

XV SEMINARIO NACIONAL DE HIDRÁULICA E HIDROLOGÍA

METODOLOGÍAS NUMÉRICAS PARA EL CÁLCULO DE TRANSPORTE DE ESPECIES NO REACTIVAS EN EL AGUA

Luis Javier Montoya Jaramillo ^(a), Francisco Mauricio Toro Botero ^(b)

(a) Universidad de Medellín, Facultad de Ingeniería Ambiental, Medellín, Colombia

(b) Posgrado en Aprovechamiento de Recursos Hidráulicos, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín.

RESUMEN

En el presente artículo se realiza una revisión bibliográfica y una descripción de las diferentes técnicas numéricas utilizadas en la solución de la ecuación de advección-difusión. Se presentan algunos problemas asociados a dicha solución y algunas alternativas para solucionar dichos problemas. Adicionalmente, se presenta el desarrollo de un esquema en diferencias finitas para solucionar dicha ecuación para el transporte en tres dimensiones y la aplicación de dicho modelo a un canal rectangular recto, con el fin de validarlo comparándolo con soluciones analíticas en una dimensión. Finalmente se presenta la aplicación de dicho esquema en un flujo alrededor de un dique.

ABSTRACT

In this paper a bibliographical review and a description of different numerical techniques to solve the advection-diffusion problem is presented. Problems related to this solution and some alternatives to solve them are also included. Additionally, it is presented the development of a finite difference scheme to solve the three dimensional transport equation and its application to a rectangular channel. For validation, the numerical solution for the rectangular channel is compared to the one dimension analytical solution. Finally, results of the application of the numerical model for the flow around a spur dike is presented.

1. Introducción

En la actualidad es frecuente el uso de métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales parciales, ecuaciones mediante las cuales se pretende modelar distintos procesos físicos. Los problemas en hidrodinámica computacional pretenden encontrar campos de velocidad, presiones hidrodinámicas, niveles y esfuerzos, para lo cual se tiene que resolver el sistema de ecuaciones que constituyen las ecuaciones de Navier-Stokes y la ecuación de conservación de masa. A dicho sistema se puede agregar una ecuación de transporte con el fin de modelar procesos de transporte de calor o materia por medio del fluido. Debido a la complejidad de dichas ecuaciones éstas se han visto sujetas a simplificaciones de acuerdo a las magnitudes de interés en el problema.

Uno de los problemas más significativos asociados con la solución numérica de dichas ecuaciones son la presencia de oscilaciones espúreas, que en muchos casos llevan a soluciones inadecuadas. Además de las restricciones de estabilidad asociadas al método de solución y que imponen restricciones al tamaño de la malla¹, existen otras causas de oscilaciones tales como la física del problema, las condiciones de borde, las condiciones iniciales, ciertos valores de los coeficientes o la no linealidad de las ecuaciones, y la forma y distribución de la malla, entre otras.

Para iniciar el estudio de las oscilaciones numéricas y sus causas se debe iniciar estudiando las ecuaciones diferenciales de tipo hiperbólico². La ecuación de onda es un caso paradigmático de éstas, y es un primer paso en el estudio de las oscilaciones, ya que por su carácter poco dispersivo, hace que los métodos tradicionales de solución tengan dificultades en reproducir la solución, ya que la condición inicial se traslada en el espacio como una onda no dispersiva³. Además, una perturbación que se presente en algún momento en el proceso de solución se trasladará sin dispersarse en el espacio a lo largo del tiempo. Estas características especiales han hecho que se hayan implementado modelos especiales para solucionar dichos problemas hiperbólicos⁴.

¹ Dichas restricciones pueden evaluarse analíticamente mediante el análisis de Von Newman (Véase Strikwerda(19), pag 40)

² Las ecuaciones diferenciales parciales se suelen clasificar en parabólicas, elípticas o hiperbólicas de acuerdo al valor del discriminante. Véase (Fletcher (7), pag 17)

³ El método de las características permite solucionar dichas ecuaciones de forma analítica. Véase Fletcher (7), pag 37-40

⁴ En este sentido son numerosas las bibliografías. Véase Strikwerda (19), Fletcher (7), Lapidus (13) por mencionar algunos pocos

Las ecuaciones necesarias para solucionar los problemas relacionados con hidráulica de aguas poco profundas pueden comportarse como ecuaciones hiperbólicas o como ecuaciones parabólicas⁵ o como una combinación de ambas. Este comportamiento hace que el planteamiento de los esquemas de solución numérica requiera un cuidado especial.

Otro problema asociado a la aparición de oscilaciones, se desprende de la física del problema y es la aparición de “choques” en la solución, es decir, cambios bruscos de una determinada magnitud en un intervalo espacial muy corto. Dichos choques dificultan la solución numérica, pues no se puede garantizar la continuidad de la solución y con ello tampoco la diferenciabilidad de la misma. Ejemplos de dichos choques son los resaltos hidráulicos o cambios de régimen asociados al número de Froude en problemas hidráulicos o al número de Mach en problemas aerodinámicos; los frentes salinos; las ondas de choque presentes tanto en problemas de dinámica de gases como en problemas hidráulicos, entre otros.

2. Técnicas de solución de la ecuación de transporte (convección – difusión)

Si se tiene una especie química que no reaccione con el agua, ni se degrade en contacto con ella, la ecuación de conservación de masa para dicha especie se puede expresar como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (1)$$

y si se posee un suministro o disminución puntual de dicha sustancia en un punto, es decir, si se tiene una fuente o un sumidero, la ecuación será

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + S \quad (2)$$

donde u , v y w son las velocidades en la dirección x , y y z respectivamente; K_x , K_y

⁵ Las ecuaciones parabólicas por su carácter dispersivo hacen que los problemas de oscilaciones sean menos significativos.

y K_z son los coeficientes de difusión de la sustancia en las respectivas direcciones c es la concentración de dicha sustancia y S es la intensidad de la fuente o el sumidero.

Por simplicidad en la exposición que se presenta a continuación, se analizará la ecuación en el caso unidimensional, esto es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (3)$$

Si se toma un esquema en diferencias centrales en espacio y adelante en el tiempo, la ecuación (3) se discretiza de la siguiente manera

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} + u \frac{c_{j+1}^n - c_{j-1}^n}{2\Delta x} = K_x \frac{c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n}{\Delta x^2} \quad (4)$$

Ahora, definiendo el número de Peclet, como $Pe = \frac{u\Delta x}{K_x}$ se encuentra que, para este esquema, además de las restricciones de estabilidad aparecen restricciones impuestas por el número de Peclet. El esquema central es estable, si $Pe \leq 2$.⁶

Intentando solucionar las restricciones presentes en el esquema central se ha propuesto un nuevo esquema utilizando una diferenciación aguas arriba de la corriente o en contra de la corriente⁷. Dicho esquema utiliza una aproximación a la derivada temporal en la dirección contraria a la corriente, así,

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} + u \frac{c_j^n - c_{j-1}^n}{\Delta x} = K_x \frac{c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n}{\Delta x^2} \quad (5)$$

Este esquema elimina la restricción impuesta por el número de Peclet, pero introduce una gran dispersión numérica debida al orden de aproximación del esquema. Haciendo un análisis de la consistencia del anterior esquema se encuentra que no es consistente con la ecuación de transporte⁸, sino con la siguiente ecuación

⁶ Un análisis detallado de esta restricción se puede ver en Leonard (15), Abbott (1) pag 140, Fletcher (7) pag 300, ó Gresho and Lee (8). El trabajo de Leonard (15), es punto de partida para entender dicha restricción y es casi una referencia obligada para entender los problemas presentes en la solución de la ecuación de transporte.

⁷ En inglés "upsteam differencing" o "upwind sheme"

⁸ Para mayores detalles, véase Abbott (1) pag 145-146 o Leonard (15)

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = (K_{num} + K_x) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (6)$$

donde K_{num} representa una difusividad numérica no necesariamente despreciable y dada por $K_{num} = \frac{u\Delta x}{2} \left(1 - \frac{u\Delta t}{\Delta x}\right)$.

Por lo tanto es necesario introducir esta “difusividad numérica o artificial” para obtener una solución consistente⁹, lo cual es difícil de lograr pues por lo general la el campo de velocidad no es constante ni en el espacio ni en el tiempo¹⁰.

Para solucionar éstos problemas en la aproximación, se han ideado diversas técnicas. En una primera línea de trabajo se encuentran unas técnicas que utilizan esquemas con un grado de aproximación mayor, aproximando las derivadas de primer orden mediante series de Taylor (usando expansiones hasta de cuarto orden). En dicha línea se encuentran métodos como el de Taylor Galerkin y el método QUICKEST. En una segunda línea se encuentran las técnicas contracorriente, las cuales de acuerdo a la dirección del flujo, dirigen el esquema de aproximación; en dicha línea se pueden mencionar los esquemas Petrov-Galerkin, “en contra de la corriente” y algunos métodos de elementos finitos que modifican las funciones de peso (funciones de peso que se inclinan corriente arriba y funciones que se inclinan corriente arriba y que además son ortogonales).

Otros métodos parten la ecuación de transporte en dos, de tal forma, que resuelven la parte convectiva y la parte difusiva de forma separada y utilizan esquemas adecuados para solucionar cada una de ellas. Otros métodos como las técnicas de mallas desplazadas, encuentran la solución para una malla gruesa y que luego se va refinando, han mostrado resultados satisfactorios en el control de dichas oscilaciones¹¹. Algunos autores, resuelven la parte advectiva de la ecuación en un sistema Lagrangiano, resolviendo el problema de las oscilaciones, pero introduciendo el problema de la selección adecuada de la malla¹². Una última técnica consiste en la aplicación de un esquema cualquiera junto con el uso de un filtro para el control de las oscilaciones, dichos filtros encuentran las oscilaciones y las “recortan”, muchos de ellos solo tienen una fundamentación experimental, son

⁹ En este sentido se utilizaron varios métodos, que introducían una “difusividad numérica” o “viscosidad artificial”. Métodos conocidos como de “Viscosidad artificial” (tanto en diferencias finitas, como sus análogos en elementos finitos). Para los de diferencias finitas véase Fletcher (7) y los de Elementos finitos, véase Kikuchi F and Ushijima T (12)

¹⁰ Véase Cunge J A, Holly F M and Verwey A (4) pag 320-333

¹¹ Esto se encuentra muy mal referenciado (solo a manera de comentario)

¹² Véase el trabajo de Thomson N.R., Sykes J.F. and Lennox W. C. 1984

poco selectivos en su filtrado y pueden llevar a que se pierda la conservación de masa¹³.

A continuación se presentarán las principales técnicas de manera esquemática, usando como ilustración la ecuación de transporte unidimensional. Para la extensión a dimensiones superiores, que en algunos casos no es tan directa, se remite el lector a las referencias que serán citadas.

3. El Método QUICKEST¹⁴

En este método, desarrollado originalmente por Leonard (ver Leonard (15)) y posteriormente esténdido a dos y tres dimensiones (vea Ekebjærg L and Justen P. (5) y Vested H J, Justesen P. and Ekebjærg L (21)). Se aproximan las derivadas haciendo uso de expansiones en series de Taylor de la siguiente forma:

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} + O(\Delta t^4) \quad (7)$$

$$u \frac{c_{j+1}^n - c_{j-1}^n}{2\Delta x} = u \frac{\partial c}{\partial x} + u \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} + O(\Delta x^4) \quad (8)$$

$$K_x \frac{c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n}{\Delta x^2} = K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + O(\Delta x^4) \quad (9)$$

Utilizando las ecuaciones (7) a (9), la ecuación de transporte se puede aproximar de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= -u \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \\ \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} - \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} + O(\Delta t^4) &= -u \frac{c_{j+1}^n - c_{j-1}^n}{2\Delta x} + u \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} + K_x \frac{c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (10)$$

Derivando la ecuación de transporte con respecto al tiempo se obtiene

¹³ Esto ha hecho que Gresho and Lee (8) los critiquen duramente, vasta mirar el sugerente título de su artículo "Don't suppress the wiggles – they're telling you something"

¹⁴ Para el desarrollo completo de este método en 1 D vease Leonard (15), Abbott y Brasco (1) pag 146-151

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} &= -u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_x u \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} \\ \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} &= -u^3 \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} + K_x u^2 \frac{\partial^4 c}{\partial x^4}\end{aligned}\tag{11}$$

Utilizando solamente derivadas espaciales hasta de tercer grado, se obtiene:

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \left(-u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_x u \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} \right) - \frac{\Delta t^2}{6} \left(-u^3 \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} \right) = -u \frac{c_{j+1}^n - c_{j-1}^n}{2\Delta x} + u \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} + K_x \frac{c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n}{\Delta x^2}\tag{12}$$

Aproximando las derivadas y reordenando, el esquema se reduce, finalmente a:

$$\begin{aligned}c_j^{n+1} &= c_j^n + \left[\mathbf{g}(1 - Cr) - \frac{Cr}{6}(Cr^2 - 3Cr + 2) \right] c_{j+1}^n - \left[\mathbf{g}(2 - 3Cr) - \frac{Cr}{2}(Cr^2 - 2Cr - 1) \right] c_j^n \\ &+ \left[\mathbf{g}(1 - 3Cr) - \frac{Cr}{2}(Cr^2 - Cr - 2) \right] c_{j-1}^n + \left[\mathbf{g}(Cr) - \frac{Cr}{6}(Cr^2 - 1) \right] c_{j-2}^n\end{aligned}\tag{13}$$

donde $Cr = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$ es el número de Courant y refleja la distancia transportada por advección durante un paso de tiempo con respecto al espaciamiento de la malla y $\mathbf{g} = \frac{K_x \Delta t}{\Delta x^2}$, es el número adimensional del coeficiente de difusión.

4. El Método de Taylor-Galerkin¹⁵

El método de Taylor-Galerkin (véase Neylon K.J. (17)) ha sido aplicado tanto para la ecuación de convección-difusión como para la de advección pura. El método, primero discretiza la derivada temporal haciendo uso de expansiones en series de Taylor, buscando un orden de aproximación de tercer orden, esto es

$$c_j^n = c_j^{n+1} - \Delta t \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} + O(\Delta t^3)\tag{14}$$

¹⁵ Para mayores detalles de este método véase KJ Neylon (17)

luego, se reemplazan las derivadas temporales, con derivadas espaciales haciendo uso de las siguientes relaciones que se derivan de la ecuación de convección difusión:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) = \left(-u \frac{\partial}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) \quad (16)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 2uK_x \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} + K_x^2 \frac{\partial^4 c}{\partial x^4}$$

Si se reemplazan estas derivadas temporales, se obtendrían derivadas espaciales de tercer y cuarto orden, las que impiden el uso de funciones de interpolación lineales. Para evitar esto, se usa un orden de aproximación menor. Usando

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \approx \frac{1}{\Delta t} \left\{ \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)^{n+1} - \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)^n \right\} \quad (17)$$

y reemplazando en la expansión de Taylor, se obtiene la siguiente aproximación para la derivada temporal

$$c_j^n = c_j^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \left\{ \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)^{n+1} + \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)^n \right\} + O(\Delta t^3) \quad (18)$$

Usando la ecuación de convección difusión para reemplazar las derivadas temporales, se obtiene

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left\{ \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)^{n+1} + \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right)^n \right\} + O(\Delta t^3) \quad (19)$$

Ahora, se divide el dominio de cálculo en pequeños elementos (N_{nodos}) y se usa la siguiente aproximación para la concentración,

$$c = \sum_{j=1}^{N_{nodos}} N_j(x) C_j(t) \quad (20)$$

donde N_j son las funciones de interpolación y C_j es la aproximación nodal a la variable c . Minimizando el residual y usando las funciones de peso igual a las funciones de interpolación, como es usual en el método de Galerkin, se obtiene:

$$R = \frac{1}{\Delta t} \sum_{j=1}^{N_{\text{nodos}}} (C_j(t + \Delta t)N_j - C_j(t)N_j) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_{\text{nodos}}} \left\{ C_j(t + \Delta t) \left(-u \frac{\partial N_j}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} \right) + C_j(t) \left(-u \frac{\partial N_j}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} \right) \right\} \quad (21)$$

y, finalmente, haciendo el residual igual a cero se llega a

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{j=1}^{N_{\text{nodos}}} (C_j(t + \Delta t) - C_j(t)) \int_{\Omega} N_i N_j d\Omega = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_{\text{nodos}}} \left\{ C_j(t + \Delta t) + C_j(t) \right\} \left(-u \int_{\Omega} N_i \frac{\partial N_j}{\partial x} + K_x \int_{\Omega} N_i \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} \right) \quad (22)$$

5. Técnicas contracorriente, Método de Petrov-Galerkin¹⁶

Entre los métodos que modifican las funciones de peso, el que más se destaca es el método de Petrov-Galerkin. En la ecuación de transporte la información viaja en dirección a la velocidad, por lo que se puede modificar el esquema clásico de solución de Galerkin para introducir este hecho. La primera modificación que se hace al método tradicional de Galerkin es hacer que las funciones de peso e interpolación sean diferentes. Esta es la base del método conocido como Petrov-Galerkin. Si se conocen soluciones analíticas de la ecuación en estudio, se pueden imponer condiciones adicionales a las funciones de peso modificadas en el método de Petrov-Galerkin, de tal forma que la solución en los nodos corresponda a los valores de la solución analítica.

Son múltiples las modificaciones a las funciones de peso y con ello son múltiples las metodologías Petrov-Galerkin propuestas por diferentes autores. A continuación se presentarán algunas que son representativas.

Si se asume que $W_i = N_i + \alpha \tilde{W}_i$, donde N_i son las funciones de interpolación lagrangianas y \tilde{W}_i es de tal forma que $\int_{\Omega} \tilde{W}_i dx = \pm \frac{\Delta x}{2}$ (el signo de la anterior

¹⁶ Véase Perella (18), Hughes and Brooks (11)

ecuación se escoge de acuerdo a la dirección de la velocidad). Se escoge además que $a\tilde{W}_i = a \frac{\Delta x}{2} \frac{dN_i}{dx}$ Con α como $|a| = a_{opt} = Coth(|Pe|) - \frac{1}{|Pe|}$ (con el que se obtienen valores nodales exactos). Además, se encuentra que para $|a| > a_{crit} = 1 - \frac{1}{|Pe|}$ no se presentan oscilaciones¹⁷.

6. Soluciones Analíticas¹⁸

Aunque son de gran complejidad y se limitan a geometrías muy simples, las soluciones analíticas son de utilidad pues permiten validar los modelos numéricos. Para el caso unidimensional se poseen soluciones analíticas para la ecuación

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= -u \frac{\partial c}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \\ c(x,0) &= 0 \\ c(0,t) &= C_0 \\ \frac{\partial c(\infty,t)}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \tag{23}$$

Cuya solución es la siguiente

$$c(x,t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x-ut}{\sqrt{4K_x t}}\right) + \frac{C_0}{2} \exp\left(\frac{ux}{K_x}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4K_x t}}\right) \tag{24}$$

7. Aplicaciones:

Se presentarán los resultados del método QUICKEST aplicados a un canal recto (Figura 1) y al caso del flujo alrededor de un dique (Figura 2). Para el canal recto se analizará el caso de la dispersión de un contaminante, con las siguientes condiciones: un campo de velocidades constantes con $u=0.432469$ m/s, el coeficiente de difusión $K_x=0.005$ m²/s y una concentración inicial de $c_0=1$ mg/l en todos los nodos a la entrada del canal y una concentración $c_0=0$ en los demás nodos, el dominio de cálculo se discretiza mediante la malla indicada en la Figura 1, con una separación de 0.24 m en la dirección x y de 0.25 m en la dirección y .

¹⁷ Para mayores detalles véase Zienkiewicz (23), capítulo 12

¹⁸ Para mayores detalles de la solución analítica ver Barry D. A. Sposito G. (2), Basha H. A. and El-Habel F. S. (3), Lassey R. K. (14), C. Zoppou and J. H. Knight (22) y para extensiones a dos y tres dimensiones ver Ellsworth T. R. y G. L. Butters (6).

Para estas condiciones, el número de Peclet es 20.76. Se toma un paso temporal de 0.1 seg. La Figura 3 presenta la comparación de los resultados del modelo a lo largo del eje central del canal con la solución analítica unidimensional en diferentes instantes de tiempo. Se puede observar la dificultad que presenta el esquema para representar el salto brusco en la función, pero se puede también observar como dicha dificultad es superada por el esquema, introduciendo errores relativamente pequeños.

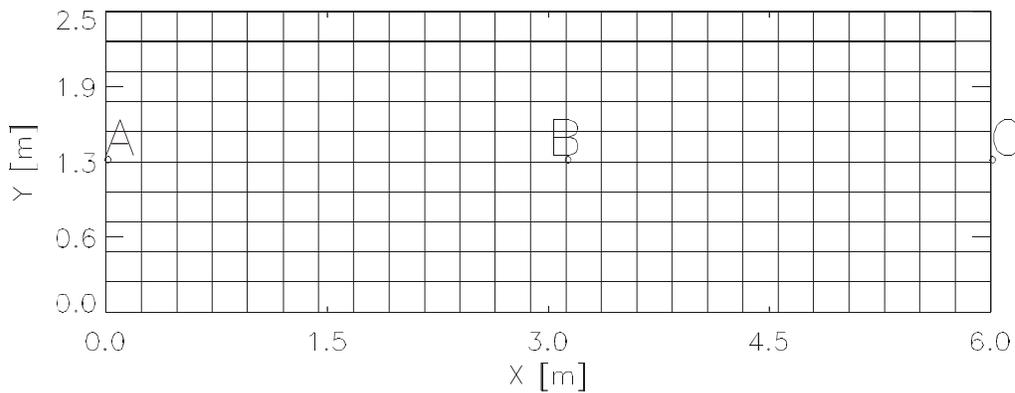


Figura 1. Malla de calculo - Canal Recto

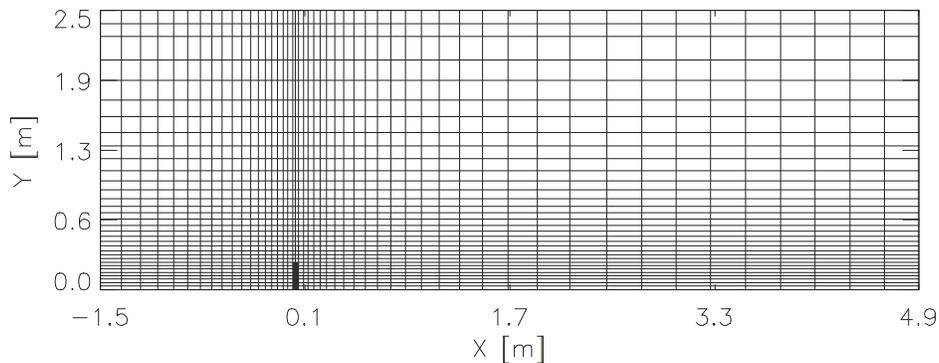


Figura 2 Malla de Cálculo – Dique.

La Figura 2 presenta el caso de la simulación alrededor de un dique. Las condiciones para la simulación son las siguientes: la Figura 4 presenta el campo de velocidades asumido, tomado como constante, correspondiente a una simulación de un modelo hidrodinámico¹⁹. Los coeficientes de difusión se asumen iguales en las tres direcciones y constantes y con un valor de $0.0001\text{m}^2/\text{seg}$ y nuevamente se introduce un contaminante a la entrada del canal como en el caso anterior. Las Figuras 5 y 6 presentan algunos resultados de la simulación.

¹⁹ Para mayores detalles vea Gómez, A. 1998, Montoya, L. J. 2000

Comparación con la solución analítica en distintos tiempos

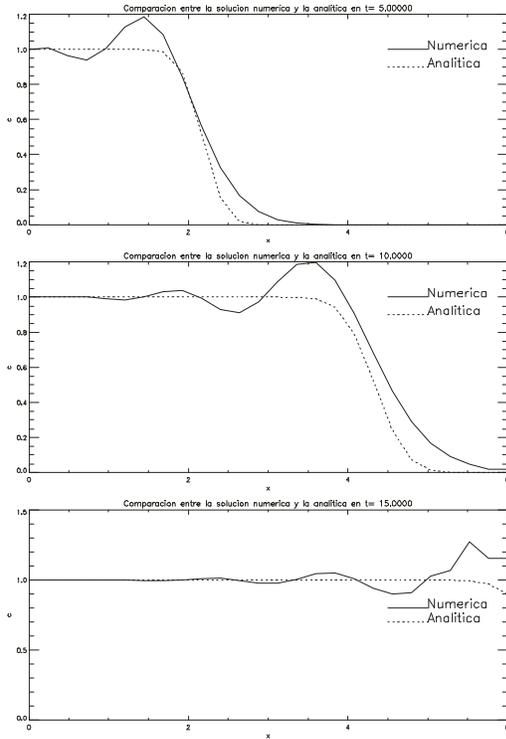
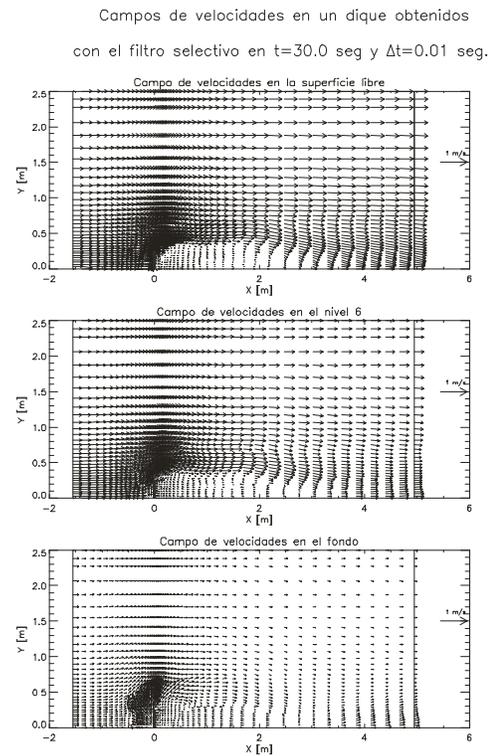


Figura 3 Simulación del transporte de un contaminante en un canal recto con velocidades constantes y comparación con la solución analítica.

Figura 4. Campo de velocidades alrededor de un dique



Valores de las concentraciones en diferentes niveles en $t= 2.00000\text{seg}$

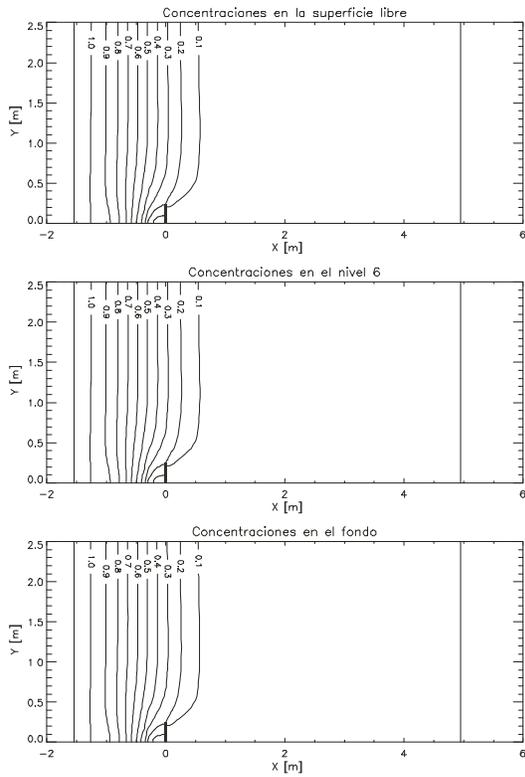
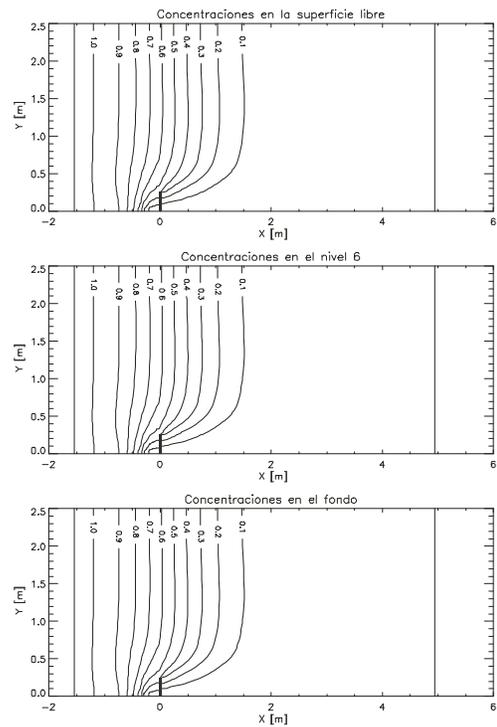


Figura 5. Concentraciones en diferentes niveles del flujo después de 2 seg de simulación.

Figura 6. Concentraciones en diferentes niveles del flujo después de 4 seg de simulación.

Valores de las concentraciones en diferentes niveles en $t= 4.00000\text{seg}$



Valores de las concentraciones en diferentes niveles en $t= 6.00000\text{seg}$

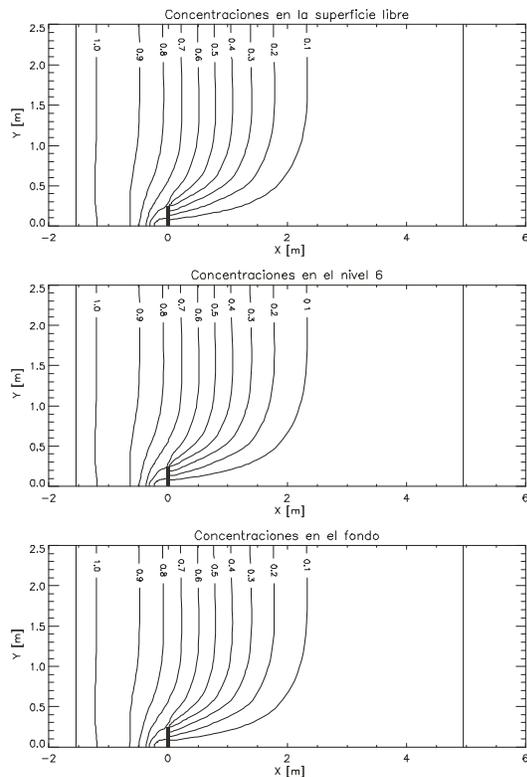


Figura 7. Concentraciones en diferentes niveles del flujo después de 6 seg de simulación.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Abbott M. B., Basco V. R. "Computational Fluid Dynamics an introduction for engineers", Longman Scientific & Technical ,1989
- [2] Barry. D. A. and Sposito G. "Analytical solution of a convection-dispersion model with time-dependent transport coefficients", Water Resources Research, Vol 25, No 12, Dic 1989, pp 2407-2416.
- [3] Basha H. A. and El-Habel F. S. " Analytical solution of the one-dimensional time-dependent Transport equation", Water Resources Research, Vol. 29, No 9, Sep 1993, pp 3209-3214
- [4] Cunge J A, Holly F M and Verwey A. " Practical Aspects of computational river hydraulics" Pitman Publishing, 1980
- [5] Ekebjærg L, Justen P. " An explicit scheme for advectio-diffusion modelling in two dimensions" Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1991, 88, 287-297
- [6] Ellswort T. R. and Butters G. L. " Three-Dimensional Analytical Solution to the Advection-Dispersion Equation in Arbitrary cartesian Coordinates", Water Resources Research, Vol 29, No 9, Sep 1993, pp 3215-3225
- [7] Fletcher C. A.J. "Computational Techniques for Fluid Dynamics 1" Springer-Verlang, Second Edittion, 1990

- [8] Gresho P. M., Lee R L. "Don't suppress the wiggles – they're telling you something", *Computers and fluids*, Vol 9, pp 223-253
- [9] Hirsch C. "Numerical Computation of internal and external flows" Vol 1, John Wiley & Sons, 1988
- [10] Hirsch C. "Numerical Computation of internal and external flows" Vol 2, John Wiley & Sons, 1990
- [11] Hughes T. J. R. and Brooks A. "A theoretical framework for Petrov-Galerkin methods with discontinuous weighting functions: Application to the streamline-upwind procedure" en *Finite Elements in Fluids*, Volumen 4, John Wiley & Sons, 1982
- [12] Kikuchi F., Ushijima T. "Theoretical analysis of some finite element methods for convective diffusion equations" en *Finite elements in fluids*, Volume 4, John Wiley & Sons, 1982, pp 67-87
- [13] Lapidus L., Pinder G. "Numerical solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering", John Wiley & Sons, 1982
- [14] Lassey K. R. "Unidimensional solute transport incorporating equilibrium and rate-limited isotherms with first-order loss. 1. Model Conceptualizations and Analytical solutions", *Water Resources research*, Vol 24, No 3, Marzo 1988, pp 343-350
- [15] Leonard B. P. "A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation", *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 19, 1979, 58-98
- [16] Morton K.W., Sobey I.J. "Discretisation of a convection-diffusion equation", Report Number 94/4, Numerical Analysis Group, Oxford University Computing Laboratory, 1991, 22 p.
- [17] Neylon K. J. "Application of the Taylor-Galerkin Method to transport problems in subsurface Hydrology", Numerical Analysis Report 5/93, en www.rdg.ac.uk/AcaDepts/sm/wsm1/research/na-reports-1993.html
- [18] Perella A. J. "A class of Petrov-Galerkin Finite Elements Methods for the numerical solution of the stationary Convection-Diffusion equation", PhD Thesis of Department of mathematical sciences of University of Durham, England, Septiembre de 1996.
- [19] Strikwerda J. "Finite difference Schemes and Partial Differential Equations"
- [20] Thomson N. R., Sykes J. F., and Lennox W. C. "A Lagrangian porous media mass transport model", *Water resources research*, vol 20, No 3, Marzo 1984, pp 391-399
- [21] Vested H J, Justesen P. and Ekebjærg L "Advection-dispersion modelling in three dimensions" *Appl. Math. Modelling*, Oct 1992, Vol. 16, 506-519
- [22] Zopou C. and Knight J. H. "Analytical solutions for advection and advection-diffusion equations with spatially variable coefficients", *Journal of Hydraulic engineering*, Vol 126, No 2, Feb 1997, pp 144-147
- [23] Zienkiewicz, O.J., "The Finite Element Method", McGraw Hill, 1982