una de las piedras angulares en el desarrollo de

los métodos de elementos finitos estabilizados. Algunas formulaciones algebraicas para el diseño del parámetro de estabilización para la ecuación escalar de CDR en 1D, basadas en el principio del máximo discreto, pueden encontrarse en [1, 2, 9]; la extensión a sistemas puede consultarse en [4]. Asimismo, en [10, 6] se propone un diseño del parámetro de estabilización basado en un análisis de Fourier, considerando el problema de flujo en aguas poco profundas en [32]. En este capítulo vamos a utilizar precisamente el diseño algorítmico del τ^e desarrollado en [32] y que está dado por

$$\boldsymbol{\tau}^e = \text{diag}(\tau^e, \tau^e, 0),$$

con el parámetro τ^e dado por

$$\tau^e = \left[c_1 \frac{\nu_H}{(h^e)^2} + c_2 \frac{|\mathbf{a}|}{h^e} + c_3 |S_{11}| + c_4 |S_{12}| \right]^{-1},$$

para elementos finitos lineales, siendo $\nu_H = \frac{\mu_H}{\rho}$ el coeficiente de viscosidad cinemática y $|\mathbf{a}|$ la norma de la velocidad. Se entiende que las funciones que aparecen en esta expresión se calculan dentro de cada elemento e , cuyo diámetro es h^e , y c_1, c_2, c_3 y c_4 son constantes algorítmicas.

Para elementos de alto orden, la experimentación numérica y también el análisis teórico (que está fuera del objetivo de este trabajo) nos han llevado a proponer como matriz de parámetros de estabilización:

$$\boldsymbol{\tau}^e = \text{diag}(\tau_1^e, \tau_1^e, \tau_2^e), \quad (3.3.31)$$

con

$$\tau_1^e = \left[c_1 \frac{\nu_H}{\left(\frac{h^e}{d^2}\right)^2} + c_2 \frac{|\mathbf{a}|}{\frac{h^e}{d}} + c_3 |S_{11}| + c_4 |S_{12}| \right]^{-1}, \quad \tau_2^e = \frac{\left(\frac{h^e}{d}\right)^2}{c_1 \tau_1^e}, \quad (3.3.32)$$

donde c_1, c_2, c_3 y c_4 son los mismos coeficientes que antes, y que para los ejemplos numéricos hemos adoptado como $c_1 = 12, c_2 = 2$ y $c_3 = c_4 = 1$ y d es el orden polinomial de interpolación.

Reemplazando la ecuación (3.3.30) en (3.3.28), finalmente tenemos la formulación estabilizada ASGS para resolver la ecuación vectorial de CDR estacionaria, la cual consiste en encontrar $\mathbf{u}_h \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \boldsymbol{\tau}^e [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] d\Omega = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h. \quad (3.3.33)$$

El método OSS para el problema de CDR vectorial estacionario

A continuación vamos a describir el método OSS propuesto en [33]. El punto de partida es la elección del espacio de las subescalas, que ahora no será el espacio de residuos de elementos finitos como en el caso anterior, sino que se toma como espacio $\tilde{\mathcal{W}}$ el espacio ortogonal en el sentido de L^2 al espacio de elementos finitos, es decir,

$$\tilde{\mathcal{W}} = \mathcal{W}_h^\perp, \quad (3.3.34)$$

que es una legítima elección que cumple con $\mathcal{W} = \mathcal{W}_h \oplus \tilde{\mathcal{W}}$.

Tomando en cuenta (3.3.34) de (3.3.26) se sigue que

$$\mathbf{v}_{h,ort} \in \mathcal{W}_h, \quad \tilde{\mathbf{u}} \in \mathcal{W}_h^\perp,$$

lo que significa que $\mathbf{v}_{h,ort}$ es una función del espacio de elementos finitos y por lo tanto numéricamente calculable, mientras que $\tilde{\mathbf{u}}$ estará en el espacio ortogonal a \mathcal{W}_h . A este espacio \mathcal{W}_h^\perp escogido para las subescalas $\tilde{\mathbf{u}}$ lo denominamos espacio de subescalas ortogonales.

Para resolver (3.3.26) y (3.3.27), al igual que en el método ASGS, asumimos $\tilde{\mathbf{u}}_{esq} = \mathbf{0}$ y escribimos

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathcal{L}^{-1} [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)] + \mathcal{L}^{-1}(\mathbf{v}_{h,ort}), \quad (3.3.35)$$

donde, como en el método ASGS, \mathcal{L}^{-1} es el inverso del operador \mathcal{L} con condiciones de Dirichlet homogéneas. De (3.3.28) se observa que solo se necesita la componente de $\tilde{\mathbf{u}}$ sobre el espacio $\mathcal{L}(\mathcal{W}_h)$ y, al igual que en el método ASGS, esto sugiere aproximar (3.3.35) como

$$\tilde{\mathbf{u}} \approx \boldsymbol{\tau}^e [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)] + \boldsymbol{\tau}^e \mathbf{v}_{h,ort}. \quad (3.3.36)$$

Puesto que $\tilde{\mathbf{u}} \in \mathcal{W}_h^\perp$, de (3.3.36) se tiene

$$0 = \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{u}}^T \mathbf{v}_h \, d\Omega \approx \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\boldsymbol{\tau}^e [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)])^T \mathbf{v}_h \, d\Omega + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\boldsymbol{\tau}^e \mathbf{v}_{h,ort})^T \mathbf{v}_h \, d\Omega, \quad (3.3.37)$$

para todo $v_h \in \mathcal{W}_h$. Si llamamos $\mathbf{\Pi}_\tau$ la proyección L^2 sobre el espacio de elementos finitos pesada con $\boldsymbol{\tau}^e$ dentro de cada elemento, de (3.3.37) se tiene que

$$\mathbf{v}_{h,ort} = -\mathbf{\Pi}_\tau [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)]. \quad (3.3.38)$$

Reemplazando (3.3.38) en (3.3.36) tenemos

$$\tilde{\mathbf{u}} \approx \boldsymbol{\tau}^e [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{\Pi}_\tau [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)]]. \quad (3.3.39)$$

Sea ahora

$$\mathbf{\Pi}_\tau^\perp = \mathbf{I} - \mathbf{\Pi}_\tau, \quad (3.3.40)$$

donde \mathbf{I} es la identidad en \mathcal{W}_h y $\mathbf{\Pi}_\tau^\perp$ es la proyección sobre el espacio ortogonal al espacio de elementos finitos. La ecuación (3.3.39) se puede escribir entonces como

$$\tilde{\mathbf{u}} \approx \boldsymbol{\tau}^e \mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)]. \quad (3.3.41)$$

Podemos reemplazar esta expresión en (3.3.24) y usar el hecho de que las integrales sobre los contornos de los elementos son cero, con lo cual obtenemos la formulación estabilizada de elementos finitos OSS que resuelve la ecuación vectorial de CDR estacionaria, la cual consiste en encontrar $\mathbf{u}_h \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \boldsymbol{\tau}^e \mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] \, d\Omega = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h. \quad (3.3.42)$$

Generalización

Las ecuaciones (3.3.33) y (4.3.1), que definen respectivamente los métodos ASGS y OSS, se pueden escribir en forma conjunta de la siguiente manera: encontrar

$\mathbf{u}_h \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \boldsymbol{\tau}^e \mathbf{P} [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] \, d\Omega = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \quad (3.3.43)$$

donde

$$\mathbf{P} = \begin{cases} \mathbf{I} & \text{para el método ASGS,} \\ \boldsymbol{\Pi}_\tau^\perp & \text{para el método OSS.} \end{cases}$$

En términos generales, ambas formulaciones, ASGS y OSS, consiguen el objetivo de estabilizar el problema. Aunque como veremos en los ejemplos numéricos su comportamiento en el problema que nos ocupa es parecido, la formulación OSS es habitualmente más precisa, aunque algo más costosa. Asimismo, permite simplificaciones que no consideraremos en este trabajo (véase por ejemplo la discusión en [19])

3.3.5 Ecuación de CDR vectorial transitoria

Describimos a continuación la extensión de las formulaciones introducidas al problema transitorio. Como en el caso estacionario, consideramos para simplificar condiciones de contorno de Dirichlet homogéneas.

Las únicas modificaciones que debemos tener en cuenta son las originadas por el término $\partial_t \mathbf{u}$ en la ecuación (3.3.1). En particular, la forma variacional continua será, en vez de (3.3.7): hallar $\mathbf{u} : \gamma \rightarrow \mathcal{W}$ tal que

$$(\partial_t \mathbf{u}, \mathbf{v}) + B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v} \rangle \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W},$$

y cumpliendo la condición inicial. Aquí y en lo que sigue, $(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = \int_{\Omega} \mathbf{f}^T \mathbf{g} \, d\Omega$ para cualesquiera funciones vectoriales \mathbf{f} y \mathbf{g} de $L^2(\Omega)$.

Como hemos indicado anteriormente, la discretización en el tiempo la llevaremos a cabo usando la regla trapezoidal. Una vez linealizadas la ecuaciones mediante el método de Picard, el problema continuo en el espacio que habrá que resolver en cada paso de tiempo, escrito en forma variacional, será: dado $\mathbf{u}^n \in \mathcal{W}$, encontrar $\mathbf{u}^{n+1} \in \mathcal{W}$ tal que

$$(\delta_t^n \mathbf{u}, \mathbf{v}) + B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v} \rangle \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{W}, \quad (3.3.44)$$

para $n = 1, 2, \dots$, siendo \mathbf{u}^0 la condición inicial. Recordemos de la notación introducida en (3.2.11)-(3.2.13) que se sobreentiende en esta ecuación que la incógnita \mathbf{u} (y el término de fuerzas) está aproximada en el instante de tiempo $t^{n+\theta} = t^n + \theta\delta t$ (y en una iteración determinada).

Al plantear la descomposición $\mathbf{u} = \mathbf{u}_h + \tilde{\mathbf{u}}$, igual que hicimos en el caso estacionario, aparecerá el término $\partial_t \tilde{\mathbf{u}}$, que en principio no es nulo. Sin embargo, en todo lo que sigue haremos la suposición de que $\partial_t \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$, lo cual implica que la variación temporal de las subescalas es despreciable comparada con el resto de términos. En [6] las subescalas que satisfacen esta condición son llamadas cuasi-estáticas, mientras que se denominan dinámicas si no se hace esta hipótesis (véase [6, 20, 53]).

Aplicando la descomposición mencionada de \mathbf{u} a la ecuación continua (3.3.44) se tiene:

$$(\delta_t^n (\mathbf{u}_h + \tilde{\mathbf{u}}), \mathbf{v}_h + \tilde{\mathbf{v}}) + B(\mathbf{u}_h + \tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h + \tilde{\mathbf{v}}) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h + \tilde{\mathbf{v}} \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \forall \tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (3.3.45)$$

Debido a que hemos linealizado las ecuaciones mediante el método de Picard, podemos utilizar las propiedades de las formas bilineales en B , con lo cual la ecuación (3.3.45) se puede descomponer en el siguiente sistema de ecuaciones:

$$(\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + (\delta_t^n \tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \quad (3.3.46)$$

$$(\delta_t^n \mathbf{u}_h, \tilde{\mathbf{v}}) + (\delta_t^n \tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{v}}) + B(\mathbf{u}_h, \tilde{\mathbf{v}}) + B(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{v}}) = \langle \mathbf{F}, \tilde{\mathbf{v}} \rangle \quad \forall \tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (3.3.47)$$

Tomando en cuenta la suposición de que $\delta_t^n \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$, el sistema de ecuaciones (3.3.46) y (3.3.47) se escribe de la siguiente manera:

$$(\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h) = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \quad (3.3.48)$$

$$(\delta_t^n \mathbf{u}_h, \tilde{\mathbf{v}}) + B(\mathbf{u}_h, \tilde{\mathbf{v}}) + B(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{v}}) = \langle \mathbf{F}, \tilde{\mathbf{v}} \rangle \quad \forall \tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{W}}. \quad (3.3.49)$$

Integrando por partes el término $B(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h)$ tal como se hizo para el problema

estacionario en (3.3.23) y reemplazando en la ecuación (3.3.48), se tiene

$$\begin{aligned}
 (\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) &+ \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \tilde{\mathbf{u}} \, d\Omega \\
 &+ \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} (\partial_i \mathbf{v}_h^T \mathbf{K}_{ij} n_j \tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{v}_h^T n_i \mathbf{A}_i^c \tilde{\mathbf{u}}) \, d\Gamma \\
 &= \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h.
 \end{aligned} \tag{3.3.50}$$

Ahora bien, integrando también por partes dentro de cada elemento los términos $B(\mathbf{u}_h, \tilde{\mathbf{v}})$ y $B(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{v}})$ de la ecuación (3.3.49) con condiciones de Dirichlet homogéneas, esta se puede escribir como

$$\begin{aligned}
 &\sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega^e} \tilde{\mathbf{v}}^T n_i \mathbf{K}_{ij} \partial_j (\mathbf{u}_h + \tilde{\mathbf{u}}) \, d\Gamma + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{v}}^T \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{u}}) \, d\Omega \\
 &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{v}}^T [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h)] \, d\Omega - \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{v}}^T \delta_t^n \mathbf{u}_h \, d\Omega \quad \forall \tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathcal{W}}.
 \end{aligned} \tag{3.3.51}$$

El primer término de la parte izquierda de la ecuación (3.3.51) se anula, puesto que los flujos difusivos deben ser continuos a través de los contornos inter-elementales y por lo tanto, en la frontera de los elementos las componentes normales de los flujos de \mathbf{u} son iguales pero de signo contrario.

Como resultado de lo anterior la ecuación (3.3.51) es equivalente a encontrar $\tilde{\mathbf{u}} : \gamma \rightarrow \tilde{\mathcal{W}}$ tal que

$$\mathcal{L}(\tilde{\mathbf{u}}) = \mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \delta_t^n \mathbf{u}_h + \mathbf{v}_{h,ort} \quad \text{en } \Omega^e, \forall \mathbf{v}_{h,ort} \in \tilde{\mathcal{W}}^\perp, \tag{3.3.52}$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{u}}_{esq} \quad \text{en } \partial\Omega^e, \tag{3.3.53}$$

para $e = 1, \dots, n_{el}$ y para una cierta función $\tilde{\mathbf{u}}_{esq}$ que es evaluada en los contornos inter-elementales. Aquí igual que en el caso estacionario, es importante observar la presencia del elemento $\mathbf{v}_{h,ort}$, el cual garantiza que $\tilde{\mathbf{u}}$ pertenezca al espacio de subescalas $\tilde{\mathcal{W}}$ (y no a todo el espacio \mathcal{W}).

Las ecuaciones (3.3.50), (3.3.52) y (3.3.53) equivalen exactamente al sistema de ecuaciones (3.3.48) y (3.3.49), en donde hasta ahora no hemos hecho ninguna aproximación. Lo que sigue es hacer una selección de las funciones $\tilde{\mathbf{u}}_{esq}$, $\mathbf{v}_{h,ort}$ y una solución aproximada de la ecuación (3.3.52). La manera de escoger dichas

funciones da lugar a las formulaciones ASGS y OSS que describimos más adelante. Los pasos comunes los describimos a continuación.

Para seleccionar $\tilde{\mathbf{u}}_{esq}$, igual que en el caso estacionario, tomamos el espacio de las subescalas $\tilde{\mathcal{W}}$ como un espacio de funciones burbuja, es decir el espacio de funciones que se anulan en los contornos de los elementos. Con esta aproximación se elimina el término de las integrales en los contornos de los elementos en la ecuación (3.3.50), con lo cual el problema transitorio a ser resuelto es encontrar $\mathbf{u}_h : \gamma \rightarrow \mathcal{W}_h$ tal que

$$(\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} (\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \tilde{\mathbf{u}} \, d\Omega = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \quad (3.3.54)$$

donde \mathcal{L}^* es el operador adjunto de \mathcal{L} que está dado por la ecuación (3.3.22). Por otro lado todavía hace falta determinar $\tilde{\mathbf{u}}$. Para determinar $\tilde{\mathbf{u}}$ vamos a resolver el problema (3.3.52) y (3.3.53) en el espacio de las subescalas $\tilde{\mathcal{W}}$ de funciones burbuja, con lo cual $\tilde{\mathbf{u}}_{esq} = 0$ y $\tilde{\mathbf{u}}$ puede ser escrito como:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathcal{L}^{-1} [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \delta_t^n \mathbf{u}_h + \mathbf{v}_{h,ort}], \quad (3.3.55)$$

en cada elemento, donde \mathcal{L}^{-1} es el operador inverso del operador \mathcal{L} con condiciones de Dirichlet homogéneas.

Similar al caso estacionario de la ecuación (3.3.54) vemos que solo se necesita la componente de $\tilde{\mathbf{u}}$ sobre el espacio $\mathcal{L}(\mathcal{W}_h)$, donde $\mathcal{L}(\mathcal{W}_h)$ es el espacio de funciones de la forma $\mathcal{L}(\mathbf{v}_h)$, con $\mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h$, esto sugiere aproximar (3.3.55) como

$$\tilde{\mathbf{u}} \approx \boldsymbol{\tau}^e [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \delta_t^n \mathbf{u}_h + \mathbf{v}_{h,ort}], \quad (3.3.56)$$

donde la matriz de parámetros de estabilización $\boldsymbol{\tau}^e$ que se calcula dentro del dominio de cada elemento está dada por (3.3.31) y (3.3.32), y es una aproximación algebraica del operador \mathcal{L}^{-1} .

Formulación ASGS para el problema CDR vectorial transitorio

El método ASGS toma como espacio de subescalas el espacio de funciones que son residuos de funciones de elementos finitos, es decir, el espacio de funciones de la forma $\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{v}_h) - \delta_t^n \mathbf{v}_h$, con $\mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h$. Esto nos lleva a que $\mathbf{v}_{h,ort} = 0$.

Reemplazando (3.3.56) en (3.3.54) con $\mathbf{v}_{h,ort} = 0$, se obtiene la ecuación estabilizada con el método ASGS para el problema CDR vectorial transitorio y que consiste en: dado $\mathbf{u}_h^n \in \mathcal{W}$, encontrar $\mathbf{u}_h^{n+1} \in \mathcal{W}$ tal que

$$\begin{aligned} (\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \boldsymbol{\tau}^e [\delta_t^n \mathbf{u}_h + \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] d\Omega \\ = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \end{aligned} \quad (3.3.57)$$

Nótese que no aparece el término $(\delta_t^n \tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h)$, puesto que hemos supuesto subescalas cuasi-estacionarias, pero si que aparece $\delta_t^n \mathbf{u}_h$ en el término de estabilización.

La matriz de parámetros de estabilización $\boldsymbol{\tau}^e$ para elementos finitos de alto orden está dada por las ecuaciones (3.3.31) y (3.3.32), el operador \mathcal{L} por (3.3.2) y el operador \mathcal{L}^* por la ecuación (3.3.22).

Formulación OSS para el problema CDR vectorial transitorio

De manera similar al caso estacionario, la elección del espacio de las subescalas \tilde{W} es el espacio ortogonal en el sentido L^2 al espacio de elementos finitos con lo cual $\tilde{\mathbf{u}} \in \mathcal{W}_h^\perp$ y $\mathbf{v}_{h,ort} \in \mathcal{W}_h$ lo que significa que $\mathbf{v}_{h,ort}$ es una función del espacio de elementos finitos y por lo tanto numéricamente calculable.

Para calcular $\mathbf{v}_{h,ort}$ partimos de la ecuación (3.3.56) y como $\tilde{\mathbf{u}} \in \mathcal{W}_h^\perp$ entonces $(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}_h) = 0$, con lo cual

$$\sum_{e=1}^{nel} (\boldsymbol{\tau}^e (\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \delta_t^n \mathbf{u}_h), \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{nel} (\boldsymbol{\tau}^e \mathbf{v}_{h,ort}, \mathbf{v}_h) = 0 \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \quad (3.3.58)$$

Si llamamos $\mathbf{\Pi}_\tau$ a la proyección L^2 sobre el espacio de elementos finitos pesada con $\boldsymbol{\tau}^e$ dentro de cada elemento, de (3.3.58) se tiene que

$$\mathbf{v}_{h,ort} = -\mathbf{\Pi}_\tau [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \delta_t^n \mathbf{u}_h], \quad (3.3.59)$$

y reemplazando (3.3.59) en (3.3.56) se tiene

$$\tilde{\mathbf{u}} \approx \boldsymbol{\tau}^e [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \delta_t^n \mathbf{u}_h - \mathbf{\Pi}_\tau [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \delta_t^n \mathbf{u}_h]]. \quad (3.3.60)$$

Sea

$$\mathbf{\Pi}_\tau^\perp = \mathbf{I} - \mathbf{\Pi}_\tau, \quad (3.3.61)$$

donde \mathbf{I} es la identidad en \mathcal{W}_h y $\mathbf{\Pi}_\tau^\perp$ es la proyección sobre el espacio ortogonal al espacio de elementos finitos. La ecuación (3.3.60) se puede escribir como

$$\tilde{\mathbf{u}} \approx \boldsymbol{\tau}^e \mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\mathbf{F} - \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \delta_t^n \mathbf{u}_h]. \quad (3.3.62)$$

donde la matriz de parámetros de estabilización $\boldsymbol{\tau}^e$ que se calcula dentro del dominio de cada elemento está dada por (3.3.31) y (3.3.32).

Si esta expresión es reemplazada en (3.3.50) y tal como se ha mencionado antes, las integrales sobre los contornos de los elementos son cero, se obtiene la ecuación estabilizada con el método OSS para el problema CDR vectorial transitorio que consiste en: dado $\mathbf{u}_h^n \in \mathcal{W}_h$ encontrar $\mathbf{u}_h^{n+1} \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$\begin{aligned} (\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \boldsymbol{\tau}^e \mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\delta_t^n \mathbf{u}_h + \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] d\Omega \\ = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h. \end{aligned}$$

Podemos aplicar aquí los mismos comentarios que para 3.3.57. Sin embargo, hay una consideración importante a tener en cuenta, y es que puesto que $\delta_t^n \mathbf{u}_h$ es una función que pertenece al espacio de elementos finitos \mathcal{W}_h , su componente en el espacio ortogonal es nula, esto es, la ecuación variacional discreta anterior se reduce a

$$\begin{aligned} (\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \boldsymbol{\tau}^e \mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] d\Omega \\ = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h. \end{aligned} \quad (3.3.63)$$

A continuación vamos a describir la manera de calcular $\mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}]$. De la ecuación (3.3.61) tenemos que

$$\mathbf{\Pi}_\tau^\perp [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] = \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F} - \mathbf{\Pi}_\tau [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}]. \quad (3.3.64)$$

Reemplazando la ecuación (3.3.64) en la ecuación (3.3.63) tenemos: dado $\mathbf{u}_h^n \in$

\mathcal{W}_h encontrar $\mathbf{u}_h^{n+1} \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$\begin{aligned} (\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \boldsymbol{\tau}^e (\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F} - \boldsymbol{\Pi}_\tau [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}]) d\Omega \\ = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \end{aligned} \quad (3.3.65)$$

en donde todavía nos hace falta describir como calcular $\boldsymbol{\Pi}_\tau [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}]$.

Para calcular esta proyección, se procede de manera iterativa. La cual, en cada paso de tiempo, se calcula con los valores de las variables correspondientes a la iteración anterior.

Al inicio de cada iteración, primero determinamos $\boldsymbol{\Pi}_\tau [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}]$ resolviendo el siguiente problema de elementos finitos: encontrar $\boldsymbol{\Pi}_\tau [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] \in \mathcal{W}_h$ tal que

$$(\boldsymbol{\Pi}_\tau [\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}], \mathbf{v}_h)_\tau = (\mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}, \mathbf{v}_h)_\tau \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{W}_h, \quad (3.3.66)$$

donde $(\cdot, \cdot)_\tau$ indica el producto escalar L^2 pesado por la matriz de parámetros de estabilización dentro de cada elemento.

El proceso iterativo termina cuando el error calculado con norma L^2 entre dos iteraciones consecutivas es menor que una tolerancia.

3.4 Resultados de los experimentos numéricos

Con el fin de evaluar las formulaciones de los métodos variacionales de subescalas ASGS y OSS con elementos finitos de alto orden aplicados a las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas, hemos realizado diferentes experimentos numéricos, tales como pruebas de convergencia en malla y la aproximación de varios problemas que se encuentran en la literatura. A continuación presentamos los resultados para un test de convergencia y para dos ejemplos que se han convertido en clásicos.

El método de linealización empleado es el de Picard. El criterio de convergencia en no linealidad lo hemos fijado en la norma L^2 , de manera que el proceso iterativo lo hemos considerado convergido cuando

$$\frac{\|\mathbf{u}_h^i - \mathbf{u}_h^{i-1}\|_{L^2}}{\|\mathbf{u}_h^i\|_{L^2}} < \text{tol},$$

donde i es el contador de iteraciones en un paso de tiempo dado y tol es la tolerancia de convergencia, fijada en 10^{-5} en todos los ejemplos. Aquí y en lo que sigue, las normas L^2 se extienden a todo el dominio Ω . Asimismo, todas las unidades se consideran dadas en el SI.

3.4.1 Pruebas de convergencia en malla

Las pruebas de convergencia en malla que hemos llevado a cabo consisten en calcular el error en norma L^2 entre el valor exacto y la aproximación numérica de una incógnita u (cualquiera de las del problema). Si el error del método se comporta como el error de interpolación, situación que puede considerarse óptima, este error debe comportarse como

$$e = \|u - u_h\|_{L^2} \leq ch^{d+1} \quad (3.4.1)$$

donde u_h es la aproximación de u en el espacio de elementos finitos, c es una constante positiva, h es aquí el diámetro de la partición de elementos finitos (no la altura de la lámina de agua) y d el grado polinómico de la función de forma correspondiente a la interpolación de la aproximación u_h . Aunque consideraremos valores de hasta $d = 4$, no consideraremos convergencia en d , por lo que la constante c la tomaremos fija (sabemos que decrece con d).

Aplicando logaritmos a los dos miembros de la inecuación (3.4.1) se tiene que:

$$\log e \leq \log c + (d + 1)\log h \quad (3.4.2)$$

Si graficamos la ecuación (3.4.2) (en el caso de igualdad) en el plano \mathbb{R}^2 con $\log e$ en las ordenadas y $\log h$ en las abscisas, tenemos una línea recta, donde $d + 1$ es la pendiente teórica óptima de convergencia. Las pruebas de convergencia en malla consisten entonces en verificar que la pendiente calculada sea precisamente $d + 1$. Para ello, seleccionamos como solución exacta tanto para las velocidades U_1 , U_2 como para la elevación de la superficie libre del agua η la función polinómica espacio-temporal

$$\eta(x, y, t) = U_1(x, y, t) = U_2(x, y, t) = x^6 y^6 (1 - x)^6 (1 - y)^6 t,$$

e imponemos el término fuente \mathbf{F} en la ecuación vectorial de CDR transitoria (3.2.5) mediante las siguientes expresiones tomadas de las ecuaciones (3.2.1),

(3.2.2):

$$f_i = \partial_t (hU_i) + \partial_j (hU_i U_j) + \partial_i \frac{1}{2} g (h^2 - H^2) - \partial_j \left(\frac{h}{\rho} \bar{\tau}_{ji} \right) + Q_i \quad i = 1, 2,$$

$$f_3 = \partial_t h + \partial_i (hU_i),$$

siendo $\mathbf{F} = [f_1, f_2, f_3]^T$ y $\bar{\tau}_{ji}$ y Q_i dados por las ecuaciones (3.2.3) y (3.2.4), respectivamente. Hemos tomado $H = 1$ m, es decir, batimetría constante con profundidad de 1 m, aceleración de la gravedad $g = 10$ m/s² y viscosidad cinemática $\nu_H = \frac{\mu_H}{\rho} = 10^{-3}$ m²/s. El parámetro de Coriolis \hat{f} , las tensiones de superficie libre debidas al viento τ_{3i}^s , las variaciones de presión atmosférica p_a y el coeficiente de fricción en el fondo Ch no han sido tomados en cuenta para los ejemplos de las pruebas de convergencia en malla.

A continuación presentamos los resultados de los experimentos numéricos de las pruebas de convergencia en malla con solución analítica conocida, tanto para el método ASGS como para el OSS. En cada gráfica se puede apreciar con línea continua la pendiente teórica de convergencia y con línea con apéndices sobre ella la pendiente calculada. Presentamos los resultados para los distintos grados polinómicos de las funciones de forma estudiados, es decir, para elementos lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden triangulares P_1, P_2, P_3, P_4 y cuadrangulares Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 respectivamente.

El dominio computacional es el cuadrado $[0, 1] \times [0, 1]$ y el intervalo de tiempo es $[0, 1]$, con incrementos para cada paso de tiempo $\delta t = 0.2$. La malla de elementos finitos consiste en triángulos o cuadrados formando una malla regular. Para cada grado polinómico de las funciones de forma P_1, P_2, P_3, P_4 o Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 , hemos calculado los errores con norma L^2 para ocho mallas de tamaño h siendo $\frac{1}{h} = 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50$, el número de partes en que se ha dividido cada lado del cuadrado. En el Cuadro 3.1 se muestran el número de elementos y el número de nodos para cada refinamiento, tanto para elementos triangulares como para elementos cuadrangulares. El integrador temporal utilizado es BDF1.

En el encabezado de las gráficas de las pruebas de convergencia en malla se adjuntan dos filas con los valores de las pendientes calculadas; la primera fila corresponde a los valores de las pendientes de las rectas que pasan por los primeros 5 puntos y la segunda fila son las pendientes de las rectas que pasan por los últimos 5 puntos de los 8 puntos del refinamiento de malla evaluados ($\frac{1}{h} = 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50$). De esta manera podemos visualizar numéricamente la tendencia

Triángulos		Número de nodos			
$1/h$	elem.	$P1$	$P2$	$P3$	$P4$
15	450	256	961	2116	3721
20	800	441	1681	3721	6561
25	1250	676	2601	5776	10201
30	1800	961	3721	8281	14641
35	2450	1296	5041	11236	19881
40	3200	1681	6561	14641	25921
45	4050	2116	8281	18496	32761
50	5000	2601	10201	22801	40401
Cuadrados		Número de nodos			
$1/h$	elem.	$Q1$	$Q2$	$Q3$	$Q4$
15	225	256	961	2116	3721
20	400	441	1681	3721	6561
25	625	676	2601	5776	10201
30	900	961	3721	8281	14641
35	1250	1296	5041	11236	19881
40	1600	1681	6561	14641	25921
45	2025	2116	8281	18496	32761
50	2500	2601	10201	22801	40401

Tabla 3.1: Refinamiento para elementos triangulares y cuadrangulares

de la convergencia de las pendientes calculadas hacia el valor teórico. Para el cálculo de dichas pendientes se ha utilizado el método de los mínimos cuadrados. La simbología $m(P1)$, $m(P2)$, $m(P3)$, $m(P4)$, corresponde a las pendientes para elementos triangulares lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden, respectivamente, mientras que para elementos cuadrangulares lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden la simbología es $m(Q1)$, $m(Q2)$, $m(Q3)$, $m(Q4)$. Los valores de las pendientes teóricas para las variables de velocidad se corresponden con: $m(P1) = m(Q1) = 2$, $m(P2) = m(Q2) = 3$, $m(P3) = m(Q3) = 4$, $m(P4) = m(Q4) = 5$, y las pendientes teóricas para la variable η que es la elevación de la superficie libre del agua se corresponden con: $m(P1) = m(Q1) = 1$, $m(P2) = m(Q2) = 2$, $m(P3) = m(Q3) = 3$, $m(P4) = m(Q4) = 4$.

En las Figuras 3.1, 3.2 y 3.3 se muestran la convergencia en malla de las componentes de la velocidad U_1 y U_2 y de la elevación de la superficie libre del agua η usando elementos triangulares, tanto para las formulaciones estabilizadas ASGS gráficas del lado izquierdo y OSS gráficas del lado derecho. Para elementos cuadrangulares los resultados de las pruebas de convergencia en malla están en las Figuras 3.4, 3.5 y 3.6.

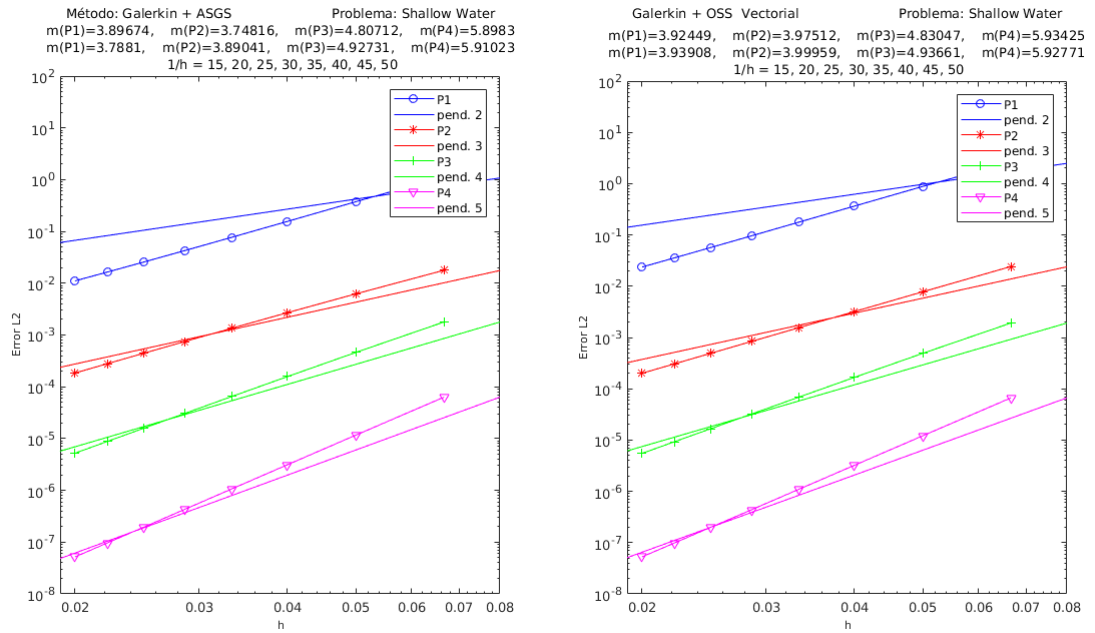


Figura 3.1: Convergencia en malla ASGS-OSS, elementos triangulares, velocidad U_1 .

Para los dos métodos de estabilización considerados, ASGS y OSS, los valores de las constantes algorítmicas c_i , $i = 1, 2, 3, 4$, se han calibrado a $c_1 = 12$, $c_2 = 2$, $c_3 = 1$, $c_4 = 1$, como ya se ha mencionado. Para la convergencia del método OSS con elementos cuadráticos cuadrados Q_2 , fue necesario utilizar $c_1 = 15$. Aunque para los elementos lineales Q_1 y de alto orden Q_3 , Q_4 , es suficiente utilizar $c_1 = 4$, hemos preferido usar $c_1 = 15$ para todos los elementos con el objeto de uniformizar los datos en las gráficas de las pruebas de convergencia en malla. En las figuras de las gráficas de convergencia en malla se observa tanto gráfica como numéricamente que las pendientes calculadas son mayores o tienden al valor de la pendiente teórica $d + 1$.

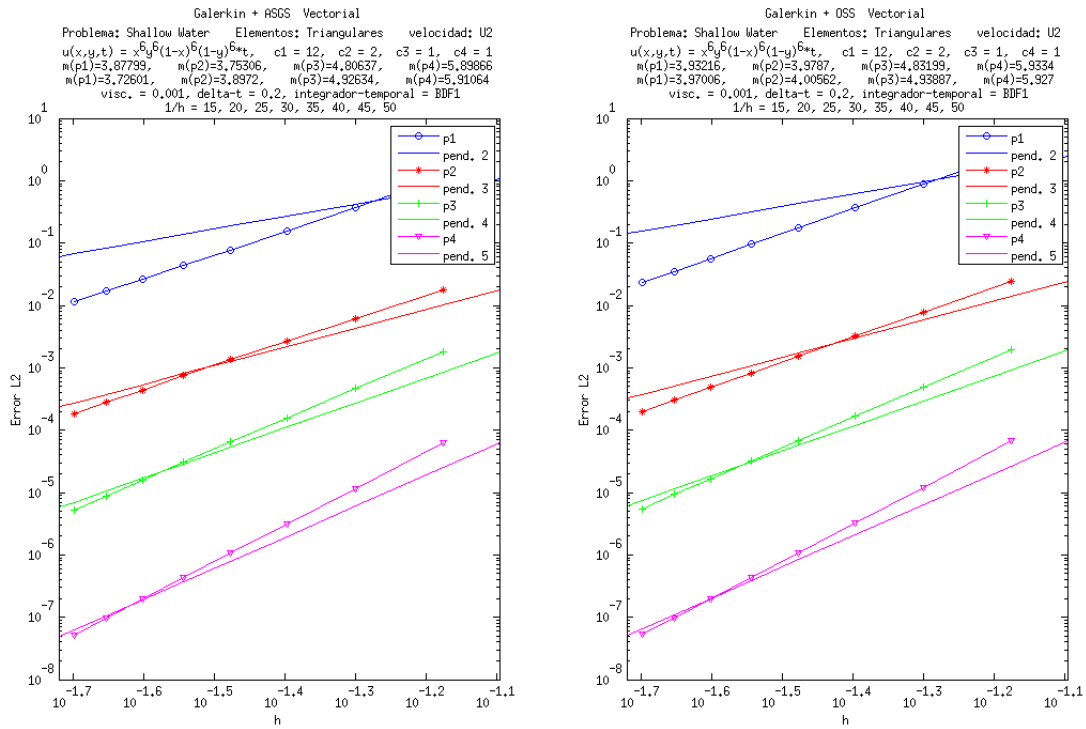


Figura 3.2: Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares, velocidad U_2 .

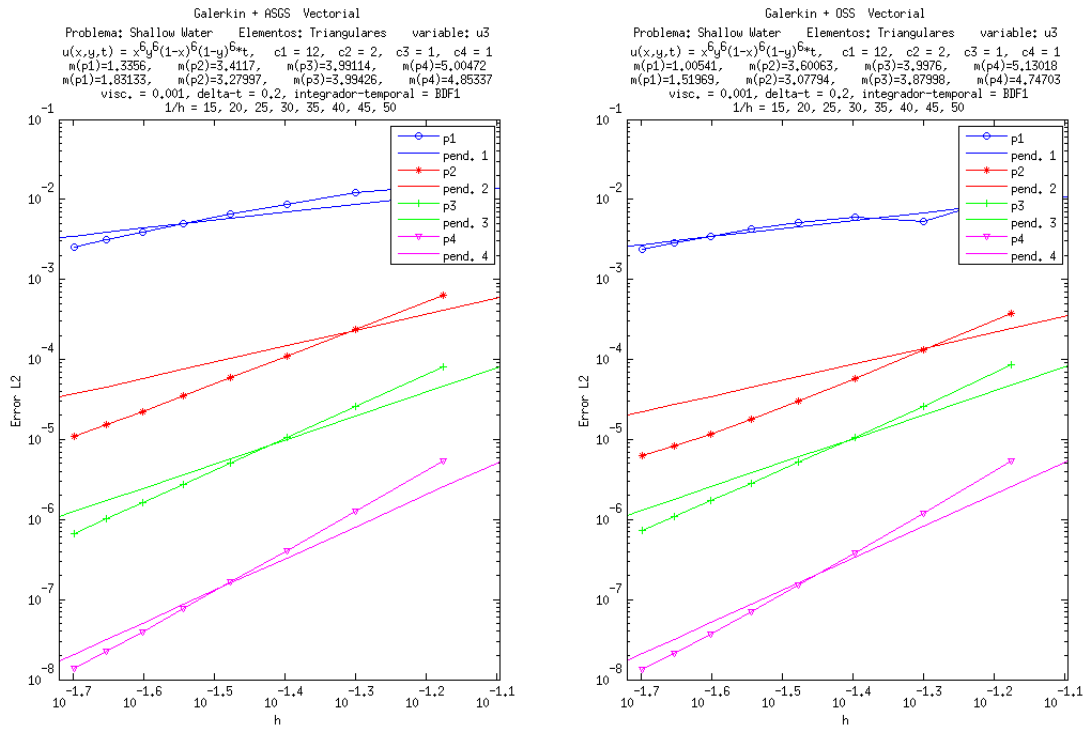


Figura 3.3: Convergencia ASGS-OSS, elementos triangulares, elevación η de la superficie libre del agua.

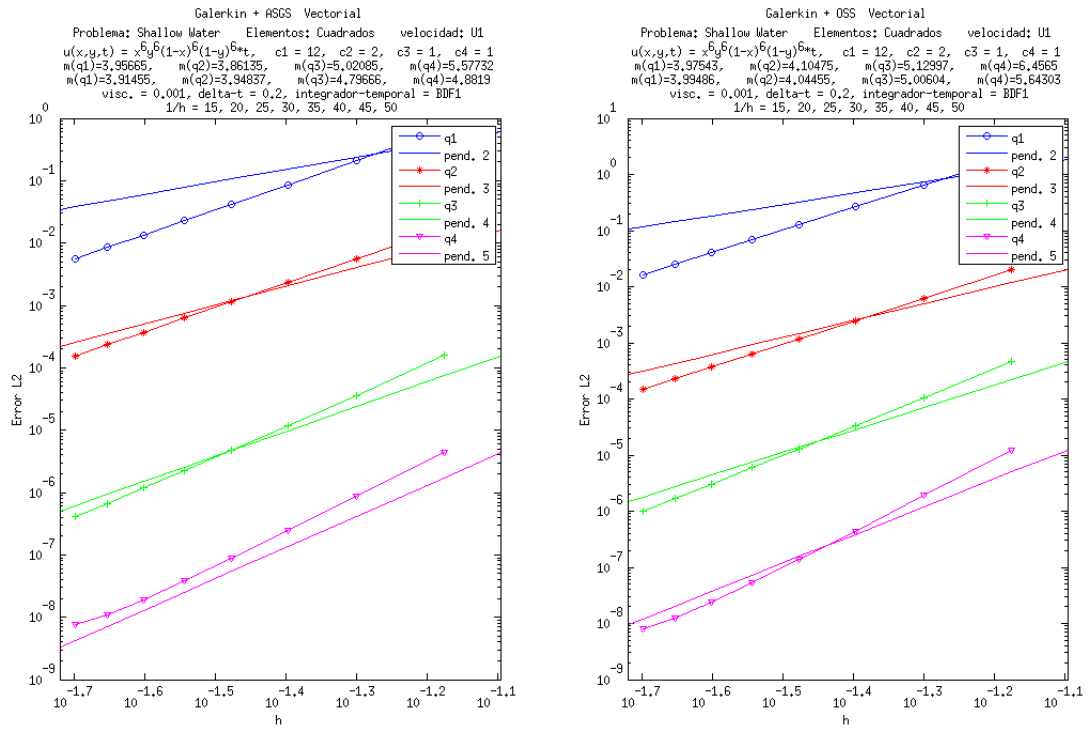


Figura 3.4: Convergencia ASGS-OSS, elementos cuadrangulares, velocidad U_1 .

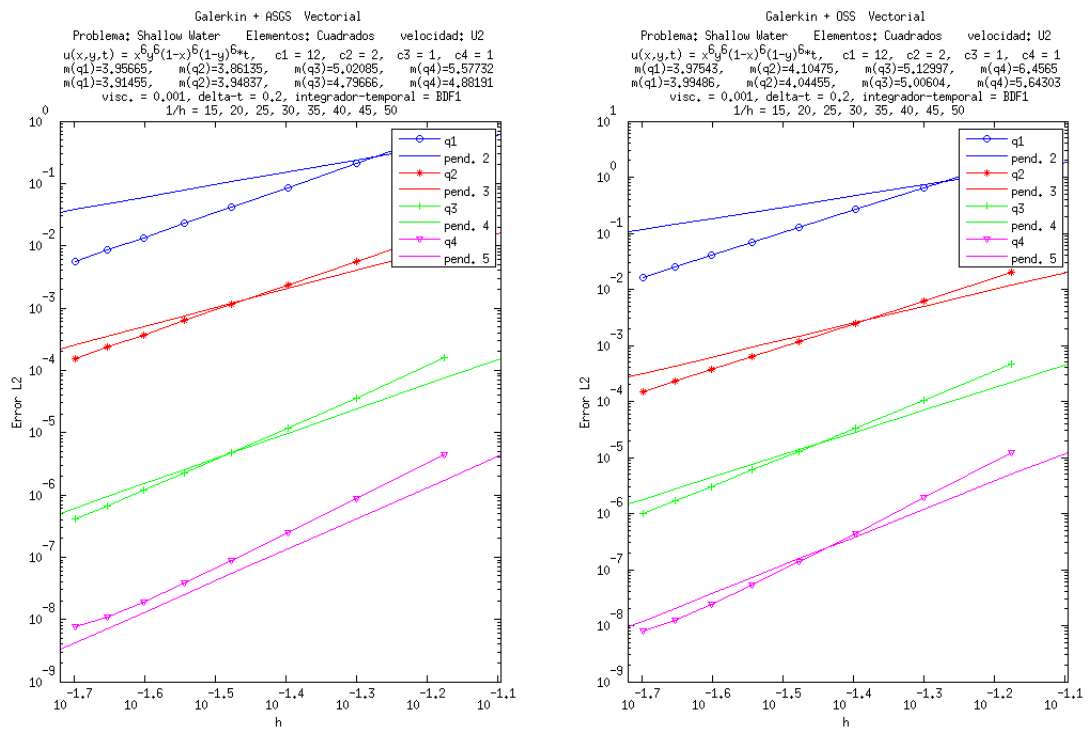


Figura 3.5: Convergencia ASGS-OSS, elementos cuadrangulares, velocidad U_2 .

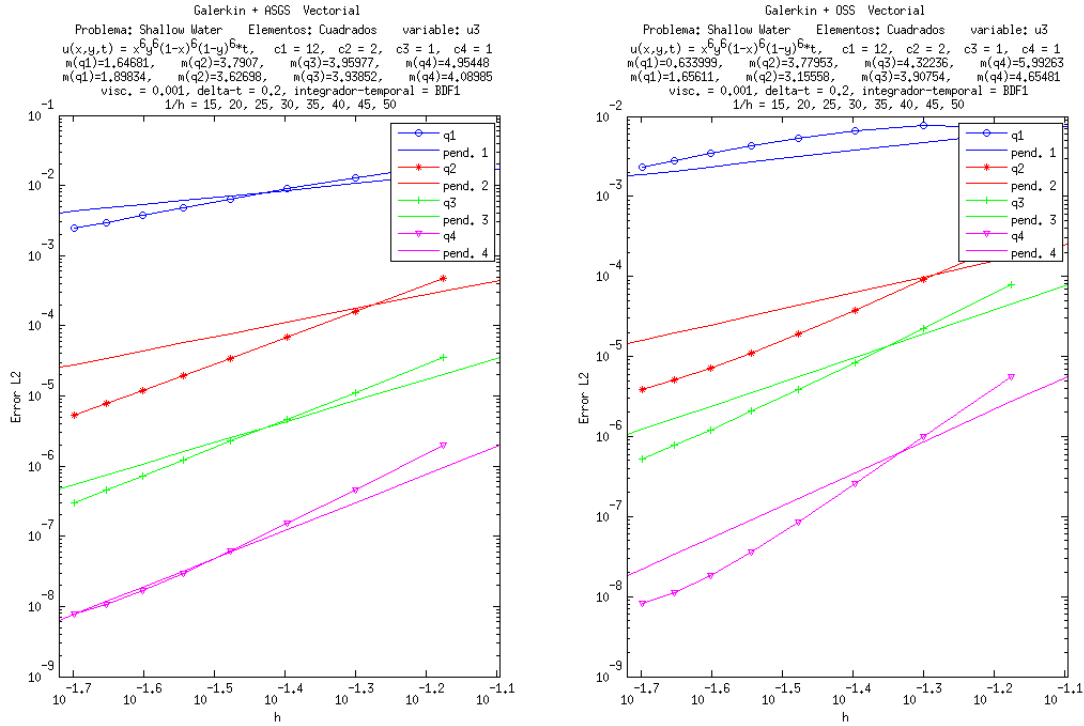


Figura 3.6: Convergencia ASGS-OSS, elementos cuadrados, elevación η de la superficie libre del agua.

Los resultados de las gráficas de convergencia en malla muestran claramente que las formulaciones generalizadas para los métodos estabilizados ASGS y OSS son capaces de aproximar correctamente el problema de CDR vectorial transitorio con convección dominante que estamos considerando, con igual interpolación para todas las variables e incluyendo no linealidad en los términos convectivo, de reacción y en la derivada temporal de la tercera variable correspondiente al cambio de variable.

3.4.2 Flujo a través de un obstáculo elíptico

Este caso de referencia ha sido ampliamente examinado en la literatura utilizando diferentes métodos, como volúmenes finitos [35, 37], método de Godnov [38], método de los mínimos cuadrados con elementos finitos [30, 34], o esquemas WENO en diferencias finitas [39]. En el presente trabajo vamos a reexaminar el caso de referencia con el método variacional ASGS y utilizando funciones de forma cuadráticas, cúbicas y de cuarto orden.

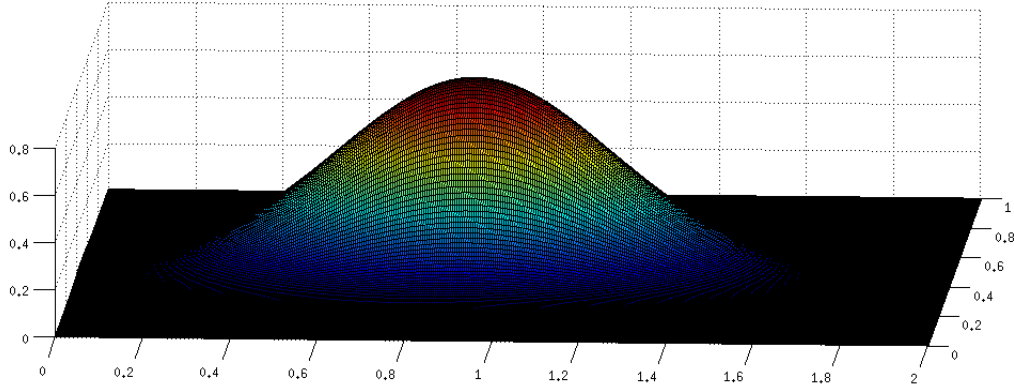


Figura 3.7: Flujo a través de un obstáculo elíptico. Ilustración del dominio computacional y de la batimetría.

El dominio computacional es $[0, 2] \times [0, 1]$ y la batimetría mostrada en la Figura 3.7 está dada por

$$z(x, y) = 0.8 \exp(-5(x - 0.9)^2 - 50(y - 0.5)^2)$$

El movimiento se inicia con la condición inicial de la superficie libre del agua perturbada por un desplazamiento hacia arriba de 0.01 m en la región $0.05 \leq x \leq 0.15$:

$$\eta(x, y, 0) = \begin{cases} 0.01 \text{ m} & \text{si } 0.05 \leq x \leq 0.15 \\ 0 \text{ m} & \text{de otra manera.} \end{cases}$$

El momento inicial en las direcciones x, y es nulo:

$$U_1(x, y, 0) = U_2(x, y, 0) = 0 \text{ m/s.}$$

En cuanto al mallado, con el objeto de comparar los resultados entre elementos lineales y de alto orden, hemos considerado conveniente utilizar refinamientos de malla para Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 que den el mismo o aproximadamente el mismo número de nodos entre sí. Tomamos como referencia el refinamiento de malla para Q_2 , que consta de 200×100 elementos cuadrados uniformes de 9 nodos, es decir, el espaciado en las direcciones x e y es $\delta x = \delta y = 0.01$ m, con un total 80601 nodos. De esta manera, la malla de referencia para elementos Q_1 consta de 400×200 elementos cuadrados uniformes de 4 nodos, es decir $\delta x = \delta y = 0.005$ m,

con un total de 80601 nodos. La malla de referencia para elementos Q_3 consta de 133×67 elementos cuadrados uniformes de 16 nodos, es decir $\delta x = \delta y = 0.015$ m, con un total de 80800 nodos. Finalmente, la malla de referencia para elementos Q_4 consta de 100×50 elementos cuadrados uniformes de 25 nodos, es decir $\delta x = \delta y = 0.02$ m, con un total de 80601 nodos.

El tamaño del paso de tiempo es uniforme, con $\delta t = 0.001$ s, y el integrador temporal es BDF1 en todos los casos.

La referencia del nivel del agua en reposo, es decir, con $\eta = 0$ m, es $z = H = 1.0$ m.

Las Figuras 3.8 y 3.9 muestran los contornos 2D de la superficie libre del agua η para distintos instantes de tiempo $t = 0.12, 0.24, 0.36, 0.48, 0.60$ s. Los contornos 2D calculados se presentan para los elementos Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 . A pesar de ser calculados para todos los elementos con mallas con igual número total de nodos, los resultados conforme se aumenta el orden de los polinomios de interpolación presentan mayor detalle que los de menor orden; esto se aprecia mirando los gráficos horizontalmente para un instante de tiempo, comparando los resultados de elementos Q_1, Q_2, Q_3 y Q_4 .

En la Figura 3.10 mostramos una comparación de los resultados de los contornos 3D de la superficie libre del agua η . Los gráficos de la parte izquierda corresponden a los resultados de nuestro trabajo y los gráficos de la parte derecha son los resultados de Shin-Jye Liang y Ying-Chih Chen [30], ambos estudios con iguales características de mallado y paso de tiempo (elementos Q_2 , $\delta x = \delta y = 0.01$ m, y $\delta t = 0.001$ s). Con respecto a los otros resultados 3D para elementos Q_1, Q_3 y Q_4 de nuestro trabajo, las diferencias entre sí y con respecto a Q_2 son visualmente imperceptibles, por lo que en la Figura 3.10(a) presentamos solo los resultados correspondientes al elemento Q_2 , para poder así compararlos con los resultados de [30]. En ambos trabajos el comportamiento de la onda es bastante similar, aunque en nuestro caso la evolución temporal es más disipativa por haber utilizado un integrador temporal de primer orden (recuérdese que nuestro propósito es el diseño de aproximaciones precisas y robustas en el espacio). Así, la perturbación que inicialmente es plana y se propaga hacia la derecha se ve afectada por el obstáculo elíptico en la parte inferior del lecho. El incremento de la amplitud de onda debido a la disminución de la profundidad del agua es obvio en $t = 0.24$ s, debido a la disminución de la velocidad de onda, siendo la más baja de todo el flujo en el momento en el cual la onda atraviesa el punto más alto del obstáculo

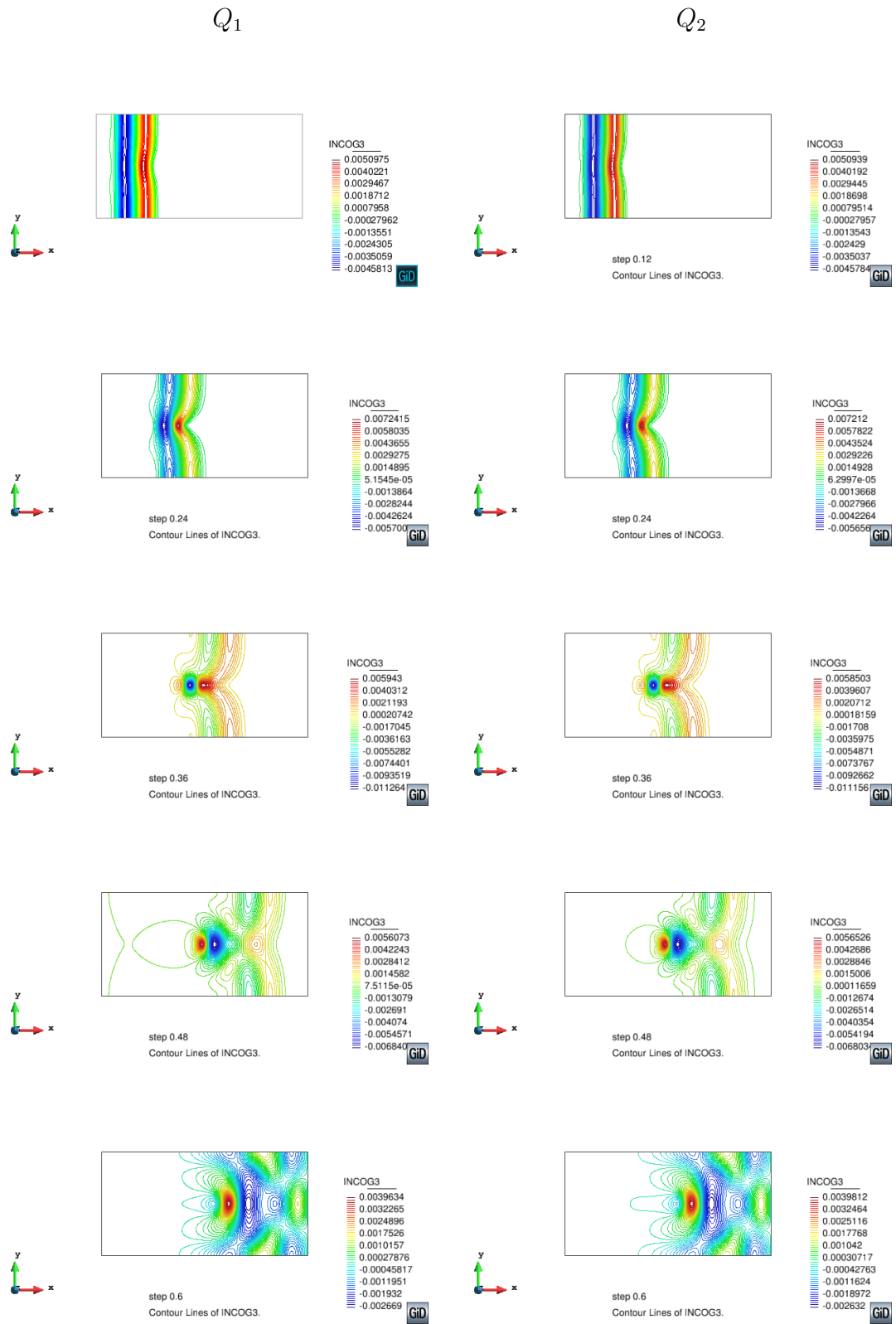


Figura 3.8: Flujo a través de un obstáculo elíptico. Contornos 2D de la superficie libre del agua η .

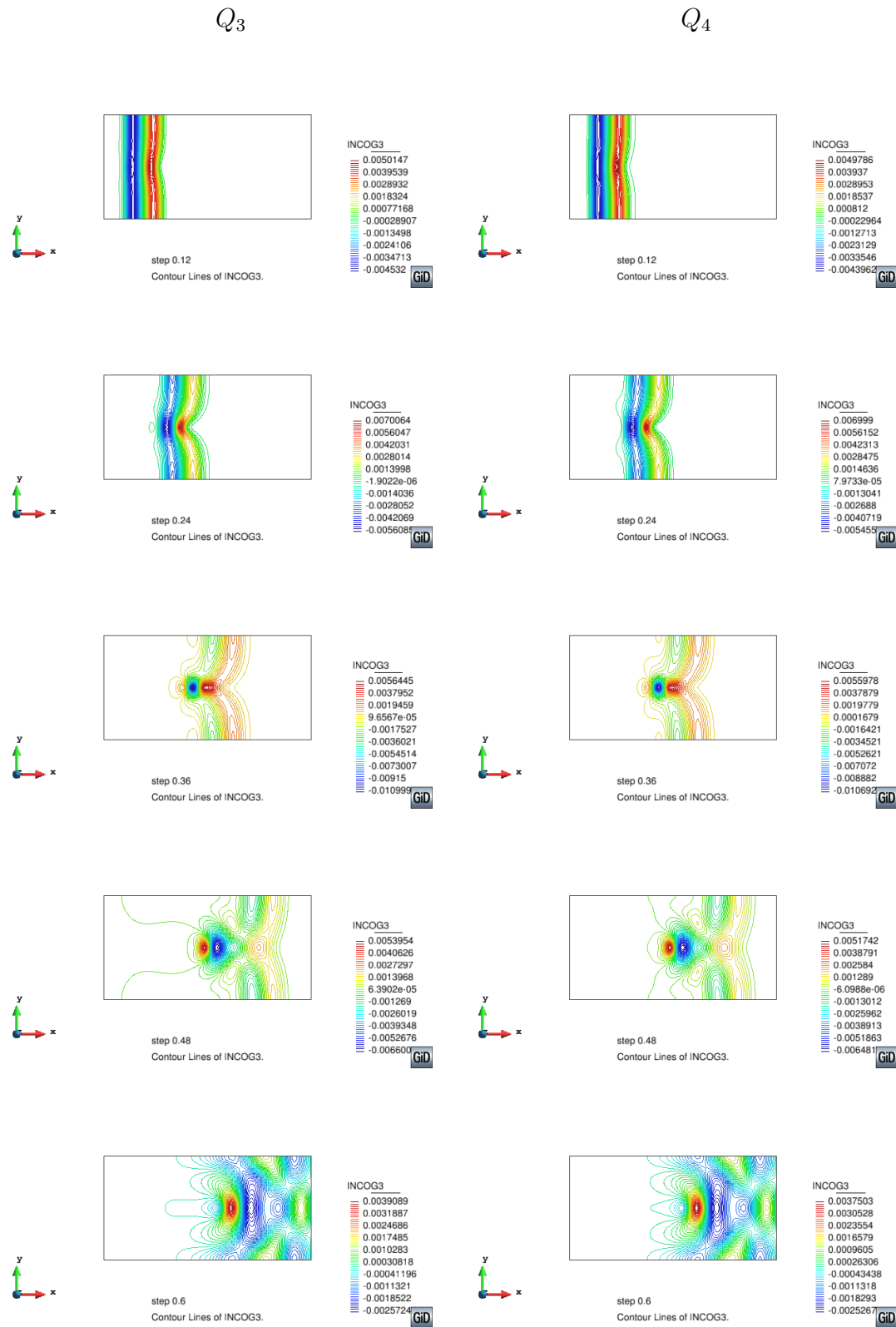


Figura 3.9: Flujo a través de un obstáculo elíptico. Contornos 2D de la superficie libre del agua η .

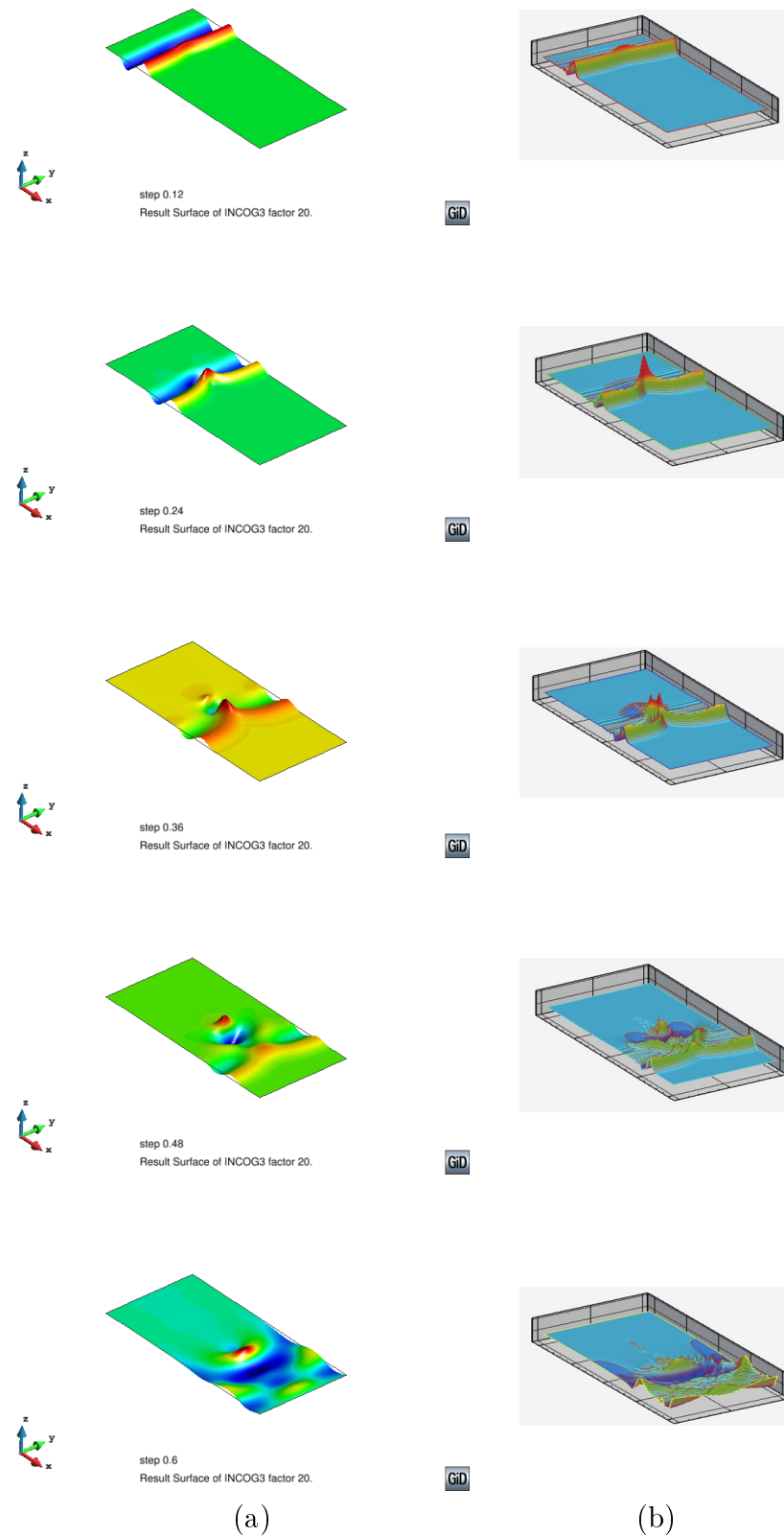


Figura 3.10: Flujo a través de un obstáculo elíptico. Contornos 3D de la superficie libre del agua η , con elementos Q_2 . (a) Resultados del presente estudio, (b) resultados de Shin-Jye Liang y Ying-Chih Chen [30].

elíptico y que aproximadamente se produce en el instante $t = 0.24$ s. Se observan ondas estacionarias de reflexión justo detrás del pico producido por el choque de la onda con el obstáculo elíptico, en $t = 0.24, 0.36, 0.48$ y 0.60 s.

Tiempo (s)	Elevación de la superficie libre del agua, η (mm)			
	Q_1	Q_2	Q_3	Q_4
0.12	5.0975	5.0939	5.0716	4.9786
0.24	7.2415	7.2120	7.1718	6.9990
0.36	5.9430	5.8503	5.7924	5.5978
0.48	5.6073	5.6526	5.6161	5.1742
0.60	3.9634	3.9812	3.9523	3.7503

Tabla 3.2: Flujo a través de un obstáculo elíptico. Picos de elevación máxima

En el Cuadro 3.2 se encuentran tabuladas las elevaciones de la superficie libre del agua η , correspondientes a los picos más altos de la onda para los instantes de tiempo $t = 0.12, 0.24, 0.36, 0.48$ y 0.60 s. Observamos como en todos los casos la onda alcanza su pico máximo en $t = 0.24$ s, debido precisamente a que alrededor de $t = 0.24$ s la onda atraviesa el punto más alto del obstáculo elíptico. También observamos que para cada instante de tiempo la elevación de la superficie del agua η disminuye conforme se incrementa el orden del elemento, lo que es completamente coincidente con la mejor precisión en elementos de alto orden. Como podemos ver en el Cuadro 3.2, para un instante de tiempo las variaciones de η conforme se aumenta el orden del elemento son del orden de las décimas, centésimas y en algunos casos milésimas de milímetro, por lo que dichas variaciones son visualmente imperceptibles como se ha mencionado anteriormente, motivo por el cual en la Figura 3.10(a) se ha presentado solo el contorno 3D correspondiente a elementos Q_2 .

Finalmente, en la 3.11 presentamos los resultados de los contornos 2D del nivel de superficie libre del agua η de: (a) Shin-Jye y Ying-Chih Chen [30] (con elementos Q_2 , $\delta x = \delta y = 0.01$ m, y $\delta t = 0.001$ s), (b) Lian y Hsu [34] (con elementos P_1 , $\delta x = \delta y = 0.01$ m, y $\delta t = 0.0005$ s) y (c) Akoh et al. [35] (con elementos P_1 , $\delta x = \delta y = 0.01$ m, y $\delta t = 0.0005$ s), para ser comparados con nuestros resultados de las Figuras 3.8 y 3.9. En general observamos que los resultados del presente trabajo dan estructuras de ondas y gradientes más nítidos y con más detalle que los resultados de [30, 34] y [35].

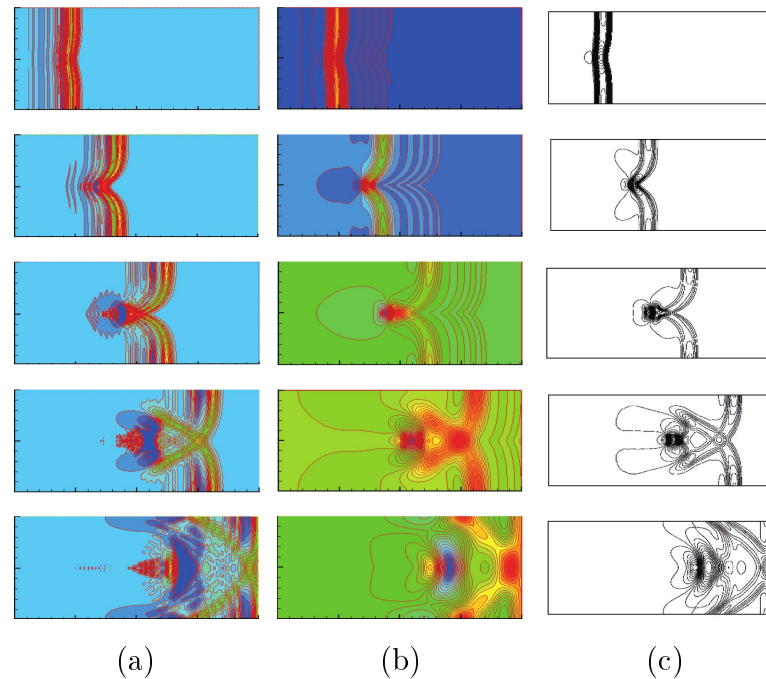


Figura 3.11: Flujo a través de un obstáculo elíptico. Contornos 2D de la superficie libre del agua de: (a) resultados de Shin-Jye y Ying-Chih Chen [30] con elementos Q_2 cuadrado de 9 nodos, (b) resultados de Ying-Chih Chen [34] con elementos P_1 triángulos de 3 nodos, (c) resultados de Akoh et al [35] con elementos P_1 .

3.4.3 Flujo de la rotura de una presa a través de una compuerta de esclusa

A continuación consideramos el problema de la rotura de una presa, el cual se puede encontrar por ejemplo en [48, 49]. La ilustración del problema se muestra en la Figura 3.12(a). La geometría del dominio computacional es una región cuadrada de $200 \text{ m} \times 200 \text{ m}$ con fondo plano sin fricción, y deslizamiento libre en todas las paredes del embalse (aguas arriba) y del desembalse (aguas abajo), excepto en las paredes interiores de separación del embalse y desembalse y de la compuerta de la esclusa. Dicha compuerta de esclusa de 75 m de ancho está localizada en la mitad del dominio. El nivel inicial del agua en el embalse de la presa (aguas arriba) es de 10 m , y el del desembalse (aguas abajo) es de 5 m de alto con el agua en reposo. En el instante en que falla la presa, el embalse de agua se libera a través de la compuerta de esclusa, creando ondas de propagación aguas abajo (desembalse). En cuanto a las condiciones de contorno, las velocidades en la dirección perpendicular a las paredes de la presa, tanto en el embalse como

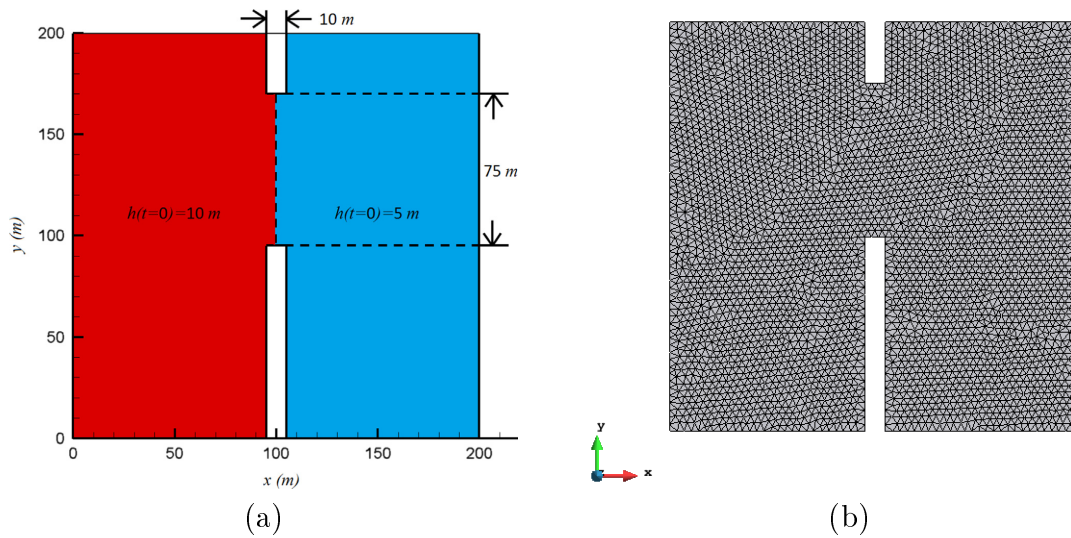


Figura 3.12: Flujo de la rotura de una presa. (a) Geometría y condiciones iniciales del problema. (b) Malla con elementos triangulares P_1 con 3733 nodos.

en el desembalse (partes derecha e izquierda correspondientemente de la Figura 3.12(a)), es necesario prescribirlas a cero; además la velocidad tangencial en las paredes interiores de separación del embalse y desembalse, así como también en las paredes de la compuerta de la esclusa, también se deben prescribir a cero. El borde izquierdo del desembalse es libre, por lo tanto la velocidad perpendicular a este borde la dejamos sin prescribir a cero. La superficie libre del agua η no se prescribe, se deja libre en todo el contorno.

Debido a que la velocidad del flujo en la dirección x es muy variable, el comportamiento de los parámetros de estabilización también es muy variable, con valores en nada comparables con el paso de tiempo, lo cual genera problemas de convergencia. Para evitar estos problemas, hemos redefinido τ_1 en cada elemento e como

$$\tau_1^e \leftarrow \min(\tau_1^e, \alpha \delta t), \quad (3.4.3)$$

donde δt es el paso de tiempo y α es un parámetro que es necesario ajustar dependiendo del tamaño de la malla y del grado del polinomio de las funciones de forma. Para este caso estudiado hemos adoptado $\alpha = 10$ para elementos P_1 y P_2 , para elementos P_3 se ha usado $\alpha = 1$ y para elementos P_4 se ha tomado $\alpha = 0.5$. El valor de τ_2^e se calcula con (3.3.32), pero en este caso con el τ_1^e calculado en (3.4.3).

En la Figura 3.12(b) se encuentra la malla usada con 7164 elementos triangulares

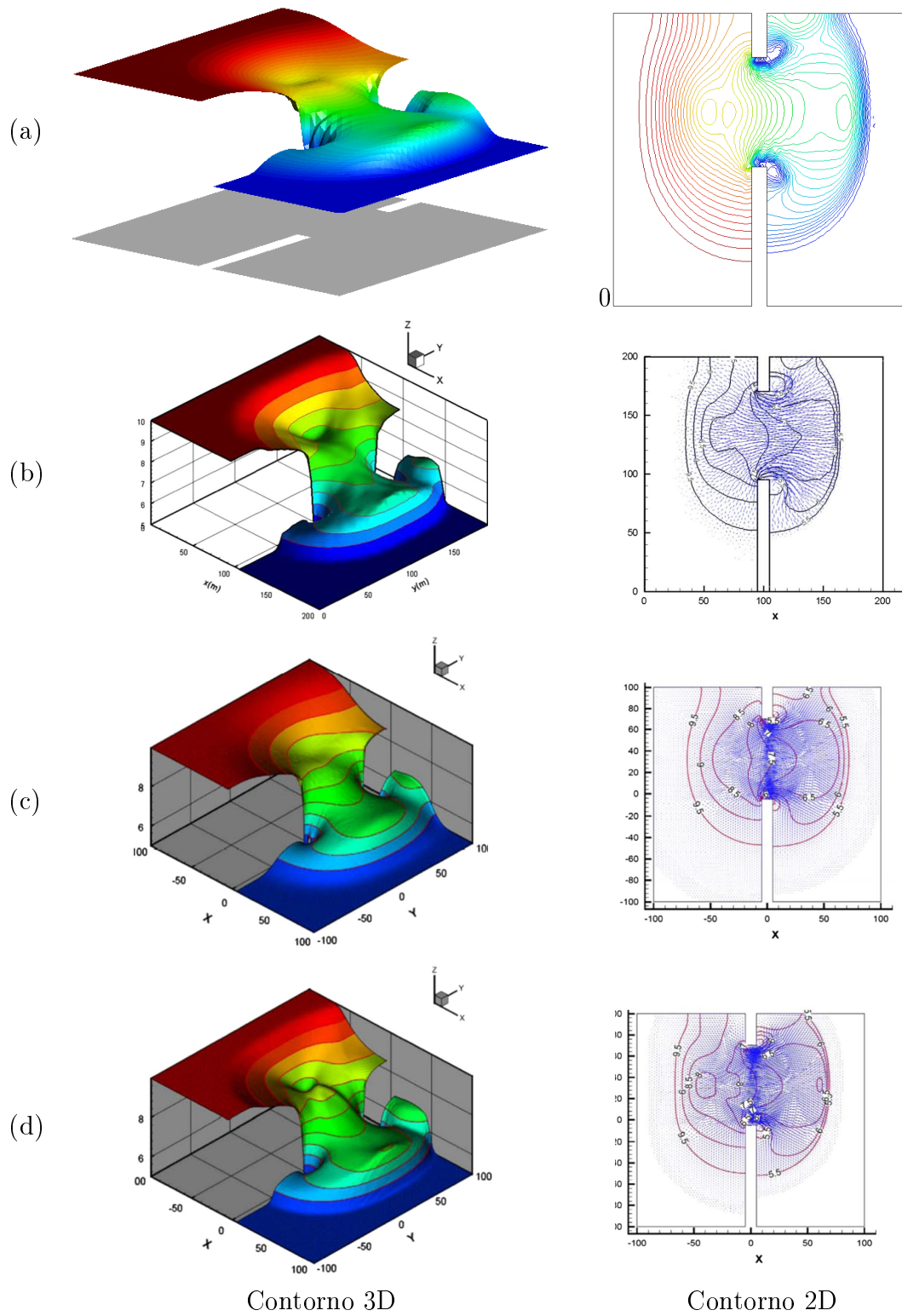


Figura 3.13: Flujo de la rotura de una presa. Contornos 3D y 2D de la superficie libre del agua en 7.2 s. Comparación de: (a) Estudio presente, (b) ELRBFM [48], (c) FVM-esquema de primer orden [50], (d) FVM-esquema de segundo orden [50].

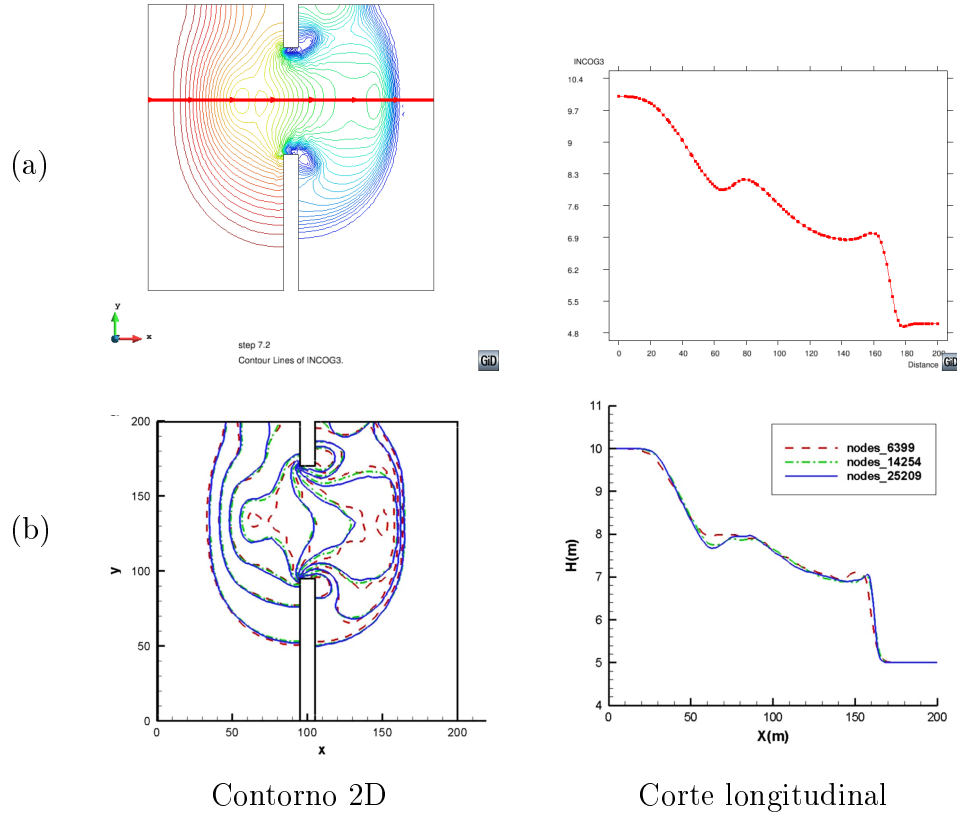


Figura 3.14: Flujo de la rotura de una presa. Contornos 2D y corte longitudinal de la superficie libre del agua en 7.2 s. Comparación de: (a) Estudio presente, (b) ELRBFM [48].

P_1 , que dan un total de 3733 nodos.

En la Figura 3.13 presentamos la comparación de los resultados de los contornos 3D y 2D de la superficie libre del agua en $t = 7.2$ s. En la Figura 3.13(a) se encuentra el resultado de nuestro trabajo y en las Figuras 3.13(b), 3.13(c) y 3.13(d), se encuentran los resultados con otros métodos como: el método ELRBFM (Extrapolated local radial basis function collocation method) [48], el método de volúmenes finitos con esquema de primer orden y esquema de segundo orden [50], respectivamente. Observando la Figura 3.13 vemos que el resultado de nuestro trabajo de los contornos 3D y 2D presenta mejor definición y captura de la onda de propagación que los resultados de [48, 50].

En las Figuras 3.14 y 3.15 se presentan los contornos 2D y los cortes longitudinales indicados de la superficie libre del agua y de la velocidad en la dirección x en

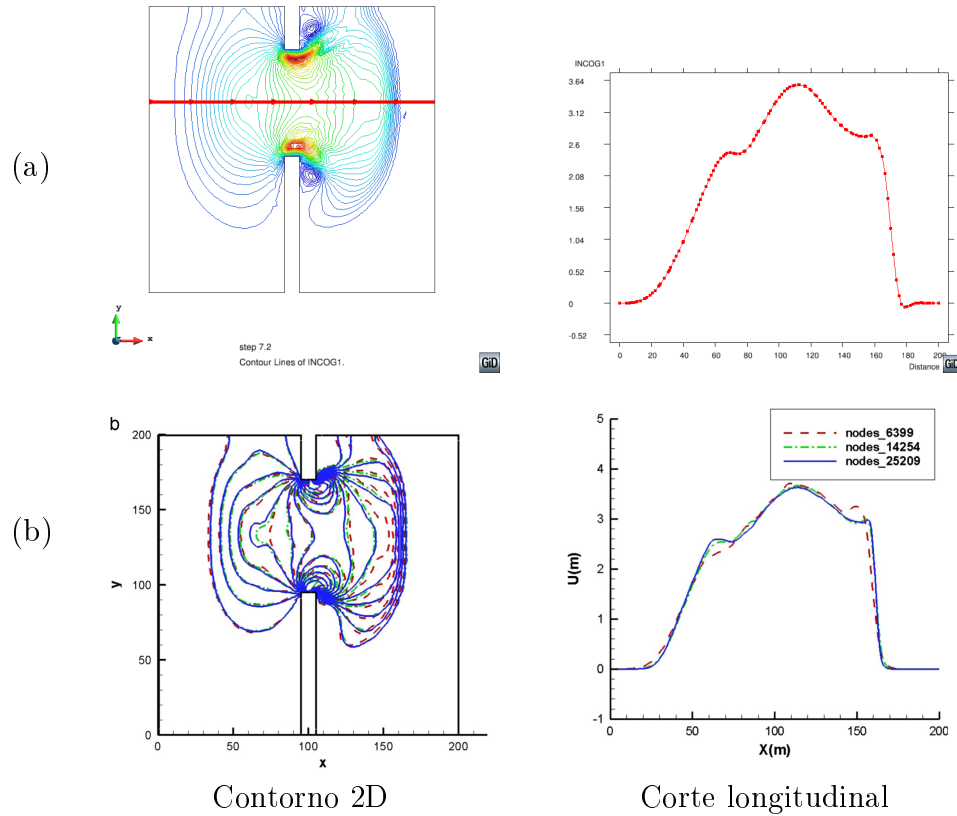


Figura 3.15: Flujo de la rotura de una presa. Contornos 2D y corte longitudinal de la velocidad en la dirección x en 7.2 s. Comparación de (a) Estudio presente, (b) ELRBFCM [48].

$t = 7.2$ s, respectivamente. En las Figuras 3.14(a) y 3.15(a) se encuentran los resultados de nuestro trabajo, mientras que en las Figuras 3.14(b) y 3.15(b) están los resultados de C.K. Chou et al. con el método ELRBFCM [48]. Observando los cortes longitudinales de las Figuras 3.14 y 3.15 vemos que nuestros resultados coinciden con los de C.K. Chou en el perfil de 25209 nodos, pero en nuestro trabajo hemos usado una malla con elementos triangulares P_1 con 3733 nodos, lo que incide en un menor costo computacional. También los contornos 2D, tanto de la superficie libre del agua como de la velocidad en la dirección x en las Figuras 3.14 y 3.15, presentan mejores y más nítidos detalles que los resultados de [48].

También presentamos la simulación del proceso de rotura de la presa en $t = 1.5$ s, $t = 3.5$ s, $t = 5.5$ s y $t = 7.2$ s, que se muestra en la Figura 3.16(a) con 3733 nodos en el caso de nuestro trabajo y con 14254 nodos para los resultados de C.K. Chou et al. [48] en la Figura 3.16(b).

Tiempo

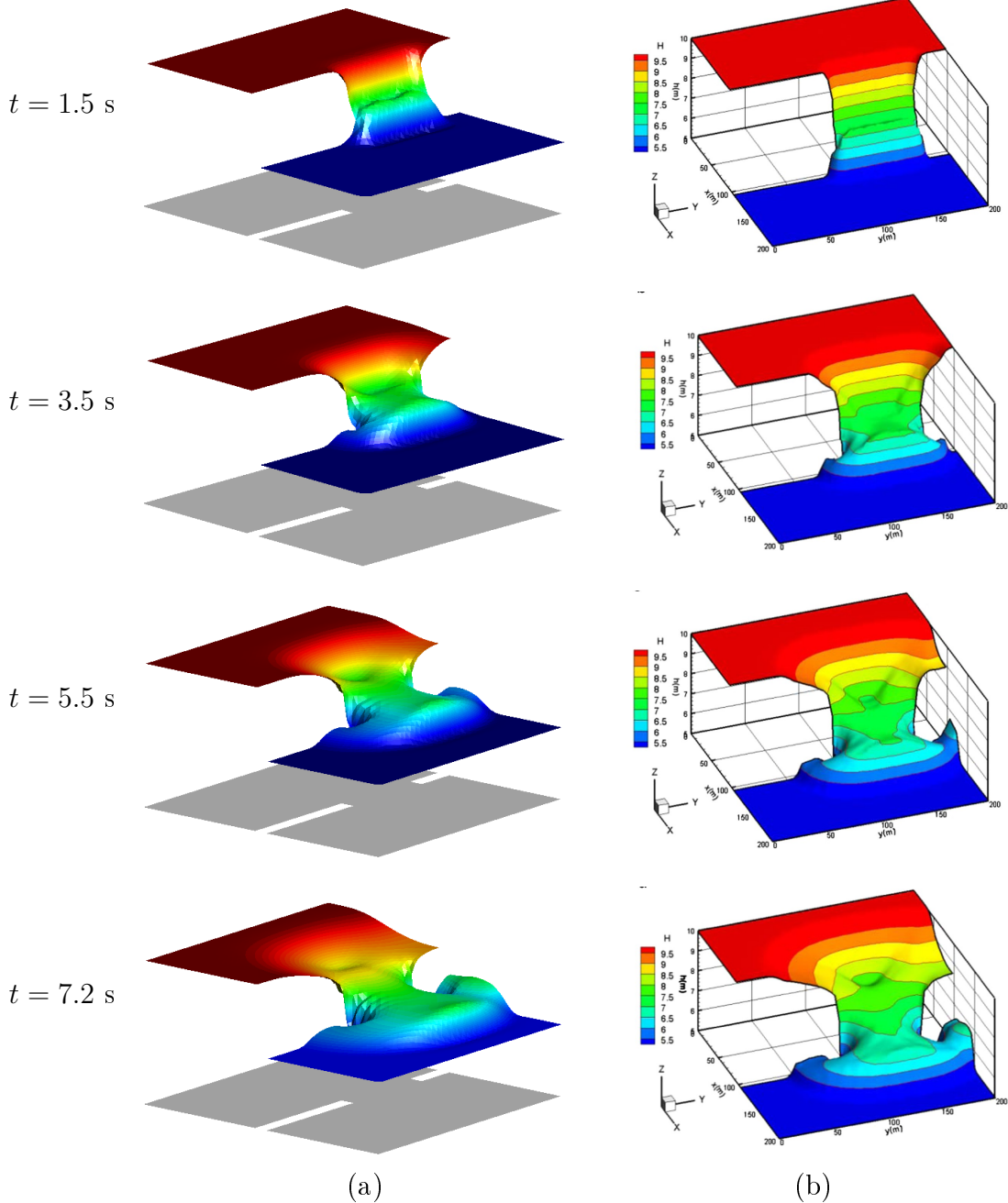


Figura 3.16: Flujo de la rotura de una presa. Contornos 3D de la superficie libre del agua, para los instantes de tiempo $t = 1.5 \text{ s}$, $t = 3.5 \text{ s}$, $t = 5.5 \text{ s}$ y $t = 7.2 \text{ s}$. Comparación de: (a) Estudio presente, (b) ELRBFCM [48].

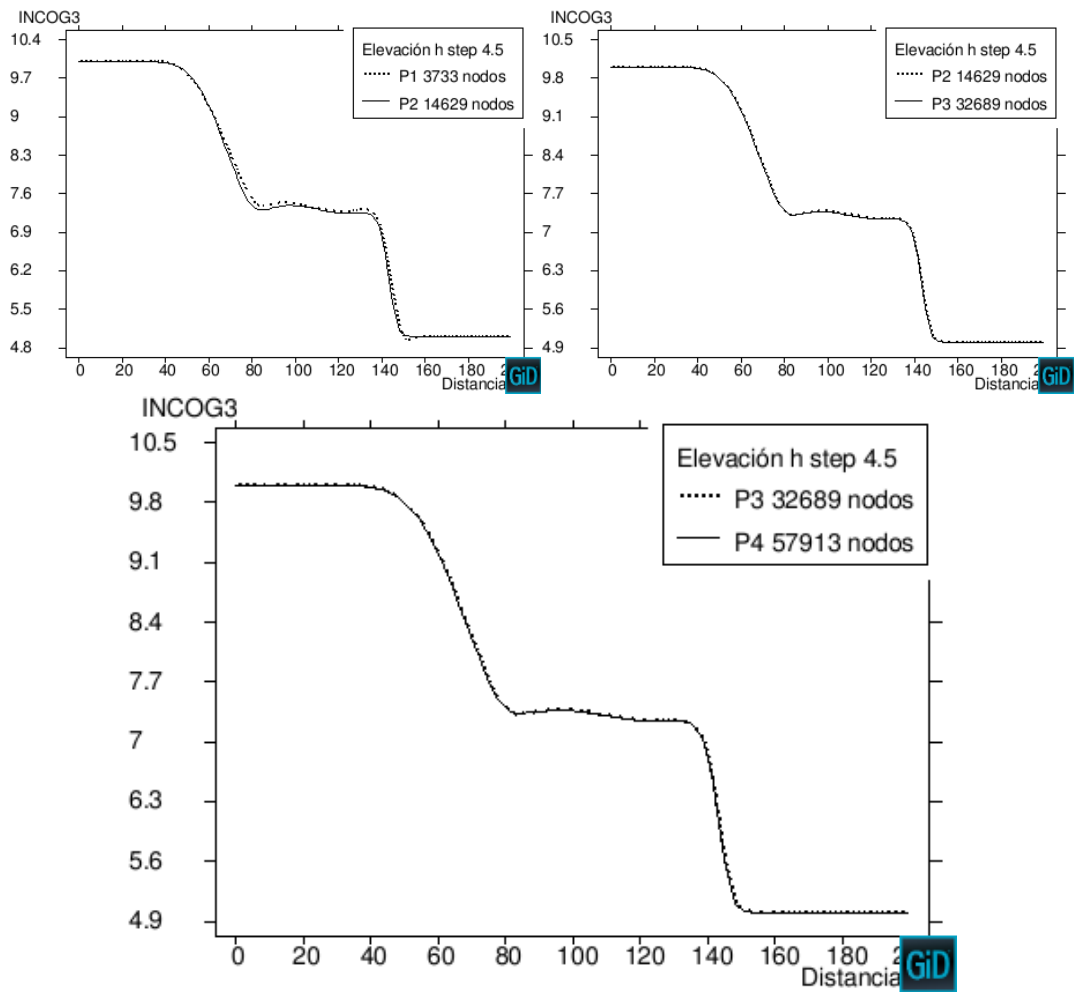


Figura 3.17: Flujo de la rotura de una presa. Corte longitudinal de la superficie libre del agua en $t = 4.5$ s. Comparación del refinamiento para P_1 , P_2 , P_3 y P_4 .

Finalmente presentamos una comparación de los resultados de elementos lineales P_1 con elementos de alto orden P_2 , P_3 y P_4 , de los cortes longitudinales de la superficie libre del agua en el instante de tiempo $t = 4.5$ s en la Figura 3.17. Tomando como base la malla de 7164 elementos triangulares P_1 con 3733 nodos y aumentando el orden de interpolación con el mismo número de elementos, obtenemos mallas con elementos triangulares P_2 con un total de 14629 nodos, P_3 con 32689 nodos y P_4 con 57913 nodos. Observando las gráficas se concluye que al aumentar el orden de interpolación se obtienen mejores resultados, como era de esperar.

3.5 Conclusiones

En este capítulo se ha presentado una revisión de los métodos estabilizados ASGS y OSS para una ecuación vectorial de tipo CDR general, estacionaria y transitoria, con aplicación a las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas. Asimismo, se ha estudiado la utilización de elementos finitos de alto orden, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden, con elementos tanto triangulares como cuadrangulares.

Las formulaciones variacionales estabilizadas ASGS y OSS nos permiten utilizar igual interpolación en todas las variables, que en nuestro caso son tres, las dos componentes de la velocidad U_1 , U_2 y la elevación η de la superficie libre del agua. Nos permiten también poder tratar con flujos de convección dominante. Estas dos dificultades se unen a la complejidad adicional de la no linealidad tanto en los términos convectivos como en la derivada temporal de la elevación de la superficie libre del agua. Para poder utilizar elementos finitos de alto orden fue necesario cambiar el cálculo del parámetro de estabilización, incluyendo en este cálculo el grado del polinomio.

De los resultados del test de convergencia realizados se puede concluir que puede ser ventajoso utilizar elementos de alto orden para el problema que hemos considerado. En términos generales, los errores para un número de nodos dado son menores cuanto mayor es el orden del polinomio utilizado. También se observó con experimentación numérica que la inclusión del término τ_2 en la matriz $\boldsymbol{\tau}$ es totalmente necesaria para el ejemplo de la rotura de la presa, ya que si se considera $\tau_2 = 0$ el resultado es que con elementos P_1 y P_2 se presentan problemas de estabilidad alrededor de los 7 s, y con elementos P_3 y P_4 estos problemas se presentan desde $t = 0.1$ s. Sin embargo, para las pruebas de convergencia en malla y el ejemplo del flujo a través de un obstáculo elíptico, es indiferente el usar $\tau_2 = 0$ o $\tau_2 = \frac{(h/d)^2}{c_1\tau_1}$, ya que las variaciones de los resultados en estos casos son mínimas.

En general, el comportamiento de los métodos estabilizados ASGS y OSS para el problema que hemos estudiado es completamente satisfactorio, mostrando que la comparación de nuestros resultados con los resultados de otros autores es favorable en todos los casos a nuestras formulaciones.

Capítulo 4

Aproximación del transporte de contaminantes con términos de reacción en aguas someras mediante elementos finitos de alto orden

En este capítulo presentamos la aproximación del modelo acoplado de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas con la ecuación convección-difusión-reacción del transporte de contaminantes. Dicha aproximación se realiza mediante elementos finitos de alto orden y usando métodos variacionales estabilizados de subescalas. El sistema acoplado de ecuaciones, previamente discretizado en el tiempo y linealizado, lo escribimos como una ecuación vectorial transitoria de convección-difusión-reacción (CDR). Los métodos estabilizados de elementos finitos utilizados son los conocidos métodos de subescalas ASGS y OSS, los mismos que nos permiten usar igual interpolación para todas las incógnitas, así como tratar con flujos de convección y reacción dominantes. Consideramos la posibilidad de no linealidad tanto en el término convectivo como en el de reacción. No consideraremos el posible desarrollo de choques en la solución. Con el fin de examinar la precisión y robustez de los métodos ASGS y OSS, presentamos cuatro casos de prueba: convergencia en malla, transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada, transporte de un contaminante en el golfo de Roses y en la desembocadura del río Guadalquivir, y el modelo depredador-presa, que puede escribirse como una ecuación vectorial de CDR transitoria con no linealidad en el término de reacción.

4.1 Introducción

Un contaminante es aquel componente que está presente en el agua a niveles perjudiciales para la vida de los seres humanos, plantas y animales ([54], véase también los informes de la U.S. Environmental Protection Agency, <https://www.epa.gov/>). La simulación del transporte de contaminantes para la predicción de la concentración de contaminantes en ríos, lagos, lagunas y regiones costeras tiene importancia estratégica en el análisis y diseño de soluciones de los problemas de contaminación ambiental del planeta.

En el fenómeno físico del movimiento de contaminantes se deben distinguir tres procesos: la difusión, la convección y la reacción. La difusión es el proceso físico debido al cual el contaminante se mueve como resultado del movimiento intermolecular de las partículas de ambas sustancias, el fluido que la transporta (agua) y el contaminante. La convección es el movimiento del soluto (contaminante) debido al movimiento del agua, por lo cual si el agua permanece en reposo no hay convección. Finalmente, la reacción tiene en cuenta el posible efecto de crecimiento o decrecimiento de un contaminante por factores externos (calor, especies con las que puede combinarse); en el caso de haber distintas especies de contaminantes, la reacción puede modelar la interacción entre ellas.

La formulación del problema del transporte de contaminantes se fundamenta, como la de todos los fenómenos físicos, en las ecuaciones de equilibrio y las ecuaciones constitutivas. Las ecuaciones del transporte de sustancias disueltas o en suspensión en el flujo se basan en el principio de conservación de la masa de dichas sustancias en caso de que no haya reacción o en el modelo de crecimiento o decrecimiento en caso de que la haya. En el problema que queremos abordar, la dinámica del transporte de contaminantes involucra los modelos de flujos del campo de velocidades en aguas someras y del transporte, difusión y reacción de contaminantes, los cuales tienen características de la ecuación transitoria de convección, difusión y reacción (CDR).

En este capítulo vamos a utilizar un modelo matemático que acopla las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas con la ecuación de CDR del transporte de contaminantes. Las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas que vamos a utilizar son las obtenidas a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes para fluidos viscosos, y que se encuentran descritas por ejemplo en [25], acopladas a la ecuación de CDR del transporte de contaminantes

como en [55, 56, 57], entre otras referencias. El sistema acoplado de ecuaciones se puede escribir en forma conservativa en términos de la profundidad del fluido, de las velocidades y de las concentraciones de contaminantes promediadas en el plano donde el flujo medio tiene lugar. La presencia del término fuente en la ecuación de momento, la consideración de la batimetría variable, la fricción en el fondo del lecho, la tensión en la superficie libre del agua debida al viento y el efecto de Coriolis son características que se pueden tomar en cuenta para obtener modelos físicos más realistas del flujo de aguas someras. El resultado es un sistema no lineal acoplado de ecuaciones diferenciales parciales. Para simplificar el modelo, supondremos que los contaminantes son pasivos, en el sentido de que no afectan la densidad del fluido y por lo tanto el flujo; en caso de no ser así, se podría introducir fácilmente algún modelo de flotación que tuviera en cuenta el flujo generado por la variabilidad en la concentración de contaminantes.

En la literatura existe mucha investigación numérica en el área del transporte de contaminantes en aguas poco profundas, aplicando métodos de diferencias finitas [58], métodos de volúmenes finitos [59, 60, 63, 64, 65], métodos de elementos finitos [56, 61, 62], métodos tipo-Godunov [70] y métodos de Boltzmann [66, 67, 68].

En este capítulo vamos a realizar la aproximación de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas acopladas a la ecuación de CDR del transporte de contaminantes mediante los métodos VMS (*Variational Multi-Scale*) llamados ASGS (*Algebraic SubGrid Scale*) y OSS (*Orthogonal Subgrid Scale*) (véase [?]). El propósito de este trabajo es tanto aplicar estas técnicas, ya conocidas, a problemas no lineales como el transporte de contaminantes en aguas poco profundas y el modelo depredador-presa, como experimentar con elementos finitos de orden elevado (hasta el cuarto orden).

Veremos en primer lugar que mediante un cambio de variables apropiado y linealizando el sistema acoplado de ecuaciones en aguas poco profundas con las ecuaciones del transporte de contaminantes, cada iteración del proceso no lineal puede escribirse como una ecuación vectorial de CDR transitoria lineal. Plantearemos la aproximación en el tiempo y el espacio de esta ecuación vectorial de CDR transitoria, para luego particularizarla al sistema acoplado de las ecuaciones del flujo en aguas poco profundas con el transporte de contaminantes.

En lo concerniente a la discretización, primero procederemos a discretizar en el tiempo mediante un esquema de integración temporal en diferencias finitas y luego realizaremos la aproximación en el espacio mediante elementos finitos, aunque el

enfoque más común es proceder a la inversa, es decir, primero discretizar en el espacio y luego aproximar el sistema resultante de ecuaciones diferenciales en el tiempo. Sin embargo, el enfoque de discretizar primero en el tiempo nos permite desacoplar los errores provenientes de la discretización temporal de los correspondientes a la discretización espacial. Aunque ambos caminos para el método estandar de Galerkin dan el mismo problema discreto, esto no es así para todos los métodos basados en VMS. En lo referente a la discretización temporal, usaremos la regla trapezoidal generalizada, que es el método en diferencias finitas más sencillo; sin embargo, cualquier otro método en diferencias finitas o incluso en elementos finitos podría aplicarse. En particular, en los ejemplos numéricos usamos esquemas de integración temporal de mayor orden que la regla trapezoidal.

En cuanto a la discretización espacial, es bien conocido que el método estándar de Galerkin presenta inestabilidades numéricas cuando los términos convectivo o de reacción son dominantes con respecto al término difusivo, además de por la necesidad dada por la condición inf-sup de usar diferentes interpolaciones de elementos finitos para la profundidad, las velocidades promediadas y la concentración de contaminante. Estos dos inconvenientes pueden superarse utilizando una formulación estabilizada. Aquí vamos a usar las formulaciones basadas en subescalas introducidas por Hughes y otros en [1, 2] para la ecuación CDR escalar estacionaria y generalizado a sistemas lineales estacionarios en [4, 5], y a sistemas lineales transitorios en [6, 9, 10], dando lugar a las formulaciones ASGS y OSS para resolver el problema de CDR vectorial transitorio, como en [71]. La idea básica es aproximar el efecto de la componente de la solución continua que no puede ser resuelta por la malla de elementos finitos en términos de la solución en el espacio de elementos finitos (método ASGS), o en términos de una subescala ortogonal respecto del producto escalar de L^2 al espacio de elementos finitos [3, 51] (método OSS). Hay que hacer notar que no consideraremos el posible desarrollo de choques en la solución, es decir, discontinuidades que pueden llegar a producirse en el límite invíscido. Para tomar en cuenta esto es necesario desarrollar técnicas de captura de discontinuidades que no consideraremos. En este capítulo, así como tampoco el tratamiento de subescalas dinámicas.

El capítulo está organizado como sigue. En la siguiente sección se describe la física del problema a ser resuelto y la obtención de la ecuación vectorial de CDR transitoria que representa el problema acoplado de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas con las ecuaciones del transporte de con-

taminantes. Las aproximaciones y formulaciones de los métodos variacionales estabilizados ASGS y OSS para la ecuación vectorial de CDR transitoria están descritos en la sección 3. En la sección 4 se presentan pruebas numéricas de convergencia en malla con soluciones analíticas conocidas, un ejemplo clásico de la literatura del transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada, dos ejemplos prácticos del transporte de un contaminante, uno en el golfo de Roses y otro en la desembocadura del río Guadalquivir, y un ejemplo del modelo depredador-presa. Finalmente, en base a los resultados obtenidos, en la Sección 5 se detallan algunas conclusiones.

4.2 Planteamiento del problema del transporte de contaminantes

4.2.1 Ecuaciones de gobierno

Las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas se obtienen por integración vertical de las ecuaciones del movimiento, bien sea de fluidos viscosos (ecuaciones de Navier-Stokes) o invíscidos (ecuaciones de Euler); véase por ejemplo [25, 26]. En este trabajo vamos a utilizar las ecuaciones obtenidas a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido Newtoniano incompresible e isotérmico, incluyendo la tensión superficial provocada por los efectos del viento así como también los efectos de Coriolis, al igual que batimetría variable, fricción en el fondo del lecho y distribución hidrostática de presiones. Vamos a considerar el problema de mecánica de fluidos acoplado con el de transporte de contaminantes. Esta será en esencia la diferencia del presente trabajo con respecto a [71], por lo que muchos de los desarrollos que presentamos aquí se encuentran también en esta referencia. Omitiremos aquellos desarrollos que no afectan la comprensión de este capítulo, aunque para permitir la lectura auto-contenida se repetirán muchos otros.

Sea Ω un dominio acotado \mathbb{R}^2 con coordenadas cartesianas $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$. Consideremos un fluido que se mueve durante el intervalo de tiempo $[0, T]$ en el dominio de \mathbb{R}^3 dado por $\Omega \times (-H(\mathbf{x}), \eta(\mathbf{x}, t))$, donde la coordenada $x_3 = -H(\mathbf{x})$ representa la batimetría del terreno y $x_3 = \eta(\mathbf{x}, t)$, que será incógnita del problema, es la superficie libre del fluido con $\mathbf{x} \in \Omega$, $t \in [0, T]$. Consideraremos

que $h(\mathbf{x}, t) := H(\mathbf{x}) + \eta(\mathbf{x}, t)$ es mucho menor que el diámetro de Ω , por lo que supondremos válida la aproximación de las ecuaciones de movimiento en aguas poco profundas. Dichas ecuaciones acopladas a la ecuación del transporte de contaminantes pueden escribirse en forma indicial como

$$\partial_t(hU_i) + \partial_j(hU_iU_j) + \partial_i\frac{1}{2}g(h^2 - H^2) - \partial_j\left(\frac{h}{\rho}\bar{\tau}_{ji}\right) + Q_i = 0, \quad (4.2.1)$$

$$\partial_t h + \partial_i(hU_i) = 0, \quad (4.2.2)$$

$$\partial_t(h\varphi_\alpha) + \partial_i(hU_i\varphi_\alpha) - \partial_i(hk_{ij}^\alpha\partial_j\varphi_\alpha) + S_{\alpha\beta}\varphi_\beta = 0, \quad (4.2.3)$$

con

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu_H \left(\partial_j U_i + \partial_i U_j - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k U_k \right), \quad (4.2.4)$$

$$Q_i = h\hat{f}(-\delta_{i1}U_2 + \delta_{i2}U_1) - g(h - H)\partial_i H + \frac{h}{\rho}\partial_i p_a - \frac{1}{\rho}\tau_{3i}^s + gU_iU_0\text{Ch}^{-1}h^{-2}, \quad i = 1, 2, \quad (4.2.5)$$

y

$$U_0 = \sqrt{U_1^2 + U_2^2}, \quad (4.2.6)$$

donde $U_i(\mathbf{x}, t)$ ($i = 1, 2$) son las componentes de la velocidad promediadas en la profundidad, δ_{ij} es la delta de Kronecker, ∂_t denota la derivada temporal y ∂_i la derivada con respecto a la i -ésima coordenada cartesiana ($i = 1, 2$) en Ω . En las ecuaciones anteriores y en lo que sigue, índices repetidos indican la notación de sumación de Einstein, y los subíndices i, j, k recorren desde 1 hasta 2. En las expresiones previas, g es la aceleración de la gravedad, ρ la densidad del fluido, $\bar{\tau}_{ij}$ son las tensiones viscosas promediadas, μ_H es el coeficiente de viscosidad dinámico, \hat{f} es el parámetro de Coriolis, p_a es la presión atmosférica, τ_{3i}^s ($i = 1, 2$) son las tensiones en la superficie libre del agua debidas al viento, Ch es el coeficiente de Chézy para el rozamiento en el fondo y U_0 es la norma euclídea de (U_1, U_2) . Usaremos letras griegas como subíndices para caracterizar los contaminantes, cuyo número supondremos que es N . Así, la concentración del contaminante α promediada en la profundidad se representa por φ_α . $S_{\alpha\beta}$ son las componentes de la matriz de términos de reacción de la ecuación de conservación de contaminantes, con $\alpha, \beta = 1, \dots, N$; en los casos de reacción no lineal, $S_{\alpha\beta}$ puede depender de las concentraciones de contaminantes, es decir, $S_{\alpha\beta} = S_{\alpha\beta}(\varphi_1, \dots, \varphi_N)$. k_{ij}^α es el coeficiente empírico de difusión (dispersión) para

el contaminante α ; nótese que por simplificar hemos supuesto que la dispersión del contaminante α no se ve afectada por el resto de contaminantes, aunque esta situación podríamos incluirla fácilmente.

Las ecuaciones (4.2.1), (4.2.2) y (4.2.3) representan un sistema de $(3 + N)$ ecuaciones, cuyo vector de incógnitas es

$$\mathbf{U}^T = [U_1, U_2, h, \varphi_1, \dots, \varphi_N].$$

Dichas ecuaciones constituyen el modelo acoplado del movimiento de un fluido en aguas poco profundas y el transporte de contaminantes. Las mismas se deben completar con las condiciones iniciales y de contorno. Los valores iniciales para la elevación del agua, las velocidades promediadas y la concentración del contaminante deben ser conocidos como condiciones iniciales. Con respecto a las condiciones de contorno, es bien conocido que el problema está bien puesto si la velocidad promediada se especifica en el contorno de entrada del dominio computacional Ω , mientras que en el resto del contorno se prescribe la componente normal de las tensiones viscosas y la elevación del fluido. Para las concentraciones de contaminantes, además de la condición inicial es necesario conocer como condiciones de contorno sus valores en el contorno de entrada del dominio de cálculo y los flujos en el contorno de salida; esta situación permitiría en particular considerar nulas las difusiones de contaminantes.

Debido a la complejidad del modelo descrito anteriormente, en la literatura existen muchas variantes de estas ecuaciones con distintas simplificaciones, como por ejemplo eliminar el término de difusión considerando convección pura; este es el caso de [55, 56, 57]. En nuestro trabajo utilizaremos las ecuaciones (4.2.1), (4.2.2) y (4.2.3) sin eliminar o hacer simplificaciones de ninguno de sus términos. Mediante un cambio de variables transformaremos las ecuaciones para poder escribirlas como una ecuación vectorial de CDR transitoria de la forma

$$\partial_t \mathbf{u} - \partial_i (\mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u}) + \partial_i (\mathbf{A}_i \mathbf{u}) + \mathbf{S} \mathbf{u} = \mathbf{F} \quad i, j = 1, 2, \quad (4.2.7)$$

para la que más adelante, en la Sección 4.3, presentaremos su aproximación numérica por elementos finitos mediante los métodos variacionales de subescalas ASGS y OSS. En las ecuaciones anteriores, \mathbf{u} es el vector de incógnitas, \mathbf{F} el vector de fuerzas conocido y \mathbf{K}_{ij} , \mathbf{A}_i , \mathbf{S} matrices dadas, que pueden depender de \mathbf{u} en problemas no lineales.

4.2.2 Cambio de variables

Realizando un cambio de variables, $\varphi_{a,\alpha} := h\varphi_\alpha$, $u_i := hU_i$ y $P := \frac{1}{2}g(h^2 - H^2)$, con $\partial_t P = hg\partial_t h$, las ecuaciones (4.2.1), (4.2.2) y (4.2.3) se pueden escribir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \partial_t u_i + \partial_i P - \partial_j \frac{\mu_H}{\rho} \left[\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k u_k \right) - \left(U_j \partial_i h + U_i \partial_j h - \frac{2}{3} \delta_{ij} U_k \partial_k h \right) \right] \\ + \partial_j (U_j u_i) + \hat{f}(-\delta_{i1} u_2 + \delta_{i2} u_1) + gU_0 \text{Ch}^{-1} h^{-3} u_i - g(h - H) \partial_i H \\ + \frac{h}{\rho} \partial_i p_a - \frac{1}{\rho} \tau_{3i}^s = 0, \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

$$\frac{1}{hg} \partial_t P + \partial_i u_i = 0, \quad (4.2.9)$$

$$\partial_t \varphi_{a,\alpha} + \partial_i (U_i \varphi_{a,\alpha}) - \partial_i (k_{ij}^\alpha \partial_j \varphi_{a,\alpha} - k_{ij}^\alpha \varphi_\alpha \partial_j h) + S_{\alpha\beta} h^{-1} \varphi_{a,\beta} = 0. \quad (4.2.10)$$

Las ecuaciones (4.2.8), (4.2.9) y (4.2.10) se pueden escribir fácilmente en el formato de la ecuación (4.2.7). Sin embargo esto lo haremos en el caso del problema linealizado y discretizado en el tiempo.

4.2.3 Discretización en el tiempo y linealización

Para la discretización temporal del modelo acoplado de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas y del transporte de contaminantes, consideremos una partición uniforme del intervalo de tiempo $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^M = T$, con $\delta t = t^{n+1} - t^n$, donde δt es el tamaño del paso de tiempo, considerado constante. Aquí y en adelante, usaremos el superíndice n para indicar el nivel de tiempo n .

Aunque la discretización en el tiempo puede realizarse mediante cualquier aproximación de la derivada temporal en diferencias finitas o elementos finitos, aquí utilizaremos la regla trapezoidal generalizada. Para una función genérica f , sea

$$f^{n+\theta} = \theta f^{n+1} + (1 - \theta) f^n, \quad 0 \leq \theta \leq 1. \quad (4.2.11)$$

Aproximaremos

$$\delta_t^n f := \frac{1}{\delta t} (f^{n+1} - f^n) = \frac{1}{\theta \delta t} (f^{n+\theta} - f^n) \approx (\partial_t f)^{n+\theta}$$

Esta aproximación es de segundo orden en δt en el caso en que $\theta = 1/2$ (método de Crank-Nicolson) y de primer orden si $\theta \neq 1/2$. Para $\theta = 1$ corresponde al método de Euler implícito o el método de diferencias hacia atrás de primer orden, a menudo abreviado como BDF1.

En cuanto a la linealización, utilizaremos el método de punto fijo de Picard. En cada iteración de cada paso de tiempo, el problema a resolver es de la forma:

$$\delta_t^n u_i + \partial_j (a_j u_i) + \partial_i p - \partial_j \hat{\tau}_{ji} + S_{u,ij} u_j + b_i = 0, \quad (4.2.12)$$

$$\frac{1}{h_0 g} \delta_t^n p + \partial_i u_i = 0, \quad (4.2.13)$$

$$\delta_t^n \varphi_{a,\alpha} + \partial_j (a_j \varphi_{a,\alpha}) - \partial_i (k_{ij}^\alpha \partial_j \varphi_{a,\alpha} - k_{ij}^\alpha \varphi_0^\alpha \partial_j h_0) + S_{\alpha\beta} h^{-1} \varphi_{a,\beta} = 0. \quad (4.2.14)$$

Usando un superíndice adicional para el contador de iteraciones, las variables introducidas en (4.2.12), (4.2.13) y (4.2.14) para la iteración i -ésima en el paso de tiempo n son

$$\begin{aligned} a_j &= U_j^{n+\theta, i-1}, & u_j &= (hU_j)^{n+\theta, i}, \\ h_0 &= h^{n+\theta, i-1}, & p &= P^{n+\theta, i}, \\ \delta_t^n p &= \frac{1}{\theta \delta t} (p - P^n), & \delta_t^n u_j &= \frac{1}{\theta \delta t} [u_j - (hU_j)^n], \\ \hat{\tau}_{ij} &= \frac{\mu H}{\rho} \left(\partial_i u_j + \partial_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k u_k \right), & \tau_{ij}^* &= \frac{\mu H}{\rho} \left(a_j \partial_i h_0 + a_i \partial_j h_0 - \frac{2}{3} \delta_{ij} a_k \partial_k h_0 \right), \\ S_{u,11} = S_{u,22} &= \text{Ch}^{-1} g U_0^{n+\theta, i-1} h_0^{-3}, & U_0^{n+\theta, i-1} &= \sqrt{\left(U_1^{n+\theta, i-1} \right)^2 + \left(U_2^{n+\theta, i-1} \right)^2}, \\ S_{u,12} = -S_{u,21} &= -\hat{f}, & b_i &= b_i^* + \partial_j \tau_{ji}^*, \\ \varphi_0^\alpha &= \varphi_\alpha^{n+\theta, i-1}, & b_i^* &= -g (h_0 - H) \partial_i H + \frac{1}{\rho} h_0 \partial_i p_a - \frac{1}{\rho} \tau_{3i}^S, \\ \delta_t^n \varphi_{a,\alpha} &= \frac{1}{\theta \delta t} [\varphi_{a,\alpha} - (h\varphi_\alpha)^n], & \varphi_{a,\alpha} &= (h\varphi_\alpha)^{n+\theta, i}. \end{aligned}$$

El super-índice i es el contador de las iteraciones debidas a la no linealidad. Obsérvese que la forma linealizada de las tensiones viscosas $\bar{\tau}_{ij}$ dada en (4.2.4) corresponde a $\hat{\tau}_{ij} - \tau_{ij}^*$, donde $\hat{\tau}_{ij}$ está escrito en términos de las variables de la iteración actual, mientras que τ_{ij}^* se calcula con los valores de las variables correspondientes a la iteración anterior. Nótese que hemos usado el símbolo S_u para indicar las componentes de la matriz de términos reactivos provenientes de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento, para distinguirlas

de las provenientes de la ecuación de conservación de contaminantes, aunque ambas contribuirán a la matriz de términos reactivos en la forma vectorial que presentamos a continuación.

4.2.4 Forma vectorial

Para escribir las ecuaciones (4.2.12), (4.2.13) y (4.2.14) en la forma vectorial (4.2.7), aunque discretizada en el tiempo, escribimos las mismas como un sistema de $(3 + N)$ ecuaciones con $(3 + N)$ incógnitas. Las ecuaciones correspondientes a las velocidades y altura de la lámina de agua son las mismas que en [71], mientras que la ecuación correspondiente a la concentración de los contaminantes es:

$$\begin{aligned} \delta_t^n \varphi_{a,\alpha} - k_{11}^\alpha \partial_1^2 \varphi_{a,\alpha} - k_{12}^\alpha \partial_1 \partial_2 \varphi_{a,\alpha} - k_{21}^\alpha \partial_2 \partial_1 \varphi_{a,\alpha} - k_{22}^\alpha \partial_2^2 \varphi_{a,\alpha} + a_1 \partial_1 \varphi_{a,\alpha} + a_2 \partial_2 \varphi_{a,\alpha} \\ + (\partial_1 a_1 + \partial_2 a_2) \varphi_{a,\alpha} + k_{11}^\alpha (\partial_1 \varphi_0^\alpha \partial_1 h_0 + \varphi_0^\alpha \partial_1^2 h_0) + k_{12}^\alpha (\partial_1 \varphi_0^\alpha \partial_2 h_0 + \varphi_0^\alpha \partial_1 \partial_2 h_0) \\ + k_{21}^\alpha (\partial_2 \varphi_0^\alpha \partial_1 h_0 + \varphi_0^\alpha \partial_2 \partial_1 h_0) + k_{22}^\alpha (\partial_2 \varphi_0^\alpha \partial_2 h_0 + \varphi_0^\alpha \partial_2^2 h_0) + S_{\alpha\beta} h_0^{-1} \varphi_{a,\beta} = 0. \end{aligned}$$

En esta ecuación hay suma para el índice β , pero no para α , que es el contador de contaminante considerado.

Para simplificar la notación, consideremos un único contaminante, caracterizado por el índice genérico α . La forma vectorial (4.2.7) del sistema de ecuaciones final, previamente discretizadas en el tiempo y linealizadas con el método de punto fijo

de Picard, está dada por:

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \delta_t^n u_1 \\ \delta_t^n u_2 \\ \frac{1}{h_{0g}} \delta_t^n p \\ \delta_t^n \varphi_{a,\alpha} \end{bmatrix} \\
& - \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} \frac{4}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{11}^* \end{bmatrix} \partial_1^2 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \\ \varphi_{a,\alpha} \end{bmatrix} - \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{12}^* \end{bmatrix} \partial_1 \partial_2 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \\ \varphi_{a,\alpha} \end{bmatrix} \\
& - \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{21}^* \end{bmatrix} \partial_2 \partial_1 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \\ \varphi_{a,\alpha} \end{bmatrix} - \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{22}^* \end{bmatrix} \partial_2^2 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \\ \varphi_{a,\alpha} \end{bmatrix} \\
& + \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_1 \end{bmatrix} \partial_1 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \\ \varphi_{a,\alpha} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_2 \end{bmatrix} \partial_2 \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \\ \varphi_{a,\alpha} \end{bmatrix} \\
& + \begin{bmatrix} \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{u,11} & S_{u,12} & 0 & 0 \\ S_{u,21} & \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{u,22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{\alpha\alpha} h_0^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ p \\ \varphi_{a,\alpha} \end{bmatrix} \\
& = \begin{bmatrix} -Q_1 \\ -Q_2 \\ 0 \\ -Q_4 \end{bmatrix}, \tag{4.2.15}
\end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned}
k_{11}^* &= \frac{\rho}{\mu_H} k_{11}^\alpha, & k_{12}^* &= \frac{\rho}{\mu_H} k_{12}^\alpha, & k_{21}^* &= \frac{\rho}{\mu_H} k_{21}^\alpha, & k_{22}^* &= \frac{\rho}{\mu_H} k_{22}^\alpha, \\
Q_1 &= b_1^* + \partial_1 \tau_{11}^* + \partial_2 \tau_{21}^*, \\
Q_2 &= b_2^* + \partial_1 \tau_{12}^* + \partial_2 \tau_{22}^*, \\
Q_4 &= k_{11}^\alpha (\partial_1 \varphi_0^\alpha \partial_1 h_0 + \varphi_0^\alpha \partial_1^2 h_0) + k_{12}^\alpha (\partial_1 \varphi_0^\alpha \partial_2 h_0 + \varphi_0^\alpha \partial_1 \partial_2 h_0) \\
&\quad + k_{21}^\alpha (\partial_2 \varphi_0^\alpha \partial_1 h_0 + \varphi_0^\alpha \partial_2 \partial_1 h_0) + k_{22}^\alpha (\partial_2 \varphi_0^\alpha \partial_2 h_0 + \varphi_0^\alpha \partial_2^2 h_0).
\end{aligned}$$

En caso de considerar N contaminantes, el coeficiente (4, 4) de la matriz de términos reactivos sería de hecho una matriz $N \times N$, con el coeficiente $\alpha\beta$ dado por $(\partial_1 a_1 + \partial_2 a_2)\delta_{\alpha\beta} + S_{\alpha\beta}h_0^{-1}$.

La ecuación (4.2.15) corresponde a la ecuación vectorial de CDR transitoria (4.2.7) de las ecuaciones acopladas del movimiento de un fluido en aguas poco profundas y del transporte de contaminantes, discretizadas en el tiempo y linealizadas. Las matrices \mathbf{K}_{ij} , \mathbf{A}_i , \mathbf{S} y \mathbf{F} , de nuevo para el caso de un contaminante, son

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{11} &= \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} \frac{4}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{11}^* \end{bmatrix}, & \mathbf{K}_{12} &= \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{12}^* \end{bmatrix}, \\ \mathbf{K}_{21} &= \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{21}^* \end{bmatrix}, & \mathbf{K}_{22} &= \frac{\mu_H}{\rho} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_{22}^* \end{bmatrix}, \\ \mathbf{A}_1 &= \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & a_1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_1 \end{bmatrix}, & \mathbf{A}_2 &= \begin{bmatrix} a_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_2 \end{bmatrix}, \\ \mathbf{S} &= \begin{bmatrix} \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{u,11} & S_{u,12} & 0 & 0 \\ S_{u,21} & \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{u,22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \partial_1 a_1 + \partial_2 a_2 + S_{\alpha\alpha}h_0^{-1} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{F} &= \begin{bmatrix} -Q_1 \\ -Q_2 \\ 0 \\ -Q_4 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Obsérvese que las matrices \mathbf{K}_{ij} son simétricas. Los coeficientes de las matrices \mathbf{A}_i , \mathbf{S} y \mathbf{F} no todos son constantes, pues algunos dependen de las velocidades del flujo, elevación del nivel del agua, su batimetría y sus gradientes, cuyos valores corresponden a la iteración anterior resultado de la linealización. Asimismo, en el caso de reacciones no lineales entre contaminantes los coeficientes $S_{\alpha\beta}$ pueden

depender de las concentraciones de estos evaluadas en la iteración anterior del actual paso de tiempo.

En el caso de N contaminantes, el vector de incógnitas es

$$\mathbf{u}^T = [u_1, u_2, p, \varphi_{a,1}, \dots, \varphi_{a,N}].$$

4.3 Aproximación espacial y estabilización numérica

Una vez hemos conseguido escribir las ecuaciones del problema en la forma (4.2.7), el proceso es exactamente el mismo que el seguido en [71] para llevar a cabo la aproximación espacial, por lo que aquí nos centraremos solamente en el problema discreto final y la forma de tratar la ecuación de transporte de contaminantes.

La aproximación de Galerkin del problema es estándar. Dicha aproximación parte de la forma variacional del problema. Una vez discretizado el dominio de cálculo en una partición de elementos finitos $\{\Omega^e\}$ de Ω , con $e = 1, \dots, n_{el}$, siendo n_{el} el número de elementos de la partición, podemos construir el espacio de elementos finitos que aproxima el espacio donde se encuentra la solución del problema continuo. El método de Galerkin consiste en tomar las funciones de test de la forma variacional en el mismo espacio.

En el problema que nos ocupa, el método de Galerkin puede ser inestable por tres motivos. En primer lugar, la interpolación de la altura de la lámina de agua no puede ser independiente de la de la velocidad promediada: ambas interpolaciones tienen que cumplir la condición inf-sup que garantiza que el problema está bien puesto desde el punto de vista matemático. En segundo lugar, si los términos viscosos (o difusivos) son pequeños comparados con los convectivos, pueden aparecer oscilaciones en todo el dominio de cálculo, como es bien conocido. Este problema afecta tanto a las ecuaciones mecánicas, para altura de agua y velocidad promedio, como a las ecuaciones de transporte de contaminantes. Finalmente, si los términos reactivos son dominantes respecto de los difusivos, pueden aparecer también oscilaciones numéricas, esta vez localizadas cerca de los contornos y de las capas límite. Aunque este problema pudiera parecer poco importante, estas oscilaciones localizadas pueden ser muy perjudiciales en problemas no lineales como el que nos ocupa, pues pueden impedir que los esquemas iterativos converjan.

Todas las inestabilidades descritas se pueden evitar usando métodos de elementos finitos estabilizados. Como se ha dicho anteriormente, en este trabajo usaremos métodos basados en el concepto de VMS. En [19] se presenta una revisión de los mismos aplicados a problemas de mecánica de fluidos, mientras que en [71] se describe su aplicación a un problema formalmente análogo al que nos ocupa, aunque sin las ecuaciones de transporte de contaminantes.

En el problema que estamos considerando, la forma final discreta del problema a resolver es:

$$(\delta_t^n \mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + B(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e} (-\mathcal{L}^*(\mathbf{v}_h))^T \boldsymbol{\tau}^e \mathbf{P} [\partial_t \mathbf{u}_h + \mathcal{L}(\mathbf{u}_h) - \mathbf{F}] \, d\Omega = \langle \mathbf{F}, \mathbf{v}_h \rangle. \quad (4.3.1)$$

Para explicar los distintos términos de este problema discreto, empecemos diciendo que se entiende que esta ecuación corresponde a un cierto paso de tiempo de la discretización temporal, aunque hemos omitido el superíndice del paso de tiempo para no cargar la notación. Asimismo, hemos visto que estas ecuaciones corresponden también a una cierta iteración del proceso iterativo resultado de la linealización del problema.

El subíndice h hace referencia a funciones en el espacio de elementos finitos (que aquí nada tiene que ver con la altura de la lámina de agua). Así, \mathbf{u}_h es la aproximación a la incógnita \mathbf{u} , mientras que \mathbf{v}_h es una función de test arbitraria, cumpliendo las adecuadas condiciones de contorno. Hemos usado el símbolo $\langle \cdot, \cdot \rangle$ para indicar la integral sobre el dominio de cálculo del producto de dos funciones, reemplazándolo por (\cdot, \cdot) cuando estas funciones son de cuadrado integrable, como sucede con el término temporal.

El operador \mathcal{L} es el asociado al problema (4.2.7), es decir

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}) := -\partial_i (\mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u}) + \partial_i (\mathbf{A}_i \mathbf{u}) + \mathbf{S} \mathbf{u},$$

mientras que \mathcal{L}^* denota su adjunto (sin condiciones de contorno), dado por

$$\mathcal{L}^*(\mathbf{v}) := -\partial_i (\mathbf{K}_{ij}^T \partial_j \mathbf{v}) - \mathbf{A}_i^T \partial_i \mathbf{v} + \mathbf{S}^T \mathbf{v}.$$

La forma B en (4.3.1) es la asociada al problema escrito en forma débil, es decir, la del método de Galerkin. Suponiendo que las matrices \mathbf{A}_i se descomponen en una parte que no se integra por partes, \mathbf{A}_i^c , y otra que sí, \mathbf{A}_i^f (y que por consiguien-

te contribuye a los flujos de contorno), y que las condiciones de contornos son homogéneas, para simplificar, en nuestro caso tenemos que

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \partial_i \mathbf{v}^T \mathbf{K}_{ij} \partial_j \mathbf{u} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \partial_i (\mathbf{A}_i^c \mathbf{u}) \, d\Omega - \int_{\Omega} \partial_i \mathbf{v}^T \mathbf{A}_i^f \mathbf{u} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}^T \mathbf{S} \mathbf{u} \, d\Omega.$$

Solo nos queda por describir el término llamado de estabilización en (4.3.1). En primer lugar, el operador \mathbf{P} define el método que estamos considerando. En el caso en que $\mathbf{P} = \mathbf{I}$, la identidad, nos referiremos a este método como ASGS, mientras que si \mathbf{P} es la proyección ortogonal al espacio de elementos finitos, el método resultante es el llamado OSS. Los detalles de cómo motivar dichos métodos y cómo se particularizan al problema que nos ocupa (aunque sin las concentraciones de contaminantes), pueden encontrarse en [19, 71]. Solo falta describir el cálculo de la llamada matriz de parámetros de estabilización $\boldsymbol{\tau}^e$, calculada en cada elemento e de la partición de elementos finitos. Tomaremos dicha matriz como diagonal, de la forma

$$\boldsymbol{\tau}^e = \text{diag}(\tau_1^e, \tau_1^e, \tau_2^e, \tau_3^e, \dots, \tau_{2+N}^e) \quad (4.3.2)$$

con

$$\tau_1^e = \left[c_1 \frac{\nu_H}{\left(\frac{h^e}{d^2}\right)^2} + c_2 \frac{|\mathbf{a}|}{h^e} + c_3 |S_{u,11}| + c_4 |S_{u,12}| \right]^{-1}, \quad \tau_2^e = \frac{\left(\frac{h^e}{d}\right)^2}{c_1 \tau_1^e}, \quad (4.3.3)$$

$$\tau_{2+\alpha}^e = \left[c_1 \frac{\min\{k_{11}^\alpha, k_{22}^\alpha\}}{\left(\frac{h^e}{d^2}\right)^2} + c_2 \frac{|\mathbf{a}|}{h^e} + c_3 |S_{\alpha\alpha}| h_0^{-1} \right]^{-1}, \quad (4.3.4)$$

donde c_1 , c_2 , c_3 y c_4 son parámetros numéricos, y que para los ejemplos numéricos hemos adoptado $c_1 = 12$, $c_2 = 2$ y $c_3 = c_4 = 1$. En estas expresiones, $\nu_H = \frac{\mu_H}{\rho}$ es el coeficiente de viscosidad cinemática, $|\mathbf{a}|$ es la norma de la velocidad y d es el orden polinomial de interpolación.

La justificación de los parámetros de estabilización usados, así como algunas técnicas numéricas que hemos empleado en elementos de alto orden, puede consultarse en [19, 69] (véase también [72, 21]).

4.4 Resultados de los experimentos numéricos

Con el propósito de evaluar las formulaciones de los métodos variacionales de subescalas ASGS y OSS con elementos finitos de alto orden en la ecuación vectorial de CDR transitoria, con no linealidad en los términos convectivo y de reacción, hemos realizado diferentes experimentos numéricos, tales como pruebas de convergencia en malla para el problema del transporte de un contaminante, la aproximación de un ejemplo numérico del transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada que se encuentra en la literatura, un ejemplo práctico de distribución del transporte de un contaminante en el golfo de Roses y en la desembocadura del río Guadalquivir, y un ejemplo del modelo depredador-presa.

El método de linealización utilizado es el de Picard. El criterio de convergencia para la no linealidad se ha fijado en la norma L^2 , es decir, el proceso iterativo se considera convergido cuando

$$\frac{\|\mathbf{u}_h^i - \mathbf{u}_h^{i-1}\|_{L^2}}{\|\mathbf{u}_h^i\|_{L^2}} < \text{tol},$$

donde i es el contador de iteraciones en un paso de tiempo dado y tol es la tolerancia de convergencia, fijada en 10^{-5} en todos los ejemplos. Aquí y en lo que sigue, las normas L^2 se extienden a todo el dominio Ω . En los casos del transporte de contaminantes estudiaremos el transporte de un solo contaminante, excepto en el ejemplo del modelo depredador-presa.

4.4.1 Pruebas de convergencia en malla

Las pruebas de convergencia en malla para el problema del transporte de un contaminante que hemos realizado consisten en calcular el error en norma L^2 entre el valor exacto de una solución manufacturada y la aproximación numérica de una de las incógnitas del problema, el cual debe ser menor o igual que el valor teórico. Sabemos que si el error del método se comporta como el error de la interpolación, situación que puede considerarse óptima, este error debe cumplir con

$$e = \|u - u_h\|_{L^2} \leq Ch^{d+1}, \quad (4.4.1)$$

donde u_h es la aproximación de la incógnita u en el espacio de elementos finitos, C es una constante positiva, h es el diámetro de la partición de elementos finitos

Triángulos		Número de nodos			
$1/h$	elem.	$P1$	$P2$	$P3$	$P4$
15	450	256	961	2116	3721
20	800	441	1681	3721	6561
25	1250	676	2601	5776	10201
30	1800	961	3721	8281	14641
35	2450	1296	5041	11236	19881
40	3200	1681	6561	14641	25921
45	4050	2116	8281	18496	32761
50	5000	2601	10201	22801	40401

Cuadrados		Número de nodos			
$1/h$	elem.	$Q1$	$Q2$	$Q3$	$Q4$
15	225	256	961	2116	3721
20	400	441	1681	3721	6561
25	625	676	2601	5776	10201
30	900	961	3721	8281	14641
35	1250	1296	5041	11236	19881
40	1600	1681	6561	14641	25921
45	2025	2116	8281	18496	32761
50	2500	2601	10201	22801	40401

Tabla 4.1: Refinamiento para elementos triangulares y cuadrangulares

(no confundir con la altura de la lámina de agua) y d el grado polinómico de la función de forma correspondiente a la interpolación de la aproximación u_h . Consideraremos pruebas de convergencia en malla para $1 \leq d \leq 4$.

Si graficamos la ecuación (4.4.1) (en el caso de la igualdad) en el plano, con $\log e$ en las ordenadas y $\log h$ en las abscisas, tenemos una línea recta, donde $d+1$ es la pendiente teórica óptima de convergencia. Las pruebas de convergencia en malla consisten entonces en verificar que la pendiente calculada sea precisamente $d+1$. Para ello, seleccionamos como solución exacta tanto para las velocidades U_1 , U_2 como para la elevación de la superficie libre del agua η y para la concentración de un contaminante φ , la función polinómica espacio-temporal

$$\eta(x, y, t) = U_1(x, y, t) = U_2(x, y, t) = \varphi(x, y, t) = x^6 y^6 (1 - x^6)(1 - y^6)t,$$

e imponemos el término fuente \mathbf{F} en la ecuación vectorial de CDR transitoria (4.2.7) mediante las siguientes expresiones tomadas de las ecuaciones (4.2.1),

(4.2.2) y (4.2.3):

$$\begin{aligned} f_i &= \partial_t(hU_i) + \partial_j(hU_iU_j) + \partial_i\frac{1}{2}g(h^2 - H^2) - \partial_j\left(\frac{h}{\rho}\bar{\tau}_{ji}\right) + Q_i \quad i = 1, 2, \\ f_3 &= \partial_t h + \partial_i(hU_i), \\ f_4 &= \partial_t(h\varphi) + \partial_i(hU_i\varphi) - \partial_i(hk_{ij}\partial_j\varphi), \end{aligned}$$

siendo $\mathbf{F} = [f_1, f_2, f_3, f_4]^T$ y $\bar{\tau}_{ji}$ y Q_i dados por las ecuaciones (4.2.4) y (4.2.5), respectivamente. Hemos tomado batimetría constante con profundidad de 1 m, es decir, $H = 1$ m, aceleración de la gravedad $g = 10$ m/s², viscosidad cinemática $\nu_H = 10^{-3}$ m²/s y los coeficientes empíricos de dispersión $k_{11} = k_{22} = 10^{-3}$ m²/s, $k_{12} = k_{21} = 0$. El parámetro de Coriolis \hat{f} , las tensiones de superficie libre debidas al viento τ_{3i}^s , las variaciones de presión atmosférica p_a y el coeficiente de fricción en el fondo Ch no han sido tomados en cuenta para los ejemplos de las pruebas de convergencia en malla, como tampoco el término reactivo de la ecuación de transporte de contaminantes.

A continuación detallamos los resultados de los experimentos numéricos de las pruebas de convergencia en malla con solución analítica conocida, tanto para el método ASGS como para el OSS. En cada gráfica se puede apreciar con línea continua la pendiente teórica de convergencia y con línea con apéndices sobre ella la pendiente calculada. Presentamos los resultados para los distintos grados polinómicos de las funciones de forma estudiados, es decir, elementos lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden triangulares P_1, P_2, P_3, P_4 y elementos cuadrangulares Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 , respectivamente.

El dominio computacional es el cuadrado $[0, 1] \times [0, 1]$ y el intervalo de tiempo es $[0, 1]$, con incrementos para cada paso de tiempo $\delta t = 0.2$. La malla de elementos finitos consiste en triángulos o cuadrados formando una malla regular. Para cada grado polinómico de las funciones de forma P_1, P_2, P_3, P_4 o Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 , hemos calculado los errores con norma L^2 para ocho mallas de tamaño h , siendo $\frac{1}{h} = 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50$, el número de partes en que se ha dividido cada lado del cuadrado. En el Cuadro 4.1 se muestran el número de elementos y el número de nodos para cada refinamiento, tanto para elementos triangulares como para elementos cuadrangulares. Los valores de las constantes algorítmicas $c_i, i = 1, 2, 3, 4$, se han calibrado a $c_1 = 12, c_2 = 2, c_3 = 1, c_4 = 1$ y el integrador temporal utilizado es BDF3 (diferencias finitas hacia atrás de cuatro niveles de tiempo y tercer orden en δt).

En el encabezado de las gráficas de las pruebas de convergencia en malla de las Figuras 4.1 y 4.2 se adjuntan dos filas con los valores de las pendientes calculadas; la primera fila corresponde a los valores de las pendientes de las rectas que pasan por los primeros 5 puntos y la segunda fila son las pendientes de las rectas que pasan por los últimos 5 puntos de los 8 puntos del refinamiento de malla evaluados ($\frac{1}{h} = 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50$). De esta manera podemos visualizar numéricamente la tendencia de la convergencia de las pendientes calculadas hacia el valor teórico. Para el cálculo de dichas pendientes se ha utilizado el método de los mínimos cuadrados; la simbología $m(P1)$, $m(P2)$, $m(P3)$, $m(P4)$, corresponde a las pendientes para elementos triangulares: lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden respectivamente, mientras que para elementos cuadrangulares lineales, cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden la simbología es $m(Q1)$, $m(Q2)$, $m(Q3)$, $m(Q4)$. Los valores de las pendientes teóricas para las variables de la velocidad y de concentración de un contaminante son $m(P1) = m(Q1) = 2$, $m(P2) = m(Q2) = 3$, $m(P3) = m(Q3) = 4$, $m(P4) = m(Q4) = 5$, y las pendientes teóricas para la variable η , que es la elevación de la superficie libre del agua, son $m(P1) = m(Q1) = 1$, $m(P2) = m(Q2) = 2$, $m(P3) = m(Q3) = 3$, $m(P4) = m(Q4) = 4$.

En la Figura 4.1 se muestra la convergencia en malla para la primera componente de la velocidad usando elementos triangulares y en la Figura 4.2 la convergencia en malla para la concentración de un contaminante. Las otras variables muestran igualmente convergencia óptima para todos los elementos considerados. Lo mismo sucede con los elementos cuadrangulares.

4.4.2 Transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada

Este caso de referencia ha sido ampliamente examinado en la literatura con diferentes métodos, en [58] con el método de diferencias finitas, con el método de volúmenes finitos en [55, 57], con el método SUPG en [56]; en todos los casos se ha considerado convección pura, es decir, el coeficiente empírico de dispersión del transporte de un contaminante se ha tomado nulo. En el presente trabajo vamos a reexaminar el caso de referencia con el método variacional ASGS y utilizando funciones de forma cuadráticas, cúbicas y de cuarto orden, en convección dominante, es decir, considerando el coeficiente empírico de dispersión $k_{11} = k_{22} = 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ y $k_{12} = k_{21} = 0 \text{ m}^2/\text{s}$.

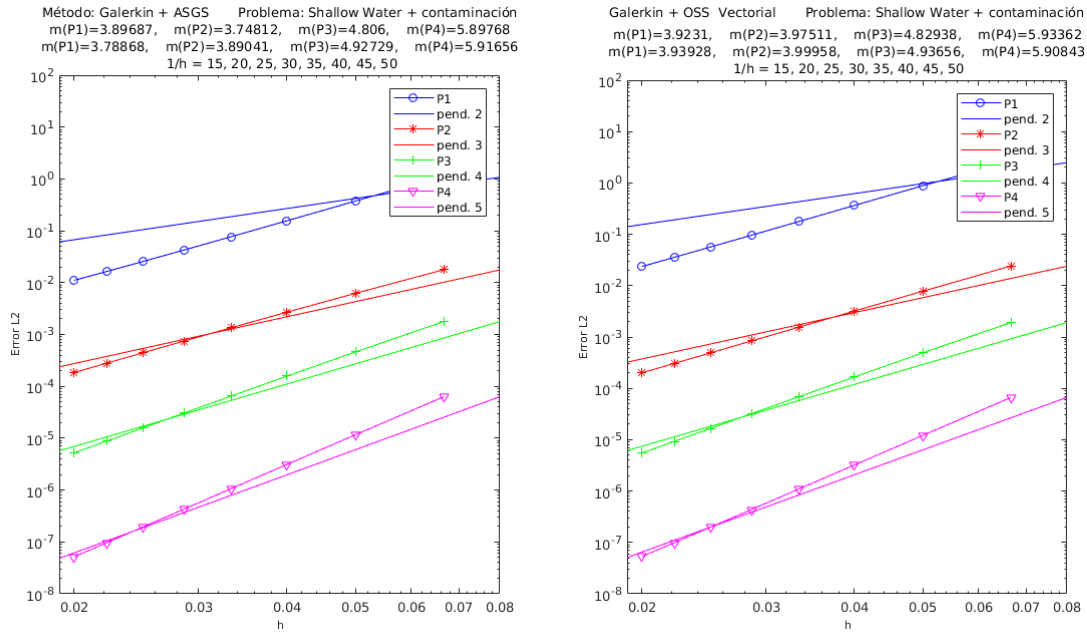


Figura 4.1: Convergencia en malla ASGS-OSS, elementos triangulares, velocidad U_1 .

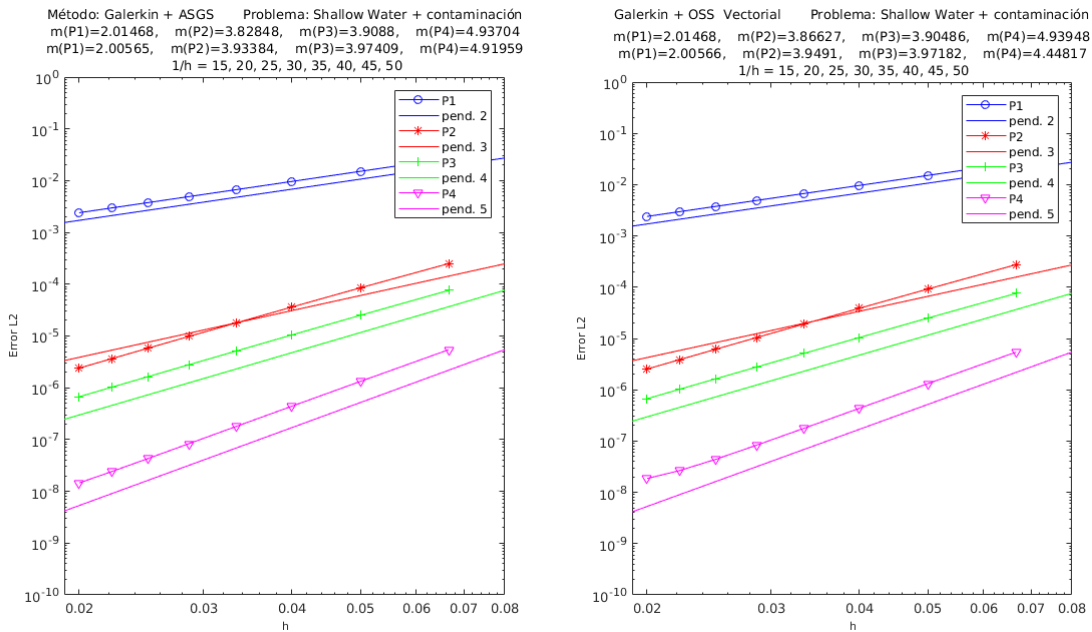


Figura 4.2: Convergencia en malla ASGS-OSS, elementos triangulares, concentración φ .

El dominio computacional es un canal cuadrado de $9 \text{ km} \times 9 \text{ km}$. En cuanto al mallado, con el objeto de comparar los resultados entre elementos lineales y de alto orden, hemos considerado conveniente utilizar refinamientos de malla para elementos Q_1 , Q_2 , Q_3 y Q_4 que den el mismo número de nodos entre si. Tomamos como referencia el refinamiento de malla para Q_2 , que consta de 90×90 elementos cuadrados uniformes de 9 nodos, es decir, el espaciado en las direcciones x e y es $\delta x = \delta y = 100 \text{ m}$, con un total de 8100 elementos y 32761 nodos. De esta manera, la malla de referencia para elementos Q_1 consta de 180×180 elementos cuadrados uniformes de 4 nodos, es decir $\delta x = \delta y = 50 \text{ m}$, con un total de 32400 elementos y 32761 nodos. La malla de referencia para elementos Q_3 consta de 60×60 elementos cuadrados uniformes de 16 nodos, es decir $\delta x = \delta y = 150 \text{ m}$, con un total de 3600 elementos y 32761 nodos. Finalmente, la malla de referencia para elementos Q_4 consta de 45×45 elementos cuadrados uniformes de 25 nodos, es decir $\delta x = \delta y = 200 \text{ m}$, con un total de 2025 elementos y 32761 nodos.

El tamaño del paso de tiempo es uniforme, con $\delta t = 20 \text{ s}$, y el integrador temporal es BDF3 en todos los casos.

Un flujo uniforme con $u_1 = u_2 = 0.5 \text{ m/s}$ y $H = 0.2485 \text{ m}$ está impuesto en todo el dominio. La concentración inicial de contaminante está dada por la siguiente suposición de dos distribuciones Gaussianas centradas respectivamente en $x_1 = y_1 = 1400 \text{ m}$ y en $x_2 = y_2 = 2400 \text{ m}$, dada por:

$$\varphi(x, y, t = 0) = \varphi_1 \exp\left(\frac{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2}{\sigma_1^2}\right) + \varphi_2 \exp\left(\frac{(x - x_2)^2 + (y - y_2)^2}{\sigma_2^2}\right),$$

donde $\varphi_1 = 10$, $\varphi_2 = 6.5$ y $\sigma_1 = \sigma_2 = 264$.

Dada la baja difusión del problema, la solución exacta es aquella concentración de contaminante que se mueve diagonalmente a través del dominio con velocidad constante, preservándose su forma durante todo el tiempo. La Figura 4.3 ilustra los resultados usando el elemento Q_2 comparados con la solución teórica en diferentes tiempos, observándose en todos los casos resultados completamente satisfactorios comparados con la solución exacta.

En el cuadro 4.2 presentamos los valores máximos y mínimos de concentración de contaminante para las funciones de forma Q_1 , Q_2 , Q_3 y Q_4 , en donde observamos que a partir de Q_2 el error de aproximación al valor exacto máximo es del orden de las centésimas, por lo cual en la Figura 4.3 hemos usado los resultados del

	Exacta	Q_1	Q_2	Q_3	Q_4
N. de elem.	—	32400	8100	3600	2025
N. de nodos	—	32761	32761	32761	32761
φ (máx.)	10	9.312	9.976	10.03	10.04
φ (mín.)	0	-0.01032	-3.702×10^{-10}	-2.986×10^{-5}	-3.533×10^{-6}

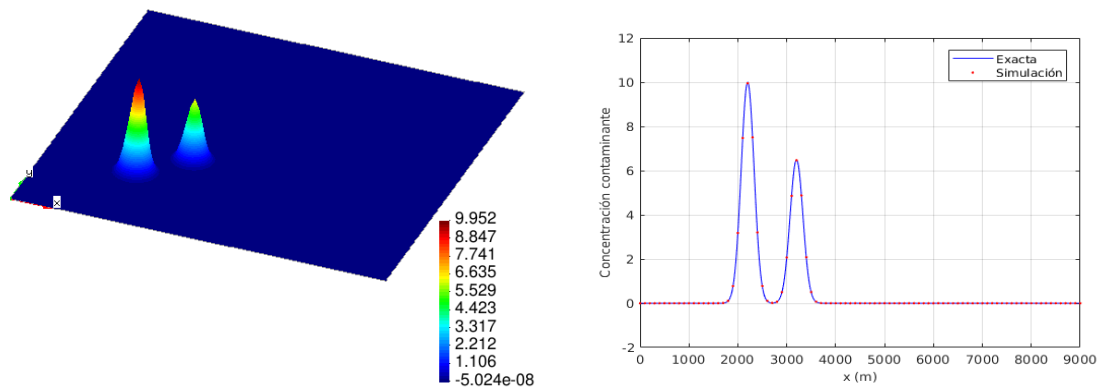
Tabla 4.2: Valores máximos y mínimos de concentración de contaminante en la cavidad cuadrada para $t = 9600$ s.

elemento Q_2 .

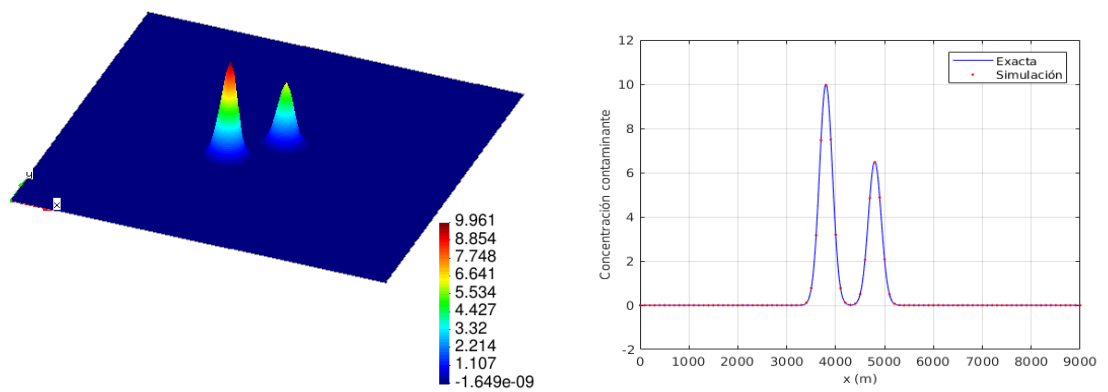
4.4.3 Transporte de un contaminante en el golfo de Roses y en la desembocadura del río Guadalquivir

A continuación presentamos dos ejemplos numéricos del transporte de un contaminante. Ambos ejemplos corresponden a situaciones físicas reales, con geometrías complejas. El objetivo es mostrar que el modelo numérico propuesto puede ser utilizado en este tipo de situaciones, aunque no disponemos de valores experimentales con los cuales comparar los resultados y por consiguiente los mostraremos solamente de manera cualitativa, sin entrar en su discusión. Desde el punto de vista numérico, el valor de estos resultados es comprobar que no presentan ningún tipo de oscilación numérica, pese a utilizar igual interpolación para todas las variables y tratarse de situaciones de flujo con convección dominante.

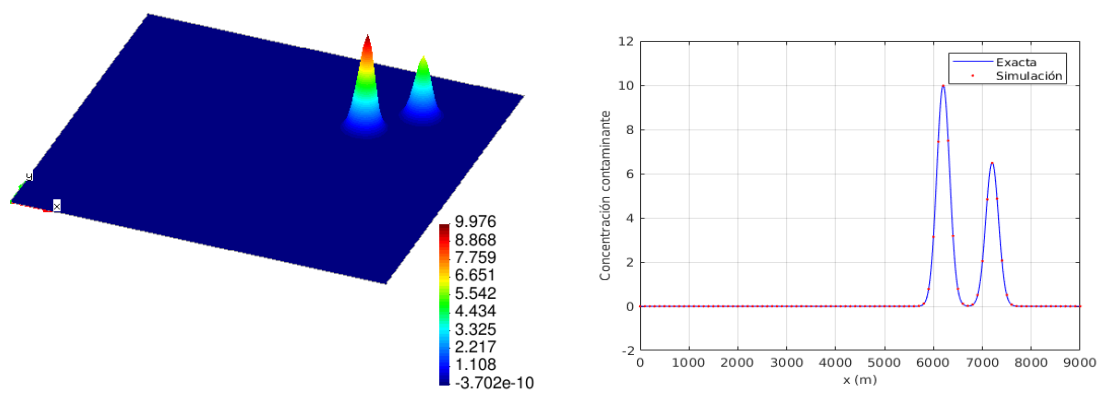
Consideramos una concentración constante de un solo contaminante $\varphi = 1$ en el flujo de entrada y coeficientes de difusión constantes $k_{11} = k_{22} = 10^{-3}$ m²/s y $k_{12} = k_{21} = 0$ m²/s. La suposición de que los coeficientes de difusión son constantes es debido a que los efectos de turbulencia no han sido considerados en el modelo. También asumimos que la concentración del contaminante se anula en las fronteras sólidas, por lo que prescribimos a cero dicha concentración tanto en el perfil de las costas como en las riveras del río, en los dos problemas tratados. En el resto de los contornos consideramos la concentración de contaminante libre, con concentración inicial igual a cero. En ambos ejemplos numéricos hemos considerado batimetría constante con una profundidad de $H = 20.0$ m (no hemos considerado pues la disminución de la profundidad hasta $H = 0$), la aceleración de la gravedad $g = 10$ m/s² y la viscosidad cinemática $\nu_H = 10^{-6}$ m²/s. El



(a) $t = 1600$ s



(b) $t = 4800$ s



(c) $t = 9600$ s

Figura 4.3: Contornos 3D (izquierda) y distribución del contaminante (derecha) a lo largo de la diagonal de la cavidad cuadrada, con elementos Q2.

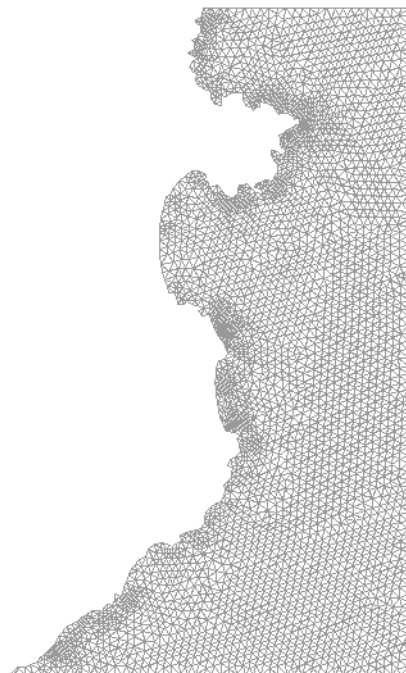


Figura 4.4: Golfo de Roses. Geometría y malla de elementos finitos

parámetro de Coriolis \hat{f} , las tensiones de superficie libre debidas al viento τ_{3i}^s , las variaciones de presión atmosférica p_a y el coeficiente de fricción en el fondo Ch no han sido tomados en cuenta en ninguno de los dos ejemplos.

El primer ejemplo es la simulación del transporte de un contaminante de concentración constante $\varphi = 1$, debido a una corriente marina que viene desde el norte en el golfo de Roses sobre la costa catalana, al sur del Cabo de Creus. La geometría del problema y los resultados numéricos se muestran en las Figuras 4.4, 4.5 y 4.6. El dominio de simulación tiene dimensiones de aproximadamente $80 \times 40 \text{ km}^2$. La malla de elementos finitos consiste en 6062 elementos triangulares lineales con 3217 nodos.

Una corriente marina de 0.1 m/s que llega desde el norte ha sido prescrita en el borde superior del dominio. Esto corresponde a una velocidad como flujo de entrada en la parte superior del dominio. En la costa la velocidad se prescribe a cero, mientras que en los contornos inferior y derecho del dominio se deja libre, donde la sobre elevación del agua se prescribe a cero.

En la segunda simulación numérica consideramos el transporte de un contaminante de concentración constante $\varphi = 1$ en la desembocadura del río Guadalquivir,

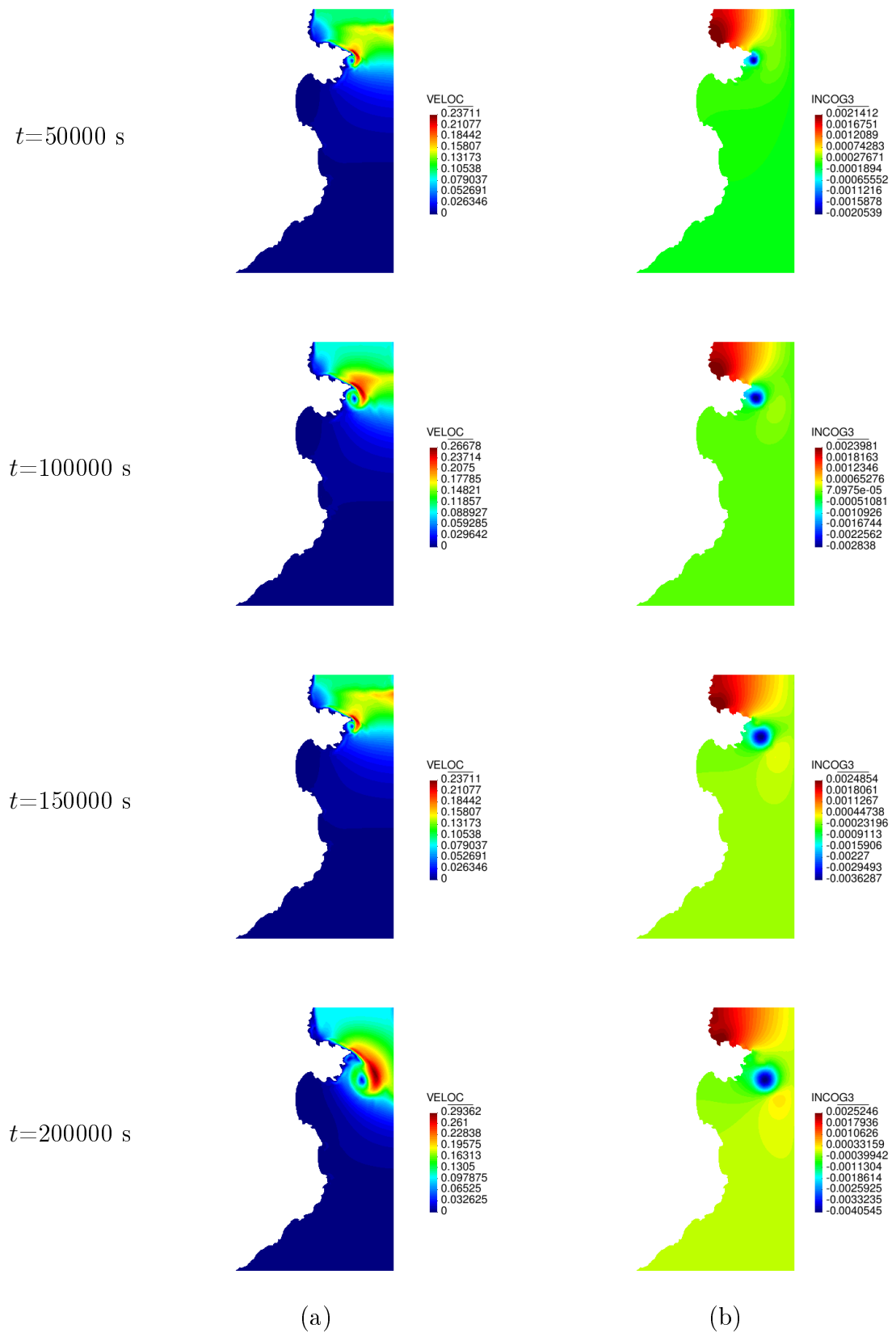


Figura 4.5: Flujo alrededor del Golfo de Roses. (a) velocidad (máx: 0.29 m/s), (b) elevación (INCOG3), superficie libre del agua (máx: 2.52 mm, mín: -4.05 mm).

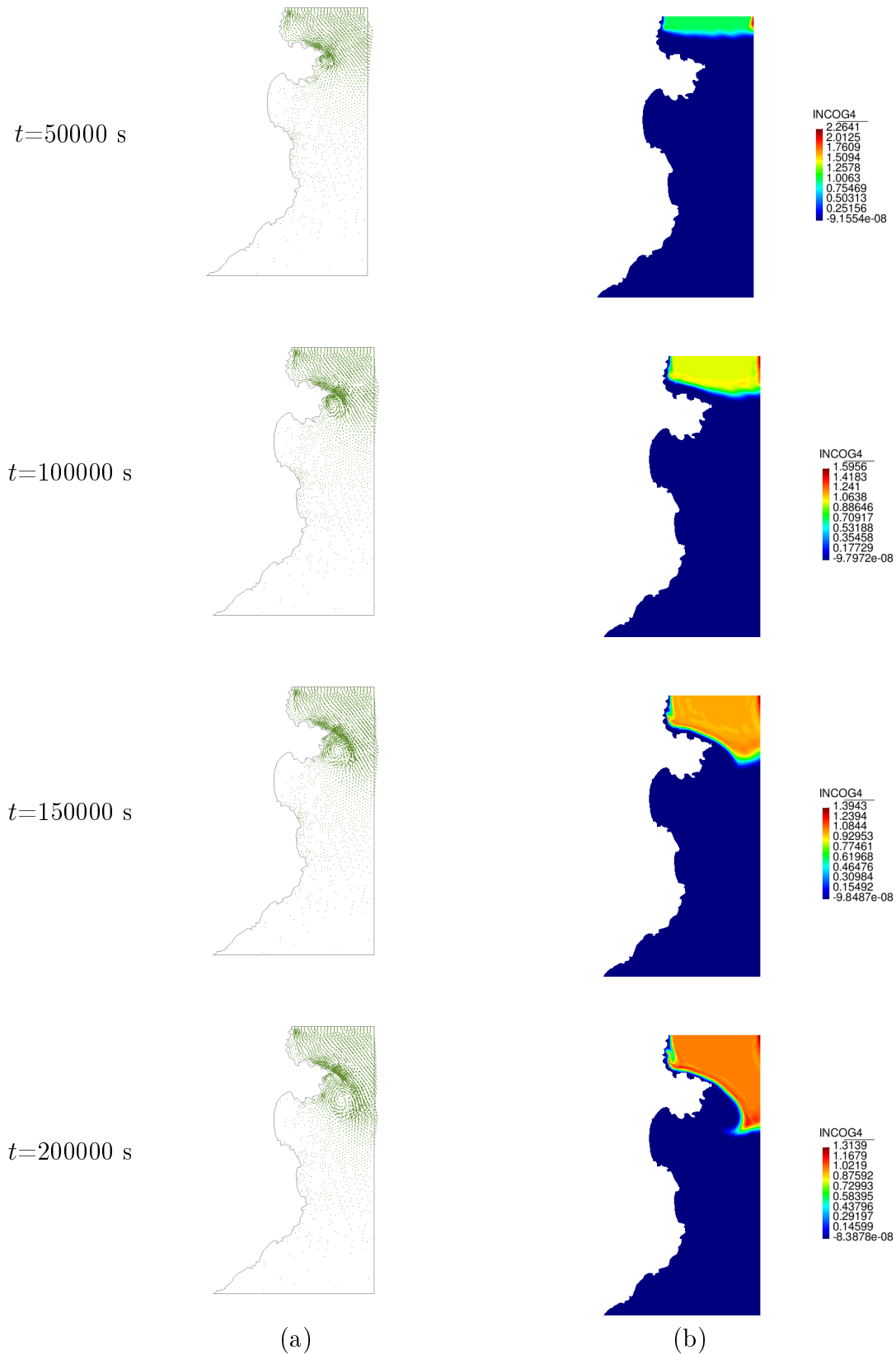


Figura 4.6: Flujo alrededor del Golfo de Roses. (a) vector de velocidad, (b) concentración del transporte de un contaminante (INGOG 4).

en la costa del sur de España. La geometría del problema y los resultados numéricos se muestran en las Figuras 4.7, 4.8 y 4.9.

La malla de elementos finitos consiste en 4955 elementos triangulares lineales con 2645 nodos.

Un flujo de corriente marina de 0.1 m/s está prescrito en el contorno inferior en dirección este-oeste y en la desembocadura del río se prescribe una corriente del río de 0.3 m/s, igualmente en dirección este-oeste. En el resto de la costa y en las riveras del río la velocidad se prescribe a cero, y se deja libre en los contornos izquierdo y superior, donde la sobreelevación del agua está prescrita a cero.

Los dos ejemplos numéricos considerados presentan flujos complejos, con importantes variaciones temporales y espaciales. Esto hace que los parámetros de estabilización sean muy variables elemento a elemento. Este hecho dificulta la convergencia de los esquemas iterativos. Puesto que τ_1 y τ_3 (en el caso de $N = 1$ contaminantes) son escalas de tiempo, a menudo se toman proporcionales a δt , y esto se puede justificar con argumentos diversos [9]. En los problemas en los que la convergencia del esquema iterativo es costosa, hemos tomado una cota máxima para τ_1 y τ_3 proporcional a δt , de manera que los hemos redefinido en cada elemento e como

$$\tau_1^e \leftarrow \min(\tau_1^e, \alpha \delta t), \quad \tau_3^e \leftarrow \min(\tau_3^e, \beta \delta t), \quad (4.4.2)$$

donde α y β son parámetros que hay que ajustar dependiendo del tamaño de la malla y del grado del polinomio de las funciones de forma. El valor de τ_2^e se sigue calculando mediante la expresión dada en (4.3.3).

Mediante experimentación numérica hemos calibrado los parámetros α y β . Para el primer ejemplo hemos considerado $\alpha = 15$ y $\beta = 6$ con un paso de tiempo uniforme $\delta t = 100$ s y para el segundo ejemplo $\alpha = 3$ y $\beta = 5$ con $\delta t = 2500$ s. En ambos casos hemos usado el integrador temporal BDF2 y presentamos resultados numéricos en diferentes instantes de tiempos de simulación, $t = 50000, 100000, 150000$ y 200000 s.

4.4.4 Modelo depredador-presa

Vamos a considerar como problema a resolver el modelo depredador-presa mostrado en [73], que es un sistema acoplado de ecuaciones transitorias de convección-

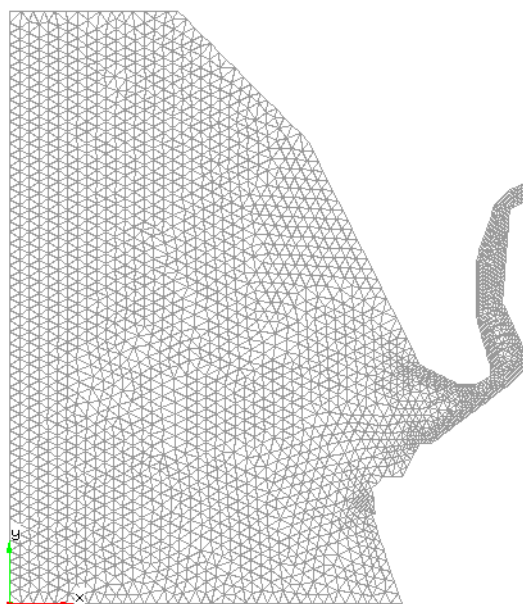


Figura 4.7: Desembocadura del río Guadalquivir. Geometría y malla de elementos finitos

difusión-reacción no lineales en el término de reacción y que describen espacial y temporalmente la dinámica poblacional de una presa y un depredador en términos de funciones de densidad continuas. Usaremos este problema como ejemplo de sistema con términos reactivos no lineales, con dos concentraciones que compiten entre ellas (en este caso no necesariamente contaminantes). Nos centraremos en el problema propiamente del modelo depredador-presa, suponiendo que la velocidad es conocida. Si embargo, la extensión al caso en el que la velocidad resulta de resolver las ecuaciones del modelo de aguas someras es inmediata. En este problema además es frecuente considerar la posibilidad de que la velocidad de transporte del depredador sea distinta a la de la presa, por lo que cuando introduzcamos estas velocidades de transporte mantendremos esta posible generalización.

Formulación del modelo depredador-presa

La forma general del modelo es como sigue:

$$\begin{aligned}\partial_t \varphi_1 &= k_1(\partial_1^2 \varphi_1 + \partial_2^2 \varphi_1) + P(\varphi_1) - E(\varphi_1, \varphi_2), \\ \partial_t \varphi_2 &= k_2(\partial_1^2 \varphi_2 + \partial_2^2 \varphi_2) + \kappa E(\varphi_1, \varphi_2) - \mu(\varphi_2),\end{aligned}$$

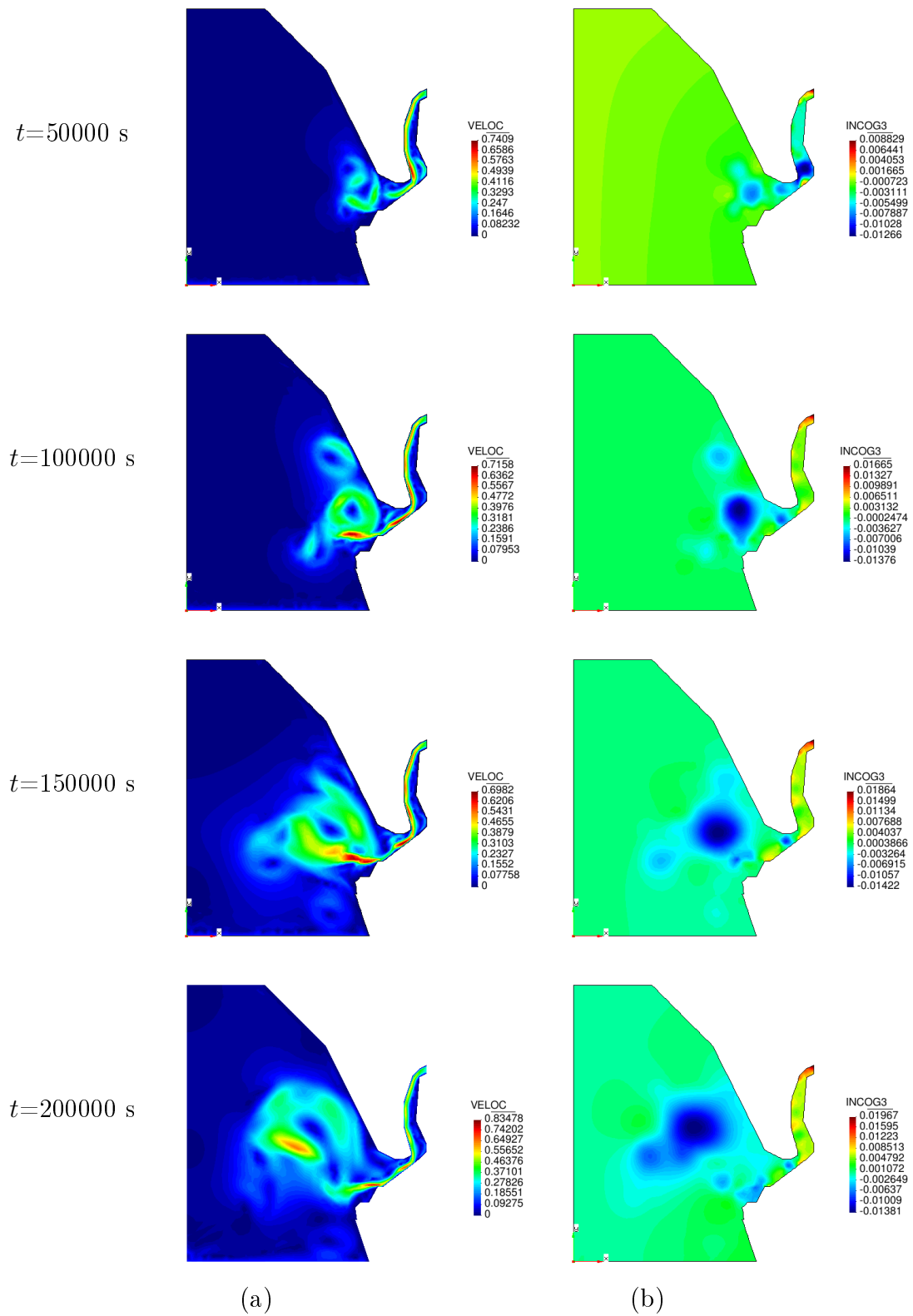


Figura 4.8: Flujo en la desembocadura del Guadalquivir. (a) velocidad (máx: 0.83 m/s), (b) elevación (INCOG3), superficie libre del agua (máx: 1.97 cm, mín: -1.42 cm).

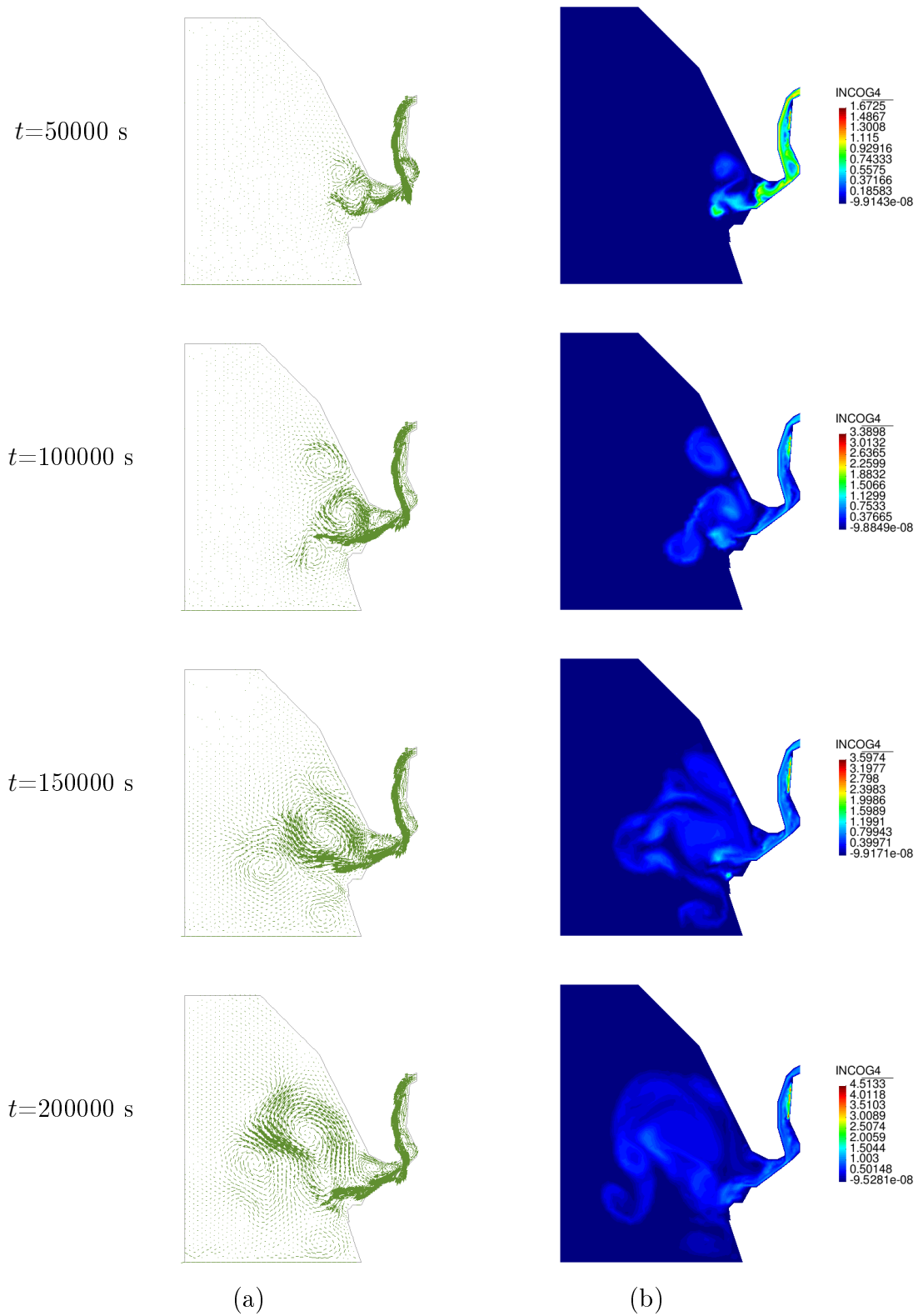


Figura 4.9: Flujo en la desembocadura del Guadalquivir. (a) vector de velocidad, (b) concentración del transporte de un contaminante (INGOG 4).

donde φ_1 y φ_2 representan las densidades de población de la presa y del depredador, respectivamente. k_1 y k_2 son los coeficientes de difusión. $P(\varphi_1)$ es la función de crecimiento de la población de la presa. La función $E(\varphi_1, \varphi_2)$ representa el acto de depredación resultante en una disminución de la población de la presa y en un incremento en la población del depredador. κ es la eficiencia de la depredación, la cual determina el incremento de la población del depredador, siendo $0 \leq \kappa \leq 1$. Finalmente, $\mu(\varphi_2)$ es la función que determina la cantidad de mortalidad del depredador.

Una de las posibilidades para modelar las funciones P , E y μ es:

$$\begin{aligned}\partial_t \varphi_1 &= k_1(\partial_1^2 \varphi_1 + \partial_2^2 \varphi_1) + C\varphi_1 \left(1 - \frac{\varphi_1}{K}\right) - B \left(\frac{\varphi_1 \varphi_2}{\varphi_1 + H}\right) \\ \partial_t \varphi_2 &= k_2(\partial_1^2 \varphi_2 + \partial_2^2 \varphi_2) + \kappa B \left(\frac{\varphi_1 \varphi_2}{\varphi_1 + H}\right) - M\varphi_2,\end{aligned}$$

donde la función $E(\varphi_1, \varphi_2)$ está modelada por el llamado modelo de Hollinger tipo II, en el cual B representa la tasa de depredación y H es la densidad media de saturación de la presa. Para modelar el crecimiento de la población de la presa usamos el llamado modelo logístico, donde C representa la tasa de crecimiento de la población de la presa y K es la capacidad de carga del sistema, y denota la cantidad máxima de población de la presa que es soportada por el dominio; en este trabajo asumimos el valor de la unidad para este parámetro. La función de mortalidad μ del depredador está dada por un término lineal, siendo M su coeficiente.

El modelo anterior considera que no hay transporte convectivo ni del depredador ni de la presa. Este transporte puede deberse a que depredador y presa se encuentren en un medio fluido en movimiento, que se correspondería con el modelo general que hemos tratado anteriormente, pero también puede ser necesario introducir la convección a través de un patrón de migración estacional o migración hacia regiones de disponibilidad de recursos. El término de advección resultante modela el movimiento masivo de poblaciones. Con esto se obtiene el sistema depredador-presa que finalmente consideraremos, dado por el sistema de ecuaciones:

$$\partial_t \varphi_1 - k_1(\partial_1^2 \varphi_1 + \partial_2^2 \varphi_2) + a_{11} \partial_1 \varphi_1 + a_{12} \partial_2 \varphi_1 - s_{11}(1 - \varphi_1)\varphi_1 + s_{12} \left(\frac{\varphi_1}{1 + \alpha_1 \varphi_1}\right) \varphi_2 = 0,$$

$$\partial_t \varphi_2 - k_2(\partial_1^2 \varphi_2 + \partial_2^2 \varphi_2) + a_{21} \partial_1 \varphi_2 + a_{22} \partial_2 \varphi_2 - s_{21} \left(\frac{\varphi_2}{1 + \alpha_2 \varphi_1} \right) \varphi_1 + s_{22} \varphi_2 = 0,$$

al cual hay que añadir las condiciones de contorno y condiciones iniciales. En estas ecuaciones, $s_{11} = C$, $K = 1$, $s_{12} = \frac{B}{H}$, $\alpha_1 = \frac{1}{H}$, $s_{21} = \frac{\kappa B}{H}$, $s_{22} = M$. El campo de velocidad para la presa es $\mathbf{a}_1 = [a_{11}, a_{12}]^T$ y para el depredador $\mathbf{a}_2 = [a_{21}, a_{22}]^T$.

Escribiendo el sistema depredador-presa en el formato de la ecuación vectorial de CDR transitoria (4.2.7) tenemos:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \partial_t \varphi_1 \\ \partial_t \varphi_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{bmatrix} \partial_1^2 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{bmatrix} \partial_2^2 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{21} \end{bmatrix} \partial_1 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} a_{12} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{bmatrix} \partial_2 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -s_{11}(1 - \varphi_1) & s \left(\frac{\varphi_1}{1 + \alpha_1 \varphi_1} \right) \\ -s_{21} \left(\frac{\varphi_2}{1 + \alpha_2 \varphi_1} \right) & s_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.4.3)$$

La matriz de los parámetros de estabilización utilizada para este problema, que está descrita en [73], es $\boldsymbol{\tau} = \text{diag}(\tau_1, \tau_2)$, con:

$$\begin{aligned} \tau_1 &= \left[\frac{4k_1}{\left(\frac{h}{d^2}\right)^2} + \frac{2|\mathbf{a}_1|}{\frac{h}{d}} + s_{11}(1 - \max(\varphi_1)) + s_{12}(1 - \max(\varphi_2)) \right]^{-1}, \\ \tau_2 &= \left[\frac{4k_2}{\left(\frac{h}{d^2}\right)^2} + \frac{2|\mathbf{a}_2|}{\frac{h}{d}} + s_{21}(1 - \max(\varphi_1)) + s_{22}(1 - \max(\varphi_2)) \right]^{-1}, \end{aligned}$$

donde recordemos que h corresponde al diámetro del elemento y d es el orden polinomial de interpolación. Las variables φ_1 y φ_2 las tomamos calculadas en la iteración anterior del paso de tiempo actual.

Pruebas numéricas y resultados

Consideremos la ecuación (4.4.3) del modelo depredador-presa dentro de un cuadrado unitario $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, con condiciones de contorno de Dirichlet homogéneas y condiciones iniciales de las densidades de población de la presa y del depredador dadas por las distribuciones normales (4.4.4) y (4.4.5), respectiva-

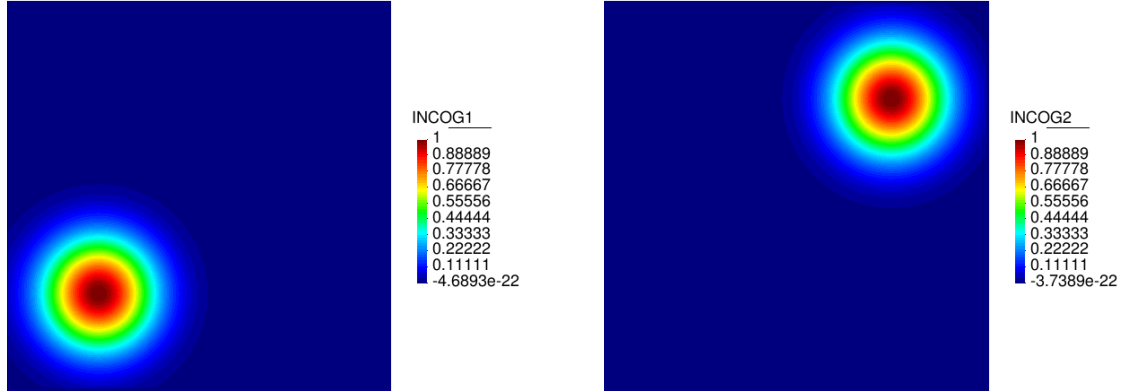


Figura 4.10: Condición inicial de la densidad de población de la presa (izquierda) y del depredador (derecha).

mente, escritas a continuación y mostradas en la Figura 4.10:

$$\varphi_1(x, y, t = 0) = \exp \left[-50 \left((x - 0.25)^2 + (y - 0.25)^2 \right) \right], \quad (4.4.4)$$

$$\varphi_2(x, y, t = 0) = \exp \left[-50 \left((x - 0.75)^2 + (y - 0.75)^2 \right) \right]. \quad (4.4.5)$$

En el Cuadro 4.3 se encuentran los valores de los coeficientes de reacción s_{11} , s_{12} , s_{21} y s_{22} para varios casos de prueba que hemos considerado. Para todos estos casos de prueba los coeficientes de difusión se tomaron como $k_{11} = k_{22} = 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$. El campo de velocidades se mantiene constante tanto para el depredador como para la presa. Las componentes de velocidad de la presa son $a_{11} = 0.5 \text{ m/s}$, $a_{12} = 0.5 \text{ m/s}$ y para el depredador son $a_{21} = -0.5 \text{ m/s}$, $a_{22} = -0.5 \text{ m/s}$, con lo cual las poblaciones del depredador y de la presa son conducidas en direcciones opuestas para encontrarse frente a frente una con la otra. No consideramos ningún término fuente y las constantes α_1 y α_2 se tomaron a la unidad. Con esto el

	s_{11}	s_{12}	s_{21}	s_{22}
Caso 1	0	0	0	0
Caso 2	0	0	0	1
Caso 3	0	0	3	0.1
Caso 4	1	0	3	0.1
Caso 5	1	2	3	0.1

Tabla 4.3: Casos de prueba del modelo depredador-presa para diferentes coeficientes de reacción

sistema de ecuaciones del modelo depredador-presa se escribe:

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \partial_t \varphi_1 \\ \partial_t \varphi_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 10^{-4} & 0 \\ 0 & 10^{-4} \end{bmatrix} \partial_1^2 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 10^{-4} & 0 \\ 0 & 10^{-4} \end{bmatrix} \partial_2^2 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} \\
& + \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & -0.5 \end{bmatrix} \partial_1 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & -0.5 \end{bmatrix} \partial_2 \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} \\
& + \begin{bmatrix} -s_{11}(1-\varphi_1) & s_{12}\left(\frac{\varphi_1}{1+\varphi_1}\right) \\ -s_{21}\left(\frac{\varphi_2}{1+\varphi_1}\right) & s_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.4.6}$$

La malla de elementos finitos usada es regular y consta de 50×50 elementos cuadrados de 4 nodos, es decir $\delta x = \delta y = 0.02$, con un total de 2500 elementos y 2601 nodos. El intervalo de tiempo es $[0, 1]$ y el tamaño del paso de tiempo tomado es uniforme, con $\delta t = 0.2$. Hemos usado el integrador temporal BDF2 y el método variacional multiescala ASGS descrito anteriormente. Presentamos resultados numéricos en diferentes instantes de tiempos de simulación, $t = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, para todos los casos de prueba.

En las Figuras 4.11, 4.12, 4.13, 4.14 y 4.15 se encuentran los resultados de los casos 1, 2, 3, 4 y 5, respectivamente, considerados en el Cuadro 4.3. Los resultados numéricos en todos los casos son los esperados y corresponden con la realidad física de cada caso, observando además que son coincidentes con los resultados mostrados en [73].

Las diferencias de los resultados de las densidades de población del depredador y de la presa con elementos de alto orden Q_2 (con 10201 nodos), Q_3 (con 22801 nodos) y Q_4 (con 40401 nodos) están en el orden de las milésimas con respecto a los resultados con elementos lineales para $t = 1.0$, tal como observamos en los

Cuadros 4.4 y 4.5, por lo que dependiendo de la escala del problema es suficiente la precisión con elementos lineales.

	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5
Q_1	0.48614	0.48614	0.48614	0.69991	0.56545
Q_2	0.48847	0.48847	0.48847	0.70560	0.56853
Q_3	0.48847	0.48847	0.48847	0.70709	0.56928
Q_4	0.48848	0.48848	0.48848	0.70786	0.56982

Tabla 4.4: Densidad de población de la presa (u_1)

	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5
Q_1	0.48614	0.22615	0.63921	0.70337	0.65541
Q_2	0.48847	0.22685	0.63872	0.71223	0.66228
Q_3	0.48847	0.22684	0.63954	0.71348	0.66352
Q_4	0.48848	0.22684	0.64002	0.71412	0.66422

Tabla 4.5: Densidad de población del depredador (u_2)

4.5 Conclusiones

En este capítulo se ha presentado la aproximación del modelo acoplado de las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas junto con las ecuaciones de convección-difusión-reacción del transporte de contaminantes mediante formulaciones estabilizadas de elementos finitos de alto orden (hasta el cuarto orden).

Las formulaciones estabilizadas de elementos finitos para la ecuación vectorial de CDR transitoria, ASGS y OSS, nos permiten utilizar igual interpolación en todas las variables, que para el modelo del transporte de contaminantes en aguas poco profundas son las dos componentes de velocidad U_1 , U_2 , la elevación η de la superficie libre del agua y las concentraciones de contaminantes. Asimismo, las formulaciones ASGS y OSS para la ecuación vectorial de CDR transitoria nos permiten tratar con flujos de convección y reacción dominantes, incluyendo problemas no lineales en los términos convectivos y reactivos. Como ejemplo de problema de reacción no lineal hemos presentado el modelo depredador-presa, con dos concentraciones acopladas a través del término reactivo como incógnitas.

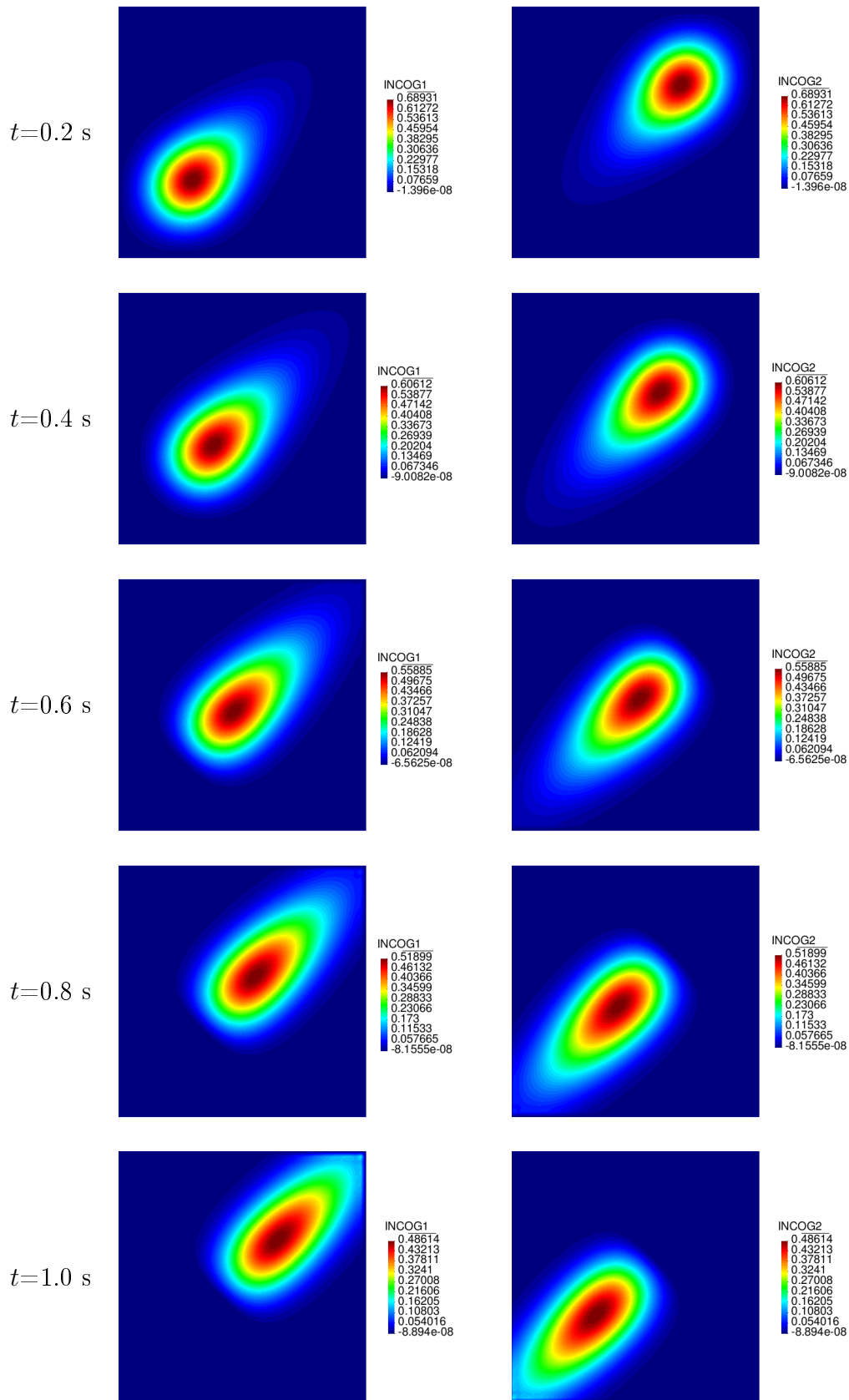


Figura 4.11: Caso1. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).

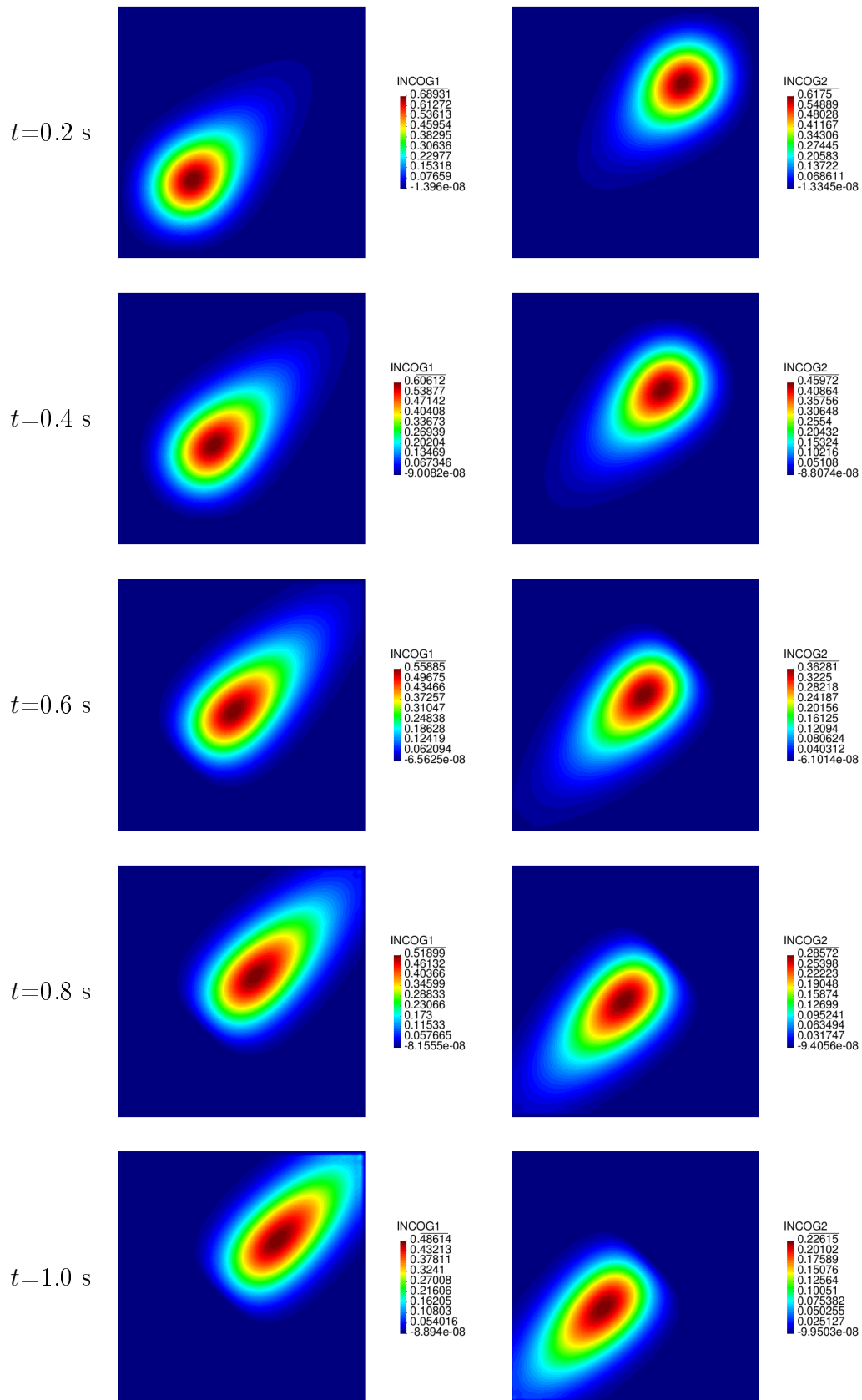


Figura 4.12: Caso2. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).

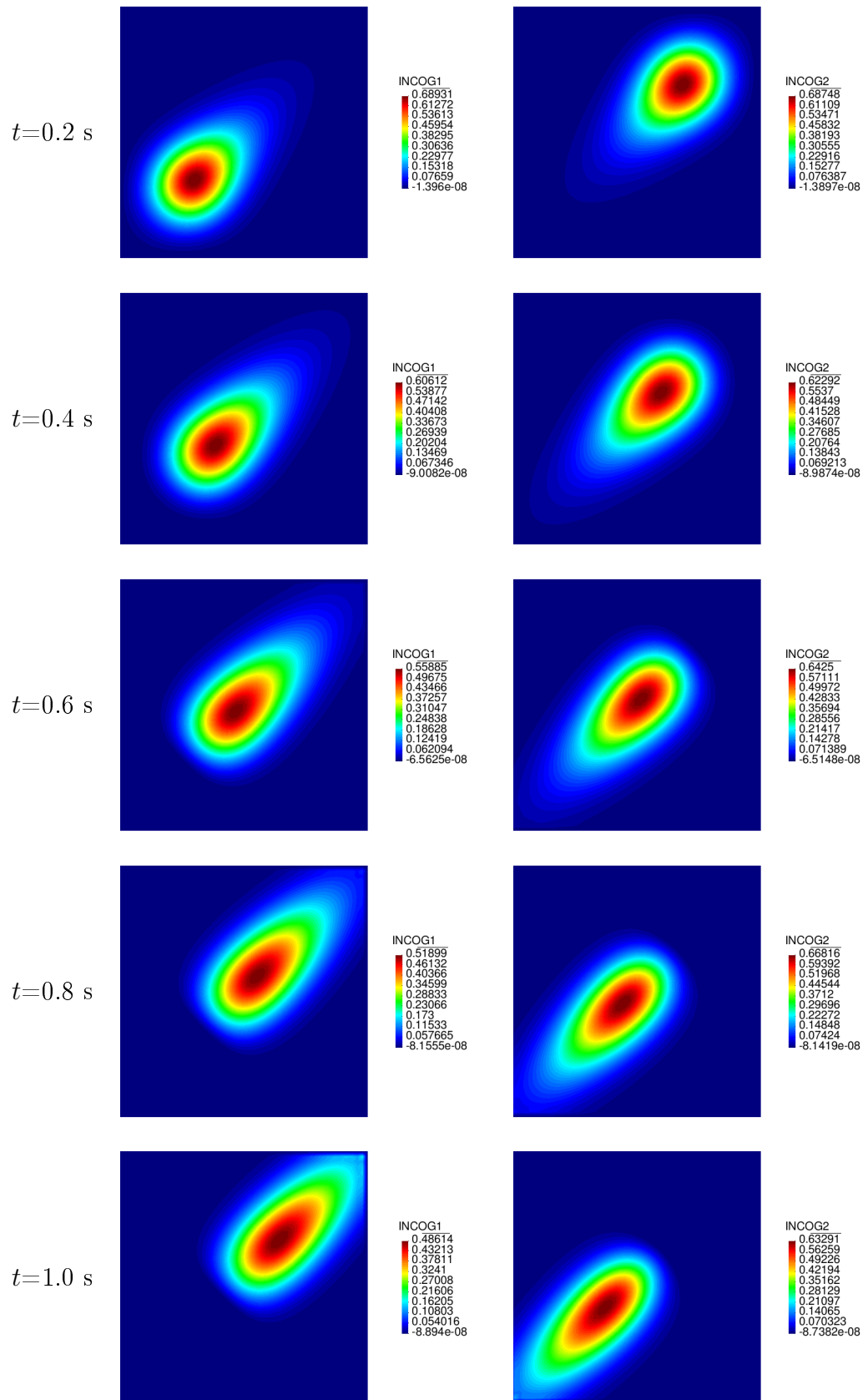


Figura 4.13: Caso3. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).

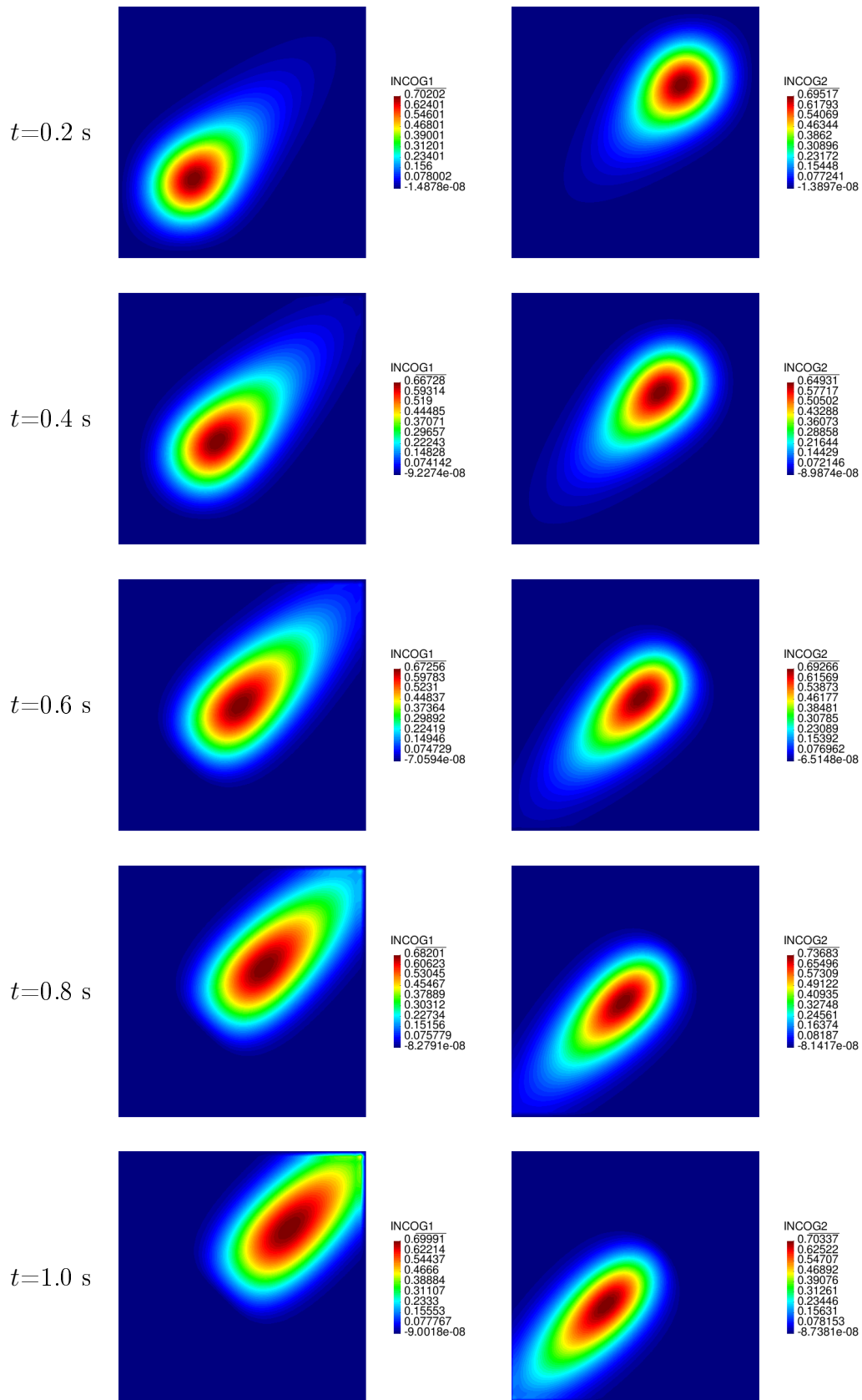


Figura 4.14: Caso4. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).

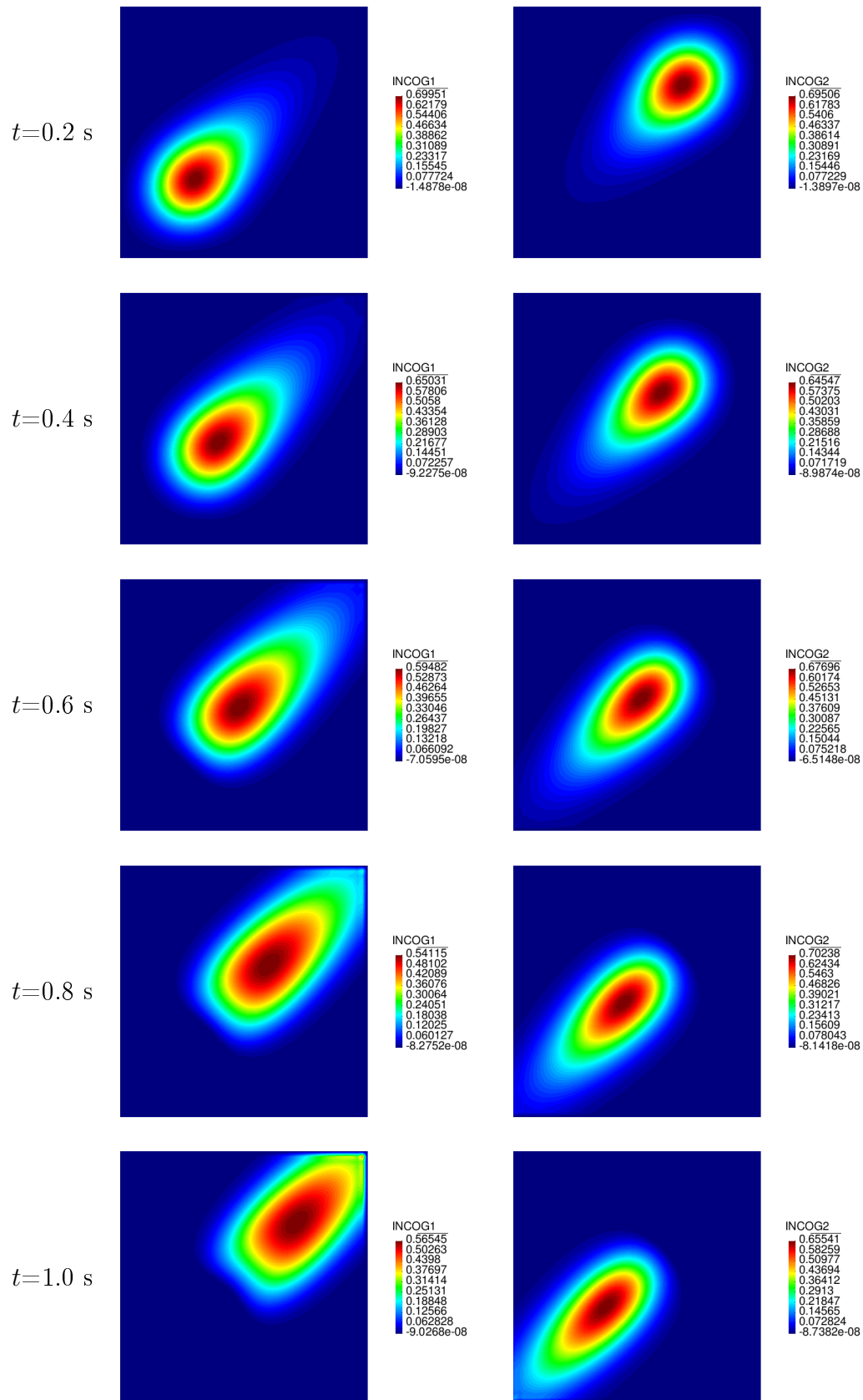


Figura 4.15: Caso5. Densidad de población de la presa (izquierda). Densidad de población del depredador (derecha).

Para utilizar elementos finitos de alto orden, en la matriz de los parámetros de estabilización se ha incluido la dependencia con el orden polinomial de interpolación.

Los resultados de las gráficas de convergencia muestran claramente que las formulaciones para los métodos estabilizados ASGS y OSS son capaces de aproximar correctamente el problema vectorial transitorio de CDR con convección dominante, particularizado al sistema acoplado de cuatro ecuaciones correspondientes al flujo en aguas poco profundas y transporte de un contaminante.

Los resultados calculados del transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada no muestran errores significativos de dispersión o disipación, por lo que concuerdan muy bien con los valores teóricos, y son mejores que los resultados presentados en la literatura, como en [55, 56, 57].

Asimismo, se observa que los resultados obtenidos del transporte de un contaminante en el golfo de Roses y en la desembocadura del río Guadalquivir son completamente satisfactorios, tanto para el campo de velocidades y el nivel de la superficie libre del agua como para la distribución de la concentración de un contaminante.

Finalmente los resultados del modelo depredador-presa son coherentes con la realidad física de cada caso, y muestran la robustez de las formulaciones estabilizadas ASGS y OSS para la ecuación vectorial de CDR transitoria en problemas de reacción dominante y de no linealidad en el término de reacción.

Capítulo 5

Conclusiones y trabajos futuros

En este capítulo presentamos los resultados y conclusiones obtenidas durante la elaboración de la presente tesis doctoral, y la apertura de algunos trabajos futuros de investigación alrededor de este tema.

5.1 Resultados y conclusiones

El objetivo principal del trabajo de tesis doctoral ha sido investigar la aproximación de la ecuación general vectorial transitoria de convección-difusión-reacción (CDR), con elementos finitos de alto orden cuadráticos, cúbicos y hasta el cuarto orden.

- En el Capítulo 2 se presentaron dos formulaciones estabilizadas de elementos finitos para resolver la ecuación escalar transitoria de CDR, y un estudio de la convergencia y estabilidad de las formulaciones incluyendo, en el estimador inverso, el grado del polinomio de las funciones de forma para tomar en cuenta en el estudio a los elementos finitos de alto orden. Del estudio se concluyó que para preservar la convergencia asociada a la integración exacta, la cuadratura mínima para la integración numérica debe ser de quinto orden, con lo cual para el elemento simplicial de cuarto orden se hizo un estudio modificando el elemento P_4 para el cual se obtuvo una cuadratura cerrada para la integración numérica exacta de un polinomio completo de hasta quinto grado, que nos permite aproximar la matriz de masa por una matriz diagonal con todos sus elementos distintos de cero, necesaria para

usar de forma eficiente el método OSS con el elemento simplicial de cuarto orden. Este elemento modificado se usó para el mallado de todos los ejemplos de la tesis con elementos simpliciales de cuarto orden con el método OSS. Los resultados de los experimentos numéricos, tanto de las pruebas de convergencia en malla, las pruebas con capas límite y la simulación numérica del transporte de una concentración, mostraron que la convergencia y estabilidad de los dos métodos estabilizados es óptima tanto para elementos triangulares y cuadrangulares de alto orden cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden, en todos los casos de convección y reacción dominantes.

- En el capítulo tres se presentó la aproximación de la ecuación general vectorial transitoria mediante dos formulaciones estabilizadas de elementos finitos y se experimentó con elementos finitos triangulares y cuadrangulares de alto orden cuadráticos, cúbicos y de cuarto orden para resolver las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas, las mismas que presentan convección dominante frente al término viscoso y agravado por la no linealidad de los términos convectivos y de la derivada temporal de la elevación de la superficie libre del agua. Los resultados de la experimentación numérica, como las pruebas de convergencia en malla, comprobaron la robustez y exactitud de las dos formulaciones ASGS y OSS presentadas. Del mismo modo, los resultados del flujo a través de un obstáculo elíptico y del flujo de la rotura de una presa a través de una compuerta de esclusa mostraron mejor definición y exactitud que los mostrados en la literatura por otros autores.
- En el capítulo cuatro, utilizando las formulaciones del capítulo anterior, hemos presentado el problema del transporte de contaminantes como un sistema acoplado de la ecuación del transporte de contaminantes junto con las ecuaciones del movimiento de un fluido en aguas poco profundas, así como también las ecuaciones del modelo depredador-presa. Igual que en el capítulo anterior, los experimentos de las pruebas de convergencia en malla mostraron la eficacia de las dos formulaciones presentadas. Del mismo modo, los resultados del transporte de un contaminante en una cavidad cuadrada mostraron coincidencia con los valores teóricos de la solución exacta. Igualmente, los resultados del transporte de un contaminante en el golfo de Roses y en la desembocadura del río Guadalquivir mostraron ser satisfactorios, tanto para el campo de velocidades y el nivel de la superficie

del agua como para la distribución de la concentración de un contaminante. Por último, los resultados del modelo depredador-presa también resultaron ser los esperados para todos los casos considerados. En general las formulaciones estabilizadas ASGS y OSS mediante elementos finitos de alto orden para la ecuación vectorial transitoria de CDR mostraron ser completamente eficaces en problemas de convección y reacción dominantes combinados con la problemática de la no linealidad en los términos de convección, reacción y de la derivada temporal.

5.2 Trabajos futuros

Con el desarrollo de la tesis han surgido varias ideas para futuros trabajos.

- Una primera idea es la extensión de las formulaciones ASGS y OSS mediante elementos finitos de alto orden para resolver problemas más generales, especialmente aquellos que involucren no linealidad en el término difusivo.
- Otra tarea es el análisis y estudio de las discontinuidades en el límite invísido de la ecuaciones de aguas someras.
- También sería interesante incluir en las formulaciones ASGS y OSS mediante elementos finitos de alto orden el tratamiento de subescalas dinámicas.
- Un importante trabajo será el estudio comparativo de la eficiencia del alto orden en las formulaciones ASGS y OSS, buscando un menor coste computacional para una precisión dada.
- Finalmente, otra línea de trabajo puede ser la investigación de la formulación de la matriz completa de los parámetros de estabilización para la ecuación de CDR vectorial.

Bibliografía

- [1] T. J. R. Hughes. Multiscale phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 127, No. 1-4, pp. 387-401, 1995.
- [2] T. J. R Hughes, G. O. Feijóo, L. Mazzei, and J. B. Quincy. The variational multiscale method-a paradigm for computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 166:3-24, 1998.
- [3] R. Codina, Finite Element Approximation of the Convection-Diffusion Equation: Subgrid-Scale Spaces, Local Instabilities and Anisotropic Space-Time Discretizations, in *Bail 2010 - Boundary and Interior Layers, Computational and Asymptotic Methods, Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, Eds. C. Clavero, J.L. Gracia and F.J. Lisbona, volume 81, pages 85-97. Springer, 2011.
- [4] R. Codina, On stabilized finite element methods for linear systems of convection-diffusion-reaction equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 188:61-82, 2000.
- [5] R. Codina, A stabilized finite element method for generalized stationary incompressible flows, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190:2681-2706, 2001.
- [6] R. Codina, Stabilized finite element approximation of transient incompressible flows using orthogonal subscales, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191:4295-4321, 2002.
- [7] C. Baiocchi, F. Brezzo, L.P. Franca, Virtual bubbles and Galerkin/least-squares type methods (Ga.L.S), *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 105 (1993) 125-141.

- [8] F. Brezzi, L.P. Franca, T.J.R. Hughes, A. Russo, $b = \int g$, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 145 (1997) 329-339.
- [9] Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 156:185-210, 1998.
- [10] R. Codina, J. Blasco, Analysis of a stabilized finite element approximation of the transient convection-diffusion-reaction equation using orthogonal subscales, *Computing and Visualization in Science* 4 (2002) 167-174.
- [11] J. Principe and R. Codina. On the stabilization parameter in the subgrid scale approximation of scalar convection-diffusion-reaction equations on distorted meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:1386-1402, 2010.
- [12] D.W. Kelly, S. Nakazawa, O.C. Zienkiewicz, J.C. Heinrich, A note on upwinding and anisotropic balancing dissipation in finite element approximations to convective diffusion problems, *Int. J. Numer. Methods Engrg.* 15 (1980) 1705– 1711.
- [13] A.N. Brooks, T.J.R. Hughes, Streamline upwind/Petrov–Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier–Stokes equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 32 (1982) 199–259.
- [14] C. Johnson, U. Nävert, J. Pitkäranta, Finite element methods for linear hyperbolic equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 45 (1984) 285–312.
- [15] T.J.R. Hughes, L.P. Franca, G.M. Hulbert, A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The Galerkin/least-squares method for advective–diffusive equations, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 73 (2) (1989) 173–189.
- [16] L. Franca, S.L. Frey, T.J.R. Hughes, Stabilized finite element methods: I. Application to the advective–diffusive model, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 95 (1992) 253–276.

- [17] J. Douglas, T. Russel, Numerical methods for convection dominated problems based on combining the method of characteristics with finite elements or finite difference procedures, *SIAM J. Numer. Anal.* 19 (1982) 871–885.
- [18] J. Donea, A Taylor–Galerkin method for convection transport problems, *Int. J. Numer. Methods Engrg.* 20 (1984) 101–119.
- [19] R. Codina, S. Badia, J. Baiges and J. Principe, Variational Multi-scale Methods in Computational Fluid Dynamics, In: *Encyclopedia of Computational Mechanics* (eds E. Stein, R. Borst and T.J.R. Hughes), doi:10.1002/9781119176817.ecm21172017, 2017.
- [20] R. Codina and J. Principe and O. Guasch and S. Badia, Time dependent subscales in the stabilized finite element approximation of incompressible flow problems", Volume 196. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2413–2430, 2007.
- [21] R. Codina, On hp convergence of stabilized finite element approximations of the convection-diffusion equation, *SeMA Journal*, 75:591-606, 2018.
- [22] P. Houston and E. Süli, Stabilised hp-finite element approximation of partial differential equations with nonnegative characteristic form, Volume 66. *Computing* 99-119, 2001.
- [23] G. Lube and G. Rapin, Residual-based stabilized higher-order FEM for advection-dominated problems, Volume 195. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 4124-4138, 2006.
- [24] Ch. Schwab, p-and hp-Finite element methods. Theory and application to solid and fluid mechanics. Oxford University Press, 1998.
- [25] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor. *The Finite Element Method*, volume 3, Fluid Mechanics. Butterworth-Heinemann, 5 edition, 2000.
- [26] H. Yamamoto. Lecture 8: The Shallow-Water Equations, <https://www.coursehero.com/file/35480149/othersonline-HW4pdf/>
- [27] J. Peraire, O.C. Zienkiewicz y K. Morgan, Shallow water problems: a general explicit formulation. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **22**, 547-574, 1986.

- [28] J. Peraire, A finite element method for convection dominated flows. Tesis doctoral, Universidad of Wales, Swansea, 1986.
- [29] E. Hanert, V. Legat, E. Deleersnijder. A comparison of three finite elements to solve the linear shallow water equations. *Ocean Modelling* 5 (2002) 17-35.
- [30] Shin-Jye Liang and Ying-Chih Chen. Space-time least-squares finite-element method for shallow-water equations. *Journal of Marine Science and Technology*, Vol. 19, No. 5, pp. 571-578 (2011).
- [31] Shinsuke Takase, Kasuo Kashiya, Seizo Tanaka and Tayfun E. Tezduyar. Space-time SUPG formulation of the shallow-water equations. *International Journal for numerical methods in fluids*. 2010; **64**:1379-1394.
- [32] R. Codina, Finite element approximation of the shallow water equations using sub-grid scale stabilization. *ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference 2001*, Swansea, Wales UK, 4-7 September 2001.
- [33] R. Codina, Stabilization of incompressibility and convection through orthogonal sub-scales in finite element methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190 (2000), 1579-1599.
- [34] Liang, S.-J. and Hsu, T.-W., Least-squares finite-element method for shallow-water equations with source terms, *Acta Mechanica Sinica*, Vol. 25, pp. 597-610 (2009).
- [35] Akoh, R., li, S., and Xiao, F., A CIP/multi-moment finite volume method for shallow water equations with source terms, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 56, pp. 2245-2270 (2008).
- [36] P. Brufau, P., García-Navarro, Two-dimensional dam break flow simulation, *International Journal for numerical methods in fluids*, Vol. 33, No. 1, pp. 35-37 (2000).
- [37] Xing, Y. and Shu, C. W., High order well-balanced finite volume WENO schemes and discontinuous Galerkin methods for a class of hyperbolic systems with source terms, *Journal of Computational Physics*, Vol. 216, pp. 567-598 (2006).

- [38] Le Veque, R. J., Balancing source terms and flux gradients in high-resolution Godunov methods: the quasi-steady wave-propagation algorithm, *Journal of Computational Physics*, Vol. 146, pp. 346-365 (1998).
- [39] Xing, Y. and Shu, C. W., High order finite difference WENO schemes for a class of hyperbolic systems with source terms, *Journal of Computational Physics*, Vol. 208, pp. 206-227 (2005).
- [40] J. C. Hsiek, T. Y., Yang, Investigation on the suitability of two dimensional depth-averaged models for bend-flow simulation, *Journal of Hydraulic Engineering*, Vol. 129, No. 8, pp. 433-465 (2003).
- [41] E. Pena, Estudio numérico y experimental del transporte de sedimentos en cauces aluviales, Tesis Doctoral, A Coruña, (2002)
- [42] E. Zahibo, N. Pelinovsky, Analytical and numerical study of nonlinear effects at tsunami modeling, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 174, pp. 795-809 (2006).
- [43] Alessandro, V., Caleffi, V., and Zanni, A., Case study: Malpasset dam-break simulation using a two-dimensional finite volume method, *ASCE Journal of Hydraulic Engineering*, Vol 128, pp. 460-472 (2002).
- [44] Fujihara, M. and Borthwick, A. G. L., Godunov-type solution of curvilinear shallow-water equations, *ASCE Journal of Hydraulic Engineering*, Vol. 126, pp. 827-836 (2000).
- [45] Zhou, J. G., A lattice Boltzmann model for the shallow water equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 191, pp. 3527-3539 (2002).
- [46] R. Codina, J. Blasco, A finite element formulation for the Stokes problem allowing equal velocity-pressure interpolation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 143 (1997) 373-391.
- [47] R. Codina, J. Blasco, Analysis of a pressure-stabilized finite element approximation of the stationary Navier-Stokes equations, *Numerische Mathematik* 87 (2000) 59-81.

- [48] C.K. Chou, C.P. Sun, D.L. Young, V. Sladek, Extrapolated local basis function collocation method for shallow water problems, *Engineering Analysis with Boundary Elements* 50 (2015) 275-290.
- [49] Liang SJ, Tang JH, Wu Ms. Solution of shallow-water equations using least-squares finite-element method. *Acta Mechanica Sinica* 2008;24(5):523-532.
- [50] Nikolos IK, Delis Al. An unstructured node-centered finite volume scheme for shallow water flows with wet/dry fronts over complex topography. *Comput Methods Appl Mech Eng* 2009;198(4748):3723-50.
- [51] R. Codina, J. M. González-Ondina, G. Díaz-Hernández and J. Principe, Finite element approximation of the modified Boussinesq equations using a stabilized formulation, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 57:1249-1268, 2008.
- [52] R. Codina and J. Principe and J. Baiges, Subscales on the element boundaries in the variational two-scale finite element method, Volume 198. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 838–852 (2009).
- [53] R. Codina and J. Principe, Dynamic subscales in the finite element approximation of thermally coupled incompressible flows, Volume 54. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 707-730 (2007).
- [54] Z. Zlatev. *The Air Pollution Problem*. In: *Computer Treatment of Large Air Pollution Models*. Environmental Science and Technology Library, vol 2. Springer, Dordrecht, 1995.
- [55] S. Li and C. J. Duffy. Fully-coupled modeling of shallow water flow and pollutant transport on unstructured grids. *Procedia Environmental Sciences*, 13:2098–2121, 2012.
- [56] F. Behzadi and J. C. Newman III. A Semi-Discrete SUPG Method for Contaminant Transport in Shallow Water Models. *Procedia Computer Science*, 80:1313-1323, 2016.
- [57] F. Benkhaldoun, I. Elmahi, M. Seaïd. Well-balanced finite volume schemes for pollutant transport by shallow water equations on unstructured meshes. *J. Comput. Phys.* 1:180-203, 2007.

- [58] T. Komatsu, A. K. Ohgushi, and K. Asai. Refined numerical scheme for advective transport in diffusion simulation. *J. Hydraul. Eng.*, 123:41-50, 1997.
- [59] L. Begnudelli, B. F. Sanders, Unstructured grid finite-volume algorithm for shallow-water flow and scalar transport with wetting and drying. *Journal of Hydraulic Engineering*, 132(4):371-384, 2006.
- [60] L. Cea, M. E. Vázquez-Cedón, Unstructured finite volume discretisation of bed friction and convective flux in solute transport models linked to the shallow water equations. *Journal of Computational Physics*. 231(8):3317-3330, 2012.
- [61] V. Caleffi, A. Valiani. A 2D local discontinuous Galerkin method for contaminant transport in channel bends. *Computers & Fluids*. 88:629-642, 2013.
- [62] S. Pavan, J. M. Hervouet, M. Ricchiuto, and R. Ata. A second order residual based predictor–corrector approach for time dependent pollutant transport. *Journal of Computational Physics*. 318:122–141, 2016.
- [63] L. Cai, Wen-Xian Xie, Jian-Hu Feng, and Jun Zhou. Computations of transport of pollutant in shallow water. *Applied Mathematical Modelling*. 31:490–498, 2007.
- [64] L. Postma, J.-M. Hervouet, Compatibility between finite volumes and finite elements using solutions of shallow water equations for substance transport, *Int. J. Numer. Methods Fluids*. 53(9):1495–1507, 2007.
- [65] S. Pavan, R. Ata, J.-M. Hervouet, Finite volume schemes and residual distribution schemes for pollutant transport on unstructured grids, *Environ. Earth Sci*. 74:7337–7356, 2015.
- [66] H. Liu, J. G. Zhou, M. Li, Y. Zhao, Multi-block Lattice Boltzmann Simulations of Solute Transport in Shallow Water Flows, *Advances in Water Resources* (2013).
- [67] H. Hammou, I. Ginzburg and M. Boulerhcha, Two-relaxation-times lattice Boltzmann schemes for solute transport in unsaturated water flow with a focus on stability. *Adv Wat Res*. 4(6):779-793, 2011.
- [68] J. G. Zhou, A lattice Boltzmann method for solute transport. *Int J Numer Methods Fluids*. 61:848-63, 2009.

- [69] A. Villota and R. Codina, Approximation of the scalar convection-diffusion-reaction equation with stabilized finite element formulations of high order, *Rev. int. métodos numér. cálc. diseño ing.* (2019). Vol. 35, (1), 6 URL https://www.scipedia.com/public/Villota_Codina_2018a
- [70] B. Rogers, M. Fujihara and A. G. L. Borthwick, Adaptive Q-tree Godunov-type scheme for shallow water equations. *Int J Numer Methods Fluids.* 35:247-80, 2001.
- [71] A. Villota and R. Codina, Approximation of the shallow water equations with higher order finite elements and variational multiscale methods, *Rev. int. métodos numér. cálc. diseño ing.* (2018). Vol. 34, 1, 28 URL https://www.scipedia.com/public/Villota_Codina_2017a.
- [72] J. Principe and R. Codina. On the stabilization parameter in the subgrid scale approximation of scalar convection-diffusion-reaction equations on distorted meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:1386-1402, 2010.
- [73] S. K. Sheshachala and R. Codina, Finite element modeling of nonlinear reaction-diffusion-advection systems of equations, *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, <https://doi.org/10.1108/HFF-02-2018-0077>, 2018.