

## Esquemas numéricos bidimensionales de alto orden para resolución numérica del sistema de aguas someras con transporte inerte de un contaminante

M.J. CASTRO DÍAZ<sup>1</sup>, E.D. FERNÁNDEZ NIETO<sup>2</sup>, A.M. FERREIRO FERREIRO<sup>3</sup>, J.A. GARCÍA RODRÍGUEZ<sup>3</sup>, C. PARÉS MADROÑAL<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Dpto. de Análisis Matemático, Univ. de Málaga. E-mail: castro@anamat.cie.uma.es.

<sup>2</sup> Dpto. de Matemática Aplicada I, Univ. de Sevilla. Sevilla. E-mail: edofer@us.es.

<sup>3</sup> Dpto. de Matemáticas, E.P.S., Univ. de A Coruña. E-mail: jagrodriguez@udc.es.

**Palabras clave:** Reconstrucciones de estado, esquema bien-equilibrado, método de volúmenes finitos, transporte de contaminantes, campos linealmente degenerados

### Resumen

En este trabajo se aplican esquemas numéricos bidimensionales de *alto orden* (ver [5]) empleando el método de *volúmenes finitos*, para la modelización del *transporte inerte* de una sustancia en un fluido, como por ejemplo, el vertido de contaminantes.

El modelo matemático consiste en un sistema acoplado de aguas someras y una ecuación que modela de transporte inerte de una sustancia. Dicho acoplamiento introduce un nuevo campo linealmente degenerado en el sistema. Además, si el vertido ocupa sólo una porción de fluido, la frontera del mismo se propaga como una discontinuidad de contacto (ver [11]). En consecuencia, para aproximar con precisión la evolución de un vertido es necesario desarrollar métodos numéricos que capturen adecuadamente las discontinuidades de contacto.

En este trabajo presentamos un método de volúmenes finitos de alto orden bidimensional basado en técnicas de reconstrucciones de estados. Concretamente hemos empleado una técnica de tipo MUSCL discontinua que garantiza orden 2. Finalmente, se presentan algunos tests numéricos.

## 1. Ecuaciones de aguas poco profundas con transporte de contaminantes

El modelo matemático que modela el transporte de contaminantes resulta de acoplar las ecuaciones de aguas someras y una ecuación de transporte:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial q_x}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{q_x^2}{h} + \frac{1}{2}gh^2 \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{q_x q_y}{h} \right) = gh \frac{\partial H}{\partial x}, \\ \frac{\partial q_y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{q_x q_y}{h} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{q_y^2}{h} + \frac{1}{2}gh^2 \right) = gh \frac{\partial H}{\partial y}, \\ \frac{\partial hC}{\partial t} + \frac{\partial q_x C}{\partial x} + \frac{\partial q_y C}{\partial y} = \sigma C_\sigma, \end{array} \right. \quad (1)$$

donde las incógnicas del problema son la altura de la columna del agua  $h(\mathbf{x}, t)$ , el caudal  $q(\mathbf{x}, t) = (q_x(\mathbf{x}, t), q_y(\mathbf{x}, t))$  y la concentración de contaminante  $C(\mathbf{x}, t)$ , donde  $H$  es la batimetría del fondo medida desde un nivel de referencia,  $\sigma(\mathbf{x}, t)$  son las fuentes emisoras (medida en  $m^2/seg$ ) y  $C_\sigma$  la concentración de sustancia en dichas fuentes.

El sistema (1) puede escribirse como un sistema 2D no conservativo,

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \mathcal{A}_1(W) \frac{\partial W}{\partial x} + \mathcal{A}_2(W) \frac{\partial W}{\partial y} = 0, \quad (2)$$

donde  $W(\mathbf{x}, t) : \mathcal{O} \times (0, T) \rightarrow \Omega \subset \mathbb{R}^N$ ,  $\mathcal{O}$  es un dominio acotado de  $\mathbb{R}^2$ ,  $\Omega$  es un conjunto convexo de  $\mathbb{R}^N$ ,  $\mathcal{A}_i : \Omega \rightarrow M_{N \times N}$  funciones regulares y localmente acotadas.

Dado un vector unitario  $\boldsymbol{\eta} = (\eta_x, \eta_y) \in \mathbb{R}^2$  se define:  $\mathcal{A}(W, \boldsymbol{\eta}) = \mathcal{A}_x(W)\eta_x + \mathcal{A}_2(W)\eta_y$ . Suponemos que el sistema (2) es hiperbólico tal que, para todo  $W \in \Omega \subset \mathbb{R}^N$  y  $\forall \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^2$ , la matriz  $\mathcal{A}(W, \boldsymbol{\eta})$  tiene  $N$  autovalores reales:  $\lambda_1(W, \boldsymbol{\eta}) \leq \dots \leq \lambda_N(W, \boldsymbol{\eta})$ , siendo  $R_j(W, \boldsymbol{\eta})$ ,  $j = 1, \dots, N$  los autovectores asociados. En consecuencia  $\mathcal{A}(W, \boldsymbol{\eta})$  es diagonalizable:  $\mathcal{A}(W, \boldsymbol{\eta}) = \mathcal{K}(W, \boldsymbol{\eta})\mathcal{L}(W, \boldsymbol{\eta})\mathcal{K}^{-1}(W, \boldsymbol{\eta})$ , donde  $\mathcal{L}(W, \boldsymbol{\eta})$  es la matriz diagonal cuyos coeficientes son los autovalores de  $\mathcal{A}(W, \boldsymbol{\eta})$  y  $\mathcal{K}(W, \boldsymbol{\eta})$  es la matriz cuyas columnas son los vectores  $R_j(W, \boldsymbol{\eta})$ ,  $j = 1, \dots, N$ .

En este caso los autovalores del sistema son  $\lambda_1 = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\eta} - \sqrt{gh}\|\boldsymbol{\eta}\|$ ,  $\lambda_2 = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\eta}$ ,  $\lambda_3 = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\eta}$ ,  $\lambda_4 = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\eta} + \sqrt{gh}\|\boldsymbol{\eta}\|$ . Nótese que el sistema acoplado (1) posee dos campos linealmente degenerados.

## 2. Métodos de volúmenes finitos de alto orden basados en reconstrucciones de estado

Para discretizar el sistema (2), descomponemos el dominio computacional en celdas o volúmenes de control,  $V_i \subset \mathbb{R}^2$ , que supondremos polígonos cerrados. Se usa la siguiente notación: dado un volumen finito  $V_i$ ,  $\mathcal{N}_i$  es el conjunto de índices  $j$  tales que  $V_j$  es el vecino de  $V_i$ ,  $E_{ij}$  es la arista común de dos celdas vecinas  $V_i$  y  $V_j$ , y  $|E_{ij}|$  su longitud,  $\boldsymbol{\eta}_{ij} = (\eta_{ij,x}, \eta_{ij,y})$  es el vector unitario normal a la arista  $E_{ij}$  y que apunta hacia la celda  $V_j$  (ver Figura 1).

La discretización del sistema (2) se lleva a cabo mediante un esquema de volúmenes finitos (ver [6]). Si  $W(\mathbf{x}, t)$  es la solución exacta denotaremos por  $\overline{W}_i^n$  el promedio de la solución en  $t^n$ ,

$$\overline{W}_i^n = \frac{1}{|V_i|} \int_{V_i} W(\mathbf{x}, t^n) d\mathbf{x},$$

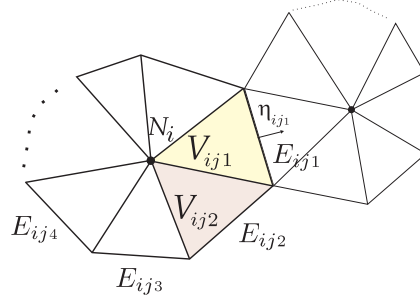


Figura 1: Volumen finito general.

$W_i^n$  representará la aproximación de  $\overline{W}_i^n$  en  $t^n$ , es decir,  $W_i^n \simeq \overline{W}_i^n$ .

Dado un volumen  $V_i$  denotaremos por  $P_i$  el operador de reconstrucción sobre el volumen. En concreto,  $P_i$  dependerá de una familia de valores  $\{W_j\}_{j \in \mathcal{B}_i}$ , donde  $\mathcal{B}_i$  es un conjunto de índices de volúmenes de control vecinos o próximos a  $V_i$  (ver [5]). Cuando los valores de la sucesión dependan del tiempo, denotaremos al operador de reconstrucción por  $P_i^t$ .

Dado el vector  $\eta_{ij}$  que apunta al volumen  $V_j$ , denotaremos por  $W_{ij}^-(t, \mathbf{s})$  y  $W_{ij}^+(t, \mathbf{s})$   $\forall \mathbf{s} \in E_{ij}$ , al límite de  $P_i^t$  ( $P_j^t$  respectivamente) cuando  $\mathbf{x}$  tiende a  $\mathbf{s}$  a través de  $V_i$  ( $V_j$  respectivamente):

$$\lim_{\substack{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{s} \\ \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\eta}_{ij} < k_{ij}}} P_i^t(\mathbf{x}) = W_{ij}^-(t, \mathbf{s}), \quad \lim_{\substack{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{s} \\ \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\eta}_{ij} > k_{ij}}} P_j^t(\mathbf{x}) = W_{ij}^+(t, \mathbf{s}). \quad (3)$$

## 2.1. Método 2D de volúmenes finitos de alto orden

Consideramos el siguiente esquema numérico de alto orden, independiente del operador de reconstrucción empleado (ver detalles en [5]):

$$W_i'(t) = -\frac{1}{|V_i|} \left[ \sum_{j \in \mathcal{N}_i} |E_{ij}| \sum_{l=1}^{n(\bar{r})} w_l \mathcal{A}_{ij,l}^-(W_{ij,l}^+(t), W_{ij,l}^-(t), \eta_{ij}) (W_{ij,l}^+(t) - W_{ij,l}^-(t)) + \int_{V_i} \left( \mathcal{A}_1(P_i^t(\mathbf{x})) \frac{\partial P_i^t}{\partial x}(\mathbf{x}) + \mathcal{A}_2(P_i^t(\mathbf{x})) \frac{\partial P_i^t}{\partial y}(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x} \right], \quad (4)$$

donde  $w_l$ ,  $l = 1, \dots, n(\bar{r})$ , denota los pesos de una fórmula de cuadratura asociada a la integral 1D sobre la arista  $E_{ij}$ . Si mediante  $x_l$  se denotan los puntos sobre la arista  $E_{ij}$  de la fórmula de cuadratura, entonces  $W_{ij,l}^\pm(t) = W_{ij}^\pm(t, \mathbf{x}_l)$ . En la práctica esta fórmula se elige en función del orden del operador de reconstrucción de estado: si por  $\bar{r}$  denotamos el orden de la fórmula de cuadratura, entonces  $\bar{r} > p$ , siendo  $p$  el orden del operador de reconstrucción en las aristas de los volúmenes finitos.

Mediante  $\mathcal{A}_{ij}$  se denota la matriz de Roe asociada al problema 1D no conservativo proyectado sobre la arista  $E_{ij}$ . El producto no conservativo  $\mathcal{A}(W)W_x$  del problema 1D proyectado hace difícil la definición de solución débil para esta clase de sistemas. En la teoría desarrollada por Dal Maso, LeFloch y Murat (ver [4]) se introduce una definición de

productos no conservativos como medidas de Borel, basada en la selección de una familia de caminos en el espacio de fases. También debe elegirse en este caso una familia de caminos para definir la matriz de Roe (ver [8]). En este trabajo hemos considerado un operador de reconstrucción de estado de orden dos para mallas no estructuradas, propuesto en [5].

## 2.2. Reconstrucciones de orden dos sobre mallas no estructuradas bidimensionales

Por simplicidad supongamos que tenemos volúmenes finitos de tipo arista (ver [6]). Un volumen de tipo arista lo podemos escribir como  $V_i = T_{i,1} \cup T_{i,2} \cup T_{i,3} \cup T_{i,4}$ , donde  $T_{i,k}$ ,  $k = 1, 2, 3, 4$ , son triángulos (ver Figura 2) definidos por  $\mathbf{C}_i$  (punto medio de la arista sobre la que se construye el volumen finito de tipo arista) y las cuatro aristas del volumen de control. Sean  $b_{i,k}$ ,  $k = 1, 2, 3, 4$ , los baricentros de estos triángulos, respectivamente.

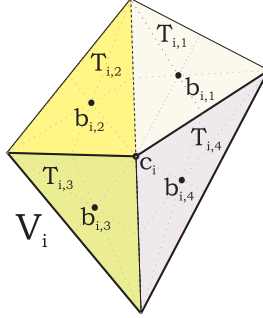


Figura 2: Triángulos que forman el volumen finito de tipo arista  $V_i$ .

Se considera el siguiente operador de reconstrucción  $P_i(\mathbf{x})$  de orden dos (ver [5]), definido como

$$P_i(\mathbf{x}) = \overline{W}_i + p(\mathbf{x}), \quad \text{con} \quad p(\mathbf{x}) = \nabla W_i(\mathbf{x} - N_i). \quad (5)$$

donde  $\nabla W_i$  es una aproximación al menos de primer orden del gradiente de la solución  $W(\mathbf{x})$ , y  $N_i$  al punto definido por:  $N_i = \sum_{k=1}^4 \frac{|T_{i,k}|}{|V_i|} b_{i,k}$ .

Si por  $\nabla W_{|T_j}$  denotamos la estimación del gradiente sobre  $T_j$ , se considera la siguiente aproximación, de segundo orden, del gradiente de la solución en  $N_i$  (ver [5]),

$$\nabla W_i \approx \frac{\sum_{j=1}^4 |T_j| \nabla W_{|T_j}}{\sum_{j=1}^4 |T_j|}. \quad (6)$$

Es frecuente que en la aproximación numérica de sistemas hiperbólicos como los considerados en este trabajo, la solución presente discontinuidades. A fin de obtener un operador de reconstrucción que aproxime con orden dos la solución en zonas regulares y que al

mismo tiempo capture las regiones donde  $W(\mathbf{x})$  sea discontinua, es necesario modificar el operador de reconstrucción (5), usando para ello una función limitadora de pendiente.

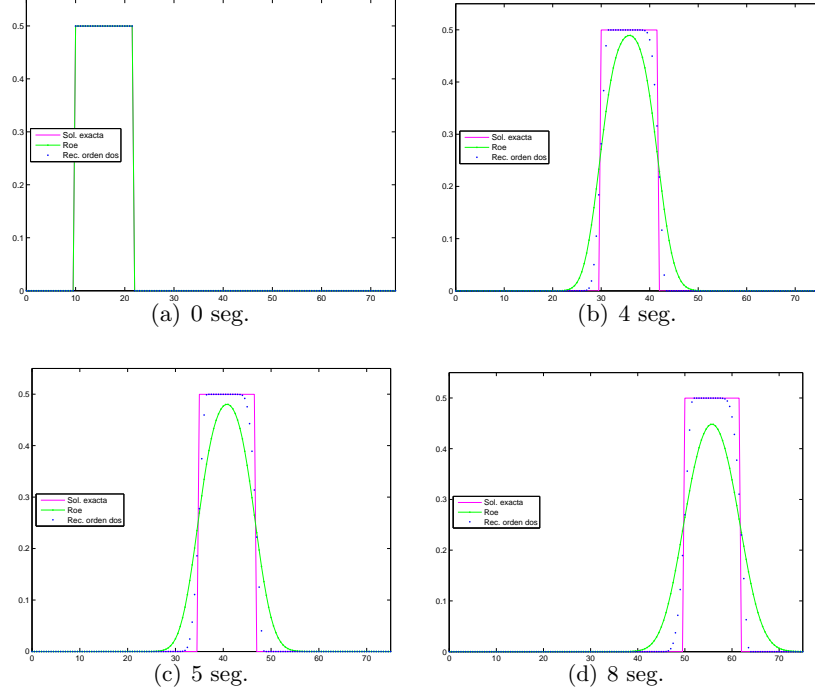


Figura 3: Evolución de la concentración de contaminante en diferentes instantes. Sección longitudinal central.

### 3. Experimentos numéricos

#### 3.1. Transporte de contaminante en un canal rectangular con fondo plano

Este test bidimensional estudia la evolución de una mancha de contaminantes de forma circular que se arrastra con velocidad constante en un canal rectangular de dimensiones  $75 m \times 30 m$ . Las condiciones iniciales son:

$$h(x, y, 0) = 2, \quad q_x(x, y, 0) = 10, \quad q_y(x, y, 0) = 0;$$

y la concentración inicial de contaminante viene dada por,

$$C(x, y, 0) = \begin{cases} 0,5 & \text{si } (x - 15)^2 + (y - 15)^2 \leq 36, \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Suponemos además que no existen fuentes emisoras.

La condición  $CFL$  es igual a  $0,8$ . Empleamos una malla estructurada de 9000 volúmenes finitos. Se impone el caudal  $\mathbf{q} = (10, 0)$ . Como condiciones de contorno se imponen condiciones libres en las fronteras correspondientes a la recta  $x = 0$  y  $x = 75$ . En las paredes

laterales se impone la condición de deslizamiento  $\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\eta} = 0$ . Con estos datos se deja evolucionar el experimento hasta  $t = 10$  segundos.

La solución exacta viene dada por un círculo que se desplaza a velocidad constante en la dirección del eje  $X$ ,  $v_x = \frac{q_x}{h} = 5 \text{ m/s}$ . En la Figura 3 se presenta una comparativa en la sección longitudinal central entre la solución exacta, la solución aproximada empleando un método de orden 1 (Roe) y la solución aproximada mediante el esquema de la sección 2.2. Se aprecia como con el esquema de orden 2 se consigue mantener la concentración inicial 0,5 y se preserva mejor la frontera que delimita el contaminante. En la Figura 4 se presenta una comparativa mediante curvas de nivel entre la difusión del contaminante empleando Roe y el método 2.2.

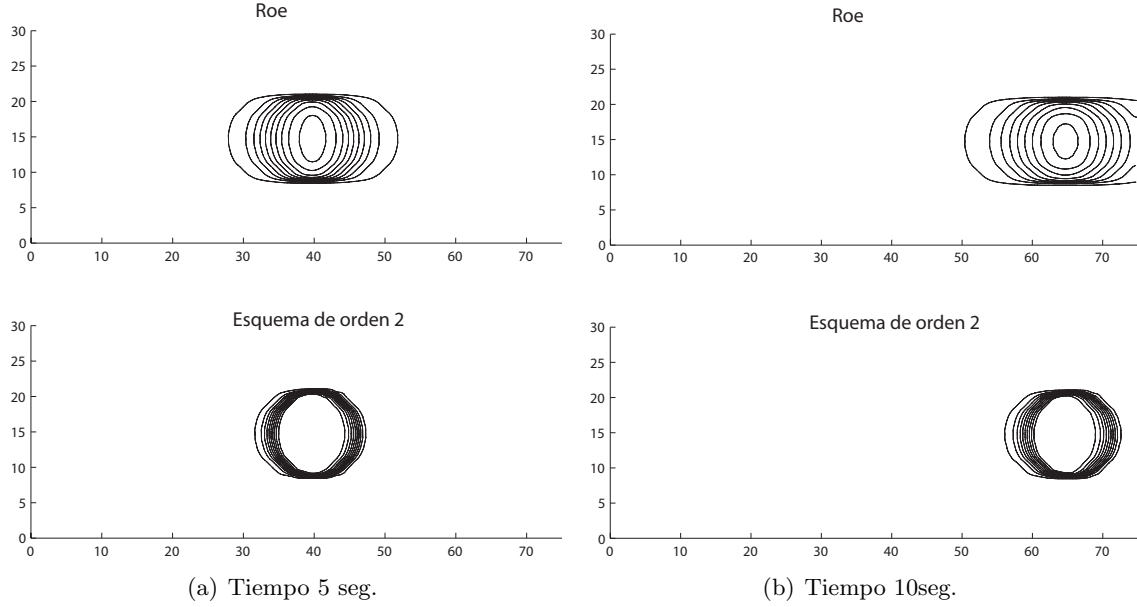


Figura 4: Evolución del contaminante (de arriba abajo Roe vs. reconstrucción de segundo orden): curvas de nivel.

### 3.2. Transporte de contaminante en un canal rectangular con fondo variable

Este test se lleva a cabo en un canal rectangular de dimensiones  $75\text{m} \times 30\text{m}$ . El fondo del canal presenta un bump que viene dado por la siguiente función:

$$B(x, y) = e^{-0,075 \cdot (x-37,5)^2}. \quad (7)$$

Se supone inicialmente un contaminante ocupando un círculo de centro  $(15, 15)$  y radio 6 m. Suponemos inicialmente un flujo constante de  $\mathbf{q} = (1, 0)$  y una superficie libre constante de 3 m. de altura en su zona más profunda. Como condiciones de contorno se impone una condición de deslizamiento  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$  en las fronteras  $y = 0$  e  $y = 30$ , y condiciones libres en  $x = 0$  y  $x = 75$ . Se considera  $CFL = 0,8$  y se deja evolucionar la simulación hasta el tiempo  $t = 120$  seg. En la Figura 5 se presentan los resultados obtenidos empleando Roe

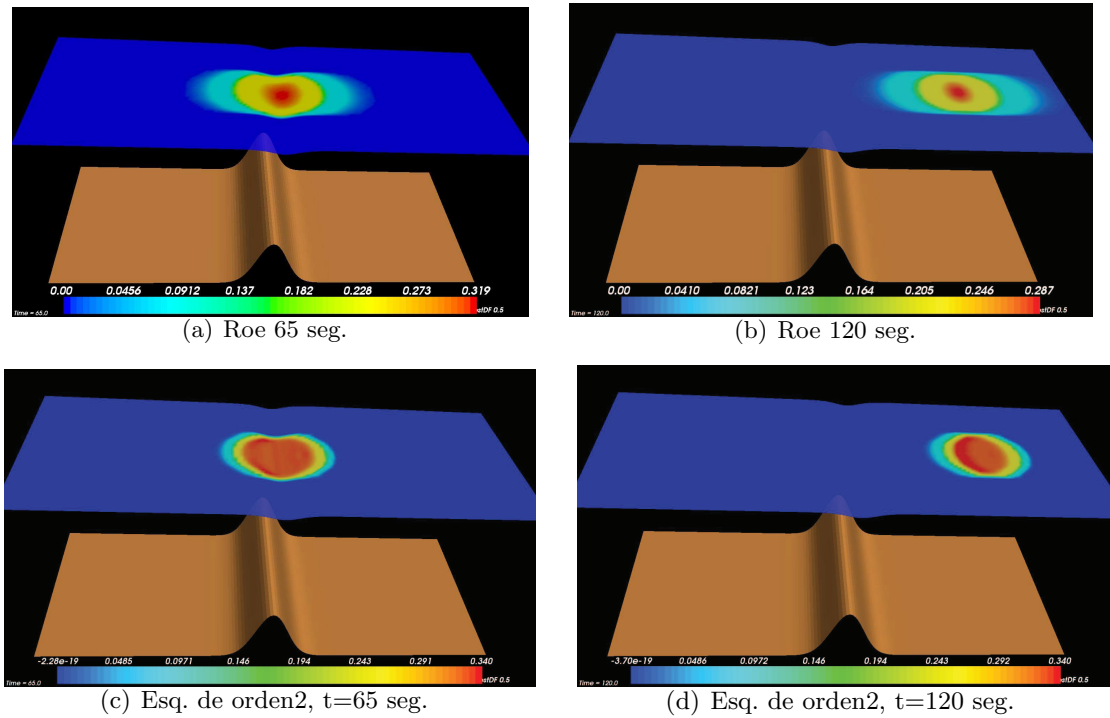


Figura 5: Evolución de la concentración de contaminante en diferentes instantes.

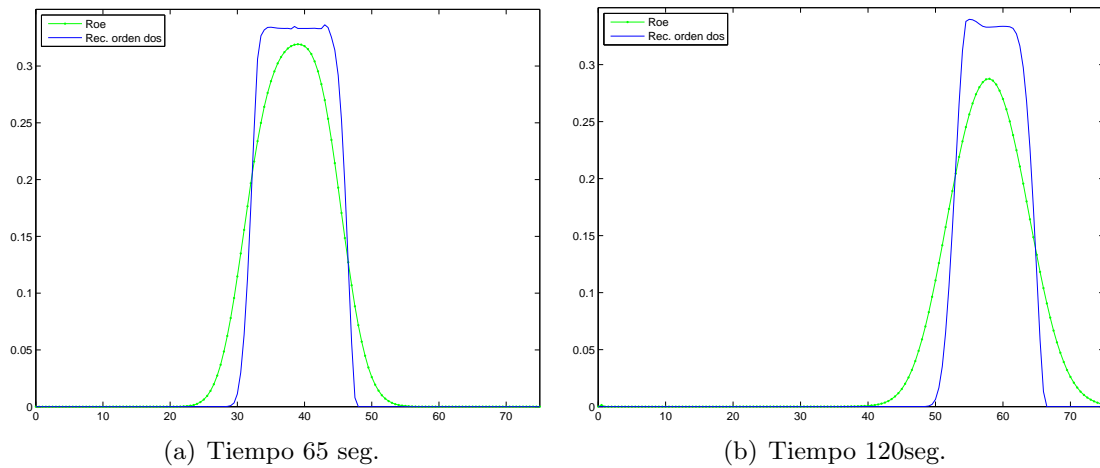


Figura 6: Evolución de la concentración de contaminante: sección longitudinal central (Roe vs. esquema de orden 2).

y el esquema 2.2. Las figuras 5-(a) y 5-(b) corresponden al resultado obtenido empleando el método de Roe. En las figuras 5-(c) y 5-(d) se muestra la evolución del contaminante empleando el esquema de reconstrucciones de orden 2.

En la Figura 6 se muestra la comparativa entre el esquema de Roe y el esquema 2.2 a lo largo de una sección longitudinal central. En línea punteada se muestra el resultado obtenido con el esquema de Roe y en línea continua se muestra el resultado empleando el

esquema de reconstrucciones de estado de orden 2.

### Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por los proyectos de investigación MTM2006-08075 y MTM2006-01275, financiados por el Gobierno Español.

### Referencias

- [1] M.O. Bristeau, B.Perthame. *Transport of pollutant in shallow water using kinetic schemes*. CEM-RACS 1999, ESAIM Proceedings 10, Soc. Math. Appl. Indust., Paris 1999, 9-21.
- [2] M.J. Castro, J.M. Gallardo, Carlos Parés. *Finite volume schemes based on weno reconstruction of states for solving nonconservative hyperbolic systems. Applications to shallow water systems*. Mathematics of Computation, 75(255), 1103–1134, 2006.
- [3] M. J. Castro, J. A. García , J. M. González, C. Parés. *A parallel 2D finite volume scheme for solving systems of balance laws with nonconservative products: application to shallow flows*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 195(19–22), 2006.
- [4] G. Dal Maso, P.G. LeFloch, F. Murat. *Definition and weak stability of nonconservative products*. J. Math. Pures Appl. 74: 483–548, 1995.
- [5] A.M. Ferreiro Ferreiro. *Desarrollo de técnicas de post-proceso de flujos hidrodinámicos, modelización de problemas de transporte de sedimentos y simulación numérica mediante técnicas de volúmenes finitos*. Tesis Doctoral. Universidad de Sevilla. 2006.
- [6] J.A. García Rodríguez. *Paralelización de esquemas de volúmenes finitos: aplicación a la resolución de sistemas de tipo aguas someras*. Tesis Doctoral. Universidad de Málaga. 2005.
- [7] A. Marquina. *Local piecewise hyperbolic reconstruction of numerical fluxes for nonlinear scalar conservation laws*. SIAM, Journal Sci. Comput. 15(4), 892-915, 1994.
- [8] C. Parés, M.J. Castro. *On the well-balance property of Roe's method for nonconservative hyperbolic systems. Applications to shallow-water systems*. ESAIM: M2AN, 38(5):821–852, 2004.
- [9] H. J. Schroll and F. Svensson. *A Bihyperbolic Finite Volume Method for Quadrilateral Meshes*. SIAM: J. Sci. Comput., 26(2):237–260, 2006.
- [10] Susana Serna. *A class of extended limiters applied to piecewise hyperbolic methods*. SIAM: J. Sci. Comput., 28(1):123–140, 2006.
- [11] E. F. Toro. *Shock-capturing methods for free-surface shallow flows*. Wiley, 2001.
- [12] Zhengfu Xu, Chi-Wang Shu. *Anti-diffusive finite difference weno methods for shallow water with transport of pollutant*. Journal of Computational Mathematics, 24(3):239–251, 2006.