

MODELIZACIÓN MATEMÁTICA Y RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE COMBUSTIÓN DE CARBÓN PULVERIZADO

Laura Saavedra Lago
Departamento de Matemática Aplicada
Universidade de Santiago de Compostela

Tesis doctoral



Diciembre 2011

Don Alfredo Bermúdez de Castro, catedrático del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidade de Santiago de Compostela, y Don José Luis Ferrín González, profesor titular del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidade de Santiago de Compostela, informan que la memoria titulada:

**MODELIZACIÓN MATEMÁTICA Y RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE
COMBUSTIÓN DE CARBÓN PULVERIZADO**

fue realizada bajo su dirección por Doña Laura Saavedra Lago, estimando que la interesada se encuentra en condiciones de optar al grado de Doctor en Ciencias Matemáticas, por lo que solicitan que sea admitida a trámite para su lectura y defensa pública.

En Santiago de Compostela, a 28 de Diciembre de 2011.

Los directores:

Prof. Dr. Alfredo Bermúdez de Castro

Prof. Dr. José Luis Ferrín González

La doctoranda: Laura Saavedra Lago

Agradecimientos

En primer lugar, quiero mostrar mi más profundo agradecimiento a los directores de este trabajo, *Alfredo Bermúdez* y *José Luis Ferrín*, por haberme guiado a lo largo de toda la investigación, desde mis primeros pasos en la matemática aplicada hasta las últimas correcciones de esta memoria. Además de vuestros conocimientos, me habéis inculcado vuestra forma de trabajar, rigurosa y entusiasta. Gracias por motivarme y apoyarme en mi dedicación a la carrera investigadora.

Me gustaría agradecer la colaboración del profesor *Amable Liñán*. Ha sido un privilegio el poder trabajar contigo. Gracias por tu incansable entusiasmo. Quisiera hacer extensible este agradecimiento a los miembros de la Sección Española del Instituto de Combustión.

Quisiera mostrar mi gratitud a *Bertrand Naud* y al grupo de Modelización y Simulación Numérica del Departamento de Energía del CIEMAT, en el que realicé mi primera estancia de investigación. Gracias por ayudarme en el desarrollo de mi código. Tu conocimiento y experiencia han sido indispensables para comprender muchos de los fenómenos que hay detrás de los procesos de combustión turbulenta.

Durante mi segunda estancia empecé a trabajar con *Rodolfo Bermejo*, profesor en el Departamento de Matemática Aplicada a la Ingeniería Industrial de la E.T.S.I. Industriales. Gracias por haberme ayudado tanto a lo largo de estos años, por estar siempre ahí resolviéndome tantas y tantas dudas y por hacer que en esta tesis apareciera el análisis numérico, tan necesario para la tranquilidad de una matemática. Quisiera hacer llegar este agradecimiento a todo los miembros del departamento. No puedo dejar de mencionar a *Jaime Carpio*, gracias por haberme hecho sentir como en casa durante mis estancias en Madrid.

Por supuesto quiero agradecer a los miembros del Departamento de Matemática Aplicada en el que he trabajado todos estos años. Ha sido todo un honor compartir con vosotros trabajo, reuniones, charlas, seminarios, congresos, comidas, cenas, pinchos de las tesis... Gracias por haber hecho que ir a trabajar no fuese tan duro. Quería mencionar de forma especial a *Fran* por haberme ayudado con la ardua tarea de la programación, a *Margarita* por haberme iniciado en la labor docente y a *Dolores* y a *Elena* por todo el apoyo que me habéis dado, siempre con vuestra mejor sonrisa.

Quisiera dedicar un agradecimiento especial a la profesora *Peregrina Quintela* por ser la primera persona que me animó a trabajar en esto de la matemática aplicada cuando realicé, bajo su supervisión, un trabajo sobre materiales energéticos. Gracias porque estoy segura de que sin ese primer trabajo nunca hubiese existido esta tesis.

Gracias a todos mis compañeros de aventuras, con los que compartí tantas horas en la

Facultad de Matemáticas: *Marta, Luz, Tere, Cris, Rafa, Rebeca, Andrés, Carlos, Bea, Rosa, Ibán* y todos los demás... Habéis conseguido que este difícil camino lo haya recorrido con la mejor compañía posible. Gracias por el permitirme tomar el café en tan excelsa compañía. Quería agradecer especialmente a *Marta* y a *Luz* por haber estado conmigo desde el primer día, por las risas, las confidencias, el apoyo brindado, en definitiva, por vuestra amistad.

Por último, quería dar las gracias a mi familia y amigos. A mis dos *Marías* y a *Cris*, porque con vosotras he pasado tantos buenos momentos compostelanos que volvería a repetir la carrera. A *Fran* e *Ignacio*, por cuidarme tanto. A *Rubén*, por entender mis locuras y seguir ahí. A mi padre tengo que agradecerle, entre otras muchas cosas, el haberme inculcado su amor por la ciencia. Tú me enseñaste a hacer mi primera derivada y todavía sigo aprendiendo de ti. No tengo palabras para expresar la gratitud y admiración que le tengo a mi madre. Gracias por estar a mi lado siempre, pase lo que pase, y porque siempre tienes la palabra justa en el momento adecuado que me reconforta.

Finalmente, quería dedicar este trabajo a la memoria de una persona muy especial: Gloria, siempre te llevo conmigo.

Aunque aquí se cierra esta etapa en mi vida, espero que todos vosotros sigáis formando parte de mi futuro. Gracias a todos.

Índice general

Introducción	1
I Modelización matemática	3
1. Modelos para flujos de gases reactivos	9
1.1. Introducción	9
1.2. Definiciones generales y notaciones	9
1.2.1. Movimiento de un cuerpo	9
1.2.2. Mezcla de fluidos reactivos	11
1.3. Ecuaciones de conservación para flujos de gases reactivos	13
1.3.1. Ecuaciones de conservación de la masa	13
1.3.2. Ecuación de la cantidad de movimiento	15
1.3.3. Ecuación de conservación de la energía	16
1.3.4. Ecuación de estado	18
1.4. Análisis dimensional. Modelo simplificado	18
1.5. Modelización de la turbulencia	21
1.5.1. Conceptos elementales sobre turbulencia	22
1.5.2. Ecuaciones promediadas	22
1.5.3. Modelo $k - \epsilon$ estándar	25
1.5.4. Modelo general para flujos turbulentos de gases reactivos	26
1.6. Condiciones de contorno utilizadas	26
2. Modelo de combustión	29
2.1. Introducción	29
2.2. Llamas de difusión	30
2.3. Modelo de combustión	31

2.4. Modelo para la fase gaseosa	34
2.5. Modelo para la fase sólida	37
2.5.1. Partículas grandes con alto contenido en cenizas	40
2.5.1.1. Continuidad del modelo	44
2.5.2. Partículas pequeñas con alto contenido en cenizas	45
2.5.3. Partículas con bajo contenido en cenizas	46
2.6. Fuentes para la fase gaseosa	47
2.7. Modelo para el movimiento de las partículas	49
2.8. Modelo BFL en flujos turbulentos	51
2.8.1. Modelo para la dispersión de las partículas	52
II Métodos de Lagrange-Galerkin Modificados	55
3. Métodos MLG para ecuaciones de convección-difusión-reacción	61
3.1. Introducción	61
3.2. Problema de Cauchy y notaciones	62
3.3. Curvas características	66
3.4. Discretización temporal: método de las características	68
3.4.1. Existencia y unicidad de solución del problema semidiscretizado	70
3.5. Discretización espacial: método de elementos finitos	71
3.6. Métodos de Lagrange-Galerkin estándar	75
3.7. Métodos de Lagrange-Galerkin modificados	77
3.8. Análisis numérico de los métodos Lagrange-Galerkin modificados	81
3.8.1. Notaciones y resultados preliminares	82
3.8.2. Convergencia del método $(MLG)_1$	87
3.8.3. Convergencia del método $(MLG)_2$	98
3.9. Resultados numéricos	109
3.9.1. Un método semi-Lagrangiano cuasi-monótono	109
3.9.2. Integración numérica	111
3.9.3. Test de la esfera Gaussiana	112
3.9.4. El cilindro con ranura	119
4. Métodos MLG para las ecuaciones de Navier-Stokes	125
4.1. Introducción	125
4.2. Problema de Cauchy	126

4.3. Discretización temporal: método de las características	127
4.4. Discretización espacial: método de elementos finitos	128
4.5. Curvas características aproximadas	131
4.6. Métodos de Lagrange-Galerkin modificados	135
4.7. Resultados numéricos	139
4.7.1. Integración numérica	140
4.7.2. Un test académico bidimensional	141
4.7.3. Un test académico tridimensional	152
4.7.4. Flujo alrededor de un cilindro	154
4.7.5. Eficiencia de los métodos modificados	159

III Resolución numérica. Aplicación a un chorro de carbón pulverizado 161

5. Métodos numéricos y algoritmos	165
5.1. Introducción	165
5.2. Resolución numérica de la fase gaseosa	166
5.2.1. Conservación de la masa de las especies y de la energía	169
5.2.2. Conservación de k y ϵ	176
5.2.3. Conservación de la masa y cantidad de movimiento	179
5.3. Resolución numérica de la fase sólida	183
5.3.1. Condiciones de contorno para la fase sólida	186
5.4. Algoritmos utilizados	187
5.4.1. Algoritmo para la fase sólida	189
6. Simulación de un chorro de carbón pulverizado	195
6.1. Introducción	195
6.2. Descripción y datos del experimento	196
6.3. Descripción y datos de las simulaciones	199
6.3.1. Datos sobre el carbón	202
6.4. Resultados obtenidos	203
6.4.1. Sensibilidad de los modelos	203
6.4.2. Comparación de los modelos de combustión	208
6.4.3. Comparación con los resultados experimentales	214

Conclusiones	221
A. Implementación de un método MLG para Navier-Stokes	223
A.1. Formulación del problema	223
A.2. Escritura matricial del problema discretizado. Eliminación de las burbujas . .	225
B. Descripción del programa de simulación	229
B.1. Datos del programa	229
B.2. Resolución	233
B.2.1. Sistemas lineales y tiempos de cálculo	238
B.3. Postproceso	239
Nomenclatura	243
Bibliografía	247

Introducción

El carbón es una roca sedimentaria de color negro, muy rica en carbono. Existen diferentes tipos de carbones desde la turba, que es el menos evolucionado y en que la materia vegetal muestra poca alteración, hasta la antracita que es el que presenta una mayor evolución. El carbón se usa principalmente como combustible fósil para la obtención de energía. El consumo de carbón en el mundo aumentará un 56 % de 2007 a 2035, y la participación del carbón en el consumo mundial de energía crecerá de un 27 % a un 28 % en ese mismo periodo, según se dice en el informe de la EIA¹ [36]. El carbón es el combustible que proporciona la mayor generación de electricidad en el mundo, el 42 % en 2007 y se prevé que esta cifra se incremente hasta el 2035.

Las centrales térmicas de carbón pulverizado son la principal fuente de energía eléctrica en el mundo. Entre los años 70 y 80 se empezaron a desarrollar las centrales de lecho fluido con las que, en la actualidad, se ha conseguido aumentar el rendimiento y reducir las emisiones contaminantes. Otra tecnología en auge es la de los ciclos combinados que utilizan como combustible gas de síntesis obtenido mediante la gasificación del carbón. Estas centrales pueden alcanzar un 55 % de rendimiento frente al 30 %, como máximo, de una central térmica convencional y, por lo tanto, son menos contaminantes.

El tradicional proceso de combustión de carbón en calderas para mover turbinas de vapor es relativamente ineficiente y tiende a producir importantes cantidades de óxidos de nitrógeno (NO_x), dióxido de carbono (CO_2) y dióxido de azufre (SO_2) que contribuyen a la formación de ozono, el efecto invernadero y la lluvia ácida. Por estas razones se hace importante la investigación de los procesos involucrados en la combustión de carbón, con la que se han obtenido avances significativos en la comprensión de estos fenómenos, en los procesos de formación contaminantes, así como en el aumento de la eficiencia de la combustión en las centrales térmicas de carbón pulverizado. En esta investigación juega un papel fundamental el desarrollo de modelos matemáticos y métodos numéricos precisos para su resolución, que permitan, mediante simulaciones en el ordenador, predecir el comportamiento de los flujos de gases en los que se produce la combustión de carbón pulverizado. Estas simulaciones, en algunos casos, permitirán ahorrar los costes de la realización de algunas pruebas experimentales, que pueden llegar a ser muy costosas.

El punto de partida de este trabajo es un código diseñado especialmente para la simulación de calderas en tres dimensiones, llamado SC3D, realizado a finales de los años 90 en la tesis doctoral de J.L. Ferrín [44]. Este programa fue realizado en el marco de la colaboración entre la empresa ENDESA Generación S.A. (en concreto, con la Central Térmica situada en

¹ Administración de Información de Energía estadounidense

As Pontes (Galicia)) y con el Departamento de Matemática Aplicada de la USC.

El objetivo inicial de esta tesis era realizar la revisión del código SC3D para obtener un software con nuevos modelos, métodos numéricos más precisos, más rápido y sin algunas de las limitaciones que tenía el citado código, como el uso de mallas estructuradas. Esta actualización del código nos ha llevado a las tres contribuciones fundamentales de esta tesis: el estudio y ampliación de un nuevo modelo de combustión, así como su interpretación para poder ser implementado en un código de simulación, el desarrollo y análisis numérico de nuevos métodos numéricos precisos y estables y, por último, la validación de los modelos y métodos implementados con diferentes problemas.

Este trabajo se divide en tres partes:

Parte I: se realiza la modelización matemática de flujos de gases turbulentos reactivos mezclados con carbón pulverizado. Se describirán modelos para las dos fases (sólida y gaseosa) y el tipo de acoplamiento entre ambas. Teniendo en cuenta la complejidad de los problemas que se pretenden resolver será necesario realizar un análisis dimensional e introducir algunas hipótesis, por ejemplo, sobre la cinética de las reacciones o la forma de las partículas, para simplificar el modelo que tendremos que resolver.

Parte II: se describen y analizan los métodos de Lagrange-Galerkin modificados para ecuaciones de tipo convección-difusión-reacción y para las ecuaciones de Navier-Stokes. Cuando se resuelven problemas tridimensionales, además de la precisión, la eficiencia computacional se vuelve algo prioritario. Los métodos de Lagrange-Galerkin combinan el uso de las curvas características para la discretización del término convectivo y elementos finitos para la discretización espacial. En relación al tiempo de cálculo, la ventaja de los métodos implementados es que permiten el uso de pasos de tiempo grandes, pero, a cambio, tienen dos pasos muy costosos en mallas finas: la resolución de sistemas lineales y el cálculo del movimiento de nodos de cuadratura a lo largo de las curvas características. Los métodos de Lagrange-Galerkin modificados que presentamos, reducirán considerablemente el coste de esta última etapa, manteniendo la misma precisión de los métodos estándar. Se presentarán resultados numéricos que avalan los órdenes de convergencia obtenidos y que nos permiten analizar la mejora en la eficiencia computacional que representan los métodos modificados frente a los estándar.

Parte III: se hace una descripción de los métodos de discretización utilizados para cada una de las ecuaciones de los modelos implementados así como de los algoritmos utilizados en la resolución de los problemas discretos. Al tener que resolver numerosos problemas acoplados entre sí, los algoritmos diseñados tratarán estos acoplamientos manteniendo la estabilidad de los métodos y asegurando la mayor eficiencia computacional posible. Por último, se presentan los resultados obtenidos con nuestro código para una llama de carbón pulverizado obtenida en laboratorio y se compararán con resultados experimentales. Este ejemplo nos permite validar los modelos implementados, así como comprobar la fiabilidad de la herramienta desarrollada. La elección de este caso sencillo se debe a que facilita el análisis de las complejidades del modelo de combustión de carbón desarrollado, evitando otras dificultades que podrían distorsionar su estudio.

Parte I

Modelización matemática

Introducción

La modelización de flujos de gases reactivos es una de las ramas más complejas de la mecánica de medios continuos. Por un lado, hay que considerar los fenómenos de transporte de masa, de momento y de energía entre diferentes puntos de la mezcla, que se producen siempre que el movimiento del gas, su composición o su temperatura no sean uniformes. El transporte de masa se produce por convección (o advección) y difusión, mientras que la transferencia de energía se produce por convección, conducción y radiación. Para ver con más detalle la modelización de fluidos con un solo compuesto pueden consultarse libros como, por ejemplo, Batchelor [8] o Kundu y Cohen [62] y para ver los modelos más generales de mezclas de fluidos se pueden consultar Gurtin [52] o Bermúdez [18]. Por otro lado, hay que conocer las reacciones químicas que tienen lugar entre las distintas especies y las leyes que rigen sus velocidades, es decir, la cinética química. Estas reacciones modificarán la composición de la mezcla y su temperatura. Los modelos generales para gases reactivos están formados por ecuaciones de conservación de movimiento, energía, masa total y masa de cada una de las especies, que tienen en cuenta todos los fenómenos descritos.

Si además el flujo de gases es turbulento, tenemos que tratar con el que, probablemente, sea el fenómeno más complicado en mecánica de fluidos. En la descripción de un flujo turbulento entran en juego diferentes escalas de tiempo y espacio que dificultan o hacen imposible la descripción precisa del flujo. Además, si el flujo es una mezcla de gases reactivos, es necesario modelizar las relaciones entre la turbulencia y el transporte y la cinética química. Por ejemplo, hay que tener en cuenta que la turbulencia altera la estructura de las llamas acelerando la mezcla de reactantes y, por lo tanto, intensificando la reacción química. La literatura sobre este tema es tan abundante como su complejidad; podemos ver, entre otros, Libby y Williams [68], Williams [95], Kuo [63] o Poinot y Veynante [83].

Los problemas que vamos a considerar en este trabajo incluyen además la combustión de partículas de carbón pulverizado. Teniendo en cuenta el tamaño de las partículas y su dispersión, el carbón pulverizado se pueden considerar como una fase discreta para la cual se puede usar una descripción Lagrangiana. De esta forma, habrá que modelizar la evolución de la masa y de la temperatura de cada una de las partículas de carbón a lo largo de su trayectoria. Durante la combustión de una partícula de carbón tienen lugar diferentes procesos difíciles de modelizar como, por ejemplo, la liberación de materias volátiles o el ataque que sufre por diferentes sustancias como el vapor de agua o el oxígeno. Además, estos procesos pueden ser muy distintos dependiendo de la composición de carbón y del tamaño de las partículas. Existen numerosas referencias que tratan el estudio de los fenómenos que tienen lugar durante la combustión de una partícula de carbón y de su modelización; por

ejemplo, Smoot y Pratt [91], que presentan modelos matemáticos de flujos de gases con carbón pulverizado y se hacen análisis detallados de las características del carbón y de su combustión, incluyendo medidas experimentales; Annamalai y Ryan [4], artículo en el que se hace una revisión de los procesos en combustión de carbón, Eaton *et al* [38], dónde se hace un resumen del estado del arte de la metodología y modelos en los códigos comerciales de dinámica de fluidos computacional (CFD). Más recientemente, en Williams *et al* [94] se menciona que la mayor limitación en los códigos de simulación actuales es la utilización de modelos simplificados para la liberación de volátiles y la gasificación. Esta limitación viene dada, en parte, por la dificultad para medir los parámetros involucrados en los modelos.

Por lo tanto, tendremos un medio continuo, la fase gaseosa, formada por un flujo de gases turbulentos reactivos y de la que se hará un tratamiento Euleriano, y un medio discreto, la fase discreta o sólida, compuesta por partículas de carbón y de la que se hará una descripción Lagrangiana. Estas dos fases estarán acopladas pues, por un lado, la fase gaseosa determina la atmósfera en la que se queman las partículas y, por otra, la fase sólida aportará fuentes de momento, masa y energía a la fase gaseosa.

El objetivo de esta parte del trabajo es describir los modelos simplificados que vamos a considerar para la simulación de flujos turbulentos de gases reactivos que incluyen combustión de carbón pulverizado.

En el Capítulo 1, estableceremos las ecuaciones generales que se verifican en una mezcla de gases reactivos. Haciendo un análisis dimensional del tipo de problemas que trataremos, podemos simplificar estas ecuaciones considerando válidas hipótesis como que el número de Lewis es igual a la unidad (es decir, que la difusión másica de todas las especies es igual a la térmica) o el número de Mach es pequeño (es decir, que la velocidad del flujo es mucho menor que la del sonido). Por último, proponemos dos tipos de aproximaciones para el tratamiento de la turbulencia. Una primera, tipo LES en la que utilizamos el modelo de Smagorinsky, y otra, tipo RANS, con el modelo $k - \epsilon$. Esta última aproximación será la que describiremos con detalle, estableciendo las ecuaciones promediadas incluyendo las que verifican la energía cinética turbulenta k y la disipación turbulenta ϵ .

En el Capítulo 2, se describe el modelo de combustión BFL que ha sido introducido en Bermúdez *et al* [19]. Vamos a generalizar el análisis hecho en ese artículo para tener en cuenta carbón con bajo contenido en cenizas. En este capítulo, por un lado, vamos a simplificar la cinética química del modelo general para flujos de gases reactivos y, por otro lado, proporcionaremos las fuentes o sumideros de masa y energía que aportan las partículas a la fase gaseosa, obtenidas por medio de un estudio detallado de los procesos físico-químicos que tienen lugar en ellas y en su entorno.

Para el modelo de fase gaseosa se consideran 8 especies gaseosas y tres reacciones entre éstas y se supone válida la hipótesis de *Burke-Schumann* (ver [28]) de reacciones infinitamente rápidas. En el modelo BFL se generaliza el análisis de Burke-Schumann para tener en cuenta tres reactantes que compiten por el oxígeno. Para ello, se usan ciertas combinaciones lineales de las variables dependientes conocidas como variables de Schwab-Zeldovich, que pueden ser vistas como fracciones de mezcla sin normalizar y que, como el número de Lewis es uno, permiten eliminar los términos correspondientes a las reacciones químicas en las ecuaciones de conservación de la masa y la energía del modelo general.

El modelo de fase sólida tendrá en cuenta los efectos de la liberación de materias volátiles, que producirá vapor de agua y volátiles combustibles que reaccionarán en fase gaseosa, y los de la gasificación del carbono fijo con oxígeno, vapor de agua y dióxido de carbono. Además, se permite que todas estas reacciones ocurran simultáneamente. Los productos de la gasificación del carbono fijo se queman con oxígeno en fase gaseosa en llamas que pueden estar en el interior de la partícula, alrededor de la misma o en el gas lejos de ella. En el modelo BFL las llamas de difusión pueden entrar en el interior de la partícula por suponer que es porosa, a diferencia de otros como, por ejemplo, el de Libby y Blake [69], que solo tienen en cuenta reacciones en la superficie de la partícula. Las reacciones de gasificación pueden estar congeladas o controladas por la difusión y la determinación de su estado se ha obtenido en Bermúdez *et al* [19] siguiendo el método de Liñán [67] de altas energías de activación. En este modelo para fase sólida distinguiremos tres submodelos: para partículas grandes con alto contenido en cenizas, para partículas pequeñas con alto contenido en cenizas y para carbón con bajo contenido en cenizas. Esto se debe a que una partícula podrá alojar las llamas de difusión en su interior o su entorno, dependiendo de su tipo.

Capítulo 1

Modelos para flujos de gases reactivos

1.1. Introducción

En este capítulo vamos a introducir las ecuaciones que modelan el flujo de una mezcla de gases que reaccionan entre sí. Se trata de un capítulo introductorio en el que se establecerán las notaciones y ecuaciones que describen los fenómenos más importantes que tienen lugar en una mezcla de gases reactivos.

En la primera sección daremos algunas definiciones y notaciones que utilizaremos a lo largo de esta memoria. Usaremos la notación empleada por Gurtin [52] y Bermúdez [18].

En la segunda sección se describen las ecuaciones que modelan el comportamiento de los flujos de gases reactivos. Para ver con mayor profundidad la obtención de estos modelos, así como otros aspectos más específicos del estudio de las reacciones de combustión en flujos de gases, se puede consultar por ejemplo Kuo [63] y Williams [95].

En la tercera sección se realiza el análisis dimensional del modelo para analizar qué términos pueden ser despreciados según el problema que vamos a resolver.

Como la mayoría de los problemas sobre flujos de gases reactivos serán turbulentos, en la cuarta sección se introducen algunos conceptos básicos sobre la turbulencia y se describe el modelo obtenido para estos flujos cuando se utiliza el $k - \epsilon$ estándar.

Por último, se especificarán las condiciones de contorno elegidas para el modelo completo.

En los sucesivos capítulos de esta memoria se estudiarán con más detalle los fenómenos que tienen lugar en un flujo con combustión de carbón. El objetivo será simplificar las ecuaciones obtenidas en este capítulo para obtener un modelo adaptado a los flujos que pretendemos simular.

1.2. Definiciones generales y notaciones

1.2.1. Movimiento de un cuerpo

Siguiendo a Gurtin [52] utilizaremos la siguientes notaciones: Sean \mathcal{E} un espacio afín asociado a un espacio vectorial euclídeo \mathcal{V} , Lin el espacio vectorial de los endomorfismos de

\mathcal{V} (que se identifica a los tensores de orden 2) y Sym el subespacio de Lin formado por los endomorfismos simétricos.

Definición 1.2.1. *Una región regular es una región cerrada con frontera de clase C^1 a trozos, siendo una región cerrada la clausura de un abierto conexo en \mathcal{E} .*

Un cuerpo material (o configuración de referencia) \mathcal{B} se define como una región regular del espacio afín \mathcal{E} . Una deformación del cuerpo \mathcal{B} es una aplicación biyectiva regular \mathbf{f} de \mathcal{B} sobre una región cerrada del espacio afín y que verifica $\det(\nabla \mathbf{f}) > 0$.

Un movimiento del cuerpo \mathcal{B} será una aplicación de clase C^3

$$X : \mathcal{B} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{E} \quad (1.1)$$

que verifica que, para cada t , $X(\cdot, t)$ es una deformación. La trayectoria asociada al movimiento X es el conjunto

$$\mathcal{T} = \{(x, t) / x = X(p, t), t \in \mathbb{R}, p \in \mathcal{B}\}. \quad (1.2)$$

Los elementos $p \in \mathcal{B}$ se llaman puntos materiales, $x = X(p, t)$ será el lugar ocupado por el punto material p en el instante t y \mathcal{B}_t la región ocupada por el cuerpo material \mathcal{B} en el instante t , es decir, $\mathcal{B}_t = X(\mathcal{B}, t)$.

La aplicación de referencia,

$$\mathbf{P} : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{B}, \quad (1.3)$$

da el punto material p que ocupa el lugar x en cada instante de tiempo t .

Las variables definidas en $\mathcal{B} \times \mathbb{R}$ son las variables materiales o Lagrangianas mientras que las definidas en la trayectoria se llaman variables espaciales o Eulerianas. Cualquier campo espacial puede ser transformado en un campo material y viceversa utilizando el movimiento y su aplicación de referencia.

En esta memoria se escribirán de distinta forma los operadores diferenciales dependiendo de si se aplican a campos materiales o a campos espaciales. Las notaciones utilizadas pueden verse en la Tabla 1.1.

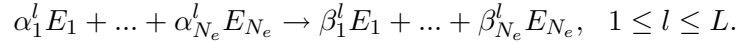
Operador	Campo material	Campo espacial
Derivada de ϕ respecto de la variable temporal t	$\dot{\phi}$ o $\frac{D\phi}{Dt}$	ϕ'
Gradiente de ϕ respecto de la variable espacial	$\nabla \phi$	$\text{grad } \phi$
Divergencia de ϕ respecto de la variable espacial	$\text{Div} \phi$	$\text{div} \phi$

Tabla 1.1: Notación utilizada para los distintos operadores diferenciales

Por último, el gradiente del movimiento será el tensor $F(p, t) := \nabla X(p, t)$ y $\mathbf{v}(x, t) := \dot{X}(\mathbf{P}(p, t), t)$ será la descripción espacial de la velocidad.

1.2.2. Mezcla de fluidos reactivos

Consideramos una mezcla de N_e especies reactivas $E_i, 1 \leq i \leq N_e$, siendo cada una de ellas un fluido de Coleman-Noll. La definición de fluido de Coleman-Noll puede verse en Bermúdez [18]. Cada especie E_i tiene un movimiento asociado X_i de forma que todas las especies ocupan el mismo lugar en cada instante de tiempo, es decir $\mathcal{B}_t^i = \mathcal{B}_t, 1 \leq i \leq N_e$. Supondremos que en la mezcla tienen lugar L reacciones químicas que escribiremos de la siguiente forma:



En esta memoria utilizaremos las siguientes notaciones para las propiedades de la especie i -ésima:

- ρ_i densidad,
- \mathcal{M}_i masa molecular,
- \mathbf{v}_i velocidad,
- π_i presión,
- e_i energía interna específica,
- h_i entalpía específica,
- $c_{v,i}$ calor específico a volumen constante,
- $c_{\pi,i}$ calor específico a presión constante.

Nota 1.2.1. Recordemos que para un fluido de Coleman-Noll los calores específicos a volumen y presión constantes se definen como:

$$c_{v,i} := \left(\frac{\partial e_i}{\partial \theta} \right)_{\rho_i} \quad \text{y} \quad c_{\pi,i} := \left(\frac{\partial h_i}{\partial \theta} \right)_{\pi_i}, \quad (1.4)$$

siendo θ la temperatura de la mezcla.

Además, la entalpía específica viene dada por

$$h_i := e_i + \frac{\pi_i}{\rho_i}. \quad (1.5)$$

La concentración de la especie E_i es

$$c_i = \frac{\rho_i}{\mathcal{M}_i}, \quad (1.6)$$

y $c = \sum_{i=1}^{N_e} c_i$ es la concentración de la mezcla.

La fracción másica de cada especie E_i se define como

$$Y_i = \frac{\rho_i}{\rho}, \quad (1.7)$$

donde $\rho = \sum_{i=1}^{N_e} \rho_i$ es la densidad de la mezcla, mientras que la fracción molar viene dada por

$$X_i = \frac{c_i}{c}. \quad (1.8)$$

Introducimos las siguientes variables para la mezcla:

- Energía específica:

$$e = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i e_i, \quad (1.9)$$

- Entalpía específica:

$$h = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i h_i, \quad (1.10)$$

- Calor específico a volumen constante:

$$c_v = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i c_{v,i}, \quad (1.11)$$

- Calor específico a presión constante:

$$c_\pi = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i c_{\pi,i}, \quad (1.12)$$

- Presión:

$$\pi = \sum_{i=1}^{N_e} \pi_i, \quad (1.13)$$

- Velocidad:

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i \mathbf{v}_i, \quad (1.14)$$

- Masa molecular:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_e} \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i}}. \quad (1.15)$$

Con estas definiciones se puede comprobar que la relación (1.5) para un fluido vista en la Nota 1.2.1 se verifica también para la mezcla, es decir

$$h = e + \frac{\pi}{\rho}. \quad (1.16)$$

Denotaremos por h_i^0 la entalpía específica de formación de la especie E_i a temperatura θ_0 , es decir, la entalpía necesaria para formar 1 kg de especie E_i a la temperatura θ_0 , a partir de los elementos que la componen a la misma temperatura. Esta temperatura θ_0 se denomina temperatura de referencia y su valor habitual es 298.15 K, es decir, 25 °C. En general, en las bases de datos los valores que encontramos son de las entalpías molares de formación que denotaremos como ΔH_i^0 para cada especie i . La relación entre las entalpías de formación másicas y molares es

$$h_i^0 = \frac{\Delta H_i^0}{\mathcal{M}_i}. \quad (1.17)$$

Si la reacción l -ésima es una reacción de combustión, el calor liberado por unidad de masa de combustible, llamado calor de reacción, se define a partir de la entalpía de formación como

$$q_l := -\frac{1}{\mathcal{M}_{E_{i_l}}} \sum_{i=1}^{N_e} (\beta_i^l - \alpha_i^l) h_i^0 \mathcal{M}_i, \quad (1.18)$$

siendo E_{i_l} la especie combustible en la reacción l -ésima.

Por último, definiremos la velocidad de difusión de la especie E_i como la diferencia entre la velocidad de la especie y la de la mezcla,

$$\mathbf{V}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}. \quad (1.19)$$

1.3. Ecuaciones de conservación para flujos de gases reactivos

Las variables definidas en la sección anterior nos permitirán escribir las ecuaciones del modelo que utilizaremos para mezclas de gases reactivos. En esta sección resumiremos las ecuaciones generales para este tipo de flujos, las cuales incluirán fuentes provenientes de una fase condensada. En nuestro caso particular estas fuentes serán debidas a la masa y a la energía que liberan las partículas de carbón durante su combustión.

Por último, obtendremos un modelo simplificado realizando un análisis dimensional, teniendo en cuenta el tipo de problemas que resolveremos, e incluiremos las condiciones de contorno que nos permitirán la descripción completa del problema.

1.3.1. Ecuaciones de conservación de la masa

La ecuación de conservación de la masa para cada una de las especies de la mezcla es

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_i \mathbf{v}_i) = f_i^r + f_i^m, \quad (1.20)$$

donde f_i^r representa la fuente de masa de especie E_i debida a las reacciones químicas homogéneas en fase gaseosa y f_i^m la fuente de masa transferida desde la fase condensada a la fase

gaseosa a partir de reacciones en las que se produce un cambio de estado (por ejemplo, las reacciones de gasificación en la combustión de carbón pulverizado).

La fuente de masa debida a las reacciones se escribe como

$$f_i^r = \mathcal{M}_i \sum_{l=1}^L (\beta_i^l - \alpha_i^l) \gamma_l, \quad (1.21)$$

donde γ_l es la velocidad de la reacción l -ésima dada en $kmol/m^3s$. La determinación de esta velocidad se hace a través de la *ley de acción de masa* (ver [5] o [95]) que establece que

$$\gamma_l = k_l \prod_{i=1}^{N_e} c_j^{\alpha_j^l}, \quad (1.22)$$

siendo k_l la velocidad o tasa específica de la reacción l -ésima que será función de la temperatura de la mezcla. Esta dependencia de la temperatura viene dada por la *ley de Arrhenius*,

$$k = B_l \theta^{\nu_l} e^{-\mathcal{E}_l/\mathcal{R}\theta}, \quad (1.23)$$

siendo B_l el factor de frecuencia, \mathcal{E}_l la energía de activación y $\nu_l \in [0, 1]$ el exponente pre-exponencial de la reacción l -ésima.

Observación 1.3.1. *La velocidad γ_l se refiere a una de las especies, E_{i_l} , de la reacción l -ésima, es decir, son los kilomoles producidos (o consumidos) de la especie E_{i_l} por unidad de volumen y tiempo. Así, como los coeficientes estequiométricos de la reacción l -ésima son únicos salvo traslación y/o multiplicación por una constante, estos deben normalizarse para que $\beta_{i_l}^l - \alpha_{i_l}^l = 1$.*

Sumando las ecuaciones (1.20) para todas las especies y teniendo en cuenta que la masa global se conserva en cada reacción química, es decir,

$$\sum_{i=1}^{N_e} f_i^r = 0, \quad (1.24)$$

se obtiene la ecuación de conservación de la masa para la mezcla de gases

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = f^m, \quad (1.25)$$

siendo

$$f^m := \sum_{i=1}^{N_e} f_i^m. \quad (1.26)$$

La ecuación (1.25) escrita en forma no conservativa es

$$\dot{\rho} + \rho \text{div} \mathbf{v} = f^m. \quad (1.27)$$

Escribiremos ahora la ecuación de conservación de la masa de cada especie en función de su fracción másica y de la velocidad de la mezcla. Bastará con utilizar la definición de

fracción másica (1.7) y de velocidad de difusión (1.19), en la ecuación de conservación (1.20) para obtener

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) + \operatorname{div} \mathbf{J}_i = f_i^r + f_i^m, \quad i = 1, \dots, N_e, \quad (1.28)$$

donde $\mathbf{J}_i = \rho Y_i \mathbf{V}_i$ es el flujo másico de difusión de la especie i . Utilizando la ley de Fick, podemos escribir

$$\mathbf{V}_i = -\frac{\mathcal{D}_i}{Y_i} \operatorname{grad} Y_i, \quad (1.29)$$

donde \mathcal{D}_i es el coeficiente de difusividad másica de la especie i en la mezcla, resultando la siguiente expresión para el flujo de difusión

$$\mathbf{J}_i = -\rho \mathcal{D}_i \operatorname{grad} Y_i. \quad (1.30)$$

Sustituyendo (1.30) en (1.28) se tiene la ecuación de conservación de masa para cada especie

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D}_i \operatorname{grad} Y_i) = f_i^r + f_i^m, \quad i = 1, \dots, N_e. \quad (1.31)$$

Si tenemos en cuenta que se verifica

$$\operatorname{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) = Y_i(\mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} \rho) + \rho(\mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} Y_i) + \rho Y_i \operatorname{div} \mathbf{v}, \quad (1.32)$$

y sustituimos esta expresión en (1.31) se tiene

$$Y_i(\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v}) + \rho \dot{Y}_i - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D}_i \operatorname{grad} Y_i) = f_i^r + f_i^m, \quad i = 1, \dots, N_e, \quad (1.33)$$

de donde, utilizando la ecuación de conservación de la masa (1.27), llegamos a la ecuación de conservación de la masa de cada especie escrita en forma no conservativa

$$\rho \dot{Y}_i - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D}_i \operatorname{grad} Y_i) + f_i^m Y_i = f_i^r + f_i^m, \quad i = 1, \dots, N_e. \quad (1.34)$$

1.3.2. Ecuación de la cantidad de movimiento

Supondremos que si hay fase discreta ésta será dispersa y su fracción volumétrica pequeña. Por lo tanto, sus efectos sobre la cantidad de movimiento de la mezcla gaseosa serán despreciables. Teniendo esto en cuenta, la ecuación del movimiento escrita en forma conservativa es

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) - \operatorname{div} \mathbb{T} = \rho \mathbf{g}, \quad (1.35)$$

donde \mathbf{g} es la aceleración de la gravedad y \mathbb{T} es el tensor de tensiones de Cauchy que, en el caso de fluidos de Coleman-Noll, admite la expresión

$$\mathbb{T} = -\pi \mathbb{I} + \mathbb{T}_v, \quad (1.36)$$

siendo \mathbb{T}_v su parte viscosa. Asumiendo que \mathbb{T}_v tiene una dependencia lineal de $\operatorname{grad} \mathbf{v}$ (fluido Newtoniano), el principio de indiferencia material y la isotropía del fluido permiten escribir \mathbb{T}_v como

$$\mathbb{T}_v = 2\mu \mathbb{D} + \xi \operatorname{div} \mathbf{v} \mathbb{I}, \quad (1.37)$$

donde μ es la viscosidad dinámica de la mezcla, ξ la segunda viscosidad y

$$\mathbb{D} = \frac{1}{2} (\text{grad } \mathbf{v} + \text{grad } \mathbf{v}^t), \quad (1.38)$$

es el tensor de velocidad de deformación.

Supondremos válida la *hipótesis de Stokes* que establece la siguiente relación entre los coeficientes de viscosidad μ y ξ

$$\xi = -\frac{2}{3}\mu. \quad (1.39)$$

Teniendo en cuenta la forma de \mathbb{T} (1.36), la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (1.35) queda

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} + \text{div}(\rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) - \text{div}\mathbb{T}_v + \text{grad } \pi = \rho\mathbf{g}, \quad (1.40)$$

y en forma no conservativa

$$\rho\dot{\mathbf{v}} - \text{div}\mathbb{T}_v + \text{grad } \pi + f^m\mathbf{v} = \rho\mathbf{g}. \quad (1.41)$$

1.3.3. Ecuación de conservación de la energía

La ecuación de la energía en forma conservativa, en función de la energía interna específica, es

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \text{div}(\rho e\mathbf{v}) - \mathbb{T} \cdot \mathbb{D} = -\text{div}\mathbf{q}_c - \text{div}\mathbf{q}_r + f, \quad (1.42)$$

siendo \mathbf{q}_c el flujo de calor por conducción, \mathbf{q}_r el flujo de calor por radiación y f la fuente de energía procedente de la fase discreta. Teniendo en cuenta la relación (1.16), se puede escribir la ecuación de la energía en función de la entalpía de la forma

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \text{div}(\rho h\mathbf{v}) - \mathbb{T}_v \cdot \mathbb{D} - \dot{\pi} = -\text{div}\mathbf{q}_c - \text{div}\mathbf{q}_r + f, \quad (1.43)$$

La ley constitutiva para el flujo de calor por conducción nos permite escribir

$$\mathbf{q}_c = -k_T \text{grad } \theta - \sum_{i=1}^{N_e} \rho_i \mathbf{V}_i h_i, \quad (1.44)$$

siendo k_T el coeficiente de difusión térmica. Si utilizamos la expresión (1.29) en (1.44) para reemplazar las velocidades de difusión y, además, suponemos que todas las especies tienen el mismo coeficiente de difusión másica $\mathcal{D}_i = \mathcal{D}$, $i = 1, \dots, N_e$, y que el número de Lewis es igual a 1, es decir, $k_T = \rho\mathcal{D}c_\pi$, obtenemos

$$\mathbf{q}_c = -\rho\mathcal{D} \text{grad } h. \quad (1.45)$$

Sustituyendo (1.45) en la ecuación (1.43) resulta la ecuación

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \text{div}(\rho h\mathbf{v}) - \text{div}(\rho\mathcal{D} \text{grad } h) - \mathbb{T}_v \cdot \mathbb{D} - \dot{\pi} = -\text{div}\mathbf{q}_r + f, \quad (1.46)$$

que en forma no conservativa quedaría de la forma

$$\rho \dot{h} - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} h) - \mathbb{T}_v \cdot \mathbb{D} - \dot{\pi} + f^m h = -\operatorname{div} \mathbf{q}_r + f. \quad (1.47)$$

Por último, reescribiremos la ecuación de la energía en términos de la entalpía térmica específica h_T , también llamada entalpía sensible. La entalpía específica de la mezcla se puede descomponer en

$$h = h_T + \sum_{i=1}^{N_e} Y_i h_i^0. \quad (1.48)$$

La entalpía térmica se escribe en función de la temperatura y la composición de la mezcla como

$$h_T = \hat{h}_T(\theta, \pi, Y_1, \dots, Y_{N_e}) = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i \int_{\theta_0}^{\theta} c_{\pi,i}(s) ds. \quad (1.49)$$

Utilizando la descomposición de la entalpía específica (1.48) en la ecuación de la energía (1.46) obtenemos

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho h_T)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho h_T \mathbf{v}) - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} h_T) - \mathbb{T}_v \cdot \mathbb{D} - \dot{\pi} \\ & + \sum_{i=1}^{N_e} h_i^0 \left[\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} Y_i) \right] = -\operatorname{div} \mathbf{q}_r + f. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Teniendo en cuenta que se verifica la ecuación (1.31) se llega a

$$\frac{\partial(\rho h_T)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho h_T \mathbf{v}) - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} h_T) - \mathbb{T}_v \cdot \mathbb{D} - \dot{\pi} = -\operatorname{div} \mathbf{q}_r + f^e + f_r^e, \quad (1.51)$$

donde

$$f^e := f - \sum_{i=1}^{N_e} h_i^0 f_i^m \quad (1.52)$$

es la fuente de energía proveniente de las partículas de carbón u otra fase dispersa condensada y

$$f_r^e := - \sum_{i=1}^{N_e} h_i^0 f_i^r \quad (1.53)$$

es la fuente de energía debida a las reacciones químicas entre las especies de la mezcla gaseosa.

La forma no conservativa de la ecuación (1.51) es

$$\rho \dot{h}_T - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} h_T) - \mathbb{T}_v \cdot \mathbb{D} - \dot{\pi} + f^m h_T = -\operatorname{div} \mathbf{q}_r + f^e + f_r^e, \quad (1.54)$$

la cual se deduce inmediatamente usando la ecuación (1.27).

Para completar la formulación de la ecuación de conservación de la energía habría que modelizar el flujo de calor por radiación. La radiación es un fenómeno muy importante en muchas aplicaciones como, por ejemplo, en calderas de carbón pulverizado, pero su estudio desborda los objetivos de esta tesis y formará parte del trabajo futuro; además, en alguno de los ejemplos que consideraremos en la parte de resultados numéricos la radiación será un fenómeno despreciable.

1.3.4. Ecuación de estado

Un gas perfecto es un fluido de Coleman-Noll que verifica la ecuación de estado $\pi = \rho R\theta$, donde $R = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}_g}$, siendo $\mathcal{R} = 8.314472$ J/mol K la constante universal de los gases y \mathcal{M}_g la masa molecular del gas. Si la mezcla es de gases perfectos se tiene,

$$\pi_i = \rho_i R_i \theta, \quad i = 1, \dots, N_e, \quad (1.55)$$

donde $R_i = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}_i}$. Sumando la ecuación (1.55) para todas las especies y teniendo en cuenta (1.13) se obtiene la ecuación de estado para la mezcla

$$\pi = \rho R \theta, \quad (1.56)$$

con $R = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}}$, siendo \mathcal{M} la masa molecular de la mezcla dada en (1.15).

1.4. Análisis dimensional. Modelo simplificado

Considerando las hipótesis:

- los coeficientes de difusión son iguales para todos los gases de la mezcla,
- el número de Lewis es igual a la unidad,
- la hipótesis de Stokes sobre los coeficientes de viscosidad,
- la ley de Fick,
- el flujo de calor por radiación es despreciable,

hemos obtenido el siguiente modelo para una mezcla de gases perfectos reactivos, escrito en forma conservativa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = f^m, \quad (1.57)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) - \operatorname{div} \mathbb{T}_v + \operatorname{grad} \pi = \rho \mathbf{g}, \quad (1.58)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} Y_i) = f_i^r + f_i^m, \quad i = 1, \dots, N_e, \quad (1.59)$$

$$\frac{\partial(\rho h_T)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho h_T \mathbf{v}) - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} h_T) - \mathbb{T}_v \cdot \mathbb{D} - \dot{\pi} = f^e + f_r^e, \quad (1.60)$$

$$\pi = \rho R \theta. \quad (1.61)$$

Podemos hacer una simplificación de este modelo a partir de un análisis dimensional del mismo, teniendo en cuenta las magnitudes características del tipo de problemas que trataremos.

En primer lugar descompondremos la presión como

$$\pi(x, t) = \pi_h(x, t) + \bar{\pi}(t), \quad (1.62)$$

donde $\bar{\pi}$ es el promedio espacial de la presión

$$\bar{\pi}(t) = \text{vol}(\mathcal{B}_t)^{-1} \int_{\mathcal{B}_t} \pi(x, t) dx. \quad (1.63)$$

Si denotamos con subíndice 0 los valores característicos de la magnitudes en nuestro problema, podemos definir el número de Mach como

$$M = \frac{v_0}{c_0}, \quad (1.64)$$

donde c_0 representa el valor característico de la velocidad del sonido. En el caso de un gas perfecto se tiene

$$c = \sqrt{\gamma R \theta} = \sqrt{\gamma \frac{\pi}{\rho}}, \quad (1.65)$$

siendo $\gamma = \frac{c_\pi}{c_v}$.

Los flujos que vamos a considerar serán compresibles y su número de Mach será pequeño; en concreto, $M \ll 1$. Estos flujos se consideran “débilmente” compresibles (ver [85]) ya que tienen un comportamiento hidrodinámicamente incompresible, es decir, las variaciones de la densidad se deben principalmente a los cambios en la temperatura. En estos flujos se tiene que $\pi_h \ll \bar{\pi}$ y, por lo tanto, π_h se puede despreciar en la ecuación de estado.

Reescalamos ahora las variables independientes de la forma

$$x^* = \frac{x}{L_0}, \quad t^* = \frac{tv_0}{L_0},$$

siendo L_0 la longitud característica del problema. El resto de las variables y los coeficientes de las ecuaciones se adimensionalizan de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} \rho^* &= \frac{\rho}{\rho_0}, \quad \pi_h^* = \frac{\pi_h}{\rho_0 v_0^2}, \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_0}, \quad h_T^* = \frac{h_T}{c_{p0} \Delta \theta}, \\ \mu^* &= \frac{\mu}{\mu_0}, \quad \mathcal{D}^* = \frac{\mathcal{D} c_{\pi 0} \rho_0}{k_{T0}}, \end{aligned}$$

siendo $\Delta \theta = \theta_c - \theta_0$ la diferencia entre la temperatura θ_c típica del flujo de gases, que se suele tomar como la temperatura de la llama, y θ_0 la temperatura de referencia considerada para dichos gases, es decir, 298 K. En el caso de flujos con paredes sólidas la adimensionalización de la entalpía se hace tomando como salto de temperaturas $\theta_c - \theta_P$, siendo θ_P la temperatura de las paredes. Para ver cómo obtener las ecuaciones adimensionales para problemas de combustión podemos consultar Kuo [63], y Poinso y Veynante [83].

Definimos los números adimensionales

$$Re = \frac{\rho_0 L_0 U_0}{\mu_0}, \quad Fr = \frac{U_0}{gL_0}, \quad Pr = \frac{c_{\pi 0} \mu_0}{k_{T0}}, \quad Pe = Pr Re, \quad Ec = \frac{U_0^2}{c_{\pi 0} \Delta \theta},$$

que son los números de Reynolds, Froude, Prandtl, Peclet y Eckert, respectivamente.

La ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (1.58) escrita en forma adimensional es

$$\frac{\partial(\rho^* \mathbf{v}^*)}{\partial t^*} + \text{div}^*(\rho^* \mathbf{v}^* \otimes \mathbf{v}^*) - \frac{1}{Re} \text{div}^*(\mathbb{T}_v^*) + \text{grad}^* \pi_h^* = -\frac{1}{Fr} \rho^* \vec{e}_3, \quad (1.66)$$

donde

$$\mathbb{T}_v^* = \frac{L_0}{\mu_0 v_0} \mathbb{T}_v = \mu^* \left[(\text{grad } \mathbf{v}^* + (\text{grad } \mathbf{v}^*)^t) - \frac{2}{3} \text{div}^* \mathbf{v}^* \mathbb{I} \right]. \quad (1.67)$$

El número de Reynolds mide la relación entre los términos de inercia y los viscosos. Así, si el número de Reynolds es elevado podremos despreciar los términos de la ecuación debidos a los esfuerzos viscosos (salvo en las capas límite). El número de Froude mide la relación entre los términos de inercia y los gravitatorios. Si este número es grande quiere decir que estos últimos pueden ser despreciados. Veremos en cada problema concreto cómo son los números de Reynolds y Froude para ver si podemos simplificar la ecuación de la cantidad de movimiento.

Analicemos ahora la ecuación de conservación de la energía (1.60). Si adimensionalizamos la ecuación con los reescalamientos propuestos obtendremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho^* h_T^*)}{\partial t^*} + \text{div}^*(\rho^* h_T^* \mathbf{v}^*) & - \frac{1}{Pe} \text{div}^*(\rho^* \mathcal{D}^* \text{grad } h_T^*) - \frac{Ec}{Re} \mathbb{T}_v^* \cdot \mathbb{D}^* \\ & - Ec \frac{D\pi^*}{Dt^*} = \frac{L_0}{\rho_0 v_0 c_{\pi_0} \Delta\theta} (f^e + f_r^e). \end{aligned} \quad (1.68)$$

En el caso de gases perfectos se verifica la ecuación de Mayer $R = c_\pi - c_v$ y, por lo tanto, podemos escribir el número de Eckert como

$$Ec = M^2 (\gamma_0 - 1) \frac{\theta_c}{\Delta\theta}. \quad (1.69)$$

Así, tendremos que $Ec \ll 1$ si

$$M^2 (\gamma_0 - 1) \ll \frac{\Delta\theta}{\theta_c}, \quad (1.70)$$

lo que ocurrirá si el número de Mach es bajo y tenemos saltos de temperatura comparables con la temperatura característica de la mezcla de gases. Los problemas que simularemos serán flujos a bajo número de Mach en los que tienen lugar reacciones de combustión. Estas reacciones hacen que la mezcla alcance una temperatura media del orden de $1800K$ de forma que $\Delta\theta/\theta_c \approx 0.8$ y, por lo tanto, $Ec \ll 1$. Así, en general, en flujos reactivos a bajo número de Mach, podremos despreciar los términos de disipación de calor por efecto de la viscosidad, $\mathbb{T}_v \cdot \mathbb{D}$, si el número de Reynolds no es muy pequeño, y de calentamiento por compresibilidad, $\dot{\pi}$, obteniendo la ecuación de conservación de la entalpía térmica simplificada

$$\frac{\partial(\rho h_T)}{\partial t} + \text{div}(\rho h_T \mathbf{v}) - \text{div}(\rho \mathcal{D} \text{grad } h_T) = f^e + f_r^e. \quad (1.71)$$

En resumen, teniendo en cuenta las simplificaciones realizadas, el modelo que consideraremos para simular nuestra mezcla de gases reactivos será

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = f^m, \quad (1.72)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) - \operatorname{div} \mathbb{T}_v + \operatorname{grad} \pi = \rho \mathbf{g}, \quad (1.73)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_i \mathbf{v}) - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} Y_i) = f_i^f + f_i^m, \quad i = 1, \dots, N_e, \quad (1.74)$$

$$\frac{\partial(\rho h_T)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho h_T \mathbf{v}) - \operatorname{div}(\rho \mathcal{D} \operatorname{grad} h_T) = f^e + f_r^e, \quad (1.75)$$

$$\bar{\pi} = \rho R \theta. \quad (1.76)$$

Debemos tener en cuenta que se verifica la relación

$$\sum_{i=1}^{N_e} Y_i = 1, \quad (1.77)$$

con lo que podemos evitar resolver una ecuación para una especie, y que la temperatura se relaciona con la entalpía térmica y la composición mediante la ecuación (1.49).

Para la resolución del modelo propuesto será necesario conocer las fuentes de masa y energía provenientes de la fase condensada. Como hemos mencionado, estas fuentes en nuestros problemas serán debidas a la combustión de partículas de carbón y se calcularán resolviendo un modelo de combustión para las mismas. El modelo elegido será descrito en el Capítulo 2. Este modelo nos permitirá, además, simplificar el cálculo de la composición y la entalpía de la mezcla de gases, bajo ciertas hipótesis sobre las reacciones químicas.

1.5. Modelización de la turbulencia

Como vimos en la sección anterior, el número de Reynolds mide la relación entre los términos viscosos, con efecto estabilizante, y los términos de convección, con efecto desestabilizante. Si el número de Reynolds es pequeño los términos difusión suavizarán las pequeñas perturbaciones que haya en el flujo, obteniendo un régimen ordenado o laminar. A medida que el número de Reynolds crece, el flujo laminar se va complicando hasta llegar a un comportamiento caótico. Se dice entonces que el flujo es turbulento. En este tipo de flujos se producen variaciones muy rápidas de sus propiedades, siendo imposible determinar su valor instantáneo en una determinada posición. Así, será necesario realizar un estudio estadístico de las variables y ecuaciones que determinan el flujo.

La turbulencia es uno de los fenómenos más complejos en la mecánica de fluidos y, cuando el flujo es una mezcla de gases reactivos, hay que modelizar además la interacción entre la turbulencia y la cinética química. Es por esto que el estudio de los flujos turbulentos de fluidos reactivos es uno de los campos más complejos para la modelización matemática y la simulación numérica. Pero este tipo de flujos son los que encontramos en la mayoría de aplicaciones prácticas como calderas industriales o motores.

Hay numerosas referencias en la literatura sobre este campo como, por ejemplo, Kuo [63], Williams [95], Libby y Williams [68] y, más recientemente, Poinot y Veynante [83]. En estos

libros se hace una revisión de los diferentes modelos para flujos turbulentos reactivos, discutiendo las aplicaciones, limitaciones y dificultades de los mismos con vistas a su resolución numérica.

En esta sección se pretenden dar unas nociones básicas sobre la obtención de las ecuaciones para un flujo turbulento de gases reactivos, teniendo en cuenta los modelos que vamos a utilizar en nuestro código.

1.5.1. Conceptos elementales sobre turbulencia

En la modelización de flujos turbulentos se utilizan tres tipos de enfoque para el tratamiento de las diferentes escalas de estos flujos:

- DNS (Direct Numerical Simulations): se resuelven las ecuaciones sin utilizar ningún modelo de turbulencia. Es necesario realizar una malla lo bastante fina para capturar todos los remolinos hasta los más pequeños. Por ejemplo, para resolver una llama turbulenta en 3D en un recinto de 5^3mm^3 se necesita una malla de 1 a 2 millones de elementos (ver [83]). Es por esto por lo que este tipo de simulaciones han empezado a tener importancia en los últimos años por el desarrollo de los ordenadores, aunque, de momento, se limitan a problemas casi académicos.
- RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes): se calculan los valores medios de las variables del problema resolviendo las ecuaciones promediadas temporalmente. Al realizar el promedio de las ecuaciones aparecen algunos términos que deben ser aproximados utilizando modelos de turbulencia para completar el sistema de ecuaciones (cierre).
- LES (Large Eddy Simulations): se simulan las escalas o estructuras turbulentas más grandes, generalmente de tamaño mayor que la malla computacional, mientras que la influencia de las más pequeñas, las llamadas escalas submalla, se representa utilizando modelos de turbulencia. Las ecuaciones se obtienen filtrando las de partida.

En el código que hemos desarrollado hemos considerado dos elecciones para modelizar la turbulencia: por un lado una aproximación tipo RANS utilizando el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ estándar y, por otro lado, hemos implementado la resolución de las ecuaciones filtradas junto con el modelo de Smagorinsky.

1.5.2. Ecuaciones promediadas

Como vimos, al realizar una simulación tipo RANS obtenemos los valores medios de las variables que definen nuestro flujo. Para obtener las ecuaciones de estos valores medios de las variables, se promedian las ecuaciones del modelo (1.72)-(1.77). Existen dos tipos de procedimientos: utilizar un promedio temporal, llamado promedio de Reynolds, o un promedio temporal ponderado por la masa, llamado promedio de Favre.

Definición 1.5.1. *Dada una variable del problema ϕ , se definen los siguientes valores medios:*

- *el promedio de Reynolds:*

$$\bar{\phi}(x, t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \phi(x, s) ds, \quad (1.78)$$

- *el promedio de Favre:*

$$\tilde{\phi}(x, t) = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} = \frac{1}{\bar{\rho}} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \rho\phi(x, s) ds, \quad (1.79)$$

donde $\bar{\rho}$ es el promedio temporal de la densidad.

Las fluctuaciones en torno a estos promedios las denotaremos como ϕ' para la media de Reynolds y como ϕ'' para la media de Favre. De esta forma podemos descomponer una variable como suma de su valor medio y de su fluctuación en torno a la media:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \quad (1.80)$$

para la media de Reynolds, y

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'', \quad (1.81)$$

para la de Favre.

A la hora de obtener las ecuaciones promediadas, tendremos en cuenta que se verifican las siguientes propiedades (ver Kuo [63]):

$$\overline{\bar{\phi}} = \bar{\phi}, \quad (1.82)$$

$$\overline{\phi'} = 0, \quad (1.83)$$

$$\overline{\phi + \psi} = \bar{\phi} + \bar{\psi}, \quad \overline{\alpha\phi} = \bar{\alpha}\bar{\phi}, \quad (1.84)$$

$$\overline{\phi\psi} = \bar{\phi}\bar{\psi} + \overline{\phi'\psi'} \quad (1.85)$$

$$\overline{\tilde{\phi}''} = 0, \quad \overline{\phi''} \neq 0, \quad (1.86)$$

$$\overline{\rho\tilde{\phi}} = \bar{\rho}\tilde{\phi}, \quad (1.87)$$

$$\overline{\rho\phi''} = 0. \quad (1.88)$$

Los promedios de Reynolds se utilizan en caso de flujos con densidad constante, mientras que si la densidad es variable se utilizarán promedios de Favre. La relación entre los promedios de Favre y de Reynolds no es simple

$$\bar{\rho}\tilde{\phi} = \bar{\rho}\bar{\phi} + \overline{\rho'\phi'} \quad (1.89)$$

Si aplicamos la descomposición (1.81) a las ecuaciones del modelo para un flujo de gases reactivos (1.72)-(1.77) y las promediamos temporalmente, obtenemos

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) = \bar{f}^m, \quad (1.90)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Y}_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{Y}_i) - \operatorname{div}(\bar{\rho} \bar{D} \operatorname{grad} \tilde{Y}_i - \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}'' Y_i''}) = \bar{f}_i^r + \bar{f}_i^m, \quad i = 1, \dots, N_e, \quad (1.91)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}})}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \otimes \tilde{\mathbf{v}}) - \operatorname{div}(\bar{\mathbb{T}}_v - \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}'' \otimes \mathbf{v}''}) + \operatorname{grad} \bar{\pi}_h = \bar{\rho} \mathbf{g}, \quad (1.92)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{h}_T)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{h}_T) - \operatorname{div}(\bar{\rho} \bar{D} \operatorname{grad} \tilde{h}_T - \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}'' h_T''}) = -\operatorname{div} \bar{\mathbf{q}}_r + \bar{f}^e + \bar{f}_r^e, \quad (1.93)$$

$$\pi_0 = \bar{\rho} \mathcal{R} \tilde{\theta}, \quad (1.94)$$

siendo

$$\pi_0 = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \left(\frac{1}{\operatorname{vol}(\mathcal{B}_s)} \int_{\mathcal{B}_s} \pi(x, s) dx \right) ds. \quad (1.95)$$

Las ecuaciones (1.90)-(1.94) tienen nuevas incógnitas que pueden ser expresadas en función de variables ya conocidas utilizando modelos de turbulencia. Así, los flujos turbulentos de masa de especies y entalpía se modelarán usando la hipótesis clásica del gradiente

$$\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}'' Y_i''} \approx -\frac{\mu_t}{Sc_t} \operatorname{grad} \tilde{Y}_i, \quad (1.96)$$

$$\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}'' h_T''} \approx -\frac{\mu_t}{Sc_t} \operatorname{grad} \tilde{h}_T, \quad (1.97)$$

donde Sc_t es el número de Schmidt turbulento, cuyo valor más habitual es 0.7.

El término $\tau^F = -\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}'' \otimes \mathbf{v}''}$, se conoce como tensor de esfuerzos aparentes de Favre. Los modelos RANS de primer orden consideran válida la hipótesis de Boussinesq, que relaciona este tensor con los gradientes de las velocidades medias de la forma

$$\tau^F \approx \mu_t \left((\operatorname{grad} \tilde{\mathbf{v}} + (\operatorname{grad} \tilde{\mathbf{v}})^t) - \frac{2}{3} \operatorname{div} \tilde{\mathbf{v}} \mathbb{I} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \mathbb{I}. \quad (1.98)$$

La ventaja de esta hipótesis es su escaso coste computacional debido a que solo será necesario un modelo para obtener k y μ_t . La desventaja es la consideración de μ_t como una variable escalar isotrópica, lo cual en general no es cierto. Otra alternativa sería utilizar modelos RANS de segundo orden que consisten en resolver las ecuaciones que verifican las componentes de τ^F , pero estos modelos son mucho más complejos y presentan problemas en flujos con recirculación (ver [63]).

La modelización de las fuentes de masa y energía debidas a las reacciones \bar{f}_i^r, \bar{f}_r^e es más compleja y requiere un análisis detallado del problema, comparando las escalas de la química y de la turbulencia, y dependerá del tipo de combustión que ocurre. Entre los numerosos modelos desarrollados se encuentran, por ejemplo, los del tipo modelo de mezcla turbulenta. La hipótesis fundamental de estos modelos es que los tiempos de la química son más pequeños que los de la mezcla turbulenta. A este grupo pertenecen modelos como el Eddy-Break-Up o Eddy-Dissipation-Concept (también conocido como modelo Magnussen). Para ver con más profundidad estos y otros modelos se puede consultar cualquiera de las referencias citadas al inicio de la sección.

En el Capítulo 2 describiremos el modelo de combustión BFL laminar en el que, bajo ciertas hipótesis, los términos f_i^r , f_r^e desaparecen. Pero cuando el flujo es turbulento este modelo deberá ser modificado para tener en cuenta la influencia de la turbulencia en la química.

1.5.3. Modelo $k - \epsilon$ estándar

El modelo que utilizaremos para calcular la viscosidad turbulenta, μ_t , y la energía cinética turbulenta, k , es el modelo $k - \epsilon$ estándar. Este modelo es el más utilizado debido a su simplicidad y a su razonable precisión en flujos complejos. Un motivo más para la elección de este modelo es que los modelos de dispersión de partículas disponibles en la literatura utilizan siempre k y ϵ , así que necesitamos estos valores. Sin embargo tiene algunas desventajas notables, entre las que destacan: la imposibilidad de describir flujos anisótropos, derivada de la suposición de la hipótesis de Boussinesq, que no simula bien flujos con número de Reynolds bajo y que necesita utilizar leyes de pared para predecir el comportamiento del flujo cercano de las paredes. A estas desventajas le sumaremos otras encontradas durante su implementación con métodos de elementos finitos, que describiremos en la tercera parte de esta memoria, y que han sido objeto de numerosos estudios.

En el modelo $k - \epsilon$ estándar la viscosidad turbulenta se define como

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (1.99)$$

siendo C_μ una constante del modelo.

Las ecuaciones para la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación turbulenta son (ver, por ejemplo, [74]):

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}k) - \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \text{grad } k \right] = P_k - \bar{\rho}\epsilon, \quad (1.100)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\epsilon)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}\epsilon) - \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \text{grad } \epsilon \right] = C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k}, \quad (1.101)$$

donde P_k representa la producción de energía cinética turbulenta debida a los gradientes de la velocidad media, $C_{1\epsilon}$ y $C_{2\epsilon}$ son constantes y σ_k y σ_ϵ son los números de Prandtl para k y ϵ , respectivamente. Las constantes del modelo se determinan experimentalmente, siendo sus valores más comunes:

$$C_{1\epsilon} = 1.44, \quad C_{2\epsilon} = 1.92, \quad \sigma_k = 1.0, \quad \sigma_\epsilon = 1.3 \quad \text{y} \quad C_\mu = 0.09. \quad (1.102)$$

La producción de la energía cinética turbulenta viene dada por

$$P_k = -\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{v}'' \otimes \mathbf{v}''} \text{grad } \tilde{\mathbf{v}}, \quad (1.103)$$

donde para los esfuerzos de Favre τ^F se supone de nuevo la expresión (1.98). Así

$$P_k = 2\mu_t \|\mathbb{D}\|^2 - \frac{2}{3}(\text{div}\tilde{\mathbf{v}})^2 - \frac{2}{3}\bar{\rho}\text{div}\tilde{\mathbf{v}}, \quad (1.104)$$

siendo

$$\|\mathbb{D}\|^2 = \mathbb{D} \cdot \mathbb{D}. \quad (1.105)$$

Si llamamos $\omega = \frac{\epsilon}{k}$, podemos escribir las ecuaciones (1.100) y (1.101) de la siguiente forma, lo que facilitará su implementación:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}k) - \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \text{grad } k \right] + \bar{\rho}\omega k = P_k, \quad (1.106)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\epsilon)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}\epsilon) - \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \text{grad } \epsilon \right] + \bar{\rho}C_{2\epsilon}\omega\epsilon = C_{1\epsilon}\omega P_k. \quad (1.107)$$

1.5.4. Modelo general para flujos turbulentos de gases reactivos

Si tenemos en cuenta la hipótesis de Boussinesq sobre el tensor de esfuerzos aparentes de Favre (1.98), la forma asumida para los flujos de especies (1.96) y entalpía (1.97), y la viscosidad turbulenta dada por el modelo $k - \epsilon$, obtendremos, a partir de las ecuaciones promediadas (1.90)-(1.94), el modelo completo para un flujo turbulento de gases reactivos:

$$\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}) = \bar{f}^m, \quad (1.108)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_i)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}\tilde{Y}_i) - \text{div} \left(\left(\bar{\rho}\bar{D} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \text{grad } \tilde{Y}_i \right) = \bar{f}_i^r + \bar{f}_i^m, \quad i = 1, \dots, N_e \quad (1.109)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}})}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}} \otimes \tilde{\mathbf{v}}) + \text{grad } \bar{\pi}_h \\ - \text{div} \left(\bar{\mathbb{T}}_v + \mu_t (\text{grad } \tilde{\mathbf{v}} + (\text{grad } \tilde{\mathbf{v}})^t) - \frac{2}{3}\mu_t \text{div}\tilde{\mathbf{v}}\mathbb{I} - \frac{2}{3}\bar{\rho}k\mathbb{I} \right) = \bar{\rho}\mathbf{g}, \end{aligned} \quad (1.110)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h}_T)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}\tilde{h}_T) - \text{div} \left(\left(\bar{\rho}\bar{D} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \text{grad } \tilde{h}_T \right) = -\text{div}\bar{\mathbf{q}}_r + \bar{f}^e + \bar{f}_r^e, \quad (1.111)$$

$$\pi_0 = \bar{\rho}\mathcal{R}\tilde{\theta}, \quad (1.112)$$

$$\mu_t = \bar{\rho}C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (1.113)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}k) - \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \text{grad } k \right] + \rho\omega k = P_k, \quad (1.114)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\epsilon)}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}\epsilon) - \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \text{grad } \epsilon \right] + \rho C_{2\epsilon}\omega\epsilon = C_{1\epsilon}\omega P_k. \quad (1.115)$$

1.6. Condiciones de contorno utilizadas

Para completar la formulación del modelo laminar, (1.72)-(1.77) debemos introducir las condiciones de contorno para cada una de las ecuaciones en derivadas parciales que forman el mismo. Como veremos con más detalle en el capítulo dedicado a la resolución numérica del modelo, la ecuación (1.76) servirá para calcular la densidad de la mezcla, cuya composición y temperatura se obtendrán resolviendo (1.74) y (1.75), respectivamente. Por otra parte, de las ecuaciones (1.72) y (1.73) obtendremos la velocidad y la presión. De hecho, la ecuación

(1.72) será utilizada como restricción para la ecuación (1.73), resolviéndose el problema de manera similar a las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles.

Teniendo esto en cuenta, para resolver el modelo propuesto necesitaremos condiciones de contorno para las ecuaciones (1.73)-(1.75).

Denotaremos el dominio por Ω y su frontera por Γ . Podemos dividir la frontera en tres partes $\Gamma = \Gamma_E \cup \Gamma_S \cup \Gamma_P$, donde Γ_E son las entradas de flujo de masa, Γ_S las salidas y Γ_P es la parte de la frontera correspondiente a las paredes impermeables para el flujo másico.

Sea T la longitud del intervalo temporal para la simulación. Para el movimiento consideraremos las condiciones de contorno

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_E, \quad \text{en } \Gamma_E \times [0, T], \quad (1.116)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \Gamma_P \times [0, T], \quad (1.117)$$

$$\mathbb{T}\mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \Gamma_S \times [0, T], \quad (1.118)$$

siendo $\mathbf{v}_E : \Gamma_E \times [0, T] \rightarrow \mathcal{V}$ una función dada. En problemas de “flujo abierto”, como el caso de las llamas que vamos a simular, podemos sustituir la condición de pared prescribiendo la velocidad del flujo lejos de la llama, es decir,

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\infty, \quad \text{en } \Gamma_P \times [0, T]. \quad (1.119)$$

Para la ecuación de conservación de las especies consideraremos las condiciones de contorno

$$Y_i = Y_i^E, \quad i = 1, \dots, N_e - 1, \quad \text{en } \Gamma_E \times [0, T], \quad (1.120)$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad i = 1, \dots, N_e - 1, \quad \text{en } (\Gamma_S \cup \Gamma_P) \times [0, T], \quad (1.121)$$

con $Y_i^E : \Gamma_E \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, N_e - 1$, funciones dadas, es decir, se conoce la composición en la entrada y se supone flujo nulo en las paredes y en la salida.

Las condiciones de contorno para la ecuación de conservación de la energía son análogas a las de las especies. Así,

$$h_T = h_T^E, \quad \text{en } \Gamma_E \times [0, T], \quad (1.122)$$

$$\frac{\partial h_T}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \text{en } \Gamma_S \times [0, T], \quad (1.123)$$

$$\frac{\partial h_T}{\partial \mathbf{n}} = q, \quad \text{en } \Gamma_P \times [0, T], \quad (1.124)$$

$$(1.125)$$

siendo $h_T^E : \Gamma_E \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ y $q : \Gamma_P \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ dadas, con q representando el flujo de calor a través de las paredes por conducción. El flujo de calor por conducción a las paredes es de la forma

$$q = h_w(\theta_P^s - \theta_P^g), \quad (1.126)$$

siendo θ_P^g la temperatura de los gases cerca de la pared, θ_P^s la temperatura de la pared sólida, o del flujo exterior a la misma, y h_w el coeficiente de transferencia de calor ($\text{W}/\text{m}^2\text{K}$).

Este coeficiente se calcula teniendo en cuenta la capa límite térmica y, en el caso de flujos turbulentos, la capa límite hidrodinámica.

Cuando el flujo es turbulento y utilizamos el modelo $k - \epsilon$, debemos dar condiciones de contorno para las ecuaciones de k y ϵ . En este trabajo hemos considerado las siguientes:

$$k = k^E, \quad \epsilon = \epsilon^E, \quad \text{en } \Gamma_E \times [0, T], \quad (1.127)$$

$$\frac{\partial k}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \text{en } (\Gamma_P \cup \Gamma_S) \times [0, T]. \quad (1.128)$$

El modelo $k - \epsilon$ no es válido en las regiones cercanas a las paredes y, por esta razón, normalmente se usa junto con leyes de pared que evitan el cálculo de k , ϵ y \mathbf{v} en estas regiones. La implementación de las leyes de pared es una de las mayores dificultades numéricas del modelo $k - \epsilon$ pues involucran un acoplamiento no lineal entre las tres variables anteriores. Dado que los flujos que vamos a simular en esta tesis son flujos en dominios abiertos, no será necesario considerar leyes de pared. Así, la implementación de estas leyes de pared o de modelos válidos en regiones con bajo número de Reynolds formará parte del trabajo a realizar en el futuro.

Capítulo 2

Modelo de combustión

2.1. Introducción

Los procesos fisico-químicos que tienen lugar en flujos de gases reactivos que incluyen la combustión de partículas de carbón pulverizado son de una gran complejidad. Esto obliga a desarrollar modelos simplificados que describan tanto los fenómenos que ocurren en el interior de las partículas, como los que tienen lugar en la mezcla gaseosa que incluirá a aquellas especies liberadas durante la gasificación del carbón.

Estos modelos se dividen en dos partes: una para la mezcla de gases y otra para las partículas de carbón (a la que también nos referiremos como fase discreta, dispersa o condensada). La forma general para el modelo de fase gaseosa la hemos visto en el capítulo 1 y deberá ser completada indicando un tratamiento para la química que tenga en cuenta las características del proceso que se va a modelizar. Para la de fase sólida se suele utilizar una descripción Lagrangiana, es decir, se calculará la evolución de las partículas siguiendo su trayectoria a lo largo del tiempo.

En los problemas que vamos a considerar tendremos reacciones de combustión, en la mezcla de gases, que supondremos que ocurren en llamas de difusión. El modelo que vamos a describir en este capítulo ha sido desarrollado en Bermúdez *et al* [19] y nos referiremos a él como modelo BFL (acrónimo de Bermúdez, Ferrín y Liñán). En este modelo la hipótesis fundamental es la de *Burke-Schumann* que considera que las reacciones en fase gaseosa son infinitamente rápidas comparadas con el resto de las escalas temporales del problema. Así, las llamas de difusión serán infinitamente delgadas y separarán zonas con oxígeno y sin combustibles de zonas con combustibles y sin oxígeno. Estas llamas pueden estar dentro de las partículas, en el gas de su entorno o lejos de ellas y cada caso se tendrá en cuenta para la derivación del modelo de fase sólida. La hipótesis de Burke-Schumann para las reacciones de combustión en fase gaseosa permitirá simplificar las ecuaciones que determinan la composición y la energía de la mezcla.

En el modelo BFL se consideraban partículas con alto contenido en cenizas y cuyo radio permanecía constante durante su gasificación. En este capítulo completaremos el análisis realizado en [19] para tener en cuenta dos casos más simples: en primer lugar el correspondiente a partículas con alto contenido en cenizas pero con un tamaño suficientemente pequeño que

produzca la extinción de la llama de difusión en su vecindad. En segundo lugar el correspondiente a partículas con bajo contenido en cenizas, que es el habitual en la literatura sobre combustión de carbón. En este caso, la capa de cenizas tiene una gran porosidad y resulta estructuralmente inestable, produciéndose su fragmentación. Por lo tanto, el radio de la partícula disminuirá durante la gasificación y la tasa de gasificación del carbón tendrá una forma más simple. Tampoco, en este segundo caso, la llama de difusión se encuentra en la vecindad de la partícula. Ambos casos simplificados se denominarán BFLs1 y BFLs2, respectivamente.

2.2. Llamas de difusión

En un flujo con gases reactivos las llamas de difusión se producen cuando el combustible y el comburente, no mezclados previamente, entran en contacto por difusión. Así, al contrario que en la combustión premezclada, el combustible y el comburente entran por lugares distintos en la cámara de combustión y se mezclan solamente en la zona donde reaccionan. De esta forma, el dominio quedará dividido en tres partes: una parte en la que hay oxidante y no hay combustibles, otra zona en la que hay combustibles pero no oxidante y la zona de la llama. En la Figura 2.1 podemos ver el esquema de un prototipo de llama de difusión.

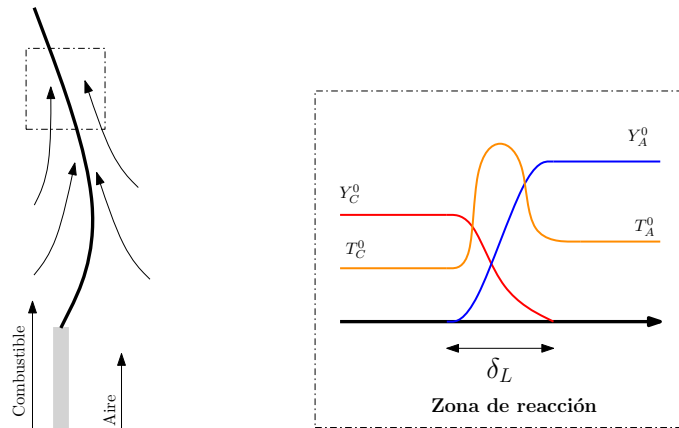


Figura 2.1: Esquema de una llama de difusión

La anchura de esta llama de difusión, que denotaremos por δ_L , vendrá determinada por las velocidades de las reacciones químicas que en ella tienen lugar y por la velocidad de difusión de las especies. Relacionado con ella, se define el número de Damköhler como el cociente entre los tiempos característicos del flujo y de la química

$$Da = \frac{\tau_f}{\tau_c}. \quad (2.1)$$

El tiempo del flujo tiene que ver con el tiempo en el que se mezclan y difunden los gases del flujo, por lo que dependerá del tipo de problema que estemos considerando y será definido en cada caso. Si se considera química muy rápida, el número de Damköhler tomará valores muy grandes comparados con la unidad.

La hipótesis de Burke-Schumann supone que las reacciones son infinitamente rápidas e irreversibles. Esto implica que el número de Damköhler es infinito y la llama de difusión infinitamente delgada, es decir, $\delta_L \rightarrow 0$, lo que significa que el oxidante y el combustible no pueden coexistir. Éste es el tratamiento más sencillo para la química en una llama de difusión y será la hipótesis fundamental para la derivación del modelo BFL. Cuando el flujo es turbulento esta hipótesis puede no ser válida ya que la estructura de la llama será más compleja, el tiempo de mezcla disminuirá y podrán ocupar el mismo lugar comburente y combustible. En este caso será necesario modificar el modelo BFL.

2.3. Modelo de combustión

Una partícula de carbón está formada por carbono fijo (o “char”), materias volátiles, humedad y cenizas. En la combustión de una partícula de carbón se pueden distinguir varias etapas: en una primera etapa, la partícula se calienta por el calor que le aporta la fase gaseosa. Al alcanzar una determinada temperatura dará comienzo una segunda etapa en la que se produce la evaporación de la humedad y la liberación de las materias volátiles a la fase gaseosa. Los volátiles liberados se quemarán en la fase gaseosa aumentando la temperatura de la mezcla de gases y de la propia partícula. Cuando la temperatura de la partícula alcance un cierto valor se iniciarán las reacciones de gasificación del char con algunas especies de la fase gaseosa. En esta tercera etapa la partícula puede seguir liberando los volátiles y la humedad que todavía contenga. Si el carbón que consideramos tiene un alto contenido en cenizas, que no pierde durante las etapas segunda y tercera, podemos considerar que el tamaño de cada partícula permanece constante. En caso contrario, durante la gasificación, la capa de cenizas que rodea al núcleo de carbono se romperá y, por lo tanto, el volumen de la partícula disminuirá.

Una vez que se haya quemado toda la fracción combustible de la partícula ésta seguirá intercambiando calor con la fase gaseosa hasta abandonar el recinto donde se está produciendo la combustión. Podemos ver un esquema de las diferentes etapas en la combustión de una partícula con alto contenido en cenizas, en la Figura 2.2.

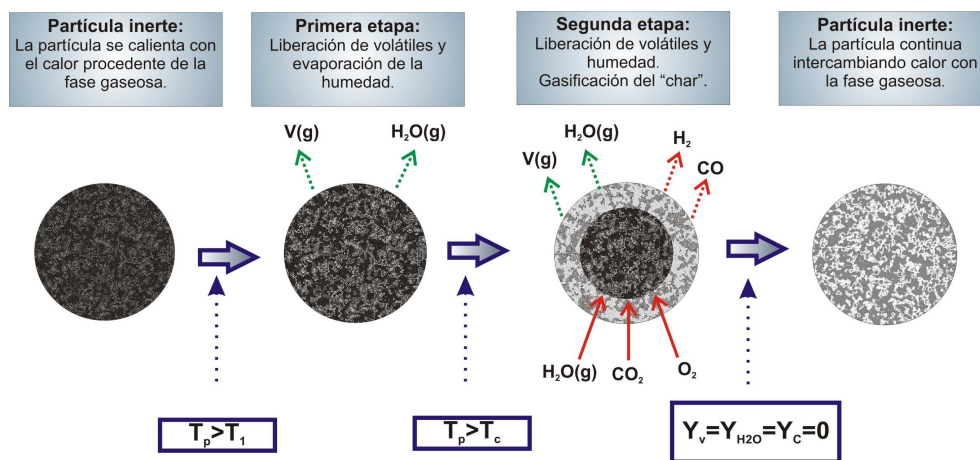
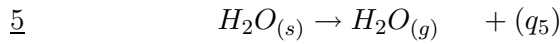
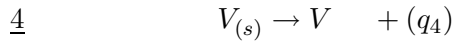
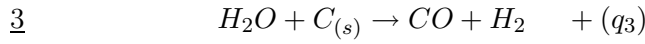
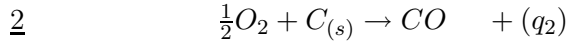
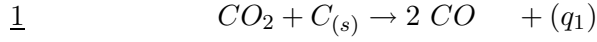
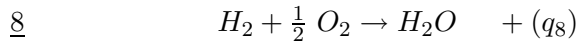
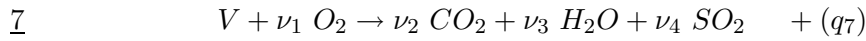
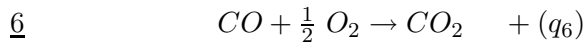


Figura 2.2: Combustión de una partícula de carbón con alto contenido en cenizas

El modelo cinético simplificado que consideramos consta de los siguientes procesos físico-químicos, expresados por las reacciones heterogéneas:



y por las siguientes reacciones de oxidación en fase gaseosa:



donde los índices s y g denotan la fase sólida y gaseosa, respectivamente, q_i es el calor de la reacción i por unidad de masa gasificada y $V_{(g)}$ denota los volátiles. Por simplicidad, consideraremos los volátiles equivalentes a una única molécula:

$$V_{(g)} = C_{\kappa_1} H_{\kappa_2} O_{\kappa_3} S_{\kappa_4}.$$

Los coeficientes $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ y κ_4 se obtienen del análisis elemental del carbón, mientras que los coeficientes estequiométricos molares ν_i vienen dados por

$$\begin{aligned} \nu_1 &= (2\kappa_1 + \kappa_2/2 + 2\kappa_4 - \kappa_3)/2, & \nu_2 &= \kappa_1, \\ \nu_3 &= \kappa_2/2, & \nu_4 &= \kappa_4. \end{aligned}$$

Llamaremos \mathcal{M}_V a la masa molecular de los volátiles, que ha de ser calculada para cada tipo de carbón. La masa molecular del resto de las especies consideradas se puede ver en la Tabla 2.1.

Especie	Masa molecular (kg/kmol)
CO_2	44
O_2	32
H_2O	18
CO	28
H_2	2
SO_2	64
$C_{(s)}$	12

Tabla 2.1: Masas moleculares

Recordemos que se ha denotado por γ_l la velocidad de la reacción l -ésima en $\text{kmol}/\text{m}^3\text{s}$ mientras que w_l será la velocidad expresada en $\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$. La velocidad global de gasificación del char, w_C , quedará determinada por la suma de las velocidades de las reacciones 1, 2 y 3:

$$w_C = w_1 + w_2 + w_3. \quad (2.2)$$

Para que el modelo sea válido se deben verificar las desigualdades

$$L_0 \gg l_c \gg l_p \gg a_p, \quad (2.3)$$

donde L_0 , l_c , l_p y a_p son las longitudes características del dominio de cálculo, de la celda computacional, de la distancia entre partículas y del radio de las mismas. Estas desigualdades nos permitirán, por ejemplo, considerar la fase sólida como dispersa, es decir, despreciar las influencias de unas partículas sobre otras y considerar que su movimiento no perturba el movimiento de la fase gaseosa. Como la fracción volumétrica de la fase discreta es pequeña, podemos realizar un tratamiento homogeneizado de la mezcla de gases y partículas. Así, la influencia de la combustión de las partículas en las ecuaciones del modelo de fase gaseosa vendrá dada por fuentes homogeneizadas de masa y energía. El acoplamiento entre los dos modelos también se producirá en el otro sentido pues la fase gaseosa determinará la atmósfera en la que se queman las partículas.

En la derivación de este modelo se aplica la hipótesis de Burke-Schumann para las reacciones en fase gaseosa. En un flujo con combustión de carbón, las llamas de difusión delgadas donde ocurren estas reacciones pueden encontrarse en el interior de las partículas porosas, en el gas de su entorno o en el que está lejos de ellas. El lugar que ocupen las llamas dependerá de la temperatura y de las concentraciones locales de oxígeno, monóxido de carbono, volátiles e hidrógeno (en lo que sigue a estas tres últimas especies se les llamará combustibles). En la Figura 2.3 se puede ver un esquema de las llamas de difusión (pintadas con una línea negra gruesa) que se producen en un quemador típico de carbón pulverizado. En el esquema se pueden ver los tres tipos de localización de las llamas de difusión en fase gaseosa.

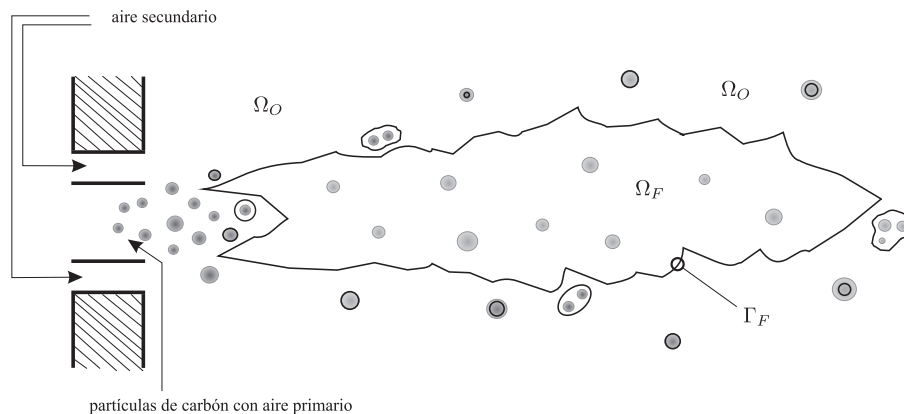


Figura 2.3: Esquema de llamas de difusión formadas en un inyector de carbón pulverizado

En particular, la hipótesis de Burke-Schumann implica que el oxígeno no puede coexistir con los combustibles. Por esto, el flujo de gases después de la homogeneización quedará dividido en dos regiones: una en la que no hay oxígeno, que denotaremos por Ω_F , y otra en la

que sí lo hay, que denotaremos por Ω_O . Estas regiones estarán separadas por una superficie, Γ_F , donde se sitúa la llama.

Debido a esta división del dominio, hay que distinguir dos casos: en primer lugar, cuando una partícula se quema en Ω_O , los combustibles que se producen durante la gasificación se consumen completamente, en una llama de difusión, dentro de la partícula o pegada a ella. En este caso las partículas no representan fuentes de combustibles para la fase gaseosa. El segundo caso, cuando la partícula está en Ω_F , al no haber oxígeno, las reacciones homogéneas 6, 7 y 8 no tienen lugar y los combustibles se unen a la fase gaseosa sin quemarse.

2.4. Modelo para la fase gaseosa

En esta sección veremos cómo se puede simplificar el modelo (1.72)-(1.77) cuando se considera válida la hipótesis de Burke-Schumann.

Si llamamos \mathcal{L}_g al operador diferencial definido por

$$\mathcal{L}_g(u) = \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \text{div}(\rho u \mathbf{v}) - \text{div}(\rho \mathcal{D} \text{grad } u), \quad (2.4)$$

podemos escribir las ecuaciones de conservación de la masa de cada una de las especies gaseosas (1.74), y de la energía (1.75) como

$$\mathcal{L}_g(Y_{O_2}) = f_{O_2}^m + f_{O_2}^r, \quad (2.5)$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{CO_2}) = f_{CO_2}^m + f_{CO_2}^r, \quad (2.6)$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{H_2O}) = f_{H_2O}^m + f_{H_2O}^r, \quad (2.7)$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{SO_2}) = f_{SO_2}^m + f_{SO_2}^r, \quad (2.8)$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{CO}) = f_{CO}^m + f_{CO}^r, \quad (2.9)$$

$$\mathcal{L}_g(Y_V) = f_V^m + f_V^r, \quad (2.10)$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{H_2}) = f_{H_2}^m + f_{H_2}^r, \quad (2.11)$$

$$\mathcal{L}_g(h_T) = f^e + f_r^e - \text{div} \mathbf{q}_r. \quad (2.12)$$

Utilizando las definiciones de f_r^e y f_i^r , $i = O_2, CO, V, H_2, CO_2, SO_2, H_2O$, dadas en (1.53) y (1.21), respectivamente, y las masas moleculares de las especies dadas en la Tabla 2.1 tenemos

$$f_{O_2}^r = -(16\gamma_6 + 32\nu_1\gamma_7 + 16\gamma_8), \quad (2.13)$$

$$f_{CO_2}^r = 44\gamma_6 + 44\nu_2\gamma_7, \quad (2.14)$$

$$f_{H_2O}^r = 18\nu_3\gamma_7 + 18\gamma_8, \quad (2.15)$$

$$f_{SO_2}^r = 64\nu_4\gamma_7, \quad (2.16)$$

$$f_{CO}^r = -28\gamma_6, \quad (2.17)$$

$$f_V^r = -\mathcal{M}_V\gamma_7, \quad (2.18)$$

$$f_{H_2}^r = -2\gamma_8 \quad (2.19)$$

y

$$\begin{aligned}
f_r^e = & - (44h_{CO_2}^0 - 28h_{CO}^0 - 16h_{O_2}^0) \gamma_6 \\
& - (44\nu_2 h_{CO_2}^0 + 18\nu_3 h_{H_2O}^0 + 64\nu_4 h_{SO_2}^0 - \mathcal{M}_V h_V^0 - 32\nu_1 h_{O_2}^0) \gamma_7 \\
& - (18h_{H_2O}^0 - 2h_{H_2}^0 - 16h_{O_2}^0) \gamma_8.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Usando la definición del calor de reacción dada en (1.18) para las reacciones en fase gaseosa, deducimos

$$\begin{aligned}
q_6 &= -\frac{1}{\mathcal{M}_{CO}}(h_{CO_2}^0 \mathcal{M}_{CO_2} - 0.5h_{O_2}^0 \mathcal{M}_{O_2} - h_{CO}^0 \mathcal{M}_{CO}), \\
q_7 &= \frac{1}{\mathcal{M}_V}(\nu_2 h_{CO_2}^0 \mathcal{M}_{CO_2} + \nu_3 h_{H_2O}^0 \mathcal{M}_{H_2O} + \nu_4 h_{SO_2}^0 \mathcal{M}_{SO_2} - \nu_1 h_{O_2}^0 \mathcal{M}_{O_2} - h_V^0 \mathcal{M}_V), \\
q_8 &= \frac{1}{\mathcal{M}_{H_2}}(h_{H_2O}^0 \mathcal{M}_{H_2O} - 0.5h_{O_2}^0 \mathcal{M}_{O_2} - h_{H_2}^0 \mathcal{M}_{H_2}).
\end{aligned}$$

Si tenemos en cuenta que se verifican las igualdades

$$w_6 = \mathcal{M}_{CO} \gamma_6, \quad w_7 = \mathcal{M}_V \gamma_7 \quad \text{y} \quad w_8 = \mathcal{M}_{H_2} \gamma_8, \tag{2.21}$$

podemos escribir las ecuaciones (2.5)-(2.12) en función de las velocidades y de los calores de reacción, llegando a

$$\mathcal{L}_g(Y_{O_2}) = f_{O_2}^m - \frac{4}{7}w_6 - \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V}w_7 - 8w_8, \tag{2.22}$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{CO_2}) = f_{CO_2}^m + \frac{11}{7}w_6 + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V}w_7, \tag{2.23}$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{H_2O}) = f_{H_2O}^m + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V}w_7 + 9w_8, \tag{2.24}$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{SO_2}) = f_{SO_2}^m + \frac{64\nu_4}{\mathcal{M}_V}w_7, \tag{2.25}$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{CO}) = f_{CO}^m - w_6, \tag{2.26}$$

$$\mathcal{L}_g(Y_V) = f_V^m - w_7, \tag{2.27}$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{H_2}) = f_{H_2}^m - w_8, \tag{2.28}$$

$$\mathcal{L}_g(h_T) = f^e + q_6 w_6 + q_7 w_7 + q_8 w_8 - \text{div} \mathbf{q}_T. \tag{2.29}$$

Para el cálculo de las fuentes provenientes de la fase dispersa f_r^e y f_i^r , $i = O_2, CO, V, H_2, CO_2, SO_2, H_2O$, necesitamos describir la respuesta de la partícula en las condiciones del gas de su entorno. Este análisis se llevará a cabo en la Sección 2.5.

Como estamos suponiendo que se verifica la hipótesis de Burke-Schumann de reacciones en fase gaseosa infinitamente rápidas, lo que implica la no coexistencia de los combustibles con el O_2 , no será necesario dar expresiones para las velocidades de éstas. Si definimos los

siguientes escalares conservados o combinaciones lineales de Shvab-Zeldovich

$$Z_1 = Y_{O_2} - \frac{4}{7}Y_{CO} - \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V}Y_V - 8Y_{H_2}, \quad (2.30)$$

$$Z_2 = Y_{CO_2} + \frac{11}{7}Y_{CO} + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V}Y_V, \quad (2.31)$$

$$Z_3 = Y_{H_2O} + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V}Y_V + 9Y_{H_2}, \quad (2.32)$$

$$Z_4 = Y_{SO_2} + \frac{64\nu_4}{\mathcal{M}_V}Y_V, \quad (2.33)$$

$$H = h_T + q_6Y_{CO} + q_7Y_V + q_8Y_{H_2}, \quad (2.34)$$

podemos eliminar los términos de las reacciones gaseosas en las ecuaciones (2.22)-(2.29), obteniendo

$$\mathcal{L}_g(Z_1) = f_{O_2}^m - \frac{4}{7}f_{CO}^m - \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V}f_V^m - 8f_{H_2}^m, \quad (2.35)$$

$$\mathcal{L}_g(Z_2) = f_{CO_2}^m + \frac{11}{7}f_{CO}^m + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V}f_V^m, \quad (2.36)$$

$$\mathcal{L}_g(Z_3) = f_{H_2O}^m + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V}f_V^m + 9f_{H_2}^m, \quad (2.37)$$

$$\mathcal{L}_g(Z_4) = f_{SO_2}^m + \frac{64\nu_4}{\mathcal{M}_V}f_V^m, \quad (2.38)$$

$$\mathcal{L}_g(H) = f^e + q_6f_{CO}^m + q_7f_V^m + q_8f_{H_2}^m - \nabla \cdot \mathbf{q}_r. \quad (2.39)$$

Una vez resueltas las ecuaciones (2.35)-(2.39) recuperaremos los valores de la entalpía térmica y de las fracciones másicas de las especies que componen la mezcla gaseosa. Para ello deberemos tener en cuenta la región del dominio en la que nos encontramos, la cual vendrá determinada por el valor de Z_1 . Así, procederemos de la siguiente forma:

1. Si $Z_1 > 0$ estaremos en la región Ω_O , es decir, sí habrá oxígeno, lo que implica que $Y_V = Y_{H_2} = Y_{CO} = 0$ y, usando (2.30)-(2.34), tendremos

$$\begin{aligned} Y_{O_2} &= Z_1, \\ Y_{CO_2} &= Z_2, \\ Y_{H_2O} &= Z_3, \\ Y_{SO_2} &= Z_4, \\ h_T &= H. \end{aligned} \quad (2.40)$$

2. Si $Z_1 < 0$ estaremos en la región Ω_F , con lo cual $w_6 = w_7 = w_8 = 0$ al no haber oxígeno. En este caso, para calcular las fracciones másicas de la mezcla y su entalpía, necesitaremos resolver dos ecuaciones adicionales elegidas entre (2.26)-(2.28) pero sin términos de reacción. Podremos elegir, por ejemplo

$$\mathcal{L}_g(Y_V) = f_V^m \text{ en } \Omega_F, \quad (2.41)$$

$$\mathcal{L}_g(Y_{H_2}) = f_{H_2}^m \text{ en } \Omega_F, \quad (2.42)$$

que deberán ser integradas usando las condiciones de contorno $Y_V = 0$ y $Y_{H_2} = 0$ en la superficie Γ_F dada por $Z_1 = 0$, que separa las regiones Ω_O y Ω_F .

El modelo para la fase gaseosa dado en esta sección es muy general y sería válido para modelos de fase sólida diferentes del que describiremos en la siguiente sección.

2.5. Modelo para la fase sólida

En esta sección describiremos el modelo para la fase sólida que proporcionará las fuentes de masa y energía procedentes de la combustión de las partículas. Estas fuentes se calcularán haciendo una descripción Lagrangiana de la temperatura y de la masa de cada partícula a lo largo de su trayectoria.

Supondremos que las partículas son esféricas y su radio es r_p . Por simplicidad, nos restringiremos al caso de bajo número de Peclet, relativo a la velocidad de la partícula en relación con la velocidad del gas ambiente. De esta forma, los efectos del movimiento de este gas ambiente relativos a la partícula pueden ser despreciados y es posible considerar la concentración y la temperatura del gas dentro de la partícula y en su entorno como campos con simetría esférica.

Como vimos en la Sección 2.3, una partícula de carbón está compuesta por cenizas, humedad, volátiles y carbono fijo. Por lo tanto, la masa de una partícula de carbón, m_p , se puede escribir como

$$m_p = m_{H_2O} + m_V + m_C + m_{cen}, \quad (2.43)$$

donde m_{H_2O} y m_V son los valores, dentro de la partícula, de la masa de volátiles y de agua que están en forma condensada, respectivamente. Denotaremos por ρ_p la densidad de la partícula y por ρ_V , ρ_{cen} , ρ_C y ρ_{H_2O} las densidades de las sustancias que la componen y llamaremos v_p al volumen de la misma¹.

Para facilitar la lectura, introducimos en este punto nueva notación referente a las reacciones químicas, que se utilizará posteriormente. Así, para cada reacción i consideramos:

- B_i factor de frecuencia,
- \mathcal{E}_i energía de activación,
- w_i masa gasificada por unidad de volumen y de tiempo,
- \dot{m}_i masa gasificada por unidad de tiempo,
- λ_i velocidad de reacción adimensional.

Las velocidades de reacción adimensionales para las reacciones 1, 2 y 3 se definen como la tasa de masa de “char” gasificado por la reacción dividida por el flujo de difusión característico

$$4\pi r_p \rho \mathcal{D}, \quad (2.44)$$

mientras que para las reacciones 4 y 5 se definen como la tasa de masa liberada de volátiles y humedad, respectivamente, dividida por el flujo (2.44). Por lo tanto, se verifican las siguientes relaciones:

$$\dot{m}_i = w_i v_p = 4\pi r_p \rho \mathcal{D} \lambda_i, \quad (2.45)$$

¹Por simplicidad en la notación solo utilizaremos el índice p en estas y otras variables cuando sea necesario distinguirlas de las que se refieren a valores en la fase gaseosa.

con $i = 1, \dots, 5$.

La velocidad adimensional de gasificación global y la masa total gasificada serán

$$\lambda = \sum_{i=1}^5 \lambda_i \text{ y } \dot{m} = \sum_{i=1}^5 \dot{m}_i, \quad (2.46)$$

respectivamente.

Supongamos que la densidad de cenizas de las partículas permanece constante durante la combustión. La evolución de m_{H_2O} , m_V y m_C , con respecto al tiempo, viene dada por

$$\frac{dm_V}{dt} = -\dot{m}_4, \quad \frac{dm_{H_2O}}{dt} = -\dot{m}_5, \quad \frac{dm_C}{dt} = -\dot{m}_C. \quad (2.47)$$

Cuando escribimos la ecuación de la temperatura de la partícula, podemos considerarla espacialmente uniforme, es decir, $T_p(t)$. Esta suposición se basa en que el tiempo característico de la conducción de calor en la partícula es pequeño comparado con el tiempo de difusión. Entonces, las reacciones que tienen lugar dentro de la partícula generan unas variaciones de temperatura pequeñas comparadas con la temperatura a la que se encuentra la partícula. Si despreciamos las variaciones espaciales de la temperatura en el interior de la partícula, podemos escribir la ecuación

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi r_p^2 (q_p'' + q_r'') + \int_0^{r_p} \left(\sum_{i=1}^8 q_i w_i \right) 4\pi r^2 dr, \quad (2.48)$$

donde $4\pi r_p^2 q_p''$ y $4\pi r_p^2 q_r''$ son los flujos de calor que llegan a la partícula por conducción y por radiación, respectivamente, siendo

$$q_p'' = k_T \frac{dT}{dr} \Big|_{r=a+}, \quad q_r'' = \varepsilon_p \left(\frac{1}{4} \int_{S^2} I(x, \omega) d\omega - \sigma T_p^4 \right), \quad (2.49)$$

donde $I(x, \omega)$ es la intensidad de radiación en la dirección ω en la posición de la partícula, que denotamos por x , ε_p es la emisividad de la partícula, $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ es la constante de Stefan-Boltzmann y S^2 es la esfera unidad.

Las velocidades de reacción por unidad de volumen, de las reacciones de gasificación del carbono fijo, se podrían modelizar utilizando leyes de tipo Arrhenius de la forma:

$$w_1 = B_1 e^{-\varepsilon_1/\mathcal{R}T_p} \rho Y_{CO_2} H(\rho_C), \quad (2.50)$$

$$w_2 = B_2 e^{-\varepsilon_2/\mathcal{R}T_p} \rho Y_{O_2} H(\rho_C), \quad (2.51)$$

$$w_3 = B_3 e^{-\varepsilon_3/\mathcal{R}T_p} \rho Y_{H_2O} H(\rho_C), \quad (2.52)$$

donde Y_{H_2O} , Y_{O_2} e Y_{CO_2} son las fracciones másicas de agua, oxígeno y dióxido de carbono del gas que llena los poros, ρ su densidad y H es la función de Heaviside. La inclusión de esta función como factor se hace para que estas tres velocidades sean cero cuando el carbono de la partícula se haya consumido completamente.

Para las reacciones de liberación de los volátiles y del vapor de agua usamos las leyes

$$w_4 = B_4 e^{-\varepsilon_4/\mathcal{R}T_p} \rho_V, \quad (2.53)$$

$$w_5 = B_5 e^{-\varepsilon_5/\mathcal{R}T_p} \rho_{H_2O}, \quad (2.54)$$

de primer orden, pero el análisis podría generalizarse fácilmente para otras más complejas. De este modo, la evaporación de la humedad se describe, por simplicidad, con un modelo cinético similar al modelo de pirólisis de generación de volátiles.

Dado que se considera la temperatura de la partícula espacialmente homogénea, a partir de las expresiones (2.53) y (2.54) se deduce que las tasas de generación de vapor de agua y de volátiles son uniformes en el interior de la partícula y dadas en función de dicha temperatura T_p . Asumimos que durante los procesos de liberación de humedad y volátiles el radio de la partícula no varía y podemos calcular la variación con el tiempo de ρ_V y ρ_{H_2O} de la forma

$$\frac{d\rho_V}{dt} = -w_4(T_p) = -B_4 e^{-\mathcal{E}_4/\mathcal{R}T_p} \rho_V, \quad (2.55)$$

$$\frac{d\rho_{H_2O}}{dt} = -w_5(T_p) = -B_5 e^{-\mathcal{E}_5/\mathcal{R}T_p} \rho_{H_2O}. \quad (2.56)$$

No se puede llegar a una expresión similar a partir de la tercera ecuación de (2.47) debido a que w_1 , w_2 y w_3 son funciones de Y_{CO_2} , Y_{O_2} y Y_{H_2O} y éstas no son uniformes en el interior de la partícula, debido al fenómeno de difusión interna.

Para llevar a cabo un tratamiento más simple de los efectos de las reacciones de gasificación del char 1, 2 y 3, se tendrá en cuenta que todas las energías de activación de estas reacciones son grandes. Los números de Damköhler de estas reacciones, que se definen como

$$Da_i = (r_p^2/D_e) B_i e^{-\mathcal{E}_i/\mathcal{R}T_p}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.57)$$

dependen fuertemente de la temperatura. Como las energías de activación de las reacciones 1, 2 y 3 son grandes, la etapa de transición se tiene cuando los números de Damköhler asociados a estas reacciones son del orden de la unidad. Así, los números de Damköhler nos permiten distinguir dos etapas en la gasificación del char. En la primera etapa ($Da_i \ll 1, i = 1, 2, 3$), las reacciones de gasificación se pueden considerar congeladas y podremos escribir $w_C = 0$, mientras que en la segunda etapa ($Da_i \gg 1, i = 1, 2, 3$), estas reacciones son muy rápidas y tienen lugar en una llama de difusión. Esta llama se encontrará en $r = r_c(t)$, siendo $r_c(t)$ el radio del núcleo de carbono fijo de la partícula en el instante t . Este radio irá disminuyendo a medida que el carbono se gasifica, por lo que a este modelo se le conoce con el nombre de “shrinking core”.

La llama de difusión de las reacciones de gasificación impide que puedan coexistir en el interior de la partícula el carbono fijo con las especies que lo atacan. Entonces, los términos w_1 , w_2 y w_3 se convierten en deltas de Dirac en $r = r_c(t)$, con valores en esta superficie w_1'' , w_2'' y w_3'' determinados para asegurar que $Y_{CO_2} = Y_{O_2} = Y_{H_2O} = 0$ dentro de la llama, $r \leq r_c$, y que $Y_C = 0$ en $r > r_c$.

Además, si suponemos que los cambios en ρ_C durante la primera etapa son despreciables, podremos considerar

$$\rho_C(r, t) = \begin{cases} \rho_C^0 & \text{si } r \leq r_c(t) \\ 0 & \text{si } r > r_c(t) \end{cases} \quad (2.58)$$

siendo ρ_C^0 el valor inicial de la densidad de carbono en la partícula.

Teniendo en cuenta la definición (2.58) podemos escribir la tercera ecuación de (2.47) en la segunda etapa como

$$3\rho_C^0 r_c^2 \frac{dr_c}{dt} = -w_C. \quad (2.59)$$

Para calcular los valores de w_1 , w_2 y w_3 y obtener la evolución de r_c deberemos resolver las ecuaciones de conservación de masa de las especies en el gas del interior de la partícula, para valores dados de T_p y de la composición del gas en la superficie de la misma. Las fracciones másicas en la superficie de la partícula deberán obtenerse de las ecuaciones de conservación de las especies, pero en el entorno gaseoso de la partícula. Para resolver todas estas ecuaciones se utilizarán técnicas similares a las empleadas en la derivación del modelo de fase gaseosa, considerando, cuando sea posible, la hipótesis de Burke-Schumann. Para realizar este análisis se debe tener en cuenta la región en la que se está gasificando la partícula, su contenido en cenizas y su tamaño.

2.5.1. Partículas grandes con alto contenido en cenizas

Los modelos obtenidos para este tipo de partículas son los descritos en [19], donde se puede ver su derivación con más detalle.

En el caso de partículas con alto contenido en cenizas se puede suponer que el radio de la partícula y, por lo tanto, su volumen, permanecen constantes a lo largo de todo el proceso de combustión. Si llamamos a al valor del radio inicial de la partícula tendremos que, para todo instante t , $r_p(t) = a$.

Como vimos en la Sección 2.3, podemos distinguir varios tipos de combustión según la región en la que se encuentre la partícula. Si la partícula se encuentra en la región Ω_F no habrá oxígeno en su interior y, por tanto, las reacciones de combustión en fase gaseosa 6, 7 y 8, así como la reacción de gasificación del char con oxígeno, no tendrán lugar. Si la partícula está en Ω_0 tendremos una llama controlada por la difusión que puede estar dentro de la partícula o en su entorno, dependiendo de si hay oxígeno en su superficie o no.

Para poder aplicar la hipótesis de Burke-Schumann en el gas del interior de los poros de la partícula o en el de su entorno, debe verificarse que los números de Damköhler sean grandes comparados con la unidad. Para ello, el tamaño de la partícula tiene que ser mayor que el espesor de una llama formada por la mezcla estequiométrica de CO y O_2 . Así, si $a > 50\mu m$ y la partícula está en Ω_O existirá una llama de difusión infinitamente delgada dentro o en el entorno de la partícula, donde el oxígeno consumirá los combustibles procedentes de la gasificación de la partícula. La llama estará dentro de la partícula en Ω_O si el escalar conservado $Z_1^s = Z_{1|r=a} > 0$ y, por lo tanto, hay oxígeno en la superficie de la partícula; mientras que estará fuera si $Z_1^s < 0$.

En el caso de una partícula grande con alto contenido en cenizas las velocidades adimensionales λ_4 y λ_5 se obtienen a partir de las expresiones (2.53) y (2.54), teniendo en cuenta la relación (2.45); resulta

$$\lambda_4 = \frac{a^2}{3\rho_g \mathcal{D}} B_4 e^{-\varepsilon_4/\mathcal{R}T_p} \rho_V, \quad (2.60)$$

$$\lambda_5 = \frac{a^2}{3\rho_g \mathcal{D}} B_5 e^{-\varepsilon_5/\mathcal{R}T_p} \rho_{H_2O}. \quad (2.61)$$

Para este tipo de partículas tendremos que resolver, en la primera etapa, las ecuaciones (2.55) y (2.56) junto con la ecuación de la energía, que dependerá de la concentración de oxígeno en la superficie de la partícula:

- Si $Z_1^s < 0$, hay una llama de difusión fuera de la partícula que hace que el oxígeno no llegue a su superficie y tenemos

$$\frac{4}{3}\pi a^3 \rho_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho a \mathcal{D} (q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5). \quad (2.62)$$

- Si $Z_1^s > 0$, los volátiles no pueden abandonar la partícula debido a la reacción con el oxígeno y, por lo tanto, la ecuación es

$$\frac{4}{3}\pi a^3 \rho_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho a \mathcal{D} \{(q_4 + q_7) \lambda_4 + q_5 \lambda_5\}. \quad (2.63)$$

En ambos casos

$$q_p'' = \frac{k_T}{ac\pi} (h_T - h_T^p) = \frac{k_T}{a} \left(\theta - \frac{c_p}{c_\pi} T_p \right), \quad (2.64)$$

siendo c_p el calor específico a presión constante del carbón.

El modelo BFL permite que la liberación de humedad y volátiles ocurra a la vez que la gasificación del “char”. Así, en la segunda etapa, determinada por $Da_i \gg 1, i = 1, 2, 3$, todavía debemos seguir resolviendo las ecuaciones (2.55) y (2.56). En el caso que la partícula se esté quemando en Ω_F , no hay oxígeno, mientras que si lo hace en Ω_O la llama de difusión que rodea la partícula, o que se encuentra en su interior, impedirá que éste llegue al núcleo de carbono fijo. Así, para los tres casos posibles tendremos que $w_2 = 0$. Teniendo esto en cuenta, podremos escribir la ecuación de evolución de r_c , (2.59), de la forma

$$\frac{\rho_C^0}{\rho a \mathcal{D}} r_c^2 \frac{dr_c}{dt} = -(\lambda_1 + \lambda_3). \quad (2.65)$$

Para las velocidades adimensionales de las reacciones 1 y 3, así como para la temperatura de la partícula, tendremos tres modelos distintos dependiendo del caso:

Caso 1 *Partícula en Ω_F .*

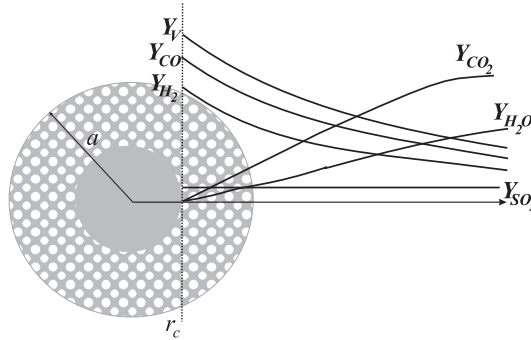


Figura 2.4: Esquema de la combustión de una partícula en Ω_F

Para calcular λ_1, λ_3 debemos resolver el sistema

$$\left. \begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} &= \left\{ Y_{CO_2}^g + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} &= \left\{ Y_{H_2O}^g + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (1-a/r_c) - \lambda}. \end{aligned} \right] \quad (2.66)$$

La temperatura en este caso se obtiene resolviendo

$$\frac{4}{3}\pi a^3 \rho_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho a \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5), \quad (2.67)$$

donde q_p'' está dada por (2.64) y q_r'' por (2.49).

Caso 2 Partícula en Ω_O y llama dentro.

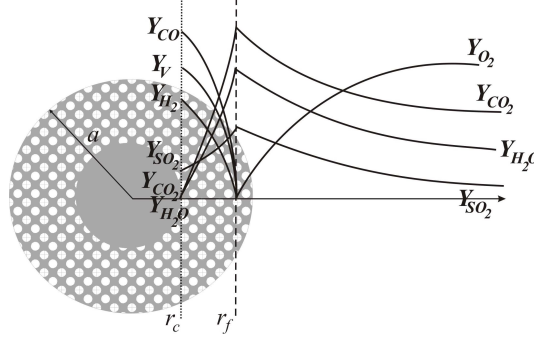


Figura 2.5: Esquema de la combustión de una partícula en Ω_O con $Z_1^s > 0$

Si denotamos por r_f el radio donde se encuentra la llama de difusión de las reacciones en fase gaseosa, tendremos $r_c < r_f \leq a$. Las ecuaciones obtenidas en esta situación son

$$\left. \begin{aligned} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (a/r_f - 1) + \lambda} &= \varphi + 1, \\ \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} - \left[\frac{22}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{11}{3} \frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right] e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (a/r_f - a/r_c)} &= \left\{ Y_{CO_2}^g - \frac{11}{3} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{\lambda_3}{\lambda} \right) - \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (1 - a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} - \left(\frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right) e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (a/r_f - a/r_c)} &= \left\{ Y_{H_2O}^g - \frac{\lambda_5}{\lambda} - \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (1 - a/r_c) - \lambda}, \end{aligned} \right] \quad (2.68)$$

con φ dada por

$$\varphi = \frac{Y_{O_2}^g}{\frac{8}{3} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{\lambda_3}{\lambda} \right) + \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda}}. \quad (2.69)$$

La temperatura debe obtenerse de la ecuación

$$\begin{aligned} \frac{4}{3}\pi a^3 \rho_p c_p \frac{dT_p}{dt} &= 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho a \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5 \\ &+ \frac{14}{3} q_6 \lambda_1 + \frac{7}{3} q_6 \lambda_3 + q_7 \lambda_4 + \frac{1}{6} q_8 \lambda_3), \end{aligned} \quad (2.70)$$

donde q_p'' está dada por (2.64) y q_r'' por (2.49).

Caso 3 Partícula en Ω_O y llama fuera.

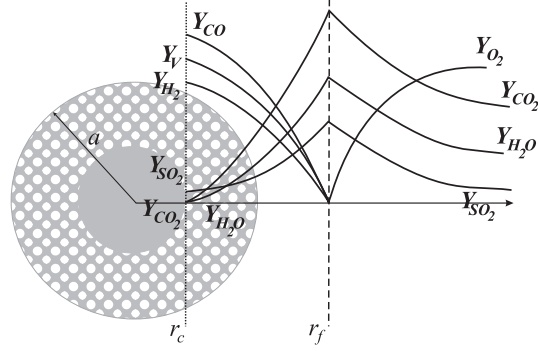


Figura 2.6: Esquema de la combust33n de una part33cula en Ω_O y con $Z_1^s < 0$

Se tiene que $r_f > a$ y las ecuaciones para obtener la evoluci33n de r_c vienen dadas por

$$\left. \begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} &= \left\{ Y_{CO_2}^g + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} + \left(\frac{22}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{11}{3} \frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right) \varphi \right\} e^{\lambda \frac{D}{D_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} &= \left\{ Y_{H_2O}^g + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} + \left(\frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right) \varphi \right\} e^{\lambda \frac{D}{D_e} (1-a/r_c) - \lambda}. \end{aligned} \right\} \quad (2.71)$$

La temperatura de la part33cula verifica la ecuaci33n

$$\begin{aligned} \frac{4}{3} \pi a^3 \rho_p c_p \frac{dT_p}{dt} &= 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho a \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5 \\ &+ \frac{14}{3} q_6 \lambda_1 + \frac{7}{3} q_6 \lambda_3 + q_7 \lambda_4 + \frac{1}{6} q_8 \lambda_3), \end{aligned} \quad (2.72)$$

donde

$$q_p'' = \frac{k_T}{ac_\pi} \frac{\lambda}{e^\lambda - 1} \left\{ h_T - h_T^p + \left[q_6 \left(\frac{14}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{7}{3} \frac{\lambda_3}{\lambda} \right) + q_7 \frac{\lambda_4}{\lambda} + q_8 \frac{1}{6} \frac{\lambda_3}{\lambda} \right] \varphi \right\}, \quad (2.73)$$

q_r'' viene dada por (2.49) y φ por (2.69) o, equivalentemente, $\varphi = e^{\lambda a/r_f} - 1$.

La posici33n de la llama de difusi33n es

$$r_f = \frac{\lambda a}{\ln(\varphi + 1)}. \quad (2.74)$$

Observaci33n 2.5.1. En el caso de una part33cula inerte tendr33amos $\rho_p = \rho_p^0$, si a33n no ha iniciado la combust33n, o $\rho_p = \rho_{cen}$ si 33sta ya ha finalizado. Su variaci33n de temperatura se debe 33nicamente al calentamiento o enfriamiento por transferencia de calor entre la fase gaseosa y la part33cula, y a la absorpci33n o emisi33n de radiaci33n. De esta forma la ecuaci33n de la energ33a se reduce a

$$\frac{4}{3} \pi a^3 \rho_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi a^2 (q_p'' + q_r''). \quad (2.75)$$

2.5.1.1. Continuidad del modelo

En este apartado veremos que se tiene la continuidad del modelo al cambiar la situación en la que se produce la combustión de la partícula de carbón.

Proposición 2.5.1. *Las ecuaciones correspondientes al caso en que la llama está dentro de la partícula ($r_f < a$) coinciden con las ecuaciones del caso en que la llama está fuera ($r_f > a$) cuando $r_f = a$.*

Demostración: Puesto que la última ecuación en los dos casos es la misma y la expresión de φ cuando $r_f = a$ es idéntica, probaremos que las otras dos ecuaciones coinciden si $r_f = a$. Si se sustituye el valor de r_f por a en las ecuaciones (2.68), se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} - \left[\frac{22}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{11}{3} \frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right] e^{\lambda \frac{D}{D_e}(1-a/r_c)} \\ = \left\{ Y_{CO_2}^g - \frac{11}{3} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{\lambda_3}{\lambda} \right) - \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{D}{D_e}(1-a/r_c)-\lambda}, \end{aligned} \quad (2.76)$$

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} - \left(\frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right) e^{\lambda \frac{D}{D_e}(1-a/r_c)} \\ = \left\{ Y_{H_2O}^g - \frac{\lambda_5}{\lambda} - \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{D}{D_e}(1-a/r_c)-\lambda}. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Reagrupando los términos en las ecuaciones (2.76) y (2.77) resulta

$$\begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} = \left\{ Y_{CO_2}^g e^{-\lambda} - \left[\frac{11}{3} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{\lambda_3}{\lambda} \right) + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right] (e^{-\lambda} - 1) + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} \right\} \\ e^{\lambda \frac{D}{D_e}(1-a/r_c)}, \end{aligned} \quad (2.78)$$

$$\frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} = \left\{ \left(Y_{H_2O}^g - \frac{\lambda_5}{\lambda} \right) e^{-\lambda} + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} (1 - e^{-\lambda}) + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{D}{D_e}(1-a/r_c)}. \quad (2.79)$$

Si se multiplican y se dividen por e^λ los segundos términos de las ecuaciones (2.78)-(2.79), se llega a

$$\begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} = \left\{ Y_{CO_2}^g + \left[\frac{11}{3} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{\lambda_3}{\lambda} \right) + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right] (e^\lambda - 1) + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} e^\lambda \right\} \\ e^{\lambda \frac{D}{D_e}(1-a/r_c)-\lambda}, \end{aligned} \quad (2.80)$$

$$\frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} = \left\{ Y_{H_2O}^g - \frac{\lambda_5}{\lambda} - \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} \frac{\lambda_4}{\lambda} (1 - e^\lambda) + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} e^\lambda \right\} e^{\lambda \frac{D}{D_e}(1-a/r_c)-\lambda}. \quad (2.81)$$

Si $r_f = a$ entonces $\varphi = e^\lambda - 1$ y, por lo tanto, las ecuaciones (2.80) y (2.81) coinciden con las del modelo (2.71).

Proposición 2.5.2. *Las ecuaciones (2.71) tienden a las ecuaciones (2.66), que modelan el comportamiento de una partícula que se quema en la zona sin oxígeno, al hacer el límite $r_f \rightarrow \infty$.*

Demostración: Si $r_f \rightarrow \infty$ se tiene que $\varphi \rightarrow 0$ y, por lo tanto, $Y_{O_2}^g = 0$. Al hacer el límite $\varphi \rightarrow 0$ en las ecuaciones (2.71) se obtienen de forma inmediata las ecuaciones del modelo (2.66).

2.5.2. Partículas pequeñas con alto contenido en cenizas

Consideramos como partículas pequeñas aquéllas cuyo radio es menor de $50\mu m$. Entonces, tendremos que el número de Damköhler basado en el tamaño de la partícula es pequeño aunque, por el contrario, el número de Damköhler asociado con la fase gaseosa homogeneizada es grande. En este caso las reacciones en fase gaseosa de oxidación de los combustibles, en el entorno o el interior de la partícula, se considerarán congeladas y el oxígeno podrá llegar al interior de la partícula y contribuir a su gasificación. Al considerar que la partícula tiene alto contenido en cenizas podremos seguir suponiendo que su radio es constante, es decir, $r_p(t) = a$.

En la primera etapa debemos resolver las ecuaciones (2.55) y (2.56) junto con la ecuación (2.62) ya que, al no haber llama de difusión en el entorno de la partícula, q_7 no contribuye al calentamiento de la misma. Las velocidades adimensionales de las reacciones 4 y 5 vienen de nuevo dadas por (2.60) y (2.61), respectivamente.

En la segunda etapa, además de (2.55) y (2.56), tendremos que resolver las ecuaciones para λ_1 , λ_2 y λ_3 , que serán distintas según el caso:

Caso 1 Partícula en Ω_F .

Si la partícula está en Ω_F el modelo obtenido es independiente de su tamaño. Así, debemos resolver las ecuaciones (2.66) para las velocidades de gasificación, (2.65) para el radio r_c y (2.67) para la temperatura de la partícula.

Caso 2 Partícula en Ω_O .

En este caso, como el oxígeno contribuye a la gasificación de la partícula, la ecuación (2.59) se puede escribir de la forma

$$\frac{\rho_C^0}{\rho a \mathcal{D}} r_c^2 \frac{dr_c}{dt} = -(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3). \quad (2.82)$$

Para obtener las velocidades de gasificación debemos resolver las ecuaciones

$$\left. \begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} &= \left\{ Y_{CO_2}^g + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{4}{3} \frac{\lambda_2}{\lambda} &= \left\{ Y_{O_2}^g + \frac{4}{3} \frac{\lambda_2}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} &= \left\{ Y_{H_2O}^g + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{D_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \end{aligned} \right\} \quad (2.83)$$

mientras que para la temperatura de la partícula

$$\frac{4}{3} \pi a^3 \rho_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho a \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_2 \lambda_2 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5), \quad (2.84)$$

donde q_p'' viene dado por (2.64) y q_r'' por (2.49).

2.5.3. Partículas con bajo contenido en cenizas

Si el carbón considerado tiene bajo contenido en cenizas, la capa de cenizas que rodea el núcleo de carbono fijo durante la gasificación se romperá y, por tanto, $r_p(t) = r_c(t)$. La principal diferencia con los modelos descritos anteriormente será que el radio ya no permanece constante durante la segunda etapa de combustión. El modelo correspondiente a este caso ha sido introducido en [21].

Al igual que ocurría en el caso de partículas pequeñas, no habrá una llama de difusión en el interior ni el entorno de la partícula, entre especies en fase gaseosa.

En la primera etapa, las ecuaciones para ρ_V y ρ_{H_2O} son, de nuevo, (2.55) y (2.56), respectivamente, y la ecuación para T_p , obtenida a partir de (2.48), es

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi r_p^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho r_p \mathcal{D} (q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5), \quad (2.85)$$

donde q_p'' viene dado por

$$q_p'' = \frac{k_T}{r_p} \left(\theta - \frac{c_p}{c_\pi} T_p \right) \quad (2.86)$$

y q_r'' por (2.49). En este caso las velocidades λ_4 y λ_5 son

$$\lambda_4 = \frac{r_p^2}{3\rho_g \mathcal{D}} B_4 e^{-\varepsilon_4/\mathcal{R}T_p} \rho_V, \quad (2.87)$$

$$\lambda_5 = \frac{r_p^2}{3\rho_g \mathcal{D}} B_5 e^{-\varepsilon_5/\mathcal{R}T_p} \rho_{H_2O}. \quad (2.88)$$

En la segunda etapa, se sigue considerando válido el modelo de “shrinking core”, pero el radio del núcleo r_c es ahora el radio de la partícula y, por lo tanto, $\rho_C = \rho_C^0$. En este caso, de la tercera ecuación en (2.47) y de la igualdad (2.45) se obtiene que la evolución de r_p viene dada por

$$\frac{\rho_C^0}{\rho \mathcal{D}} r_p \frac{dr_p}{dt} = -(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3). \quad (2.89)$$

En esta etapa, distinguiremos dos casos dependiendo de la región en la que se encuentre la partícula:

Caso 1 Partícula en Ω_F .

En este caso no hay oxígeno en el entorno de la partícula y por ello $\lambda_2 = 0$. Para las otras dos velocidades de gasificación tenemos

$$\left. \begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} &= \left\{ Y_{CO_2}^g + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} \right\} e^{-\lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} &= \left\{ Y_{H_2O}^g + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} \right\} e^{-\lambda}. \end{aligned} \right] \quad (2.90)$$

La temperatura se obtiene resolviendo

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi r_p^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho_g r_p \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5), \quad (2.91)$$

donde q_p'' está dada por (2.86) y q_r'' por (2.49).

Caso 2 Partícula en Ω_O .

Si la partícula está en la región con oxígeno, a la ecuación (2.89) debemos añadirle las siguientes

$$\left. \begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} &= \left\{ Y_{CO_2}^g + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} \right\} e^{-\lambda}, \\ \frac{4}{3} \frac{\lambda_2}{\lambda} &= \left\{ Y_{O_2}^g + \frac{4}{3} \frac{\lambda_2}{\lambda} \right\} e^{-\lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} &= \left\{ Y_{H_2O}^g + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} \right\} e^{-\lambda}, \end{aligned} \right] \quad (2.92)$$

para las velocidades de reacción y

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = 4\pi r_p^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho r_p \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_2 \lambda_2 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5) \quad (2.93)$$

para la temperatura, donde q_p'' y q_r'' están dados en (2.86) y (2.49), respectivamente.

2.6. Fuentes para la fase gaseosa

En esta sección escribiremos las expresiones de las fuentes de masa y energía que aporta una partícula a la fase gaseosa. Debemos tener en cuenta que $\lambda_2 \neq 0$ cuando el oxígeno llega al núcleo de la partícula, debido a que los números de Damköhler basados en el tamaño de la partícula son pequeños. Esto ocurre en partículas que verifican que $r_p < 50 \mu m$ o en partículas con bajo contenido en cenizas.

Las fuentes de masa para cada una de las especies debidas a una partícula son:

1. En Ω_F ,

$$F_{O_2}^m = F_{SO_2}^m = 0, \quad (2.94)$$

$$F_{CO_2}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(-\frac{11}{3} \lambda_1 \right), \quad (2.95)$$

$$F_{H_2O}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(\lambda_5 - \frac{3}{2} \lambda_3 \right), \quad (2.96)$$

$$F_{CO}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(\frac{14}{3} \lambda_1 + \frac{7}{3} \lambda_3 \right), \quad (2.97)$$

$$F_V^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \lambda_4, \quad (2.98)$$

$$F_{H_2}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \frac{1}{6} \lambda_3. \quad (2.99)$$

2. En Ω_O ,

2.1 Si la partícula tiene alto contenido en cenizas y $r_p > 50\mu m$:

$$F_{O_2}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(-\frac{8}{3}(\lambda_1 + \lambda_3) - \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V} \lambda_4 \right), \quad (2.100)$$

$$F_{CO_2}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(\frac{11}{3}(\lambda_1 + \lambda_3) + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} \lambda_4 \right), \quad (2.101)$$

$$F_{H_2O}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(\lambda_5 + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} \lambda_4 \right), \quad (2.102)$$

$$F_{SO_2}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \frac{64\nu_4}{\mathcal{M}_V} \lambda_4, \quad (2.103)$$

$$F_{CO}^m = F_V^m = F_{H_2}^m = 0. \quad (2.104)$$

2.2 Si la partícula tiene bajo contenido en cenizas o $r_p < 50\mu m$:

$$F_{O_2}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(-\frac{4}{3} \lambda_2 \right), \quad (2.105)$$

$$F_{CO_2}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(-\frac{11}{3} \lambda_1 \right), \quad (2.106)$$

$$F_{H_2O}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(\lambda_5 - \frac{3}{2} \lambda_3 \right), \quad (2.107)$$

$$F_{SO_2}^m = 0, \quad (2.108)$$

$$F_{CO}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(\frac{14}{3} \lambda_1 + \frac{7}{3} \lambda_2 + \frac{7}{3} \lambda_3 \right), \quad (2.109)$$

$$F_V^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \lambda_4, \quad (2.110)$$

$$F_{H_2}^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \left(\frac{1}{6} \lambda_3 \right). \quad (2.111)$$

En todos los casos, la fuente total de masa de la partícula al gas es

$$F^m = \frac{4\pi r_p k_T}{c_\pi} \lambda \quad (2.112)$$

y la fuente de energía

$$F^e = 4\pi r_p k_T \left\{ \left(\frac{c_p}{c_\pi} T_p - \theta \right) \frac{\lambda}{e^\lambda - 1} + (1 - \vartheta) \left[\frac{q_6}{c_\pi} \left(\frac{14}{3} \lambda_1 + \frac{7}{3} \lambda_3 \right) + \frac{q_7}{c_\pi} \lambda_4 + \frac{q_8}{c_\pi} \frac{1}{6} \lambda_3 \right] \right\} - c_p T_p \frac{dm_p}{dt}, \quad (2.113)$$

donde

$$\vartheta = \begin{cases} \varphi / (e^\lambda - 1), & \text{cuando el carbón tiene alto contenido en cenizas,} \\ & r_p > 50\mu m, Z_1^g > 0 \text{ y } Z_1^s < 0 \text{ (llama fuera de la partícula),} \\ 1, & \text{en el resto de los casos.} \end{cases}$$

Finalmente, las fuentes homogeneizadas en la fase gaseosa por unidad de volumen y tiempo, en un punto x de la caldera, se obtienen a partir de las fuentes individuales de cada

partícula mediante la expresión

$$f^\alpha(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_e} \sum_{i=1}^{N_p} \tilde{q}_j \frac{p_{ij}}{100} \int_0^{t_f^{ij}} F_{ij}^\alpha(t) \delta(x - x_p^{ij}(t)) dt \quad (2.114)$$

donde:

- N_e es el número de entradas del dominio considerado,
- N_p es el número de tamaños distintos de partículas (también llamados tipos de partículas) que entran por cada entrada j ,
- $F_{ij}^\alpha(t)$ es la contribución a α de una partícula de tipo i introducida por la entrada j , en el instante t (dadas por (2.94)-(2.113)),
- $x_p^{ij}(t)$ denota la posición ocupada por esa partícula en el instante t ,
- $\delta(x)$ es la medida de Dirac en el punto 0,
- t_f^{ij} es el tiempo que necesita la partícula para quemarse completamente o abandonar la caldera,
- \tilde{q}_j es el caudal másico de carbón que entra por j ,
- p_{ij} es el porcentaje de partículas de tipo i que entran por j .

2.7. Modelo para el movimiento de las partículas

En esta sección se presenta el modelo que consideramos para el movimiento de las partículas de carbón en el interior de la caldera.

La velocidad de las partículas se obtiene resolviendo el problema de valor inicial

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} &= F_A (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p) + \mathbf{g}, \\ \mathbf{v}_p(0) &= \mathbf{v}_{p0}, \end{aligned} \quad (2.115)$$

donde F_A es la fuerza de arrastre por unidad de masa, dada por

$$F_A = \frac{3}{16} \frac{\mu}{\rho_p r_p^2} C_D Re. \quad (2.116)$$

Aquí, \mathbf{v} es la velocidad del gas, \mathbf{v}_p la velocidad de la partícula, μ la viscosidad del gas, ρ_p la densidad de la partícula, r_p el radio, Re el número de Reynolds relativo a la partícula,

$$Re = \rho |\mathbf{v} - \mathbf{v}_p| \frac{2r_p}{\mu}, \quad (2.117)$$

y C_D es el coeficiente de arrastre aerodinámico dado por

$$C_D = \begin{cases} \frac{1 + 0.15Re^{0.687}}{Re/24}, & \text{si } Re \leq 1000 \\ 0.44, & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

Una vez calculada la velocidad de las partículas, su trayectoria se obtiene resolviendo el problema:

$$\begin{aligned}\frac{dx_p}{dt} &= \mathbf{v}_p, \\ x_p(0) &= x_{p0}.\end{aligned}\tag{2.118}$$

Al elegir el segundo miembro de la primera ecuación del problema (2.115), se supone que las únicas fuerzas que afectan al movimiento de las partículas de carbón son las de arrastre y de gravedad. Existen otras fuerzas que mueven a las partículas pero que han sido despreciadas, como generalmente ocurre en la modelización de la combustión de carbón. Por ejemplo:

- *Fuerza de masa virtual.* Es la fuerza necesaria para acelerar la masa de la fase continua en el entorno de una partícula, cuando la velocidad relativa del gas ambiente respecto a la partícula cambia. Esta fuerza se puede expresar de la forma

$$\mathbf{F}_x = \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{d}{dt} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p)\tag{2.119}$$

y sólo es importante cuando la densidad de la fase continua es del mismo orden o mayor que la densidad de la fase discreta, como sería el caso de gotas de agua en aceite. En nuestro caso la densidad de las partículas de carbón es mucho mayor que la del gas y por eso el efecto de la masa virtual no se tiene en cuenta.

- *Fuerza de flotabilidad.* Esta fuerza aparece debido a gradientes de presión en el fluido y se expresa como

$$\mathbf{F}_x = \left(\frac{\rho}{\rho_p} \right) \mathbf{v}_p \nabla \mathbf{v}.\tag{2.120}$$

Esta fuerza se puede despreciar cuando la aceleración de la partícula es del mismo orden que la del gas.

- *Efecto Magnus.* Es una fuerza de sustentación debida a la rotación de la partícula. Esta rotación podría ocurrir por impactos con otras partículas o por el gradiente de la velocidad en una región de flujo no uniforme.
- *Fuerza de sustentación ("lift") de Saffman.* Se debe a los gradientes de velocidades del gas. A diferencia del efecto Magnus la partícula no necesita estar rotando. Esta fuerza se puede expresar como

$$\mathbf{F}_x = \frac{K \nu^{1/2} \rho d_{ij}}{\rho_p r_p (d_{ik} d_{kl})^{1/4}} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p),\tag{2.121}$$

donde $K = 2.594$, d_{ij} es el tensor de deformación y $\nu = \mu/\rho$ es la viscosidad cinemática. Esta forma de la fuerza de sustentación es válida cuando el número de Reynolds relativo a la partícula es pequeño. Se recomienda usar esta fuerza sólo cuando el diámetro de las partículas es inferior a $1 \mu m$, que no es el caso en la combustión de carbón pulverizado.

2.8. Modelo BFL en flujos turbulentos

El modelo BFL que hemos descrito permite la realización de simulaciones numéricas directas (DNS) de flujos laminares o transicionales, de gases reactivos con combustión de carbón. Además, establece el marco para la obtención de modelos para la combustión turbulenta. Como la simulación directa es demasiado costosa, imposible en nuestro caso, vamos a realizar simulaciones tipo RANS usando el modelo $k - \epsilon$. Así, en el caso de tener un flujo turbulento, vamos a promediar, usando promedios de Favre, las ecuaciones de conservación de los escalares de Shvab-Zeldovich, de la misma forma que se realizó en la Sección 1.5 del Capítulo 1 para las ecuaciones de conservación de las especies y de la entalpía. De esta forma, se obtienen las ecuaciones

$$\mathcal{L}_{gt}(\tilde{Z}_1) = \overline{f_{O_2}^m} - \frac{4}{7}\overline{f_{CO}^m} - \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V}\overline{f_V^m} - 8\overline{f_{H_2}^m}, \quad (2.122)$$

$$\mathcal{L}_{gt}(\tilde{Z}_2) = \overline{f_{CO_2}^m} + \frac{11}{7}\overline{f_{CO}^m} + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V}\overline{f_V^m}, \quad (2.123)$$

$$\mathcal{L}_{gt}(\tilde{Z}_3) = \overline{f_{H_2O}^m} + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V}\overline{f_V^m} + 9\overline{f_{H_2}^m}, \quad (2.124)$$

$$\mathcal{L}_{gt}(\tilde{Z}_4) = \overline{f_{SO_2}^m} + \frac{64\nu_4}{\mathcal{M}_V}\overline{f_V^m}, \quad (2.125)$$

$$\mathcal{L}_{gt}(\tilde{H}) = \overline{f^e} + q_6\overline{f_{CO}^m} + q_7\overline{f_V^m} + q_8\overline{f_{H_2}^m} - \nabla \cdot \overline{\mathbf{q}_r}, \quad (2.126)$$

siendo \mathcal{L}_{gt} el operador diferencial definido por

$$\mathcal{L}_{gt}(u) = \frac{\partial(\overline{\rho}u)}{\partial t} + \text{div}(\overline{\rho}\tilde{\mathbf{v}}u) - \text{div}\left(\left(\overline{\rho}\overline{\mathbf{D}} + \frac{\mu_t}{S_{ct}}\right)\text{grad } u\right). \quad (2.127)$$

De nuevo, en estas ecuaciones no aparecen los términos debidos a las reacciones en fase gaseosa w_6 , w_7 y w_8 , pudiendo evitar así la modelización de estos términos. Sin embargo, en el caso de flujos turbulentos, la resolución de las ecuaciones (2.122)-(2.126) proporciona los valores medios de las combinaciones de Shvab-Zeldovich pero no sus valores instantáneos. Si queremos aplicar la hipótesis de Burke-Schumann para recuperar la composición de la mezcla y su entalpía térmica, necesitaríamos conocer Z_1 para determinar la región del dominio en la que nos encontramos. De esta forma, necesitaríamos modelizar la interacción entre la química y la turbulencia para obtener la localización de la llama de difusión en cada instante. La determinación de ese modelo dará lugar a la formulación turbulenta del modelo BFL.

Este modelo está todavía en fase de desarrollo e incluirá funciones de densidad de probabilidad a las que se les supone una forma conocida (“presumed shape Probability Density Function” o simplemente PDF). Para ver modelos de la iteración entre química y turbulencia utilizando una PDF se pueden consultar, entre otros, Kuo [63], Libby y Williams [68] o Naud [76].

Como primera aproximación, que supondremos válida para flujos no muy turbulentos, se tomará $Z_i = \tilde{Z}_i$, $i = 1, \dots, 4$ y $H = \tilde{H}$. Así, el cálculo de la composición y de la entalpía térmica de la mezcla se realizará, de la misma forma que en el caso laminar, considerando válida la hipótesis de Burke-Schumann. Esta aproximación elemental, aunque no incorpora un modelo para la interacción entre química y turbulencia, al menos incluye la difusión turbulenta de los reactantes.

En cuanto al modelo BFL para la fase sólida, supondremos que las partículas ven las fracciones másicas y la temperatura del gas promediadas. Sin embargo, para el movimiento de las partículas será necesario introducir un modelo para la dispersión de las mismas debida a la turbulencia.

2.8.1. Modelo para la dispersión de las partículas

El modelo para el movimiento de una partícula (2.115) necesita el valor instantáneo de la velocidad de la mezcla de gases. Este valor se puede obtener acoplando este modelo para el movimiento de las partículas con un modelo estocástico para tener en cuenta la dispersión de las mismas. El modelo que vamos a considerar es uno de los llamados “Discrete Random Walk”, que denotaremos de forma abreviada como DRW². Este tipo de modelos calculan la dispersión de las partículas con un muestreo aleatorio para obtener las propiedades instantáneas del fluido, para un número representativo de trayectorias de partículas. Cada trayectoria calculada, para cada tamaño y posición inicial, se llama intento.

El modelo seleccionado, e introducido en [21], calcula la velocidad instantánea del fluido como la suma de la velocidad media y una fluctuación aleatoria con distribución Gaussiana, con media cero y una varianza relacionada con la escala de la velocidad turbulenta, calculada a partir del modelo $k - \epsilon$. Así, la velocidad instantánea, vista por la partícula, viene dada por

$$\mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}} + \left(\xi_1 \sqrt{\frac{2k}{3}}, \xi_2 \sqrt{\frac{2k}{3}}, \xi_3 \sqrt{\frac{2k}{3}} \right) \quad (2.128)$$

donde ξ_i , $i = 1, 2, 3$, son números aleatorios con distribución normal.

Los modelos DRW suponen que la partícula está atrapada en un remolino durante el tiempo de vida del mismo o hasta que lo atraviesa. A lo largo del tiempo que la partícula permanece en el remolino, ésta verá el valor medio de la velocidad del flujo y el valor de las fluctuaciones de la velocidad será constante.

El tiempo de vida característico de los remolinos se expresa como

$$\tau_e = -0.15 \frac{k}{\epsilon} \log(r), \quad (2.129)$$

donde r es un número aleatorio entre 0 y 1 con distribución uniforme. El tiempo que necesita una partícula para atravesar un torbellino viene dado por,

$$\tau_c = -\tau_p \log \left(1 - \frac{l_e}{\tau_p \|\mathbf{v} - \mathbf{v}_p\|} \right), \quad (2.130)$$

donde

$$\tau_p = \frac{4\rho_p r_p^2}{18\mu} \quad (2.131)$$

es el tiempo de relajación de la partícula y

$$l_e = 0.09 \frac{k^{1.5}}{\epsilon} \quad (2.132)$$

²También se conocen como “Eddy Interaction Model” (EMI).

es la longitud característica de los torbellinos.

Cuando se alcanza el tiempo mínimo entre τ_e y τ_c se debe calcular una nueva fluctuación de la velocidad. Este modelo se basa en el modelo de interacción partícula-remolino introducido por Gosman y Ioannides en [50].

Como la mayoría de modelos DRW, este modelo tiene un comportamiento aceptable para flujos con turbulencia homogénea. En Zhou y Leschziner [98], por ejemplo, se incluye el efecto de la anisotropía en el modelo. La idoneidad de otros modelos DRW y de otro tipo de modelos para el cálculo de la dispersión de partículas se analiza en Macinnes y Bracco [70] y Hennick y Lightstone [54].

Parte II

Métodos de Lagrange-Galerkin Modificados

Introducción

Las ecuaciones de convección-difusión-reacción aparecen en numerosos modelos matemáticos utilizados en ingeniería o ciencias aplicadas. Estas ecuaciones son de tipo parabólico pero, en muchos problemas, la convección es más importante que la difusión apareciendo la naturaleza hiperbólica de estas ecuaciones. Por ejemplo, en la mayoría de problemas industriales los flujos tienen alto número de Reynolds y el término difusivo es despreciable. El desarrollo de métodos estables y precisos para problemas de convección dominante, al igual que para los hiperbólicos, es una tarea mucho más compleja que para problemas puramente elípticos o parabólicos, que ha sido objeto de numerosos estudios, muchos de ellos en el marco de los elementos finitos.

Un método clásico para el tratamiento de problemas hiperbólicos, que también es adecuado para problemas de convección dominante, es el método de las curvas características, introducido por primera vez en Benqué *et al* [10], Douglas y Russell [37] y Pironneau [81] para resolver problemas de convección-difusión, incluyendo las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles. Este método consiste en la discretización de la derivada material a lo largo de la trayectoria de las partículas fluidas, mediante esquemas de diferencias finitas. Esta aproximación es natural desde un punto de vista físico, pues la derivada material es igual a la derivada temporal cuando se calcula a lo largo de esas trayectorias. Como la discretización de la derivada material se hace hacia atrás en tiempo, hay que evaluar las variables del problema en los puntos movidos a la posición que ocupaban en un instante anterior. Esta evaluación se realiza por interpolación y dependiendo del tipo de interpolación elegido, el método de características recibe distintos nombres, aunque generalmente se denomina *método modificado de características* o *semi-Lagrangiano* o de *Lagrange-Galerkin* cuando se combina con técnicas de elementos finitos. En esta memoria, vamos a usar el método de características siempre combinado con el de elementos finitos y vamos a llamar al método clásico, que hace una proyección de la solución del problema en el espacio de elementos finitos, método de Lagrange-Galerkin y si se usa interpolación polinómica de la solución compuesta con las curvas características diremos que el método es semi-Lagrangiano. Estos últimos métodos han sido muy utilizados en la resolución de las ecuaciones que modelan los flujos atmosféricos para la realización de predicciones meteorológicas, como podemos ver en el artículo de revisión de Staniforth y Côté [92]. El análisis de algunos métodos semi-Lagrangianos con interpolación de alto orden se puede ver por ejemplo en Falcone y Ferreti [43] o Bermejo [11].

En este trabajo vamos a considerar métodos de Lagrange-Galerkin aunque algunos resultados numéricos los compararemos con los obtenidos mediante algún método semi-Lagrangiano.

El método clásico de Lagrange-Galerkin introducido en los ochenta es de primer orden en tiempo (ver, por ejemplo, Douglas y Russell [37] y Pironneau [81] o Süli [90]). Para obtener una mayor precisión vamos a considerar métodos de mayor orden que aplicaremos a ecuaciones de convección-difusión-reacción y a las de Navier-Stokes incompresibles. En Ewing y Russel [42], Rui y Tabata [87], Bermúdez *et al* [22, 23], por citar algunos, podemos ver métodos de Lagrange-Galerkin de segundo orden para ecuaciones de convección-difusión y en Boukir *et al* [25] o Notsu y Tabata [78] para las ecuaciones de Navier-Stokes. Del análisis numérico de métodos de Lagrange-Galerkin realizado por estos y otros autores, podemos destacar las siguientes ventajas de estos métodos:

- Son incondicionalmente estables, incluso para la ecuación del transporte, siempre que la proyección de Galerkin se calcule de forma exacta.
- Si el operador de difusión es lineal y simétrico, dan lugar a sistemas lineales simétricos.
- Permiten el uso de pasos de tiempo grandes sin estropear la precisión de la solución obtenida.

La posibilidad de tener sistemas lineales simétricos junto con pasos de tiempo grandes hacen que estos métodos sean muy interesantes desde un punto de vista computacional. Sin embargo, tienen algunas desventajas:

- La necesidad del uso de fórmulas de cuadratura para el cálculo de algunas integrales que estropea la estabilidad incondicional de los métodos de Lagrange-Galerkin, como ha sido analizado, por ejemplo, en Morton *et al* [75], Bermúdez *et al* [23] y Fujima y Tabata [46].
- El cálculo de los pies de las características en cada iteración que requiere resolver numerosas ecuaciones diferenciales, integrándolas hacia atrás en el tiempo. En relación con el inconveniente anterior, si tenemos fórmulas de cuadratura de alto orden el número de puntos que hay que mover por elemento de la malla es elevado. Para hacerse una idea de cuántos puntos, en este trabajo usaremos fórmulas con 31 nodos en mallas que lleguen a los 400000 elementos. Así, en cada instante de tiempo tendremos que resolver del orden de 10^7 ecuaciones diferenciales ordinarias en cada instante de tiempo y, además, localizar el elemento en el que se encuentra el pie de la característica calculado.

Las desventajas anteriores motivan la introducción de los que llamaremos *métodos de Lagrange-Galerkin modificados*. Estos métodos superan, en parte, las desventajas de los estándar y mantienen sus buenas propiedades, como la estabilidad. Además, el orden de convergencia obtenido es el mismo que el de los estándar, cuando se combinan con elementos finitos lineales o cuadráticos. En los métodos modificados que presentamos se aproximan las curvas características por otras que llamaremos *curvas características modificadas*. Con estas nuevas curvas solo será necesario calcular la posición de los vértices de la malla en los instantes anteriores, para obtener los pies de las características de todos los nodos de cuadratura de la malla. Es fácil imaginar que el uso de métodos modificados supone una ventaja computacional que, dependiendo del caso, puede ser muy significativa frente a los estándar.

Los métodos de Lagrange-Galerkin modificados fueron introducidos por primera vez para la ecuación del transporte en Bermejo y Carpio [14]. En este artículo, se muestran también resultados numéricos para problemas de convección-difusión y de Navier-Stokes, aunque no se describen los métodos para este último tipo de ecuaciones. En Bermejo y Saavedra [16] se proponen métodos de Lagrange-Galerkin modificados, de primero y segundo orden en tiempo, para ecuaciones de convección-difusión y se obtienen las estimaciones de error para estos métodos que se comprueban con algunos tests numéricos. En esta memoria se incluyen los resultados que aparecerán en este último artículo, ampliados para ecuaciones de convección-difusión-reacción, y se muestran algunos resultados numéricos adicionales.

Esta parte de la tesis consta de dos capítulos.

En el Capítulo 3, describimos los métodos de Lagrange-Galerkin para ecuaciones de convección-difusión-reacción escalares. En primer lugar, presentamos el problema de Cauchy que vamos a considerar. Para facilitar la comprensión de los nuevos métodos, se introducen antes los métodos estándar con discretizaciones temporales de primero y segundo orden. Una vez explicados estos métodos, se describe la modificación que haremos sobre las curvas características que permitirán mover los nodos de cuadratura de un tetraedro a partir de sus vértices movidos. En segundo lugar, obtendremos estimaciones de error para estos métodos en la norma $l^\infty(L^2(\Omega))$ cuyas constantes permanecen acotadas en el límite hiperbólico. Por último, verificamos los órdenes de error obtenidos para los métodos de Lagrange-Galerkin estándar y modificados, y comparamos sus tiempos de cálculo con distintos ejemplos test.

En el Capítulo 4, utilizamos los métodos de Lagrange-Galerkin modificados para la discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles. Estas ecuaciones pueden ser vistas como ecuaciones de convección-difusión no lineales y, por lo tanto, los métodos de Lagrange-Galerkin tendrán una formulación parecida a las de estas últimas. La particularidad es que, en este caso, la velocidad es la incógnita y la hipótesis de que se pueden calcular las curvas características de forma exacta ya no es válida. Así, presentaremos algunos esquemas numéricos para aproximarlas que, con objeto de mantener el orden de error de los métodos de Lagrange-Galerkin implementados, serán de orden 2. En la última sección de este capítulo mostraremos los resultados obtenidos para tests con solución conocida, con objeto de analizar la convergencia de los métodos propuestos y, además, presentaremos la simulación del flujo tridimensional alrededor de un cilindro. Se estudiará también la eficiencia computacional de los métodos modificados frente a los estándar, en distintas situaciones.

Capítulo 3

Métodos de Lagrange-Galerkin modificados para ecuaciones de convección-difusión-reacción

3.1. Introducción

En este capítulo introducimos los métodos de Lagrange-Galerkin modificados para ecuaciones de convección-difusión-reacción. Estos métodos se basan en el trabajo de Bermejo y Carpio [13] para ecuaciones de convección pura.

En primer lugar, planteamos un problema de Cauchy de convección-difusión-reacción en un dominio acotado e introducimos los espacios funcionales adecuados para su estudio.

En segundo lugar, describimos el método de las características que se utiliza para la discretización temporal del problema. Para la discretización espacial se utiliza el método de elementos finitos. Una vez descritos los métodos de Lagrange-Galerkin estándar, introducimos los modificados que aproximarán las curvas características por una modificación de las mismas.

En tercer lugar, realizamos el análisis numérico de los métodos modificados, obteniéndose el mismo orden de convergencia que para los estándar cuando se utilizan elementos finitos \mathbb{P}_1 o \mathbb{P}_2 . Esto se debe a que los métodos modificados añaden a la estimación de los estándar un término del tipo $O(h^2)$. La convergencia obtenida para los métodos modificados es de la forma $O(h^{m+1} + h^2 + \Delta t^q)$ en norma $l^\infty(L^2(\Omega))$ cuando el problema está dominado por la difusión, siendo m el grado de los polinomios de los espacios de elementos finitos de Lagrange y q el orden de la discretización temporal, que será 1 o 2. En el caso de problemas de convección dominante, si Δt es suficientemente grande obtenemos una estimación del error de la forma $O(h^{m+1}/\Delta t + h^2 + \Delta t^q)$ en norma $l^\infty(L^2(\Omega))$ mientras que, para Δt pequeño, será de la forma $O(h^m + h^2 + \Delta t^q)$ en $l^\infty(L^2(\Omega))$, con lo cual la estimación del error no explota cuando $\Delta t \rightarrow 0$ y h se mantiene fijo. Además, en el caso en que el término difusivo sea pequeño, las constantes del error permanecen acotadas en el límite hiperbólico.

En Douglas y Russel [37], para las ecuaciones de convección-difusión, se obtienen estimaciones del error de la forma $O(\Delta t + h^2)$ en el espacio $l^\infty(L^2(\Omega))$, para los métodos

Lagrange-Galerkin de orden 1 en tiempo y con elementos lineales. El problema de esta estimación es que la constante obtenida depende de $\nu^{-1/2}$ siendo ν la constante de difusión del problema. Por lo tanto, en el límite hiperbólico esta constante puede ser muy grande o no estar acotada. En Bause y Knabner [9] se analiza este mismo método y se llega a una estimación uniforme con respecto al parámetro de difusión. La estimación obtenida por Pironneau [81] es $O(\Delta t + h^m + h^{m+1}/\Delta t)$ en norma $l^\infty(L^2(\Omega))$, mientras que en Süli [90], para las ecuaciones de Navier-Stokes, se muestra el orden de convergencia $O(\Delta t + h^{m+1})$ en norma $l^\infty(L^2(\Omega))$.

Por lo tanto, las estimaciones de error que hemos obtenido para los métodos de Lagrange-Galerkin extienden, para métodos de segundo orden en tiempo, las dadas en [9] y, además, establecen el marco de validez de las obtenidas en [81] y [90].

Por último, presentamos los resultados numéricos obtenidos con los métodos de Lagrange-Galerkin estándar y modificados, que apoyan los resultados teóricos y ponen de manifiesto que los nuevos métodos son más eficientes. Además, analizamos la influencia de las fórmulas de cuadratura en la estabilidad de los métodos y comprobamos la necesidad de utilizar fórmulas de alto orden. Este hecho resalta la mayor eficacia de los métodos modificados frente a los estándar, sobre todo en problemas tridimensionales.

3.2. Problema de Cauchy y notaciones

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ un dominio acotado con frontera $\Gamma = \partial\Omega$ Lipschitziana y T una constante positiva; consideramos el siguiente problema de condiciones iniciales y de contorno:

Problema fuerte: *Encontrar una función $c : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ verificando*

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} + \mathbf{v}(x, t) \cdot \text{grad } c(x, t) - \text{div}(\mathbf{D}(x, t)\text{grad } c(x, t)) + l(x, t)c(x, t) = f(x, t), \\ \forall (x, t) \in \Omega \times (0, T) \text{ y sujeta a las condiciones} \\ c(x, t) = 0, \quad \forall (x, t) \in \Gamma \times (0, T), \\ c(x, 0) = c^0(x), \quad \forall x \in \Omega. \end{array} \right. \quad (3.1)$$

En este problema $\mathbf{v} : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$ es la descripción espacial de la velocidad, $\mathbf{D} : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathcal{S}_d$ es la matriz de difusión, donde \mathcal{S}_d es el espacio de las matrices simétricas de dimensión d , $l : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ es la función de reacción y $f : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ y $c^0 : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ son funciones escalares dadas.

Definición 3.2.1. *Sea \mathcal{L} el operador diferencial de segundo orden definido como*

$$\mathcal{L}c := -\text{div}(\mathbf{D}(x, t)\text{grad } c(x, t)) + \mathbf{v}(x, t) \cdot \text{grad } c(x, t) + l(x, t)c(x, t). \quad (3.2)$$

Este operador es elíptico si existe un número $\theta > 0$ tal que

$$\xi^t \mathbf{D}(x, t)\xi \geq \theta|\xi|^2, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d, \quad \forall (x, t) \in \Omega \times (0, T). \quad (3.3)$$

Si L es elíptico el operador diferencial $\frac{\partial}{\partial t} + L$ se dice parabólico.

Si $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$ escribimos la derivada de orden $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_d$ de una función f como

$$\partial^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}} f. \quad (3.4)$$

El espacio de funciones continuas en Ω se denotará como $C^0(\Omega)$ y para cada entero $m \geq 1$, $C^m(\Omega)$ será el espacio de las funciones m veces continuamente diferenciables. El espacio de Hölder $C^{0,1}(\Omega)$ se define como

$$C^{0,1}(\Omega) := \left\{ f \in C^0(\Omega) : \sup_{x,y \in \Omega} \frac{|f(x) - f(y)|}{|x - y|} < +\infty \right\}.$$

Este espacio es el de las funciones localmente Lipschitzianas, mientras que $C^{0,1}(\overline{\Omega})$ es el espacio de las funciones globalmente Lipschitzianas. Si $m \geq 1$ es un entero, $C^{m,1}(\Omega)$ será el espacio de las funciones de clase C^m cuyas derivadas hasta orden m pertenecen a $C^{0,1}(\Omega)$.

Introducimos los espacios de Lebesgue $L^p(\Omega)$ y los espacios de Sobolev $W^{m,p}(\Omega)$ con $m \in \mathbb{N}$ y $p = 1, 2, \dots, \infty$, definidos por

$$\begin{aligned} L^p(\Omega) &= \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ medibles} : \|f\|_{0,p,\Omega} < +\infty\}, \\ W^{m,p}(\Omega) &= \{f \in L^p(\Omega) : \partial^\alpha f \in L^p(\Omega) \forall \alpha \in \mathbb{N}^d, |\alpha| \leq m\}, \end{aligned}$$

y dotados con las normas

$$\begin{aligned} \|f\|_{0,p,\Omega} &:= \left(\int_{\Omega} |f|^p \right)^{1/p}, \\ \|f\|_{m,p,\Omega} &:= \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha f\|_{0,p,\Omega}^p \right)^{1/p}, \end{aligned}$$

si $1 \leq p < \infty$, mientras que si $p = \infty$ la norma se define como

$$\begin{aligned} \|f\|_{0,\infty,\Omega} &:= \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |f(x)| = \inf\{M \geq 0 : |f(x)| \leq M \text{ c.p.d en } \Omega\}, \\ \|f\|_{m,\infty,\Omega} &:= \max_{|\alpha| \leq m} \{\|\partial^\alpha f\|_{0,\infty,\Omega}\}. \end{aligned}$$

También introducimos en $W^{m,p}(\Omega)$ las seminormas

$$\begin{aligned} |f|_{m,p,\Omega} &:= \left(\sum_{|\alpha|=m} \|\partial^\alpha f\|_{0,p,\Omega}^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty \\ |f|_{m,\infty,\Omega} &:= \max_{|\alpha|=m} \{\|\partial^\alpha f\|_{0,\infty,\Omega}\}. \end{aligned}$$

En particular, cuando $p=2$, el espacio $L^2(\Omega)$, o simplemente L^2 , es un espacio de Hilbert con el producto escalar habitual $(\cdot, \cdot)_0$ que induce la norma $\|\cdot\|_0 = \|\cdot\|_{0,2,\Omega}$ y el espacio de

Sobolev $W^{m,2}(\Omega)$, que se denotará como $H^m(\Omega)$, será también un espacio de Hilbert con el producto escalar dado por

$$(u, v)_m := \sum_{|\alpha| \leq m} (\partial^\alpha u, \partial^\alpha v)_0, \quad (3.5)$$

que induce la norma $\|\cdot\|_m = \|\cdot\|_{m,2,\Omega}$.

En particular, en $H^1(\Omega)$ consideraremos la norma, equivalente a la definida por el producto escalar,

$$\|f\|_1 := \left(\int_{\Omega} \left(\frac{1}{L_0} |f(x)|^2 + |\text{grad } f(x)|^2 \right) dx \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.6)$$

donde recordemos que L_0 denotaba la longitud característica del dominio. Habitualmente en la literatura de análisis funcional la longitud característica se toma igual a 1 al definir esta norma. En nuestro caso, al no considerar las ecuaciones adimensionales, debemos utilizar la definición (3.6) para que haya coherencia en las unidades de la norma de $H^1(\Omega)$ como se indica en Tartar [93].

Se define el espacio $H_0^1(\Omega)$, o simplemente H_0^1 , como

$$H_0^1(\Omega) := \overline{C_c^\infty(\Omega)}^{H^1(\Omega)}, \quad (3.7)$$

y denotamos como $H^{-1}(\Omega)$ a su espacio dual y por $\langle \cdot, \cdot \rangle$ al par de dualidad. Se puede probar (ver [27]) que $H_0^1(\Omega) = \{f \in H^1(\Omega) : f|_{\Gamma} = 0\}$.

Teniendo en cuenta la desigualdad de Poincaré, en H_0^1 tenemos que la seminorma $\|\text{grad } f\|_0$ es una norma equivalente a la norma $\|f\|_1$.

Introducimos ahora los espacios de funciones que involucran al tiempo. Dado un espacio de Banach B y un entero no negativo m , llamaremos $C^m(0, T; B)$ o abreviadamente $C^m(B)$, al espacio de las funciones de clase C^m de $[0, T]$ en B dotado con la norma

$$\|f\|_{C^m(B)} := \max_{t \in [0, T]} \left\{ \max_{j=0, \dots, m} \|f^{(j)}(t)\|_B \right\}, \quad (3.8)$$

siendo $f^{(j)} := \frac{d^j f}{dt^j}$, $j = 1, \dots, m$.

Denotaremos por $L^p(0, T; B)$ o, simplemente, $L^p(B)$ al espacio de las funciones medibles $f : [0, T] \rightarrow B$ tales que

$$\|f\|_{L^p(0, T; B)} := \left(\int_0^T \|f(t)\|_B^p dt \right)^{1/p} < \infty, \quad 1 \leq p < \infty, \text{ y} \quad (3.9)$$

$$\|f\|_{L^\infty(0, T; B)} := \text{ess sup}_{0 \leq t \leq T} \|f(t)\|_B < \infty \text{ si } p = \infty. \quad (3.10)$$

Los espacios de Sobolev $W^{m,p}(0, T; B)$ constan de todas las funciones $f \in L^p(0, T; B)$ tales que sus derivadas hasta orden m , $f^{(j)}$, $j = 1, \dots, m$, existen y pertenecen a $L^p(0, T; B)$; escribiremos $H^m(B) = H^m(0, T; B) = W^{m,2}(0, T; B)$. La norma asociada a estos espacios es

$$\|f\|_{H^m(B)} := \left(\int_0^T \left(\sum_{j=0}^m \|f^{(j)}(t)\|_B^2 \right) dt \right)^{1/2}, \quad \text{si } 1 \leq p < \infty.$$

Dado un entero m no negativo consideramos el espacio funcional definido por

$$Z^m(\Omega) = \{f \in C^j(H^{m-j}(\Omega)), j = 0, \dots, m\}$$

dotado con la norma

$$\|f\|_{Z^m} = \max_{0 \leq j \leq m} \{\|f\|_{C^j(H^{m-j})}\}.$$

Por último, para simplificar la escritura, los espacios de funciones que toman valores en el espacio vectorial los denotaremos utilizando negritas, por ejemplo, $\mathbf{C}^m(\Omega) = C^m(\Omega)^d$.

Supongamos las siguientes hipótesis sobre los datos del problema:

Hipótesis 3.1. $D_{ij} \in L^\infty(\Omega \times [0, T])$, $\mathbf{v} \in L^\infty(\Omega \times [0, T])$, $l \in L^\infty(\Omega \times [0, T])$, $f \in L^2(\Omega \times [0, T])$, $c^0 \in L^2(\Omega)$.

Hipótesis 3.2. $l(x, t) \geq 0$.

Hipótesis 3.3. Las matrices $\mathbf{D}(x, t)$ verifican que su menor autovalor es positivo. De esta forma, si

$$\operatorname{ess\,inf}_{\substack{x \in \Omega \\ t \in [0, T]}} \{\lambda_{\min}(x, t)\} \geq \bar{\nu} > 0, \quad (3.11)$$

siendo $\lambda_{\min}(x, t)$ el autovalor mínimo de la matriz $\mathbf{D}(x, t)$, el operador L será elíptico.

Si realizamos la formulación variacional del problema fuerte (3.1) obtenemos el siguiente:

Problema débil: Encontrar una función $c \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$, con $c' \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ verificando

$$\begin{cases} \langle c', v \rangle + b(t; c, v) = (f, v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \text{ y c.p.d. en } [0, T], \\ c(0) = c^0, \end{cases} \quad (3.12)$$

donde $b(t; \cdot, \cdot) : H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ es la forma bilineal definida por

$$\begin{aligned} b(t; c, v) = & \int_{\Omega} \mathbf{D}(x, t) \operatorname{grad} c(x, t) \cdot \operatorname{grad} v(x, t) dx \\ & + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} c(x, t) v(x, t) dx + \int_{\Omega} l(x, t) c(x, t) v(x, t) dx. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Nota 3.2.1. Si $c \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ y $c' \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ se tiene que $c \in C^0(0, T; L^2(\Omega))$. La demostración de esta afirmación se puede ver, por ejemplo, en Evans [41] y da un sentido a la segunda ecuación de (3.12).

La forma bilineal b no es coercitiva pero verifica la siguiente *desigualdad de Garding*: existen dos constantes $\alpha > 0$ y $\beta \geq 0$ tales que

$$b(t; u, u) \geq \alpha \|u\|_{H^1(\Omega)}^2 - \beta \|u\|_0^2, \quad (3.14)$$

siendo α dependiente de θ , para todo $t \in [0, T]$, lo que permite probar un teorema de existencia y unicidad de solución del problema débil.

Teorema 3.2.1. *Si los datos verifican las Hipótesis 3.1, 3.2 y 3.3 existirá una única solución del problema débil (3.12).*

DEMOSTRACIÓN. La demostración de este teorema se puede ver, por ejemplo, en Evans [41], y Ern y Guermond [40]. \square

Definición 3.2.2. *Se dice que la solución c del problema (3.12) es solución débil del problema fuerte (3.1).*

3.3. Curvas características

En esta sección definiremos las curvas características asociadas a la velocidad \mathbf{v} y veremos algunas de sus propiedades.

Definición 3.3.1. *Se llama curva característica por el punto $(x, t) \in \overline{\Omega} \times [0, T]$ a la aplicación*

$$\mathcal{X}(x, t; \cdot) : (0, T) \rightarrow \mathbb{R}^d \quad (3.15)$$

solución del problema

$$\begin{cases} \frac{d\mathcal{X}(x, t; s)}{ds} = \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; s), s), \\ \mathcal{X}(x, t; t) = x. \end{cases} \quad (3.16)$$

El punto $\mathcal{X}(x, t; s)$ representa la posición que ocupará en el instante s el punto material que ocupa la posición x en el instante t y que se mueve con velocidad \mathbf{v} . Al punto $\mathcal{X}(x, t; s)$ se le conoce también como *pie, en el instante s , de la característica* que pasa por (x, t) .

Fijado $t \in [0, T]$ si $X(\cdot, t; \cdot)$ es un movimiento, \mathbf{v} la descripción espacial de su velocidad y $x = X(p, t)$, entonces

$$\mathcal{X}(x, t; s) = \mathcal{X}(X(p, t), t; s) = X(p, s). \quad (3.17)$$

Si se verifica que $\mathbf{v} \in C^0(\mathbf{C}^{0,1}(\overline{\Omega}))$ y $\mathbf{v} = 0$ en Γ , utilizando el Teorema de Cauchy-Lipschitz (también conocido como Teorema de Picard-Lindelöf), se tiene que \mathcal{X} está bien definida en todo el dominio $[0, T]$, es única para cada condición inicial (x, t) y $\mathcal{X}(x, t; s) \in \overline{\Omega}$ para todo $(x, t, s) \in \Omega \times [0, T] \times [0, T]$ (ver, por ejemplo, Ern y Guermond [40] o Nogueiras [77]). Además podemos escribir

$$\mathcal{X}(x, t; s) = x - \int_t^s \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; \tau), \tau) d\tau. \quad (3.18)$$

La unicidad nos permite deducir la propiedad (ver [84]),

$$\mathcal{X}(\mathcal{X}(x, t; s), s; \tau) = \mathcal{X}(x, t; \tau), \quad (3.19)$$

de donde obtenemos, haciendo $t = \tau$,

$$\mathcal{X}(\mathcal{X}(x, t; s), s; t) = x. \quad (3.20)$$

Teniendo en cuenta esta igualdad, para cada $s, t \in [0, T]$ se puede definir la aplicación inversa de $\mathcal{X}(\cdot, s; t) : \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}$, como

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}(\cdot, t; s) : \bar{\Omega} &\rightarrow \bar{\Omega} \\ y &\rightarrow \mathcal{Y}(y, t; s) = \mathcal{X}(y, t; s) \end{aligned}$$

Denotaremos por \mathbf{F} al gradiente de \mathcal{X} y por J a su determinante, es decir,

$$\mathbf{F}(x, t; s) := \text{grad } \mathcal{X}(x, t; s), \quad J(x, t; s) = \det \mathbf{F}(x, t; s). \quad (3.21)$$

Se tiene inmediatamente que $\mathbf{F}(x, t; t) = \mathbf{I}$ y $J(x, t; t) = 1$. Sin más que aplicar gradientes a las ecuaciones de (3.16) obtenemos el siguiente problema para \mathbf{F} ,

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{F}(x, t; s)}{ds} = \mathbf{L}(\mathcal{X}(x, t; s), s)\mathbf{F}(x, t; s), \\ \mathbf{F}(x, t; t) = \mathbf{I}, \end{cases} \quad (3.22)$$

siendo $\mathbf{L} = \text{grad } \mathbf{v}$.

Si $\mathbf{v} \in C^0(\mathbf{C}^1(\bar{\Omega}))$ tenemos que $J(x, t; s) > 0$ y, por lo tanto, existe $\mathbf{F}^{-1}(x, t; s)$, $\forall (x, t; s) \in \bar{\Omega} \times [0, T] \times [0, T]$. Además, como se puede ver en [52] y [77], se obtiene para J el problema

$$\begin{cases} \frac{dJ(x, t; s)}{ds} = \text{div} \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; s), s)J(x, t; s), \\ J(x, t; t) = 1, \end{cases} \quad (3.23)$$

mientras que J^{-1} verifica

$$\begin{cases} \frac{dJ^{-1}(x, t; s)}{ds} = -\text{div} \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; s), s)J^{-1}(x, t; s), \\ J^{-1}(x, t; t) = 1. \end{cases} \quad (3.24)$$

Lema 3.3.1. *Sea $\mathbf{v} \in C^0(\mathbf{W}^{k, \infty}(\Omega))$, $k \geq 1$ y $\mathbf{v}|_{\Gamma} = 0$. Entonces, $\mathcal{X} \in C^0(\Omega \times [0, T] \times [0, T])$ y es de clase $C^{k-1, 1}$ con respecto a la primera variable. Además, dados $s, t \in [0, T]$ con $|s - t|$ suficientemente pequeño, la aplicación $\mathcal{X}(\cdot, t; s) : \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}$ es un homeomorfismo cuasi-isométrico¹. En particular,*

$$\frac{1}{K_u}|x - y| \leq |\mathcal{X}(x, t; s) - \mathcal{X}(y, t; s)| \leq K_u|x - y|, \quad \forall x, y \in \Omega \quad (3.25)$$

con $K_u = e^{|s-t|\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{W}^{1, \infty}(\Omega))}}$.

¹Si (M_1, d_1) y (M_2, d_2) son dos espacios métricos, una aplicación $f : M_1 \rightarrow M_2$ es cuasi-isométrica si existen tres constantes $C_1 \geq 1$, $C_2 \geq 0$ y $C_3 \geq 0$ tales que

$$\begin{aligned} \frac{1}{C_1}d_1(x, y) - C_2 &\leq d_2(f(x), f(y)) \leq C_1d_1(x, y) + C_2, \quad \forall x, y \in M_1, \\ \forall y \in M_2 \exists x \in M_1 : d_2(f(x), y) &\leq C_3. \end{aligned}$$

Su jacobiano $J \in C^0([0, T]; L^\infty(D \times [0, T]))$ y verifica

$$e^{-C_u|s-t|} \leq J(x, s; t) \leq e^{C_u|s-t|}, \quad (3.26)$$

con $C_u = \|\operatorname{div} \mathbf{v}\|_{L^\infty(\Omega \times (0, T))}$.

DEMOSTRACIÓN. En primer lugar, recordemos que una función de $W^{1,\infty}(\Omega)$ es Hölder continua después de ser eventualmente redefinida en un conjunto de medida nula. Además, se verifica $W^{k,\infty}(\Omega) \subset C^{k-1,1}(\Omega)$. Teniendo esto en cuenta podemos ver la primera parte de la demostración en Süli [90].

Para probar la segunda parte debemos tener en cuenta que la solución de (3.23) viene dada por

$$J(x, t; s) = e^{\int_t^s \operatorname{div} \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; \tau), \tau) d\tau}, \quad (3.27)$$

mientras que la solución de (3.24) es

$$J^{-1}(x, t; s) = e^{-\int_t^s \operatorname{div} \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; \tau), \tau) d\tau}. \quad (3.28)$$

□

Teniendo en cuenta las definiciones de las curvas características y de la derivada material, sin más que aplicar la regla de la cadena, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{dc}{ds}(\mathcal{X}(x, t; s), s) &= c'(\mathcal{X}(x, t; s), s) + \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; s), s) \cdot \operatorname{grad} c(\mathcal{X}(x, t; s), s) \\ &= \dot{c}(\mathcal{X}(x, t; s), s). \end{aligned} \quad (3.29)$$

3.4. Discretización temporal: método de las características

En primer lugar obtendremos los esquemas semidiscretizados en tiempo. Para ello dividimos el intervalo $[0, T]$ en N subintervalos $[t_{n-1}, t_n]$, $n = 1, 2, \dots, N$, de longitud $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$ tales que $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$. Por simplicidad, supondremos que $\Delta t_n = \Delta t = T/N$. Utilizaremos la notación $\phi^n(x) := \phi(x, t_n)$ para cualquier función ϕ definida en $\Omega \times [0, T]$.

Recordemos que, para cada instante t_{n+1} , $\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \cdot)$ es la curva característica solución única del problema (3.16) con $t = t_{n+1}$, es decir,

$$\begin{cases} \frac{d\mathcal{X}(x, t_{n+1}; s)}{ds} = \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; s), s), \\ \mathcal{X}(x, t_{n+1}; t_{n+1}) = x. \end{cases} \quad (3.30)$$

Definimos las aplicaciones

$$\mathcal{X}^{i,j} := \mathcal{X}(\cdot, t_j; t_i), \quad (3.31)$$

$$\mathbf{F}^{i,j} := \mathbf{F}(\cdot, t_j; t_i), \quad (3.32)$$

$$J^{i,j} := J(\cdot, t_j; t_i), \quad (3.33)$$

con $i, j \in \{0, \dots, N\}$.

Podemos escribir una versión discreta del Lema 3.3.1 suponiendo que Δt es suficientemente pequeño.

Lema 3.4.1. *Sea $\mathbf{v} \in C^0(\mathbf{W}^{k,\infty}(\Omega))$, $k \geq 1$. Entonces, para cada $n \in \{0, \dots, N-1\}$, existe una única solución $\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \cdot) : [t_{n-1}, t_{n+1}] \subset [0, T] \rightarrow \bar{\Omega}$ del problema (3.16) tal que $\mathcal{X}(\cdot, t_{n+1}; \cdot) \in C^1(\mathbf{W}^{k,\infty}(D))$. Así, $\forall \alpha \in \mathbb{N}^d$, $1 \leq |\alpha| \leq k$, $\partial^\alpha \mathcal{X} \in C^0(\mathbf{L}^\infty(D \times (0, T)))$. Además, existen dos constantes K_1 y K_2 dependientes de $\|\operatorname{div} \mathbf{v}\|_{C^0(L^\infty(\Omega))}$ tales que*

$$1 - K_1 \Delta t \leq (J^{n,n+1}(x))^{-1} \leq 1 + K_2 \Delta t, \quad x \in \Omega. \quad (3.34)$$

DEMOSTRACIÓN. La demostración de este lema se puede hacer siguiendo los mismos pasos del Lema 4.2 en Süli [90], a partir del Lema 3.3.1. \square

Si escribimos la ecuación (3.29) con $t = s = t_{n+1}$ tenemos

$$\dot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; t_{n+1}), t_{n+1}) = \dot{c}(x, t_{n+1}). \quad (3.35)$$

Para cada $t \in [0, T]$ sea $a(t; \cdot, \cdot) : H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ la forma bilineal definida por

$$a(t; u, v) := \int_{\Omega} \mathbf{D}(x, t) \operatorname{grad} u(x) \cdot \operatorname{grad} v(x) dx + \int_{\Omega} l(x, t) u(x) v(x) dx, \quad \forall u, v \in H_0^1(\Omega). \quad (3.36)$$

Utilizando esta definición y teniendo en cuenta que a lo largo de las curvas características se verifica (3.29), si escribimos el problema débil (3.12) en $\mathcal{X}(x, t_{n+1}; t)$ su solución en el instante $n+1$ verifica

$$\langle \dot{c}^{n+1}, v \rangle + a(t_{n+1}; c^{n+1}, v) = \langle f^{n+1}, v \rangle, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \quad (3.37)$$

Discretizaremos el operador derivada total a lo largo de las curvas características con dos fórmulas BDF (Backward Difference Formulas) de órdenes uno (BDF1) y dos (BDF2):

- con BDF1,

$$\dot{c}(x, t_{n+1}) \approx \frac{c^{n+1}(x) - c^n(\mathcal{X}^{n,n+1}(x))}{\Delta t}, \quad (3.38)$$

- con BDF2,

$$\dot{c}(x, t_{n+1}) \approx \frac{3c^{n+1}(x) - 4c^n(\mathcal{X}^{n,n+1}(x)) + c^{n-1}(\mathcal{X}^{n-1,n+1}(x))}{2\Delta t}. \quad (3.39)$$

Teniendo en cuenta (3.35), tomando $t = t_{n+1}$ en el problema débil (3.12) y utilizando la aproximación (3.38) obtenemos el problema semidiscretizado.

Problema semidiscretizado BDF1:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dadas } c^0 \in L^2(\Omega), \{f^n\}_{n=1}^N \in (L^2(\Omega))^N \text{ encontrar } \{c^n\}_{n=1}^N \in (H_0^1(\Omega))^N \\ \text{tal que} \\ (c^{n+1} - c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, v) + \Delta t a^{n+1}(c^{n+1}, v) = \Delta t (f^{n+1}, v), \\ \forall v \in H_0^1(\Omega), \text{ y } n \in \{1, \dots, N-1\}. \end{array} \right. \quad (3.40)$$

Si utilizamos la aproximación (3.39) el problema semidiscretizado será:

Problema semidiscretizado BDF2:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dadas } c^0 \in L^2(\Omega), \{f^n\}_{n=1}^N \in (L^2(\Omega))^N \text{ encontrar } \{c^n\}_{n=1}^N \in (H_0^1(\Omega))^N \\ \text{tal que} \\ (c^1 - c^0 \circ \mathcal{X}^{0,1}, v) + \Delta t a^1(c^1, v) = \Delta t (f^1, v), \\ \frac{1}{2}(3c^{n+1} - 4c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} + c^{n-1} \circ \mathcal{X}^{n-1,n+1}, v) + \Delta t a^{n+1}(c^{n+1}, v) = \Delta t (f^{n+1}, v), \\ \forall v \in H_0^1(\Omega) \text{ y } n \in \{2, \dots, N-1\}. \end{array} \right. \quad (3.41)$$

En la definición de los problemas semidiscretizados hemos utilizado la notación f^{n+1} para la función de L^2 , $f(\cdot, t_{n+1})$, y a^{n+1} para la forma bilineal $a(t_{n+1}; \cdot, \cdot)$, para todo $n \in \{0, \dots, N-1\}$.

3.4.1. Existencia y unicidad de solución del problema semidiscretizado

Para probar la existencia y unicidad de solución de los problema semidiscretizados (3.40) y (3.41) tendremos en cuenta que la forma bilineal definida en (3.36) tiene las siguientes propiedades para cada $n \in \{0, \dots, N-1\}$:

1. a^{n+1} es simétrica y continua.
2. Si se verifican las Hipótesis 3.1, 3.2 y 3.3, $a^{n+1}(\cdot, \cdot)$ es coercitiva. En particular se verifica que existe una constante positiva $\bar{\nu}$ tal que

$$a^{n+1}(u, u) \geq \bar{\nu} \|\text{grad } u\|_0^2, \quad \forall u \in H_0^1(\Omega).$$

Teorema 3.4.1. *Supongamos que se verifican las Hipótesis 3.1, 3.2 y 3.3, entonces para Δt suficientemente pequeño los dos problemas semidiscretizados (3.40) y (3.41) tienen solución única.*

DEMOSTRACIÓN. Si introducimos las notaciones

$$\begin{aligned} b^{n+1}(u, v) &:= \varepsilon(u, v)_0 + \Delta t a^{n+1}(u, v), \\ L^{n+1}(v) &:= (\psi, v)_0 + \Delta t (f^{n+1}, v)_0, \end{aligned}$$

con ε una constante positiva y $\psi \in H_0^1(\Omega)$, tenemos que b^{n+1} es una forma bilineal simétrica, continua y coercitiva y que el operador $L^{n+1} \in H^{-1}(\Omega)$ y es continuo. Por lo tanto, aplicando el Teorema de Lax-Milgran, el problema

$$\begin{cases} \text{Encontrar } u \in H_0^1(\Omega), \text{ tal que} \\ b^{n+1}(u, v) = L^{n+1}(v), \forall v \in H_0^1(\Omega) \end{cases}$$

tiene una única solución para todo $n \in \{0, \dots, N-1\}$, de lo que se deduce inmediatamente el resultado. □

3.5. Discretización espacial: método de elementos finitos

Para la discretización espacial del problema usaremos el método de elementos finitos. En primer lugar, recordaremos algunas definiciones y resultados que nos serán de utilidad para la descripción y el análisis numérico de los métodos de Lagrange-Galerkin que describiremos en secciones posteriores. Para ver con más profundidad los conceptos que aquí se dan, así como las demostraciones de los resultados, se puede consultar, por ejemplo, Ciarlet [32].

Definición 3.5.1. Se llama malla o triangulación de un dominio Ω a una división del mismo en N_e subconjuntos T_j , $j = 1, \dots, N_e$ verificando:

1. T_j , $j = 1, \dots, N_e$ es cerrado y de interior no vacío.
2. La frontera de cada elemento T_j es lipschitciana.
3. $\Omega = \bigcup_{j=1}^{N_e} T_j$.
4. Dados T_i y T_j , con $i \neq j$, $\text{int}(T_i) \cap \text{int}(T_j) = \emptyset$.
5. Las caras de cada elemento o son subconjuntos de la frontera del dominio, Γ , o son la cara de otro elemento.

Además, la triangulación es regular si existe una constante σ tal que

$$\frac{h_j}{\rho_j} \leq \sigma, \quad j = 1, \dots, N_e,$$

siendo h_j el diámetro de T_j y ρ_j el supremo de los diámetros de las d -esferas inscritas en T_j . Diremos que esta triangulación es cuasi-uniforme si existe una constante α tal que

$$\frac{h}{h_j} \leq \alpha, \quad j = 1, \dots, N_e.$$

donde h es el tamaño característico de la malla:

$$h := \max_{1 \leq j \leq N_e} T_j.$$

A la triangulación de Ω de tamaño h la denotaremos por Ω_h . En particular, en esta memoria consideraremos que cada elemento de la triangulación es un símplex de dimensión d y si la frontera Γ es curva los elementos adyacentes tendrán al menos una cara curva.

Para cada elemento de la triangulación T_j se define un elemento finito como el triple $(T_j, P(T_j), \Sigma_{T_j})$ donde

1. $P(T_j)$ es un espacio de dimensión finita, $N_n = \dim(P(T_j))$, de aplicaciones $p : T_j \rightarrow \mathbb{R}$.
2. Σ_{T_j} es un conjunto de N_n formas lineales ϕ_i definidas sobre $P(T_j)$ que es $P(T_j)$ -unisolvante, es decir, dados N_n números reales α_i , $1 \leq i \leq N_n$ existe una única $p \in P(T_j)$ tal que

$$\phi_i(p) = \alpha_i, \quad 1 \leq i \leq N_n. \quad (3.42)$$

En particular, existen N_n funciones $p_i \in P(T_j)$, $1 \leq i \leq N_n$ que verifican

$$\phi_j(p_i) = \delta_{ij}, \quad 1 \leq j \leq N_n \quad (3.43)$$

y podemos expresar cada función $p \in P(T_j)$ como

$$p = \sum_{i=1}^{N_n} \phi_i(p) p_i. \quad (3.44)$$

Las formas lineales ϕ_i se llaman *grados de libertad* del elemento finito y las funciones p_i se llaman *funciones de base o de forma* del elemento finito.

Consideremos un elemento de referencia que denotaremos por $(\hat{T}, P(\hat{T}), \Sigma_{\hat{T}})$. Si los elementos de la triangulación son rectos, para cada símplex T_j , existe una aplicación $F_j : \hat{T} \rightarrow T_j$ afín invertible de la forma

$$F_j(\hat{x}) = B_j \hat{x} + b_j, \quad B_j \in \mathcal{M}_d(\mathbb{R}) \text{ y } b_j \in \mathbb{R}^d. \quad (3.45)$$

Estas aplicaciones permiten definir una familia de elementos finitos afín-equivalentes $(T_j, P(T_j), \Sigma_{T_j})$ donde

1. $T_j = F_j(\hat{T})$.
2. $P(T_j) = \{p : T_j \rightarrow \mathbb{R} : p = \hat{p} \circ F_j^{-1}, \hat{p} \in P(\hat{T})\}$.
3. $\Sigma_{T_j} = \{\phi_i : P(T_j) \rightarrow \mathbb{R} : \phi_i(p) = \hat{\phi}_i(p \circ F_j)\}$.

Definición 3.5.2. Se dice que un elemento T_j de la triangulación es curvo, de clase m , $m \geq 0$, si existe una aplicación $F_j : \hat{T} \rightarrow T_j$ de clase $C^{m,1}$ tal que

$$F_j = \tilde{F}_j + \Theta_j, \quad (3.46)$$

donde \tilde{F}_j es una aplicación de \hat{T} en un elemento de caras rectas \tilde{T}_j , definida como

$$\tilde{F}_j(\hat{x}) = \tilde{B}_j \hat{x} + \tilde{b}_j, \quad \tilde{B}_j \in \mathcal{M}_d(\mathbb{R}) \text{ y } \tilde{b}_j \in \mathbb{R}^d, \quad (3.47)$$

y $\Theta_j : \widehat{T} \rightarrow \mathbb{R}^d$ es una aplicación de clase $C^{m,1}$ que verifica

$$\tilde{c}_j := \sup_{\hat{x} \in \widehat{T}} \|D\Theta_j(\hat{x})\tilde{B}_j\| < 1. \quad (3.48)$$

Si $m = 0$, $D\Theta_j(\hat{x})$ se entenderá como un cociente de diferencias.

Si la partición está formada por elementos curvos de clase m , con las aplicaciones F_j se puede definir una familia de elementos finitos isoparamétricos de la misma forma que definimos las familias afín-equivalentes. Estas familias isoparamétricas de elementos finitos curvos se pueden considerar como perturbaciones de las familias afines construidas con las aplicaciones \tilde{F}_j .

Definimos los espacios de elementos finitos de Lagrange asociados a la partición Ω_h

$$\begin{aligned} W_h &:= \{v_h \in C^0(\overline{\Omega}) : v_h|_{T_j} \in P(T_j), \forall T_j \in \Omega_h\}, \\ V_h &:= H_0^1(\Omega) \cap W_h, \end{aligned}$$

con

$$P(T_j) = \{p : T_j \rightarrow \mathbb{R} : p = \hat{p} \circ F_j^{-1}, \hat{p} \in P_m(\widehat{T})\},$$

donde $P_m(\widehat{T})$ es el conjunto de polinomios definidos en \widehat{T} de grado $\leq m$.

Para facilitar la lectura de la memoria introducimos las siguientes notaciones:

- N_e : número de elementos de la triangulación o malla.
- N_n : número de nodos o grados de libertad de cada elemento o, lo que es lo mismo, la dimensión del espacio $P_m(\widehat{T})$ que viene dada por

$$N_n := \binom{m+d}{d}. \quad (3.49)$$

- N_{ng} : número de nodos o grados de libertad globales, es decir, la dimensión del espacio W_h .
- N_{vg} : número de vértices globales de la malla.
- $\alpha_i^j, i = 1, \dots, d+1$: vértices de cada símplex j .
- $\hat{\alpha}_i, i = 1, \dots, d+1$: vértices del elemento de referencia \widehat{T} .
- $\alpha_i, i = 1, \dots, N_{vg}$: vértices de la malla.
- $d_i^j, i = 1, \dots, N_n$: nodos de cada símplex j .
- $\hat{d}_i, i = 1, \dots, N_n$: nodos del elemento de referencia \widehat{T} .
- $\beta_i, i = 1, \dots, N_{ng}$: grados de libertad globales.
- $\hat{p}_i, i = 1, \dots, N_n$: polinomios de base del espacio $P(\widehat{T})$.
- $p_i^j := \hat{p}_i \circ F_j^{-1}, i = 1, \dots, N_n$: funciones de base de $P(T_j)$.

Así, una función $v_h \in W_h$ puede escribirse en cada símplex como

$$v_h|_{T_j} = \sum_{i=1}^{N_n} V_i^j p_i^j, \quad (3.50)$$

siendo $V_i^j = v_h(d_i^j)$ o bien expresarla en función de la base de W_h como

$$v_h = \sum_{i=1}^{N_{ng}} V_i \phi_i, \quad (3.51)$$

donde $V_i = v_h(\beta_i)$. Obviamente, dados i y j , hay un l tal que $\beta_l = d_i^j$ y, por lo tanto, $V_i^j = V_l$.

Enunciaremos ahora algunos resultados que utilizaremos para la estimación de error de los métodos que presentamos. Los introducimos aquí puesto que son resultados clásicos de acotación del error del método de elementos finitos y propiedades de los operadores de interpolación en los espacios de elementos finitos que hemos definido. Estos resultados pueden consultarse, por ejemplo, en Ciarlet [32] o en Ern y Guermond [40]. Por simplicidad, denotaremos por C todas las constantes que aparecen en las estimaciones que presentaremos a continuación, entendiendo que aunque sean distintas son siempre independientes de los parámetros h y Δt .

Sea $I_h \in \mathcal{L}(C^0(\Omega); W_h)$ el operador de interpolación de Lagrange, se verifica que existe una constante $C > 0$ tal que

$$\|u - I_h u\|_0 + h \|\text{grad}(u - I_h u)\|_0 \leq Ch^{k+1} \|u\|_{H^{k+1}(\Omega)}, \quad (3.52)$$

para toda $u \in H^{k+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, con k un entero verificando $m \geq k \geq 1$ y m el grado de los polinomios del espacio W_h .

Consideraremos el operador de proyección $R_{ht} : H_0^1(\Omega) \rightarrow V_h$ definido en relación con la forma bilineal $a(t; u, v)$, con $t \in [0, T]$. Así, para $u \in H_0^1(\Omega)$, $R_{ht}u$ se define casi por doquier como

$$a(t; R_{ht}u, v_h) = a(t; u, v_h), \quad \forall v_h \in V_h. \quad (3.53)$$

Este operador se llama *operador de Riesz o de proyección elíptica*.

Si definimos $\eta(t) := u(t) - R_{ht}u(t)$ con $u \in H^1(0, T; H_0^1(\Omega) \cap H^{k+1}(\Omega)) \cap C^0(0, T; H_0^1(\Omega) \cap H^{k+1}(\Omega))$, entonces se verifican las estimaciones (ver, por ejemplo, Ern y Guermond [40])

$$\|\eta(t)\|_0 + h \|\text{grad} \eta(t)\|_0 \leq Ch^{k+1} \|u(t)\|_{H^{k+1}(\Omega)}, \quad \forall t \in [0, T] \quad (3.54)$$

y

$$\begin{aligned} \|\eta_t\|_{L^2(L^2(\Omega))} + h \|\text{grad} \eta_t\|_{L^2(L^2(\Omega))} \leq \\ Ch^{k+1} \left(\|u\|_{L^2(H^{k+1}(\Omega))} + \|u_t\|_{L^2(H^{k+1}(\Omega))} \right), \end{aligned} \quad (3.55)$$

donde $\eta_t = \frac{\partial \eta}{\partial t}$ y la constante C en (3.54) y (3.55) es de la forma

$$C = \frac{\|\mathbf{D}\|_{L^\infty(\Omega \times (0, T))}}{\bar{\nu}} C_D, \quad (3.56)$$

siendo C_D una constante positiva.

Para tener control del error cuando $\bar{\nu} \rightarrow 0$ consideramos la hipótesis siguiente:

Hipótesis 3.4. La relación $\frac{\|\mathbf{D}\|_{L^\infty(\Omega \times (0, T))}}{\bar{\nu}}$ está acotada, lo que implica que

$$\infty > \frac{\lambda_{max}(x, t)}{\lambda_{min}(x, t)}, \quad x \in \Omega, \quad t \in [0, T]. \quad (3.57)$$

3.6. Métodos de Lagrange-Galerkin estándar

En esta sección describiremos los métodos de Lagrange-Galerkin estándar que se obtienen con las fórmulas BDF1 y BDF2 para la discretización del operador derivada total y que vimos en la Sección 3.4. Utilizaremos la notación c_h^n para la función de V_h aproximación de la solución del problema débil (3.12), $c \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \cap C(0, T; L^2(\Omega))$, en el instante t_n , y R_h^n para el operador de interpolación R_{ht_n} . Definimos entonces los problemas discretizados:

Problema discretizado BDF1 $(LG)_1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dada } c^0 \in L^2(\Omega) \text{ y sea } c_h^0 = R_h^0 c^0 \in V_h, \text{ encontrar } \{c_h^n\}_{n=1}^N \in (V_h)^N, \text{ tal que} \\ (c_h^{n+1} - c_h^n \circ \mathcal{X}^{n, n+1}, v_h) + \Delta t a^{n+1}(c_h^{n+1}, v_h) = \Delta t (f^{n+1}, v_h), \\ \text{para toda } v_h \in V_h. \end{array} \right. \quad (3.58)$$

Problema discretizado BDF2 $(LG)_2$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dada } c^0 \in L^2(\Omega) \text{ y sea } c_h^0 = R_h^0 c^0 \in V_h, \text{ encontrar } \{c_h^n\}_{n=1}^N \in (V_h)^N, \text{ tal que} \\ (c_h^1 - c_h^0 \circ \mathcal{X}^{0,1}, v_h) + \Delta t a^1(c_h^1, v_h) = \Delta t (f^1, v_h), \\ \frac{1}{2}(3c_h^{n+1} - 4c_h^n \circ \mathcal{X}^{n, n+1} + c_h^{n-1} \circ \mathcal{X}^{n-1, n+1}, v) + \Delta t a^{n+1}(c_h^{n+1}, v_h) \\ = \Delta t (f^{n+1}, v_h), \quad n \in \{2, \dots, N-1\}, \\ \text{para toda } v_h \in V_h. \end{array} \right. \quad (3.59)$$

La resolución de los problemas discretizados derivados del método de las características, $(LG)_1$ y $(LG)_2$, tienen como principal dificultad el cálculo de los términos $(c_h^l \circ \mathcal{X}^{l, i+1}, v_h)$, con $l = i - 1, i$ e $i = 1, \dots, N - 1$.

Para motivar la introducción de los métodos de Lagrange-Galerkin modificados veamos, por ejemplo, cómo se calcula el término $(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n, n+1}, v_h)$ utilizando un método de Lagrange-Galerkin estándar. Tenemos que

$$(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n, n+1}, v_h) = \int_{\Omega} (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n, n+1})(x) v_h(x) dx = \sum_{j=1}^{N_e} \int_{T_j} (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n, n+1})|_{T_j}(x) v_h|_{T_j}(x) dx. \quad (3.60)$$

Si suponemos $v_h|_{T_j} = p_k^j$, con $1 \leq k \leq N_n$, y utilizamos la aplicación biyectiva F_j para hacer un cambio de variable y escribir las integrales en cada elemento T_j de (3.60), en el tetraedro de referencia, obtenemos

$$\int_{T_j} (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n, n+1})|_{T_j}(x) v_h|_{T_j}(x) dx = \int_{\hat{T}} |\det(JF_j)| (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n, n+1} \circ F_j)(\hat{x}) \hat{p}_k(\hat{x}) d\hat{x}, \quad (3.61)$$

donde JF_j denota la matriz jacobiana de la aplicación F_j .

Para aproximar la integral sobre el tetraedro \hat{T} utilizamos una regla de cuadratura. Así

$$\int_{\hat{T}} |\det(JF_j)| (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \circ F_j)(\hat{x}) \hat{p}_k(\hat{x}) d\hat{x} = \mu(T_j) \sum_{s=1}^{N_q} \omega_s (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \circ F_j)(\hat{x}_s) \hat{p}_k(\hat{x}_s), \quad (3.62)$$

donde $\mu(T_j)$ es la medida del simplex T_j y \hat{x}_s , ω_s , $s = 1, \dots, N_q$ son los nodos y pesos de la fórmula de cuadratura, respectivamente. Veamos ahora cómo se calcularían los puntos $(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \circ F_j)(\hat{x}_s)$.

En la Sección 3.3 vimos que $\mathcal{X}^{n,n+1}(\bar{\Omega}) = \bar{\Omega}$ y, por lo tanto, teniendo en cuenta las propiedades de la triangulación, para cada nodo de cuadratura $\hat{x}_s \in \hat{T}$ existirá un único simplex, que denotaremos como $T_{l(s)}$, tal que $z_s := \mathcal{X}^{n,n+1}(x_s) \in T_{l(s)}$, siendo $x_s = F_j(\hat{x}_s)$. Para el elemento al que pertenece el punto z_s hemos utilizado el subíndice $l(s)$, donde la aplicación $l : \{1, \dots, N_q\} \rightarrow \{1, \dots, N_e\}$ indica el elemento en el que se encuentra cada punto z_s .

Como $c_h^n \in V_h$, se tiene

$$c_h^n|_{T_{l(s)}}(z_s) = \sum_{i=1}^{N_n} c_h^n(d_i^{l(s)}) p_i^{l(s)}(z_s), \quad (3.63)$$

es decir, para \hat{x}_s ,

$$c_h^n(\mathcal{X}^{n,n+1}(F_j(\hat{x}_s))) = \sum_{i=1}^{N_n} c_h^n(d_i^{l(s)}) \hat{g}_i^{l(s)}(\hat{x}_s), \quad (3.64)$$

donde definimos $\hat{g}_i^{l(s)} := p_i^{l(s)} \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \circ F_j$. Si consideramos la aplicación $F_{l(s)}^{-1} : T_{l(s)} \rightarrow \hat{T}$, para cada \hat{x} habrá un único $z = (\mathcal{X}^{n,n+1} \circ F_j)(\hat{x}) \in T_l$ tal que

$$\hat{g}_i^{l(s)}(\hat{x}) = (\hat{p}_i \circ F_{l(s)}^{-1})(z), \quad (3.65)$$

y, por lo tanto, para \hat{x}_s tenemos

$$\hat{g}_i^{l(s)}(\hat{x}_s) = (\hat{p}_i \circ F_{l(s)}^{-1} \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \circ F_j)(\hat{x}_s) = (\hat{p}_i \circ F_{l(s)}^{-1})(z_s). \quad (3.66)$$

Si sustituimos la expresión (3.66) en (3.64), teniendo en cuenta que $\hat{z}_s = (F_{l(s)}^{-1})(z_s)$, llegamos a

$$c_h^n(\mathcal{X}^{n,n+1}(F_j(\hat{x}_s))) = \sum_{i=1}^{N_n} c_h^n(d_i^{l(s)}) \hat{p}_i(\hat{z}_s). \quad (3.67)$$

Si volvemos a las expresiones (3.61) y (3.62) y utilizamos (3.67), se verifica para cada tetraedro T_j

$$\int_{T_j} (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1})|_{T_j}(x) v_h|_{T_j}(x) dx = \mu(T_j) \sum_{s=1}^{N_q} \omega_s \left(\sum_{i=1}^{N_n} c_h^n(d_i^{l(s)}) \hat{p}_i(\hat{z}_s) \right) \hat{p}_k(\hat{x}_s). \quad (3.68)$$

El algoritmo para calcular numéricamente las integrales (3.68) sería el siguiente:

```

BUCLE  $j = 1, \dots, N_e$ 
  ■ BUCLE  $s = 1, \dots, N_q$ 
    (1) Calcular  $x_s = F_j(\hat{x}_s)$ .
    (2) Calcular  $z_s = \mathcal{X}^{n,n+1}(x_s)$ . Para ello debemos resolver el problema
        (3.30) con condiciones iniciales  $x = x_s$ .
    (3) Encontrar el elemento  $T_{l(s)}$  que contiene al punto  $z_s = \mathcal{X}^{n,n+1}(x_s)$ 
        y calcular  $\hat{z}_s = F_{l(s)}^{-1}(z_s)$ .
    (4) Calcular  $c_h^n(z_s)$  utilizando (3.67)
    (5) Calcular  $\hat{p}_k(\hat{x}_s)$ ,  $k = 1, \dots, N_n$ 
  FIN BUCLE  $s$ 
  ■ Calcular la integral en  $T_j$  utilizando la fórmula (3.68).
  ■ Ensamblar los valores obtenidos en el vector segundo miembro  $R^n :=$ 
     $(r_1^n, \dots, r_{N_{ng}}^n)$ 
FIN BUCLE  $j$ 

```

El algoritmo presentado hay que utilizarlo en cada instante de tiempo y podemos ver que hay dos pasos que son computacionalmente muy costosos. El primero es el (2), pues debemos realizarlo para $N_e \times N_q$ puntos. El análisis teórico, avalado por experimentos numéricos, muestra que el error del método de LG depende de la precisión con que se resuelva el problema (3.30). Así, será necesario utilizar métodos de orden ≥ 2 . Además, el número de nodos de cuadratura N_q puede ser bastante grande ya que es necesario utilizar fórmulas de alto orden para mantener la estabilidad y la convergencia del método. Por ejemplo, en algunos resultados numéricos que presentaremos se utilizan fórmulas de cuadratura de Gauss-Legendre de orden 8 para tetraedros, con 31 puntos. Por otro lado, la búsqueda del tetraedro que contiene a cada uno de los nodos de cuadratura movidos (paso (3)) puede ser costosa si no está adecuadamente implementada. Para esta búsqueda utilizaremos el algoritmo SL (Search-Locate) propuesto por Allevi y Bermejo [2]. Este algoritmo es eficiente para mallas no estructuradas formadas por elementos que pueden ser curvos o rectos. Además, utiliza las aplicaciones F_j del método de elementos finitos, haciendo muy sencilla su implementación en un código que utilice este método de discretización.

En el caso del método de orden 2, $(LG)_2$, para cada instante de tiempo t_n tendríamos que utilizar el algoritmo dos veces, para calcular también los términos $(c_h^{n-1} \circ \mathcal{X}^{n-1,n+1}, v_h)$.

3.7. Métodos de Lagrange-Galerkin modificados

Los métodos de Lagrange-Galerkin modificados, que denotaremos abreviadamente como MLG, reducirán el coste computacional del cálculo de las integrales $(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, v_h)$ manteniendo el orden de error de los métodos LG estándar; se basan en las ideas introducidas

en Bermejo y Carpio [13] para la ecuación de convección pura y han sido analizados para ecuaciones de convección-difusión en Bermejo y Saavedra [16].

Definamos en primer lugar la partición Ω_h^n . En virtud del Lema 3.4.1, en cada instante t_n podemos construir un elemento $T_j^n \subset \bar{\Omega}$ asociado al elemento T_j de la partición Ω_h de la forma $T_j^n = \mathcal{X}^{n,n+1}(T_j)$. Si tenemos en cuenta el Lema 3.3.1 es fácil ver que para cada T_j existe un único elemento T_j^{*n} y que el conjunto de estos últimos forman una nueva triangulación del dominio por elementos curvos, que denotaremos por Ω_h^n .

A partir de la aplicación $F_j : \hat{T} \rightarrow T_j$ podemos definir la aplicación casi-isométrica de clase $C^{k-1,1}$, $F_j^{n,n+1} : \hat{T} \rightarrow T_j^n$, de la forma

$$F_j^{n,n+1}(\hat{x}) = (\mathcal{X}^{n,n+1} \circ F_j)(\hat{x}) \quad (3.69)$$

Debido a las propiedades de las aplicaciones F_j y $\mathcal{X}^{n,n+1}$ existe también la aplicación inversa $(F_j^{n,n+1})^{-1}$.

Si consideramos el simplex $\tilde{T}_j^{n,n+1}$ formado por los vértices $\{\mathcal{X}^{n,n+1}(a_1^j), \dots, \mathcal{X}^{n,n+1}(a_{d+1}^j)\}$, existe una única aplicación afín invertible del elemento de referencia a este simplex, $\tilde{F}_j^{n,n+1} : \hat{T} \rightarrow \tilde{T}_j^{n,n+1}$, definida como

$$\tilde{F}_j^{n,n+1}(\hat{x}) = \tilde{B}_j^{n,n+1}\hat{x} + \tilde{b}_j^{n,n+1}, \quad (3.70)$$

siendo $\tilde{B}_j^{n,n+1} \in \mathcal{M}_d(\mathbb{R})$ y $\tilde{b}_j^{n,n+1} \in \mathbb{R}^d$.

Tenemos que el elemento $\tilde{T}_j^{n,n+1}$ es una aproximación lineal del elemento $T_j^{n,n+1}$ y que se verifica

$$\tilde{F}_j^{n,n+1} = \hat{I}F_j^{n,n+1}, \quad (3.71)$$

donde \hat{I} denota el interpolante lineal sobre \hat{T} .

Así, dado un punto $\hat{x} \in \hat{T}$, para cada instante t_n podemos asociarle tres puntos:

$$\begin{aligned} x &= F_j(\hat{x}) \in T_j, \\ z &= F_j^{n,n+1}(\hat{x}) = (\mathcal{X}^{n,n+1} \circ F_j)(\hat{x}) = \mathcal{X}^{n,n+1}(x) \in T_j^{n,n+1}, \\ \tilde{z} &= \tilde{F}_j^{n,n+1}(\hat{x}) \in \tilde{T}_j^{n,n+1}. \end{aligned}$$

Si definimos la aplicación $\tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} : T_j \rightarrow \tilde{T}_j^{n,n+1}$ como

$$\tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}(x) := \tilde{F}_j^{n,n+1} \circ F_j^{-1}, \quad (3.72)$$

tenemos que $\tilde{z} = \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}(x)$. En la Figura 3.1 podemos ver un esquema de las aplicaciones $\tilde{F}_j^{n,n+1}$ y $\tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}$ para una malla de tetraedros.

Los métodos de Lagrange-Galerkin modificados consistirán en aproximar $z = \mathcal{X}^{n,n+1}(x)$ por $\tilde{z} = \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}(x)$ para todo $x \in T_j$; o lo que es lo mismo, en suponer que $T_j^{n,n+1} \approx \tilde{T}_j^{n,n+1}$. Así, para calcular el término $(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, v_h)$, aproximaremos las integrales en cada elemento de la forma

$$\int_{T_j} (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1})|_{T_j}(x) v_h|_{T_j}(x) dx \approx \int_{T_j} (c_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1})|_{T_j}(x) v_h|_{T_j}(x) dx. \quad (3.73)$$

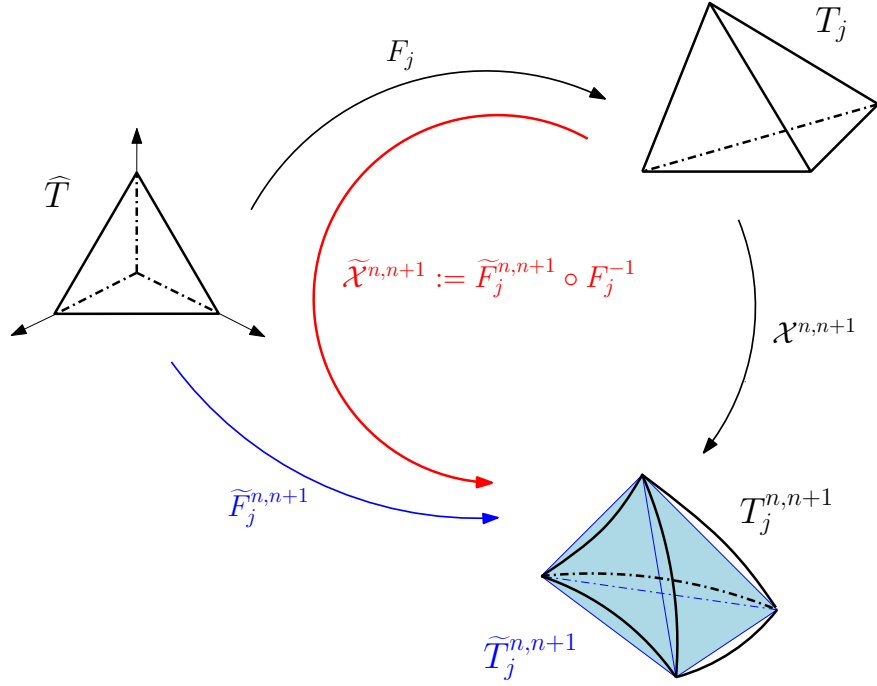


Figura 3.1: Esquema de las aplicaciones $\tilde{F}_j^{n,n+1}$ y $\tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}$

En la siguiente sección veremos cuál es el coste, en el error del método, de asumir que los elementos curvos $T_j^{n,n+1}$ se pueden aproximar por los elementos rectos $\tilde{T}_j^{n,n+1}$.

Veamos ahora cómo calcular las integrales de la derecha de (3.73) y qué ahorro representan frente al cálculo de las integrales del lado izquierdo realizadas con los métodos estándar.

Si suponemos que $v_h|_{T_j}$ es una función de base p_k^j , hacemos el cambio de variable dado por la aplicación F_j y tenemos en cuenta la definición (3.72), obtenemos que

$$\int_{T_j} (c_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1})|_{T_j}(x) v_h|_{T_j}(x) dx = \int_{\hat{T}} |\det(JF_j)| (c_h^n \circ \tilde{F}_j^{n,n+1})(\hat{x}) \hat{p}_k(\hat{x}) d\hat{x}. \quad (3.74)$$

Siguiendo los mismos pasos que en el caso de los métodos LG, utilizamos una fórmula de cuadratura para calcular la integral en \hat{T} ,

$$\int_{\hat{T}} |\det(JF_j)| (c_h^n \circ \tilde{F}_j^{n,n+1})(\hat{x}) \hat{p}_k(\hat{x}) d\hat{x} = \mu(T_j) \sum_{s=1}^{N_q} \omega_s (c_h^n \circ \tilde{F}_j^{n,n+1})(\hat{x}_s) \hat{p}_k(\hat{x}_s), \quad (3.75)$$

donde faltará calcular los puntos $(c_h^n \circ \tilde{F}_j^{n,n+1})(\hat{x}_s)$.

Si $T_{l(s)}$ es el tetraedro de la triangulación al que pertenece \tilde{z}_s y llamamos $\hat{\tilde{z}}_s = F_{l(s)}^{-1}(\tilde{z}_s)$

tenemos que, como $c_h^n \in V_h$,

$$\begin{aligned}
c_h^n(\tilde{F}_j^{n,n+1}(\hat{x}_s)) &= \sum_{i=1}^{N_n} c_h^n(d_i^{l(s)}) p_i^{l(s)}(\tilde{F}_j^{n,n+1}(\hat{x}_s)) \\
&= \sum_{i=1}^{N_n} c_h^n(d_i^{l(s)}) \hat{p}_i(F_{l(s)}^{-1}(\tilde{F}_j^{n,n+1}(\hat{x}_s))) \\
&= \sum_{i=1}^{N_n} c_h^n(d_i^{l(s)}) \hat{p}_i(\tilde{z}_s). \tag{3.76}
\end{aligned}$$

Así, con el método de Lagrange-Galerkin modificado obtenemos una igualdad análoga a la (3.68) para los métodos de LG estándar:

$$\int_{T_j} (c_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1})|_{T_j}(x) v_h|_{T_j}(x) dx = \mu(T_j) \sum_{s=1}^{N_q} \omega_s \left(\sum_{i=1}^{N_n} c_h^n(d_i^{l(s)}) \hat{p}_i(\tilde{z}_s) \right) \hat{p}_k(\hat{x}_s). \tag{3.77}$$

El algoritmo para el cálculo de las integrales de (3.77) sería:

BUCLE $j = 1, \dots, N_e$

- Calcular el elemento $\tilde{T}_j^{n,n+1}$ resolviendo el problema (3.30) con condiciones iniciales los vértices $\{d_i^j\}_{i=1}^{d+1}$ del elemento T_j .
- Construir la aplicación $\tilde{F}_j^{n,n+1}$ haciendo
$$\tilde{B}_j^{n,n+1} = [\mathcal{X}^{n,n+1}(a_1^j) - \mathcal{X}^{n,n+1}(a_{d+1}^j) \mid \dots \mid \mathcal{X}^{n,n+1}(a_d^j) - \mathcal{X}^{n,n+1}(a_{d+1}^j)]$$
y
$$\tilde{b}_j^{n,n+1} = \mathcal{X}^{n,n+1}(a_{d+1}^j).$$
- BUCLE $s = 1, \dots, N_q$
 - (1) Calcular $\tilde{z}_k = \tilde{F}_j^{n,n+1}(\hat{x}_s)$.
 - (2) Encontrar el elemento $T_{l(s)}$ donde está \tilde{z}_k y calcular $\tilde{z}_s = F_{l(s)}^{-1}(s)(\tilde{z}_k)$.
 - (3) Calcular $c_h^n(\tilde{z}_s)$ utilizando (3.76).
 - (4) Calcular $\hat{p}_k(\hat{x}_s)$, $k = 1, \dots, N_n$.

FIN BUCLE s
- Calcular la integral en T_j por la fórmula (3.77).
- Ensamblar los valores obtenidos en el vector segundo miembro $R^n := (r_1^n, \dots, r_{N_q}^n)$.

FIN BUCLE j

En el algoritmo para el método LG, en los pasos (2) y (3) se movía cada nodo de cuadratura de la malla. Ahora, en el algoritmo para los métodos MLG, estos pasos se sustituyen por los dos primeros puntos del bucle en elementos y por el punto (1), en los que los puntos de cuadratura movidos se calculan a partir de los vértices movidos con la ayuda de la aplicación $F_j^{n,n+1}$. Así, el ahorro de los métodos MLG consiste en que solamente hay que resolver el problema (3.30) para los vértices de la malla en lugar de para los $N_e \times N_q$ nodos de cuadratura de la misma.

La aproximación a la solución c del problema débil (3.12), en el instante t_{n+1} , dada por los métodos de Lagrange-Galerkin modificados se obtiene como solución de los problemas discretos siguientes, dependiendo de la fórmula en diferencias que utilicemos:

Problema discretizado modificado BDF1 (MLG)₁:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Sea } c_h^0 = R_h^0 c^0 \in V_h, \text{ encontrar funciones } \{c_h^n\}_{n=1}^N \in (V_h)^N, \text{ tales que} \\ (c_h^{n+1} - c_h^{n,n+1} \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}, v_h) + \Delta t a^{n+1}(c_h^{n+1}, v_h) = \Delta t (f^{n+1}, v_h), \\ \text{para toda } v_h \in V_h. \end{array} \right. \quad (3.78)$$

Problema discretizado modificado BDF2 (MLG)₂:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Sea } c_h^0 = R_h^0 c^0 \in V_h, \text{ encontrar funciones } \{c_h^n\}_{n=1}^N \in (V_h)^N, \text{ tales que} \\ (c_h^1 - c_h^0 \circ \mathcal{X}^{0,1}, v_h) + \Delta t a^1(c_h^1, v_h) = \Delta t (f_h^1, v_h), \\ \frac{1}{2}(3c_h^{n+1} - 4c_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} + c_h^{n-1} \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n-1,n+1}, v_h) + \Delta t a^{n+1}(c_h^{n+1}, v_h) \\ = \Delta t (f^{n+1}, v_h), \quad 2 \leq n \leq N-1, \\ \text{para toda } v_h \in V_h. \end{array} \right. \quad (3.79)$$

Observación 3.7.1. *La existencia y unicidad de solución de los problemas discretizados (LG)₁, (LG)₂, (MLG)₁ y (MLG)₂ se obtiene de forma inmediata teniendo en cuenta lo visto en la Sección 3.4.1.*

Analizaremos en la sección siguiente qué error añaden los métodos MLG con respecto a los LG y cómo ese error no estropea el orden de los LG estándar.

3.8. Análisis numérico de los métodos Lagrange-Galerkin modificados

En esta sección veremos resultados sobre la estabilidad y la estimación del error de los métodos de Lagrange-Galerkin modificados (MLG)₁ y (MLG)₂, presentados en la sección anterior. El análisis realizado en esta sección se puede aplicar para los métodos estándar simplemente no teniendo en cuenta ciertos términos.

En primer lugar, veremos las notaciones que vamos a usar en esta sección así como algunos resultados preliminares que nos permitirán dar una estimación en norma L^2 de la diferencia entre las curvas características exactas $\mathcal{X}^{n,n+1}$ y las curvas características modificadas $\tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}$.

En segundo lugar haremos el análisis numérico de los métodos, siendo el método de orden 1 el primero en analizar y, basándonos en las mismas técnicas, podremos analizar el método de orden 2.

3.8.1. Notaciones y resultados preliminares

Dado un espacio de Banach B con norma $\|\cdot\|_B$ definimos los espacios

$$l^p(0, T; B) := \{f : \{t_0, \dots, t_N\} \subset [0, T] \rightarrow B : \|f\|_{l^p(0, T; B)} < \infty\}, \quad 1 \leq p \leq \infty, \quad (3.80)$$

donde

$$\|f\|_{l^p(0, T; B)} := \left(\Delta t \sum_{i=0}^N \|f(t_i)\|_B^p \right)^{1/p} \quad 1 \leq p < \infty \quad (3.81)$$

$$\|f\|_{l^\infty(0, T; B)} := \max_{0 \leq i \leq N} \|f(t_i)\|_B, \quad p = \infty. \quad (3.82)$$

Denotaremos estos espacios de forma abreviada como $l^p(B)$.

Sea $\varphi \in C^0(H^1(\Omega))$ introducimos los operadores

$$\tilde{\mathcal{D}}_e^{n,1} \varphi := \varphi^{n+1} - \varphi^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}, \quad (3.83)$$

$$\tilde{\mathcal{D}}_e^{n,2} \varphi := \frac{1}{2} \left(3\varphi^{n+1} - 4\varphi^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} + \varphi^{n-1} \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n-1,n+1} \right). \quad (3.84)$$

También definimos los operadores $\tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,i} \varphi \in (H^1(\Omega))'$, $i = 1, 2$ y $\mathcal{F}_{\Delta t}^n \in (H^1(\Omega))'$ como

$$\langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,i} \varphi, \psi \rangle := \langle \tilde{\mathcal{D}}_e^{n,i} \varphi, \psi \rangle + \Delta t a^{n+1}(\varphi^{n+1}, \psi), \quad \forall \psi \in H^1(\Omega), \quad (3.85)$$

y

$$\langle \mathcal{F}_{\Delta t}^n, \psi \rangle := \Delta t (f^{n+1}, \psi), \quad \forall \psi \in H^1(\Omega). \quad (3.86)$$

Denotaremos las sucesiones de funciones de forma abreviada como $[\varphi] := \{\varphi^n\}_{n=1}^N$. De esta forma, si φ es una aplicación definida en $[0, T]$ o en $\{t_0, \dots, t_N\}$ y con valores en un espacio de funciones, podemos escribir $[\varphi] := \{\varphi(t_n)\}_{n=0}^N$.

Observación 3.8.1. Como en la definición de los operadores $\tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,i}$ solamente se requieren los instantes de tiempo $\{t_n\}_{n=0}^N$, estos se pueden definir también para una sucesión de funciones $[\varphi] \in (H^1(\Omega))^{N+1}$.

Con la notación introducida los problemas $(MLG)_1$ y $(MLG)_2$ se pueden escribir como

- Método de Lagrange-Galerkin modificado de primer orden en tiempo:

$$\begin{cases} \text{Dado } c_h^0 \in V_h \text{ encontrar } [c_h] \in (V_h)^N \text{ tal que} \\ \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1}[c_h] = \mathcal{F}_{\Delta t}^n, \text{ en } (V_h)', \\ \text{para } n = 0, \dots, N-1. \end{cases} \quad (3.87)$$

- Método de Lagrange-Galerkin modificado de segundo orden en tiempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dado } c_h^0 \in V_h \text{ encontrar } [c_h] \in (V_h)^N \text{ tal que} \\ \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{0,1}[c_h] = \mathcal{F}_{\Delta t}^0, \text{ en } (V_h)', \\ \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,2}[c_h] = \mathcal{F}_{\Delta t}^n, \text{ en } (V_h)', \\ \text{y para } n = 1, \dots, N-1. \end{array} \right. \quad (3.88)$$

Dado que la solución exacta del problema (3.12) en cada instante t_n verifica (3.37), la sucesión $[c] = \{c(t_n)\}_{n=1}^N$ verifica la ecuación

$$\langle \mathcal{L}^n[c], v \rangle = \langle \mathcal{F}^n, v \rangle, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega), \quad (3.89)$$

siendo $\mathcal{L}^n[c]$ y \mathcal{F}^n los operadores de $(H^1(\Omega))'$ definidos por

$$\langle \mathcal{L}^n[c], \psi \rangle := \langle \dot{c}^{n+1}, \psi \rangle + a^{n+1}(c^{n+1}, \psi), \quad (3.90)$$

$$\langle \mathcal{F}^n, \psi \rangle := (f^{n+1}, \psi), \quad (3.91)$$

para toda $\psi \in H_0^1(\Omega)$.

Para estudiar la estabilidad y la convergencia de los métodos que presentamos asumimos las siguientes hipótesis:

Hipótesis 3.5. *Los parámetros h y Δt verifican*

$$0 < h \leq h_0 < 1 \text{ y } 0 < \Delta t \leq \Delta t_0 < 1,$$

siendo h_0 y Δt_0 suficientemente pequeños.

Hipótesis 3.6. *La velocidad pertenece al espacio $C^0(\mathbf{W}^{1,\infty}(\Omega))$ y además $\mathbf{v} = 0$ en Γ .*

Veamos algunos resultados auxiliares sobre el paso convectivo que utilizaremos en los teoremas de convergencia de los métodos.

Lema 3.8.1. *Si se verifican las Hipótesis 3.5 y 3.6 y $\varphi \in L^2(\Omega)$, entonces existen dos constantes positivas K_1 y K_2 dependientes de $\|\operatorname{div} \mathbf{v}\|_{L^\infty(\Omega \times (0,T))}$ tales que*

$$(1 - K_1 \Delta t) \|\varphi\|_0^2 \leq \|\varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_0^2 \leq (1 + K_2 \Delta t) \|\varphi\|_0^2, \quad (3.92)$$

$$(1 - K_1 \Delta t) \|\varphi\|_0 \leq \|\varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_0 \leq (1 + K_2 \Delta t) \|\varphi\|_0, \quad (3.93)$$

para $n = 1, \dots, N$.

DEMOSTRACIÓN. Dado que Δt es suficientemente pequeño, por el Lema 3.4.1 tenemos que $\mathcal{X}^{n,n+1}(\overline{\Omega}) = \overline{\Omega}$. Así podemos hacer el cambio de variable $y = \mathcal{X}^{n,n+1}(x)$, y tenemos

$$\|\varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_0^2 = \int_{\Omega} \varphi(\mathcal{X}^{n,n+1}(x))^2 dx = \int_{\Omega} (\varphi(y))^2 (J^{n,n+1})^{-1}(y) dy. \quad (3.94)$$

Utilizando la acotación del Lema 3.4.1 obtenemos (3.92).

Si hacemos la raíz cuadrada de la desigualdad (3.92) y consideramos un desarrollo de Taylor de las funciones $f(x) = \sqrt{1 \pm x}$ en torno al cero,

$$\sqrt{1 \pm x} = 1 \pm \frac{1}{2}x + O(x^2),$$

tenemos que existen constantes K_3 y K_4 verificando (3.93). Por simplicidad en la notación, podemos considerar unas únicas constantes, que denotaremos de nuevo por K_1 y K_2 , que verifican las dos desigualdades. \square

Lema 3.8.2. *Si q es un entero verificando $q \geq 1$ y $\mathbf{v} \in C^0(\mathbf{W}^{q+1,\infty}(\Omega))$ y se verifica la Hipótesis 3.5, entonces, para todo $j \in \{1, \dots, N_e\}$ y para todo $n \in \{0, \dots, N-1\}$, $F_j^{n,n+1} \in \mathbf{C}^{q,1}(\hat{T})$ y existe una constante C_1 independiente de los parámetros h y Δt tal que*

$$\|\mathcal{X}^{n,n+1} - \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}\|_{\mathbf{L}^\infty(\bar{\Omega})} \leq C_1 h^2 \Delta t \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega))}. \quad (3.95)$$

DEMOSTRACIÓN. Si tenemos en cuenta la definiciones de $\mathcal{X}^{n,n+1}$ y $\tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}$ dadas en (3.31) y (3.72), respectivamente, podemos escribir para cada elemento T_j

$$\|\mathcal{X}^{n,n+1} - \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}\|_{\mathbf{L}^\infty(T_j)} = \|F_j^{n,n+1} - \tilde{F}_j^{n,n+1}\|_{\mathbf{L}^\infty(\hat{T})}. \quad (3.96)$$

Veamos primero que $F_j^{n,n+1} \in \mathbf{C}^{q,1}(\hat{T})$. Utilizando la definición de $F_j^{n,n+1}$ dada en (3.69) y la forma integral de la solución del problema (3.16) escrita en (3.18), tenemos

$$F_j^{n,n+1}(\hat{x}) = B_j \hat{x} + b_j - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{v}(X(B_j \hat{x} + b_j, t_{n+1}; \tau), \tau) d\tau. \quad (3.97)$$

Como $\mathbf{v} \in C^0(\mathbf{W}^{q+1,\infty}(\Omega))$, usando el Lema 3.4.1 deducimos que la aplicación

$$\mathcal{X}(\cdot, t_{n+1}, \cdot) : \Omega \times [0, T] \rightarrow \Omega \quad (3.98)$$

está en $C^1(\mathbf{W}^{q+1,\infty}(\Omega))$ y, por lo tanto, se tiene inmediatamente que $\tilde{F}_j^{n,n+1} \in \mathbf{W}^{q+1,\infty}(\hat{T})$, es decir, $\tilde{F}_j^{n,n+1} \in \mathbf{C}^{q,1}(\hat{T})$. Si utilizamos la igualdad (3.71) y dado que $\hat{I}(F_j) = F_j$, se obtiene, sin más que aplicar el Lema de Bramble-Hilbert (ver Ciarlet [32]),

$$\begin{aligned} & \|F_j^{n,n+1} - \tilde{F}_j^{n,n+1}\|_{\mathbf{L}^\infty(\hat{T})} = \|(F_j^{n,n+1} - F_j) - \hat{I}(F_j^{n,n+1} - F_j)\|_{\mathbf{L}^\infty(\hat{T})} \\ & \leq \hat{C} |F_j^{n,n+1} - F_j|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\hat{T})} = \hat{C} \left| \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{v}(\mathcal{X}(B_j \hat{x} + b_j, t_{n+1}; \tau), \tau) d\tau \right|_{\mathbf{W}^{2,\infty}(\hat{T})}, \end{aligned} \quad (3.99)$$

donde $\hat{C} = \hat{C}(\hat{I}, \hat{T})$; recordamos que la seminorma $|\cdot|_{W^{2,\infty}(\hat{T})}$ se define como

$$|f|_{W^{2,\infty}(\hat{T})} := \max_{|j|=2} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} \{ \partial^j f(x) \}. \quad (3.100)$$

Teniendo en cuenta la definición de la seminorma que acabamos de dar y que para cada $j \in 1, \dots, N_e$ y $t \in [t_n, t_{n+1}]$, podemos hacer un cambio de variable utilizando la aplicación

$\mathcal{X}(\cdot, t_{n+1}, t) \circ F_j : \widehat{T} \rightarrow T^{t, n+1} = \mathcal{X}(T_j, t_{n+1}, t) \subset \overline{\Omega}$. De ese modo, se llega fácilmente (ver Bermejo y Carpio [12]) a

$$\begin{aligned} \left| \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{v}(\mathcal{X}(F_j(\widehat{x}), t_{n+1}; \tau), \tau) d\tau \right|_{\mathbf{W}^{2, \infty}(\widehat{T})} &\leq C \Delta t h_j^2 \|\mathbf{v}\|_{C^0(t_n, t_{n+1}, \mathbf{W}^{2, \infty}(T^{t, n+1}))} \\ &\leq C_1 \Delta t h^2 \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{W}^{2, \infty}(\Omega))}. \end{aligned}$$

□

Consideramos una hipótesis más para la velocidad:

Hipótesis 3.7. *La velocidad está en $C^0(\mathbf{W}^{2, \infty}(\Omega))$ y se anula en la frontera Γ .*

Lema 3.8.3. *Supongamos que se verifican las Hipótesis 3.5 y 3.7 y que $\phi \in H^1(\Omega)$. Entonces, para cada instante t_n , existe una constante C_2 independiente de Δt y h , pero dependiente de $\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{W}^{2, \infty}(\Omega))}$, tal que*

$$\left\| \varphi \circ \mathcal{X}^{n, n+1} - \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1} \right\|_0 \leq C_2 h^2 \Delta t \|\text{grad } \varphi\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}. \quad (3.101)$$

DEMOSTRACIÓN. Dado que $\varphi \in H^1(\Omega)$, por el teorema fundamental del cálculo tendremos que, para cada $x \in \Omega$,

$$\varphi(\mathcal{X}^{n, n+1}(x)) = \varphi(\tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x)) + \int_{\tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x)}^{\mathcal{X}^{n, n+1}(x)} \text{grad } \varphi(s) ds. \quad (3.102)$$

Definamos para cada $\alpha \in [0, 1]$ la aplicación

$$H(\alpha, x) = \alpha \mathcal{X}^{n, n+1}(x) + (1 - \alpha) \tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x). \quad (3.103)$$

Como por el Lema 3.3.1 $\mathcal{X}^{n, n+1}$ es un homeomorfismo de $\overline{\Omega}$ en sí mismo y, por tanto, $\tilde{\mathcal{X}}^{n+1}$ también, la aplicación $H(\cdot, x)$ también es un homeomorfismo (ver Ern y Guermond [40]) y podemos aplicar el cambio de variable $s = H(\alpha, x)$ en (3.102). Así, tendremos

$$\varphi(\mathcal{X}^{n, n+1}(x)) - \varphi(\tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x)) = \left(\mathcal{X}^{n, n+1}(x) - \tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x) \right) \int_0^1 \text{grad } \varphi(H(\alpha, x)) d\alpha, \quad (3.104)$$

y, por tanto,

$$\begin{aligned} \left| \varphi(\mathcal{X}^{n, n+1}(x)) - \varphi(\tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x)) \right|^2 &\leq \\ \left| \mathcal{X}^{n, n+1}(x) - \tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x) \right|^2 \int_0^1 |\text{grad } \varphi(H(\alpha, x))|^2 d\alpha. &\quad (3.105) \end{aligned}$$

Si integramos la expresión (3.105) en T_j y aplicamos el Lema 3.8.2 se obtiene

$$\begin{aligned} \int_{T_j} \left| \varphi(\mathcal{X}^{n, n+1}(x)) - \varphi(\tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x)) \right|^2 dx &\leq \left\| \mathcal{X}^{n, n+1}(x) - \tilde{\mathcal{X}}^{n, n+1}(x) \right\|_{\mathbf{L}^\infty(\overline{\Omega})}^2 \\ &\quad \int_0^1 \left(\int_{T_j} |\text{grad } \varphi(H(\alpha, x))|^2 dx \right) d\alpha \\ &\leq C_1^2 h^4 \Delta t^2 \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{W}^{2, \infty}(\Omega))}^2 \|\text{grad } \varphi\|_{0, 2, T_j}^2. \end{aligned}$$

Sumando con respecto a j obtenemos el resultado. \square

Lema 3.8.4. *Bajo las Hipótesis 3.5 y 3.7, si $\varphi \in H^1(\Omega)$ existen dos constantes C_3 y C_4 , independientes de Δt y h , tales que*

$$(1 - C_3\Delta t)\|\varphi\|_0 \leq \left\| \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0 \leq (1 + C_4\Delta t)\|\varphi\|_0, \quad (3.106)$$

$$(1 - C_3\Delta t)\|\varphi\|_0^2 \leq \left\| \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0^2 \leq (1 + C_4\Delta t)\|\varphi\|_0^2, \quad (3.107)$$

para $n = 1, \dots, N$.

DEMOSTRACIÓN. Si escribimos $\varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}$ como

$$\varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} = \varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \left(\varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right), \quad (3.108)$$

y aplicamos normas tenemos que, utilizando (3.93) y (3.101),

$$\left\| \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0 \leq (1 + K_2\Delta t)\|\varphi\|_0 + C_2h^2\Delta t\|\text{grad } \varphi\|_{L^2(\Omega)}. \quad (3.109)$$

Dado que consideramos una malla regular podemos aplicar la desigualdad inversa,

$$\|\text{grad } \varphi\|_0 \leq Ch^{-1}\|\varphi\|_0, \quad (3.110)$$

y tenemos que

$$C_2h^2\Delta t\|\text{grad } \varphi\|_{L^2(\Omega)^d} \leq C_2Ch\Delta t\|\varphi\|_0. \quad (3.111)$$

Entonces, si consideramos

$$C_4 = K_2 + h_0C_2C, \quad (3.112)$$

tenemos que

$$\left\| \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0 \leq (1 + C_4\Delta t)\|\varphi\|_0. \quad (3.113)$$

De forma análoga, escribiendo

$$\varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1} = \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} - \left(\varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} - \varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \right), \quad (3.114)$$

tenemos que

$$\left\| \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0 \geq \left\| \varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \right\|_0 - \left\| \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} - \varphi \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \right\|_0, \quad (3.115)$$

y, por lo tanto,

$$\left\| \varphi \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0 \geq (1 - K_1\Delta t)\|\varphi\|_0 - C_2h^2\Delta t\|\text{grad } \varphi\|_{L^2(\Omega)^d} \geq (1 - C_3\Delta t)\|\varphi\|_0, \quad (3.116)$$

siendo

$$C_3 = K_1 + h_0C_2C. \quad (3.117)$$

El resultado (3.107) se obtiene inmediatamente de (3.106) sin más que elevar al cuadrado. Dado que las constantes obtenidas en este último paso verifican también la desigualdad (3.106), consideraremos unas únicas constantes que llamaremos de nuevo C_3 y C_4 . \square

3.8.2. Convergencia del método $(MLG)_1$

En primer lugar probamos la estabilidad de la solución del problema discretizado $(MLG)_1$. Recordemos las siguientes igualdades y desigualdades elementales,

$$ab \leq \frac{1}{2} \left(ca^2 + \frac{1}{c}b^2 \right), \quad (3.118)$$

$$(a-b)a = \frac{1}{2}a^2 - \frac{1}{2}b^2 + \frac{1}{2}(a-b)^2, \quad (3.119)$$

para dos números reales a y b cualesquiera y un número real positivo c . Estas relaciones serán utilizadas en muchas de las demostraciones que veremos a continuación.

Lema 3.8.5. (Estabilidad) *Si se verifican las Hipótesis 3.5 y 3.7 y $[c_h]$ es la solución del problema (3.87), entonces existe una constante $K > 0$, independiente de h y Δt tal que*

$$\| [c_h] \|_{l^\infty(L^2(\Omega))} \leq K (\|c_h^0\|_0 + \|f\|_{l^2(L^2(\Omega))}). \quad (3.120)$$

DEMOSTRACIÓN. Si en la ecuación (3.87) del problema discreto tomamos $v_h = c_h^{n+1}$, tenemos que

$$\langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1}[c_h], c_h^{n+1} \rangle = \langle \mathcal{F}_{\Delta t}^n, c_h^{n+1} \rangle.$$

Utilizando la igualdad elemental (3.119), aplicando el Lema 3.8.4, y teniendo en cuenta la coercitividad de la forma bilineal a tenemos que

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1}[c_h], c_h^{n+1} \rangle &= \frac{1}{2} \|c_h^{n+1}\|_0^2 - \frac{1}{2} \|c_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}\|_0^2 + \frac{1}{2} \|c_h^{n+1} - c_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}\|_0^2 \\ &+ \Delta t a^{n+1}(c_h^{n+1}, c_h^{n+1}) \\ &\geq \frac{1}{2} \|c_h^{n+1}\|_0^2 - \frac{1}{2} (1 + C_4 \Delta t) \|c_h^n\|_0^2 + \frac{1}{2} \|c_h^{n+1} - c_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}\|_0^2 \\ &+ \Delta t \bar{\nu} \|\text{grad } c_h^{n+1}\|_0^2. \end{aligned}$$

Por otro lado, aplicando la desigualdad elemental (3.118),

$$\langle \mathcal{F}_{\Delta t}^n, c_h^{n+1} \rangle \leq \frac{\Delta t}{2} \|f^{n+1}\|_0^2 + \frac{\Delta t}{2} \|c_h^{n+1}\|_0^2.$$

Por lo tanto, usando estas desigualdades y multiplicando por 2, se tiene

$$\|c_h^{n+1}\|_0^2 - \|c_h^n\|_0^2 \leq C_4 \Delta t \|c_h^n\|_0^2 + \Delta t \|c_h^{n+1}\|_0^2 + \Delta t \|f^{n+1}\|_0^2. \quad (3.121)$$

Sumando esta desigualdad desde $n = 0$ hasta $n = q - 1$, siendo $q \geq 1$ tenemos

$$(1 - \Delta t) \|c_h^q\|_0^2 \leq \|c_h^0\|_0^2 + (1 + C_4 \Delta t) \sum_{s=0}^{q-1} \|c_h^s\|_0^2 + \Delta t \sum_{s=0}^{q-1} \|f^{s+1}\|_0^2.$$

Como Δt es suficientemente pequeño, existe una constante $C > 0$ tal que $1 - \Delta t \geq 1/C$. Multiplicando la desigualdad por C , aplicando el Lema de Gronwall discreto (ver, por ejemplo, Quarteroni y Valli [84]) y tomando el máximo para $q \in \{1, \dots, N\}$ obtenemos inmediatamente (3.120) con $K = Ce^{\frac{C(1+C_4T)}{2}}$. \square

Deduciremos ahora una estimación del error para el método $(MLG)_1$ en la norma de $l^\infty(L^2(\Omega))$. Para ello definimos, para cada $n \in \{1, \dots, N\}$,

$$\eta^{n+1} := c^{n+1} - R_h^{n+1}c^{n+1}, \quad (3.122)$$

$$\xi_h^{n+1} := c_h^{n+1} - R_h^{n+1}c^{n+1}, \quad (3.123)$$

de forma que

$$e_h^{n+1} := c^{n+1} - c_h^{n+1} = \eta^{n+1} - \xi_h^{n+1}. \quad (3.124)$$

En primer lugar, veremos acotaciones para $\eta^n - \eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}$ que serán necesarias para el teorema de estimación del error. Para ello probaremos el lema siguiente que es una extensión del Lema 1 de Douglas *et al* [37].

Lema 3.8.6. *Bajo las Hipótesis 3.5 y 3.7, si $\eta \in H^1(\Omega)$ se verifican las siguientes acotaciones:*

$$\|\eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_{H^{-1}} \leq K_4 \Delta t \|\eta\|_0, \quad (3.125)$$

$$\|\eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_0 \leq K_5 \Delta t \|\text{grad } \eta\|_0, \quad (3.126)$$

$$\|\eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_0 \leq K_6 \|\eta\|_0, \quad (3.127)$$

donde las constantes K_4 , K_5 y K_6 son

$$\begin{aligned} K_4 &= \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))} + C_p K_2 (1 + K_2 \Delta t), \\ K_5 &= (1 + K_2 \Delta t) \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}, \\ K_6 &= 2 + K_2 \Delta t, \end{aligned} \quad (3.128)$$

con C_p la constante de la desigualdad de Poincaré.

DEMOSTRACIÓN.

a) En primer lugar, tenemos que, por definición de la norma de H^{-1} ,

$$\|\eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_{H^{-1}} = \sup_{\substack{\phi \in H_0^1(\Omega) \\ \|\phi\|_{H_0^1(\Omega)} \leq 1}} |\langle \eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, \phi \rangle|. \quad (3.129)$$

Sean $x \in \Omega$, $y = \mathcal{X}^{n,n+1}(x)$ e $\mathcal{Y}^{n,n+1}$ la aplicación inversa de $\mathcal{X}^{n,n+1}$.

Si tenemos en cuenta la acotación de $(J^{n,n+1})^{-1}$ obtenida en el Lema 3.4.1 deducimos, haciendo el cambio de variable $x = \mathcal{Y}^{n,n+1}(y)$,

$$\begin{aligned} \langle \eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, \phi \rangle &= \int_{\Omega} (\eta(x) - \eta(\mathcal{X}^{n,n+1}(x))) \phi(x) dx \leq \\ &\leq \int_{\Omega} \eta(y) \phi(y) dy - (1 + K_2 \Delta t) \int_{\Omega} \eta(y) \phi(\mathcal{Y}^{n,n+1}(y)) dy = \\ &= \int_{\Omega} \eta(y) (\phi(y) - \phi(\mathcal{Y}^{n,n+1}(y))) dy - K_2 \Delta t \int_{\Omega} \eta(y) \phi(\mathcal{Y}^{n,n+1}(y)) dy, \end{aligned}$$

y, por tanto,

$$|\langle \eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, \phi \rangle| \leq |I_1| + K_2 \Delta t |I_2|, \quad (3.130)$$

donde

$$I_1 = \int_{\Omega} \eta(y) (\phi(y) - \phi(\mathcal{Y}^{n,n+1}(y))) dy, \quad I_2 = \int_{\Omega} \eta(y) \phi(\mathcal{Y}^{n,n+1}(y)) dy. \quad (3.131)$$

Veamos cómo acotar las integrales I_1 e I_2 .

Dado que $\phi \in H_0^1(\Omega)$, por el teorema fundamental del cálculo tenemos que

$$\phi(y) - \phi(\mathcal{Y}^{n,n+1}(y)) = \int_{\mathcal{Y}^{n,n+1}(y)}^y \text{grad } \phi(s) ds. \quad (3.132)$$

Si $y \in \Omega$, para $\alpha \in (0, 1)$, la aplicación $H(\alpha) = \alpha y + (1 - \alpha)\mathcal{Y}^{n,n+1}(y)$ define un homeomorfismo quasi-isométrico de Ω en Ω (ver [40]) y, por tanto, haciendo el cambio de variable $s = H(\alpha)$ en la integral de (3.132), tenemos

$$\phi(y) - \phi(\mathcal{Y}^{n,n+1}(y)) = (y - \mathcal{Y}^{n,n+1}(y)) \int_0^1 \text{grad } \phi(H(\alpha)) d\alpha. \quad (3.133)$$

Además, por la definición de $\mathcal{X}^{n,n+1}$ se sigue que

$$y - \mathcal{Y}^{n,n+1}(y) = - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau) d\tau, \quad (3.134)$$

y, así

$$\|\phi(y) - \phi(\mathcal{Y}^{n,n+1}(y))\|_0 \leq \Delta t \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))} \|\text{grad } \phi\|_0. \quad (3.135)$$

A partir de esta última desigualdad llegamos a

$$|I_1| \leq \Delta t \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))} \|\phi\|_{H_0^1(\Omega)} \|\eta\|_0, \quad (3.136)$$

sin más que aplicar la desigualdad de Cauchy-Schwartz.

Por otro lado, podemos acotar I_2 , usando de nuevo Cauchy-Schwartz y la acotación (3.92) del Lema 3.8.1, de la forma

$$|I_2| \leq \|\eta\|_0 \|\phi \circ \mathcal{Y}^{n,n+1}\|_0 \leq (1 + K_2 \Delta t) \|\eta\|_0 \|\phi\|_0. \quad (3.137)$$

Así, usando la desigualdad de Poincaré en (3.137), existe una constante $C_p > 0$ tal que

$$|I_2| \leq C_p (1 + K_2 \Delta t) \|\eta\|_0 \|\phi\|_{H_0^1(\Omega)}. \quad (3.138)$$

Si en la desigualdad (3.130) utilizamos (3.136) y (3.138) obtenemos inmediatamente (3.125) siendo

$$K_4 = \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))} + K_2 C_p (1 + K_2 \Delta t).$$

b) Dado que $\eta \in H^1(\Omega)$ podemos escribir

$$\begin{aligned} \eta(x) - \eta(\mathcal{X}^{n,n+1}(x)) &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{d\eta(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau))}{d\tau} d\tau \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \text{grad } \eta(X(x, t_{n+1}; \tau)) \cdot \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau) d\tau, \end{aligned} \quad (3.139)$$

y, utilizando la desigualdad de Cauchy-Schwartz, deducimos

$$|\eta(x) - \eta(\mathcal{X}^{n,n+1}(x))|^2 \leq \Delta t \int_{t_n}^{t_{n+1}} |\text{grad } \eta(X(x, t_{n+1}; \tau)) \cdot \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau)|^2 d\tau.$$

Si integramos en Ω la desigualdad anterior tenemos

$$\begin{aligned} \|\eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_0^2 &\leq \Delta t \int_{\Omega} \int_{t_n}^{t_{n+1}} |\text{grad } \eta(X(x, t_{n+1}; \tau)) \cdot \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau)|^2 d\tau dx \\ &\leq \Delta t \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega} |\text{grad } \eta(X(x, t_{n+1}; \tau))|^2 dx d\tau. \end{aligned} \quad (3.140)$$

Si hacemos el cambio de variable $y = \mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau)$ y tenemos en cuenta que por el Lema 3.4.1

$$(J^{n+1}(y, \tau))^{-1} := \det \mathbf{F}^{-1}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), t_{n+1}; \tau) \leq 1 + K_2(t_{n+1} - \tau) \quad (3.141)$$

de (3.140) llegamos a

$$\begin{aligned} &\|\eta - \eta \circ \mathcal{X}^{n,n+1}\|_0^2 \\ &\leq \Delta t \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}^2 \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega} |\text{grad } \eta(y)|^2 (J^{n+1}(y, \tau))^{-1} dy d\tau \\ &\leq \Delta t \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}^2 \int_{t_n}^{t_{n+1}} (1 + K_2(t_{n+1} - \tau)) \left(\int_{\Omega} |\text{grad } \eta(y)|^2 dy \right) d\tau \\ &\leq (1 + K_2 \Delta t) \Delta t^2 \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}^2 \|\text{grad } \eta\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.142)$$

obteniéndose inmediatamente (3.126) para

$$K_5 = (1 + K_2 \Delta t)^{1/2} \|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}. \quad (3.143)$$

c) La desigualdad (3.127) se obtiene sin más que hacer $\phi = \eta$ en el Lema 3.8.1 y para $K_6 = 2 + K_2 \Delta t$.

□

Lema 3.8.7. *Supongamos que se verifican las Hipótesis 3.5 y 3.7 y que además $\mathbf{v} \in C^1(\mathbf{L}^\infty(\Omega))$ y $c \in Z^2$. Introducimos la función ϕ^{n+1} definida por*

$$\phi^{n+1}(x) := \dot{c}(x, t_{n+1}) - \frac{c^{n+1}(x) - c^n(\mathcal{X}^{n,n+1}(x))}{\Delta t}. \quad (3.144)$$

Entonces $\phi^{n+1} \in L^2(\Omega)$ y se verifica la siguiente estimación:

$$\|\phi^{n+1}\|_0 \leq \tilde{b}_1 \Delta t \|c\|_{Z^2}, \quad (3.145)$$

con \tilde{b}_1 una constante positiva independiente de Δt .

DEMOSTRACIÓN. Usando el desarrollo de Taylor de grado uno de la función

$$G(\tau) := c(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau),$$

en torno al punto t_{n+1} , llegamos a

$$\frac{G(t_{n+1}) - G(t_n)}{\Delta t} = G'(t_{n+1}) + \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\tau - t_n) G''(\tau) d\tau.$$

Ahora escribimos esta expresión en función de ϕ y tenemos

$$\phi^{n+1}(x) = -\frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\tau - t_n) \ddot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau) d\tau.$$

Dado que $\ddot{c} \in C^0(L^2(\Omega))$, y que estamos en condiciones de aplicar el Lema 3.4.1, se tiene que $\phi^{n+1} \in L^2(\Omega)$. Además, aplicando la desigualdad de Cauchy-Schwartz, llegamos a

$$\begin{aligned} |\phi^{n+1}(x)|^2 &= \frac{1}{\Delta t^2} \left| \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\tau - t_n) \ddot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau) d\tau \right|^2 \\ &\leq \frac{\Delta t}{3} \int_{t_n}^{t_{n+1}} |\ddot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau)|^2 d\tau, \end{aligned}$$

Integrando esta expresión en Ω se obtiene

$$\|\phi^{n+1}(x)\|_0^2 \leq \frac{\Delta t}{3} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Omega} |\ddot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau), \tau)|^2 d\tau,$$

de donde, haciendo el cambio de variable $y = \mathcal{X}(x, t_{n+1}; \tau)$ y aplicando el Lema 3.4.1 se sigue (3.145), con \tilde{b}_1 dependiente de las normas $\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{W}^{1,\infty}(\Omega))}$ y $\|\mathbf{v}\|_{C^1(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}$. \square

Veamos ahora el teorema que nos da la estimación de error para el método que presentamos. Para ello haremos primero una hipótesis más sobre la regularidad de la velocidad.

Hipótesis 3.8. La velocidad verifica que $\mathbf{v} \in C^1(\mathbf{L}^\infty(\Omega)) \cap C^0(\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega))$ y además se anula en la frontera de Ω .

Teorema 3.8.1. (Estimación de error) Supongamos que se verifican las Hipótesis 3.1, 3.2, 3.3, 3.4, 3.5 y 3.8 y sea

$$c \in Z^2 \cap H^1(H^{m+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)) \cap C^0(H^{m+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)), \quad (3.146)$$

siendo c solución del problema débil (3.12) y $[c_h] \in (V_h)^N$ solución de (3.87) sujeta a la condición inicial $c_h^0 = R_h^0 c^0 \in L^2(\Omega)$. Entonces se verifica la estimación de error:

$$\begin{aligned} \|[c] - [c_h]\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} &\leq F \|c\|_{Z^2(\Omega)} \Delta t + F h^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\ &\quad + F \min(D_1 \Delta t, D_2 \Delta t, D_3) \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \frac{h^{m+1}}{\Delta t} \\ &\quad + F (\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))}) h^{m+1} \\ &\quad + C \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} h^{m+1}, \end{aligned} \quad (3.147)$$

donde

$$\begin{aligned}
F &= (1 + K_2\Delta t)\varepsilon_M e^{\frac{T}{2}\left(C_4+3\varepsilon_1+\frac{\bar{\nu}}{L_0^2}\right)} \max\left\{\tilde{b}_1 T^{1/2}, C, C_2(1 + Ch_0^m)T^{1/2}, CT^{1/2}\right\} \\
\varepsilon_M &= \max\left\{\varepsilon_1^{1/2}, \left(\frac{3}{4}\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{4L_0^2}\right)\right\}, \\
D_1 &= \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\bar{\nu}}}\left(\frac{\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}}{1 + K_2\Delta t} + C_p K_2\right), \\
D_2 &= \frac{\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}}{h}, \\
D_3 &= 1 + \frac{1}{1 + K_2\Delta t},
\end{aligned}$$

ε_1 es una constante positiva independiente de $\bar{\nu}$, K_2 , C_2 , C_4 y \tilde{b}_1 son las constantes de los Lemas 3.8.1, 3.8.3, 3.8.4 y 3.8.7, respectivamente, C_p es la constante de la desigualdad de Poincaré y C es la constante genérica de las acotaciones del error η .

DEMOSTRACIÓN. Por (3.54) tenemos que η^{n+1} está acotado, así que para obtener la estimación del error será necesario acotar ξ_h^{n+1} . Si tenemos en cuenta que, por definición,

$$\xi_h^{n+1} = \eta^{n+1} - c^{n+1} + c_h^{n+1},$$

aplicando el operador $\tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1} \in (H^1(\Omega))'$ definido en (3.85) tenemos

$$\begin{aligned}
\left\langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1} \xi_h^{n+1}, v_h \right\rangle &= \left\langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1} \eta^{n+1}, v_h \right\rangle - \left\langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1} c^{n+1}, v_h \right\rangle + \left\langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1} c_h^{n+1}, v_h \right\rangle \\
&= (\eta^{n+1} - \eta^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}, v_h) - (c^{n+1} - c^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}, v_h) \\
&\quad + \Delta t (\dot{c}^{n+1}, v_h),
\end{aligned} \tag{3.148}$$

ya que $a(\eta^{n+1}, v_h) = 0$ por la definición de la proyección V-elíptica R_h^{n+1} , $[c]$ verifica (3.89) y $[c_h]$ es solución del problema (3.87).

Así, haciendo $v_h = \xi_h^{n+1}$ en (3.148) y sumando y restando $\eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}$, $c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}$ y η^n obtenemos que

$$\langle \mathcal{L} \xi_h^{n+1}, \xi_h^{n+1} \rangle = I_1 + I_2 + I_3 + I_4, \tag{3.149}$$

siendo

$$I_1 = \Delta t \left\langle \dot{c}^{n+1} - \left(\frac{c^{n+1} - c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}}{\Delta t} \right), \xi_h^{n+1} \right\rangle, \tag{3.150}$$

$$I_2 = \langle \eta^{n+1} - \eta^n, \xi_h^{n+1} \rangle, \tag{3.151}$$

$$I_3 = \left\langle \eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \eta^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} + c^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} - c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, \xi_h^{n+1} \right\rangle, \tag{3.152}$$

$$I_4 = \langle \eta^n - \eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, \xi_h^{n+1} \rangle. \tag{3.153}$$

Por otro lado, si utilizamos la desigualdad (3.107) del Lema 3.8.4, tenemos que

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L} \xi_h^{n+1}, \xi_h^{n+1} \rangle &= \frac{1}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2 - \frac{1}{2} \|\xi_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}\|_0^2 + \frac{1}{2} \|\xi_h^{n+1} - \xi_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}\|_0^2 \\
&\quad + \Delta t a(\xi_h^{n+1}, \xi_h^{n+1}) \\
&\geq \frac{1}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2 - \frac{1 + C_4 \Delta t}{2} \|\xi_h^n\|_0^2 + \Delta t \bar{\nu} \|\text{grad } \xi_h^{n+1}\|_0^2.
\end{aligned} \tag{3.154}$$

El siguiente paso será acotar superiormente los términos I_i , $i = 1, \dots, 4$. Para I_1 utilizamos la desigualdad de Cauchy-Schwartz, la desigualdad elemental (3.118) y el Lema 3.8.7, obteniendo

$$\begin{aligned} |I_1| &\leq \Delta t \left\| \frac{c^{n+1} - c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}}{\Delta t} - \dot{c}^{n+1} \right\|_0 \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\leq \frac{\Delta t}{2\varepsilon} \left\| \frac{c^{n+1} - c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}}{\Delta t} - \dot{c}^{n+1} \right\|_0^2 + \frac{\Delta t \varepsilon}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2 \\ &\leq \tilde{b}_1^2 \frac{\Delta t^3}{2\varepsilon} \|c\|_{Z^2}^2 + \frac{\Delta t \varepsilon}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.155)$$

siendo ε una constante positiva que tendrá dimensión t^{-1} y será independiente de $\bar{\nu}$.

Para acotar I_2 utilizamos de nuevo la desigualdad de Cauchy-Schwartz y la desigualdad elemental (3.118). Tenemos que

$$|I_2| \leq \Delta t \left\| \frac{\eta^{n+1} - \eta^n}{\Delta t} \right\|_0 \|\xi_h^{n+1}\|_0 \leq \frac{\Delta t}{2\varepsilon} \left\| \frac{\eta^{n+1} - \eta^n}{\Delta t} \right\|_0^2 + \frac{\Delta t \varepsilon}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2.$$

Utilizando la regla de Barrow llegamos a

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\eta^{n+1} - \eta^n}{\Delta t} \right\|_0^2 &= \frac{1}{\Delta t^2} \int_{\Omega} \left| \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial \eta}{\partial t}(x, \tau) d\tau \right|^2 dx \leq \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left\| \frac{\partial \eta}{\partial t}(\tau) \right\|_0^2 d\tau \\ &= \frac{1}{\Delta t} \|\eta'\|_{L^2(t_n, t_{n+1}; L^2(\Omega))}^2, \end{aligned}$$

donde hemos usado la desigualdad de Cauchy-Schwartz.

Por lo tanto, deducimos que

$$|I_2| \leq \frac{1}{2\varepsilon} \|\eta'\|_{L^2(t_n, t_{n+1}; L^2(\Omega))}^2 + \frac{\Delta t \varepsilon}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2. \quad (3.156)$$

Utilizando el Lema 3.95 podemos acotar I_3 de la forma

$$\begin{aligned} \left\| \eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \eta^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0 &\leq C_2 h^2 \Delta t \|\text{grad } \eta^n\|_0, \\ \left\| c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - c^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0 &\leq C_2 h^2 \Delta t \|\text{grad } c^n\|_0, \end{aligned}$$

y, utilizando la desigualdad elemental (3.118),

$$\begin{aligned} |I_3| &\leq \left\| \eta^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} - \eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} + c^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - c^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1} \right\|_0 \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\leq C_2 h^2 \Delta t (\|\text{grad } \eta^n\|_0 + \|\text{grad } c^n\|_0) \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\leq \frac{C_2^2 h^4 \Delta t}{2\varepsilon} (\|\text{grad } \eta^n\|_0 + \|\text{grad } c^n\|_0)^2 + \frac{\Delta t \varepsilon}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2. \end{aligned} \quad (3.157)$$

Por último nos queda estimar I_4 para lo cual utilizaremos el Lema 3.8.6, que nos proporcionará tres acotaciones distintas. En primer lugar, utilizando la cota (3.125) tenemos

$$\begin{aligned} |I_4| &= |\langle \eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \eta^n, \xi_h^{n+1} \rangle| \leq \|\eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \eta^n\|_{H^{-1}(\Omega)} \|\xi_h^{n+1}\|_{H_0^1(\Omega)} \\ &\leq K_4 \Delta t \|\eta^n\|_0 \|\xi_h^{n+1}\|_{H_0^1(\Omega)} \\ &\leq \frac{K_4^2 \Delta t}{2\bar{\nu}} \|\eta^n\|_0^2 + \frac{\bar{\nu} \Delta t}{2} \|\text{grad } \xi_h^{n+1}\|_0^2 + \frac{\bar{\nu} \Delta t}{2L_0^2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.158)$$

donde recordamos que L_0 es la longitud característica del problema.

Si utilizásemos la desigualdad (3.126) tendríamos la siguiente cota superior

$$\begin{aligned} |I_4| &= |(\eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \eta^n, \xi_h^{n+1})| \leq \|\eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \eta^n\|_0 \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\leq K_5 \Delta t \|\eta^n\|_0 \|\xi_h^{n+1}\|_0 \leq \frac{K_5^2 \Delta t}{2\varepsilon} \|\text{grad } \eta^n\|_0^2 + \frac{\varepsilon \Delta t}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.159)$$

y de (3.127) deduciríamos

$$\begin{aligned} |I_4| &= |(\eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \eta^n, \xi_h^{n+1})| \leq \|\eta^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} - \eta^n\|_0 \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\leq K_6 \|\eta^n\|_0 \|\xi_h^{n+1}\|_0 \leq \frac{K_6^2 \Delta t}{2\varepsilon} \left\| \frac{\eta^n}{\Delta t} \right\|_0^2 + \frac{\varepsilon \Delta t}{2} \|\xi_h^{n+1}\|_0^2. \end{aligned} \quad (3.160)$$

Si utilizamos las cotas superiores (3.155), (3.156), (3.157) y (3.158) en (3.154) y hacemos $\varepsilon = \varepsilon_1$ obtenemos

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{2} - \Delta t \left(\frac{3\varepsilon_1}{2} + \frac{\bar{\nu}}{2L_0^2} \right) \right) \|\xi_h^{n+1}\|_0^2 + \frac{\Delta t \bar{\nu}}{2} \|\text{grad } \xi_h^{n+1}\|_0^2 \leq \frac{1 + C_4 \Delta t}{2} \|\xi_h^n\|_0^2 \\ &+ \frac{\tilde{b}_1^2}{2\varepsilon_1} \Delta t^3 \|c\|_{Z^2}^2 + \frac{1}{2\varepsilon_1} \|\eta'\|_{L^2(t_n, t_{n+1}; L^2(\Omega))}^2 \\ &+ \frac{C_2^2 h^4 \Delta t}{2\varepsilon_1} (\|\text{grad } \eta^n\|_0 + \|\text{grad } c^n\|_0)^2 + \frac{K_4^2 \Delta t}{2\bar{\nu}} \|\eta^n\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.161)$$

para $n \in \{0, \dots, N\}$.

Sea $q \geq 1$; sumamos la desigualdad (3.161) desde $n = 0$ hasta $n = q - 1$. Teniendo en cuenta que $\xi_h^0 = R_h^0 c^0 - c_h^0 = 0$, llegamos a

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{2} - \Delta t \left(\frac{3\varepsilon_1}{2} + \frac{\bar{\nu}}{2L_0^2} \right) \right) \|\xi_h^q\|_0^2 \leq \Delta t \frac{1}{2} \left(C_4 + 3\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{L_0^2} \right) \sum_{n=1}^{q-1} \|\xi_h^n\|_0^2 \\ &+ \frac{\tilde{b}_1^2}{2\varepsilon_1} \Delta t^2 \sum_{n=0}^{q-1} \Delta t \|c\|_{Z^2}^2 + \frac{1}{2\varepsilon_1} \sum_{n=0}^{q-1} \|\eta'\|_{L^2(t_n, t_{n+1}; L^2(\Omega))}^2 \\ &+ \frac{C_2^2 h^4}{2\varepsilon_1} \sum_{n=0}^{q-1} \Delta t (\|\text{grad } \eta^n\|_0 + \|\text{grad } c^n\|_0)^2 + \frac{K_4^2}{2\bar{\nu}} \sum_{n=0}^{q-1} \Delta t \|\eta^n\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.162)$$

después de haber eliminado algunos términos positivos del lado izquierdo de la desigualdad.

Algunos de los términos del lado derecho de la desigualdad pueden acotarse. Así, tenemos

$$\sum_{n=0}^{q-1} \Delta t \|c\|_{Z^2}^2 \leq T \|c\|_{Z^2}^2, \quad (3.163)$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{q-1} \|\eta'\|_{L^2(t_n, t_{n+1}; L^2(\Omega))}^2 &\leq \|\eta'\|_{L^2(L^2(\Omega))}^2 \leq (Ch^{m+1})^2 \\ &\quad \left(\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} \right)^2, \end{aligned} \quad (3.164)$$

$$\sum_{n=0}^{q-1} \Delta t (\|\text{grad } \eta^n\|_0 + \|\text{grad } c^n\|_0)^2 \leq T(1 + Ch^m)^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2, \quad (3.165)$$

$$\sum_{n=0}^{q-1} \Delta t \|\eta^n\|_0^2 \leq T(Ch^{m+1})^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2, \quad (3.166)$$

gracias a que $\sum_{n=0}^N \Delta t = T$ y a que se verifican las estimaciones (3.54) y (3.55).

Como Δt es suficientemente pequeño podemos suponer que

$$1 - \Delta t \left(3\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{L_0^2} \right) \geq \frac{1}{\bar{C}},$$

siendo \bar{C} un número real positivo. Por simplicidad en la escritura, tomaremos $\bar{C} = 2$ y, además, seguiremos denotando igual a las constantes que aparecen en las desigualdades aunque estas estén multiplicadas por 2 o por 4. Así, multiplicando (3.162) por 4 obtenemos

$$\begin{aligned} \|\xi_h^q\|_0^2 &\leq \Delta t \left(C_4 + 3\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{L_0^2} \right) \sum_{n=1}^{q-1} \|\xi_h^n\|_0^2 \\ &\quad + \frac{\tilde{b}_1^2}{\varepsilon_1} T \Delta t^2 \|c\|_{Z^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon_1} (Ch^{m+1})^2 \left(\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} \right)^2 \\ &\quad + \frac{C_2^2 h^4}{\varepsilon_1} (1 + Ch^m)^2 T \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2 + \frac{K_4^2}{\bar{\nu}} (Ch^{m+1})^2 T \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2. \end{aligned} \quad (3.167)$$

Podemos aplicar ahora el Lema de Gronwall en su versión discreta (ver [84]) y, tomando el máximo en $q \in \{1, \dots, N\}$, obtendríamos,

$$\begin{aligned} \|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} &\leq F_1 \varepsilon_1^{-1/2} \tilde{b}_1 T^{1/2} \Delta t \|c\|_{Z^2} \\ &\quad + F_1 \varepsilon_1^{-1/2} Ch^{m+1} \left(\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} \right) \\ &\quad + F_1 \varepsilon_1^{-1/2} T^{1/2} C_2 h^2 (1 + Ch^m) \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\ &\quad + F_1 \varepsilon_1^{-1/2} T^{1/2} K_4 \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\bar{\nu}}} Ch^{m+1} \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}, \end{aligned} \quad (3.168)$$

siendo $F_1 = e^{(C_4 + 3\varepsilon_1 + \bar{\nu}/L_0^2) \frac{T}{2}}$.

Si utilizamos ahora las cotas superiores (3.155), (3.156), (3.157) y (3.159), en lugar de (3.158), en (3.154), tomamos $\varepsilon = \varepsilon_2$ y sumamos desde $n = 0$ hasta $n = q - 1$, obtenemos

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{1}{2} - 2\Delta t \varepsilon_2 \right) \|\xi_h^q\|_0^2 \leq \Delta t \frac{1}{2} (C_4 + 4\varepsilon_2) \sum_{n=1}^{q-1} \|\xi_h^n\|_0^2 \\
& + \frac{\tilde{b}_1^2}{2\varepsilon_2} \Delta t^2 \sum_{n=0}^{q-1} \Delta t \|c\|_{Z^2}^2 + \frac{1}{2\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{q-1} \|\eta'\|_{L^2(t_n, t_{n+1}; L^2(\Omega))}^2 \\
& + \frac{C_2^2 h^4}{2\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{q-1} \Delta t \left(\|\text{grad } \eta^n\|_0^2 + \|\text{grad } c^n\|_0^2 \right)^2 + \frac{K_5^2}{2\varepsilon_2} \sum_{n=0}^{q-1} \Delta t \|\text{grad } \eta^n\|_0^2.
\end{aligned} \tag{3.169}$$

Empleando de nuevo las acotaciones (3.163), (3.164) y (3.165), junto con

$$\sum_{n=0}^{q-1} \Delta t \|\text{grad } \eta^n\|_0^2 \leq (Ch^m)^2 T \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}, \tag{3.170}$$

llegamos a

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{1}{2} - 2\Delta t \varepsilon_2 \right) \|\xi_h^q\|_0^2 \leq \Delta t \frac{1}{2} (C_4 + 4\varepsilon_2) \sum_{n=1}^{q-1} \|\xi_h^n\|_0^2 \\
& + \frac{\tilde{b}_1^2}{2\varepsilon_2} \Delta t^2 T \|c\|_{Z^2}^2 + \frac{1}{2\varepsilon_2} (Ch^{m+1}) \left(\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} \right)^2 \\
& + \frac{C_2^2 h^4}{2\varepsilon_2} (1 + Ch^m)^2 T \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} + \frac{K_5^2}{2\varepsilon_2} (Ch^m)^2 T \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}.
\end{aligned} \tag{3.171}$$

De nuevo, al ser Δt suficientemente pequeño podemos considerar, por simplicidad, que

$$1 - 4\Delta t \varepsilon_2 \geq \frac{1}{2},$$

y seguir llamando igual a todas las constantes que aparecen en la desigualdad, aunque estén multiplicadas por 2 o por 4.

Si multiplicamos la ecuación por 4, aplicamos el Lema de Gronwall discreto y tomamos el máximo en $q \in \{1, \dots, N\}$ obtendremos la siguiente estimación del error:

$$\begin{aligned}
\|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} & \leq F_2 \varepsilon_2^{-1/2} \tilde{b}_1 T^{1/2} \Delta t \|c\|_{Z^2} \\
& + F_2 \varepsilon_2^{-1/2} Ch^{m+1} \left(\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c_t\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} \right) \\
& + F_2 \varepsilon_2^{-1/2} T^{1/2} C_2 h^2 (1 + Ch^m) \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\
& + F_2 \varepsilon_2^{-1/2} T^{1/2} K_5 Ch^m \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))},
\end{aligned} \tag{3.172}$$

siendo $F_2 = e^{\frac{C_4 + 4\varepsilon_2}{2} T}$.

Por último si usásemos (3.155), (3.156), (3.157) y (3.160) en (3.154), siguiendo los mismos pasos que para obtener la estimación de error anterior, deduciríamos

$$\begin{aligned}
\|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} & \leq F_2 \varepsilon_2^{-1/2} \tilde{b}_1 T^{1/2} \Delta t \|c\|_{Z^2} \\
& + F_2 \varepsilon_2^{-1/2} Ch^{m+1} \left(\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c_t\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} \right) \\
& + F_2 \varepsilon_2^{-1/2} T^{1/2} C_2 h^2 (1 + Ch^m) \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\
& + F_2 \varepsilon_2^{-1/2} \frac{T^{1/2}}{\Delta t} K_6 Ch^{m+1} \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}.
\end{aligned} \tag{3.173}$$

Si ahora tomamos $\varepsilon_2 = \frac{3}{4}\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{4L_0^2}$ tenemos que

$$F_1 = F_2 = e^{\frac{BT}{2}},$$

con $B = C_4 + 3\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{L_0^2} = C_4 + 4\varepsilon_2$. Además, si $\varepsilon_M = \max\{\varepsilon_1^{1/2}, \varepsilon_2^{-1/2}\}$ y

$$G = F_1 \varepsilon_M \max\left\{\tilde{b}_1 T^{1/2}, C, C_2(1 + Ch_0^m)T^{1/2}, CT^{1/2}\right\},$$

se verifica que

$$\begin{aligned} \|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} &\leq G\Delta t \|c\|_{Z^2} \\ &+ Gh^{m+1} \left(\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c_t\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} \right) \\ &+ Gh^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\ &+ G \frac{1}{\Delta t} \min\left(K_4 \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\bar{\nu}}} \Delta t, \frac{K_5}{h} \Delta t, K_6 \right) h^{m+1} \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}. \end{aligned} \quad (3.174)$$

En (3.128) tenemos las expresiones de las constantes K_4 , K_5 y K_6 obtenidas en el Lema 3.8.6. Sin más que sustituir estas expresiones en la desigualdad obtenida y teniendo en cuenta la estimación del error de interpolación dada en (3.54) se deduce el resultado. \square

Observación 3.8.2. Si observamos la estimación del error del teorema anterior podemos ver en qué casos perdemos un orden de error espacial, analizando el término de la desigualdad

$$A = F \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \min(D_1 \Delta t, D_2 \Delta t, D_3) \frac{h^{m+1}}{\Delta t}.$$

Si el número de Peclet local, o relativo a la malla, es

$$Pe = \frac{hU_0}{\bar{\nu}},$$

siendo $U_0 = \|\mathbf{v}\|_{C^0(L^\infty(\Omega))}$, podemos escribir D_1 como

$$D_1 = CPe^{1/2} \left(\frac{U_0}{h} \right)^{1/2},$$

con

$$C = \varepsilon_1^{1/2} \left(\frac{1}{1 + K_2 \Delta t} + \frac{C_p K_2}{U_0} \right).$$

Entonces, podemos distinguir dos situaciones:

1. Si $Pe \geq \frac{U_0}{hC^2}$ o, lo que es lo mismo, si $0 < \bar{\nu} \leq \frac{C^2 h^2}{2}$, tendremos que $D_1 \geq D_2$ y, por lo tanto,

$$\min(D_1 \Delta t, D_2 \Delta t, D_3) = \min\left(1 + \frac{1}{1 + K_2 \Delta t}, \frac{U_0 \Delta t}{h}\right).$$

El número de Courant local es justamente $Cu = \frac{U_0 \Delta t}{h}$ de manera que si

$$Cu \leq 1 + \frac{1}{1 + K_2 \Delta t},$$

tenemos que

$$A = O(h^m),$$

y, en caso contrario,

$$A = O\left(\frac{h^{m+1}}{\Delta t}\right).$$

En cualquier caso las constantes del error no tienden a infinito en el límite hiperbólico ya que la única dependencia de la viscosidad aparece en F y ésta no está en ningún denominador.

2. Si $Pe < \frac{U_0}{hC^2}$ o, lo que es lo mismo, si $\bar{\nu} > \frac{C^2 h^2}{2}$, tendremos que $D_1 < D_2$ y, por lo tanto,

$$\min(D_1 \Delta t, D_2 \Delta t, D_3) = \min\left(1 + \frac{1}{1 + K_2 \Delta t}, CPe^{1/2} \left(\frac{U_0}{h}\right)^{1/2} \Delta t\right).$$

En este caso, si $\Delta t < \frac{D_3}{D_1}$ el término de error A es de la forma

$$A = O(h^{m+1}),$$

y, en el caso contrario, tendríamos que

$$A = O\left(\frac{h^{m+1}}{\Delta t}\right).$$

En esta última situación, dado que D_1 depende de $\bar{\nu}^{-1/2}$, la constante del error también pero como estamos en un caso en que la difusión no es demasiado pequeña, no habría problema.

Observación 3.8.3. En la expresión del error, el término procedente del error cometido al aproximar \mathcal{X} por $\tilde{\mathcal{X}}$ es $O(h^2)$. Por lo tanto, la estimación de error sería válida para el caso del método de Lagrange-Galerkin estándar sin más que suprimir este término y extendería las estimaciones hechas por Pironneau [81] y Süli [90]. La observación anterior también se puede hacer para los métodos estándar y, de esta forma, establecemos el régimen de validez para las estimaciones de esos artículos.

3.8.3. Convergencia del método $(MLG)_2$

En esta sección presentaremos el análisis numérico del método de Lagrange Galerkin modificado, de orden 2 en tiempo, dado en (3.88).

Para simplificar la escritura, en la obtención de los resultados introducimos algunas notaciones. Así, para una sucesión funcional $[\varphi] := \{\varphi^n\}_{n=0}^N$ definimos

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_1^n[\varphi] &= \varphi^{n+1} - \varphi^n, \\ \mathcal{R}_2^n[\varphi] &= \varphi^{n+1} - \varphi^{n-1},\end{aligned}$$

por lo tanto, para la sucesión $[\|\varphi\|_0] := \{\|\varphi^n\|_0\}_{n=0}^N$ podemos escribir

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_1^n[\|\varphi\|_0] &= \|\varphi^{n+1}\|_0 - \|\varphi^n\|_0, \\ \mathcal{R}_2^n[\|\varphi\|_0] &= \|\varphi^{n+1}\|_0 - \|\varphi^{n-1}\|_0.\end{aligned}$$

Dada una función $\varphi \in C^0(H^1(\Omega))$ utilizaremos las siguientes notaciones:

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}^{n,1} &= \varphi^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1}, \\ \tilde{\varphi}^{n,2} &= \varphi^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+2}, \\ \overline{\varphi}^{n,1} &= \varphi^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, \\ \overline{\varphi}^{n,2} &= \varphi^n \circ \mathcal{X}^{n,n+2}.\end{aligned}$$

Lema 3.8.8. *Supongamos que se verifican las Hipótesis 3.5 y 3.7 y sea $[\varphi_h] \in (V_h)^N$, entonces, para todo $n \in \{1, \dots, N-1\}$, se verifica*

$$\begin{aligned}\langle \tilde{D}_e^{n,2}[\varphi_h], \varphi_h^{n+1} \rangle &\geq \frac{1}{4} \mathcal{R}_1^n[\|\varphi_h\|_0^2] + \frac{1}{4} \left[\|2\varphi_h^{n+1} - \tilde{\varphi}_h^{n,1}\|_0^2 - \|2c_h^n - \overline{\varphi}_h^{n-1,1}\|_0^2 \right] \\ &+ \frac{1}{4} \|\varphi_h^{n+1} - 2\overline{\varphi}_h^{n,1} + \overline{\varphi}_h^{n-1,2}\|_0^2 \\ &- \left(\frac{5}{4} \overline{K}_2 + C_2 h_0 \right) \Delta t (\|\varphi_h^n\|_0^2 + \|\varphi_h^{n-1}\|_0^2) \\ &- 2C_2 h_0 \Delta t \|\varphi_h^{n+1}\|_0^2,\end{aligned}\tag{3.175}$$

siendo $\overline{K}_2 = K_2(1 + \Delta t K_2)$ y K_2 la constante del Lema 3.8.1.

DEMOSTRACIÓN. En primer lugar, reescribiremos $\tilde{D}_e^{n,2}[\varphi_h]$ utilizando la nueva notación, así:

$$\begin{aligned}\tilde{D}_e^{n,2}[\varphi_h] &= \frac{1}{2} \left(3\varphi_h^{n+1} - 4\tilde{\varphi}_h^{n,1} + \tilde{\varphi}_h^{n-1,2} \right) = \frac{1}{2} \left(3\overline{\varphi}_h^{n+1} - 4\overline{\varphi}_h^{n,1} + \overline{\varphi}_h^{n-1,2} \right) \\ &- 2 \left(\tilde{\varphi}_h^{n,1} - \overline{\varphi}_h^{n,1} \right) + \frac{1}{2} \left(\tilde{\varphi}_h^{n,2} - \overline{\varphi}_h^{n,2} \right)\end{aligned}\tag{3.176}$$

y, por lo tanto, tenemos que

$$\begin{aligned}\langle \tilde{D}_e^{n,2}[\varphi_h], \varphi_h^{n+1} \rangle &= \frac{1}{4} \|\varphi_h^{n+1}\|_0^2 + \frac{1}{4} \|2\varphi_h^{n+1} - \tilde{\varphi}_h^{n,1}\|_0^2 \\ &+ \frac{1}{4} \|\varphi_h^{n+1} - 2\overline{\varphi}_h^{n,1} + \overline{\varphi}_h^{n-1,2}\|_0^2 \\ &- \frac{1}{4} \|\overline{\varphi}_h^{n,1}\|_0^2 - \frac{1}{4} \|2\overline{\varphi}_h^{n,1} - \overline{\varphi}_h^{n-1,2}\|_0^2 \\ &- 2 \left(\tilde{\varphi}_h^{n,1} - \overline{\varphi}_h^{n,1}, \varphi_h^{n+1} \right) + \frac{1}{2} \left(\tilde{\varphi}_h^{n,2} - \overline{\varphi}_h^{n,2}, \varphi_h^{n+1} \right) \\ &= I_1 + I_2 + I_3 + I_4 + I_5 + I_6 + I_7,\end{aligned}\tag{3.177}$$

donde hemos utilizado la igualdad,

$$\frac{1}{2}(3a - 4b + c, a) = \frac{1}{4}\|a\|^2 + \frac{1}{4}\|2a - b\|^2 + \frac{1}{4}\|a - 2b + c\|^2 - \frac{1}{4}\|b\|^2 - \frac{1}{4}\|2b - c\|^2. \quad (3.178)$$

Estableceremos ahora cotas inferiores para I_i , $i = 4, 7$. Para I_4 , si tenemos en cuenta (3.92), llegamos a

$$I_4 = -\frac{1}{4}\|\overline{\varphi}_h^{n,1}\|_0^2 \geq -\frac{1}{4}\|\varphi_h^n\|_0^2 - \frac{1}{4}K_2\Delta t\|\varphi_h^n\|_0^2. \quad (3.179)$$

Haciendo el cambio de variable $y = \mathcal{X}^{n,n+1}(x)$, teniendo en cuenta que $\mathcal{X}^{n-1,n+1}(x) = \mathcal{X}(x, t_{n+1}; t_n) = \mathcal{X}(y, t_n; t_{n-1})$, utilizando el Lema 3.4.1 y (3.92) se tiene

$$\begin{aligned} \|2\overline{\varphi}_h^{n,1} - \overline{\varphi}_h^{n-1,2}\|_0^2 &= \int_{\Omega} (2\varphi_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}(x) - \varphi_h^{n-1} \circ \mathcal{X}^{n-1,n+1}(x))^2 dx \\ &= \int_{\Omega} (2\varphi_h^n(y) - \varphi_h^{n-1} \circ \mathcal{X}^{n-1,n}(y))^2 (J^{n,n+1}(y))^{-1} dy \\ &\leq (1 + K_2\Delta t)\|2\varphi_h^n - \overline{\varphi}_h^{n-1,1}\|_0^2 \\ &\leq \|2\varphi_h^n - \overline{\varphi}_h^{n-1,1}\|_0^2 + 4K_2\Delta t\|\varphi_h^n\|_0^2 + \overline{K}_2\Delta t\|\varphi_h^{n-1}\|_0^2, \end{aligned}$$

donde $\overline{K}_2 = K_2(1 + K_2\Delta t)$ y, por lo tanto, obtenemos para I_5 la cota siguiente:

$$I_5 \geq -\frac{1}{4}\|2\varphi_h^n - \overline{\varphi}_h^{n-1,1}\|_0^2 - K_2\Delta t\|\varphi_h^n\|_0^2 - \frac{1}{4}\overline{K}_2\Delta t\|\varphi_h^{n-1}\|_0^2. \quad (3.180)$$

Para I_6 se tiene

$$\begin{aligned} I_6 &\geq -2\|\widetilde{\varphi}_h^{n,1} - \overline{\varphi}_h^{n,1}\|_0\|\varphi_h^{n+1}\|_0 \geq -2C_2h\Delta t\|\varphi_h^n\|_0\|\varphi_h^{n+1}\|_0 \\ &\geq -C_2h_0\Delta t\|\varphi_h^n\|_0^2 - C_2h_0\Delta t\|\varphi_h^{n+1}\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.181)$$

donde se ha utilizado la desigualdad de Cauchy-Schwartz, el Lema 3.8.3 y la desigualdad inversa (3.110). Aplicando estas técnicas de nuevo, podemos acotar I_7 como

$$\begin{aligned} I_7 &= -\frac{1}{2}\left(\overline{\varphi}_h^{n-1,2} - \widetilde{\varphi}_h^{n-1,2}, \varphi_h^{n+1}\right) \geq -\frac{1}{2}\|\overline{\varphi}_h^{n-1,2} - \widetilde{\varphi}_h^{n-1,2}\|_0\|\varphi_h^{n+1}\|_0 \\ &\geq -C_2h\Delta t\|\varphi_h^{n-1}\|_0\|\varphi_h^{n+1}\|_0 \geq -C_2h_0\Delta t\|\varphi_h^{n-1}\|_0^2 - C_2h_0\Delta t\|\varphi_h^{n+1}\|_0^2. \end{aligned} \quad (3.182)$$

Si sustituimos las acotaciones (3.179), (3.180), (3.181) y (3.182) en (3.177), y utilizamos la desigualdad elemental (3.118), obtenemos el resultado. \square

Gracias al lema previo podemos probar un resultado de estabilidad del método de Lagrange-Galerkin modificado, de orden 2 en tiempo, que hemos presentado.

Teorema 3.8.2. (Estabilidad) *Si se verifican las Hipótesis 3.1, 3.2, 3.3, 3.5 y 3.7, entonces existe una constante K independiente de Δt y h tal que $[c_h] \in (V_h)^N$, solución del problema (3.88), verifica*

$$\|[c_h]\|_{l^\infty(L(\Omega))} \leq K \left(\|c_h^0\|_0 + \|f^{n+1}\|_{l^2(L^2(\Omega))} \right). \quad (3.183)$$

DEMOSTRACIÓN. Como $[c_h]$ es solución del problema (3.88), si usamos la acotación obtenida en el Lema 3.8.8 para $[\varphi_h] = [c_h]$ llegamos a

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \mathcal{R}_1^n [\|c_h\|_0^2] + \frac{1}{4} \left(\|2c_h^{n+1} - \bar{c}_h^{n,1}\|_0^2 - \|2c_h^n - \bar{c}_h^{n-1,1}\|_0^2 \right) \\ & + \frac{1}{4} \|c_h^{n+1} - 2\bar{c}_h^{n,1} + \bar{c}_h^{n-1,2}\|_0^2 + \bar{\nu} \Delta t \|\text{grad } c_h^{n+1}\|_0^2 \leq \Delta t \|f^{n+1}\|_0^2 \\ & + \left(\frac{5}{4} \bar{K}_2 + C_2 h_0 \right) \Delta t (\|c_h^n\|_0^2 + \|c_h^{n-1}\|_0^2) + \left(\frac{1}{4} + 2C_2 h_0 \right) \Delta t \|c_h^{n+1}\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.184)$$

para $n = 1, \dots, N-1$, donde hemos utilizado la coercitividad de la forma bilineal a^{n+1} y la desigualdad elemental (3.118) para acotar el término $\Delta t (f^{n+1}, c_h^{n+1})$.

Dado un entero $q \geq 1$ sumamos los términos de la desigualdad (3.184) desde $n = 1$ hasta $n = q-1$. Los dos primeros términos de la izquierda de la desigualdad quedan de la forma,

$$\sum_{n=1}^{q-1} \frac{1}{4} \mathcal{R}_1^n [\|c_h\|_0^2] = \frac{1}{4} \|c_h^q\|_0^2 - \frac{1}{4} \|c_h^1\|_0^2, \quad (3.185)$$

y

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{q-1} \left(\|2c_h^{n+1} - \bar{c}_h^{n,1}\|_0^2 - \|2c_h^n - \bar{c}_h^{n-1,1}\|_0^2 \right) = \frac{1}{4} \|2c_h^q - \bar{c}_h^{q-1,1}\|_0^2 - \frac{1}{4} \|2c_h^1 - \bar{c}_h^{0,1}\|_0^2 \\ & \geq \frac{1}{4} \|2c_h^q - \bar{c}_h^{q-1,1}\|_0^2 - \|c_h^1\|_0^2 - \frac{1}{4} \|c_h^0\|_0^2 - \frac{1}{4} K_2 \Delta t \|c_h^0\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.186)$$

utilizando el Lema 3.8.1 para la última desigualdad.

Si sustituimos (3.185) y 3.186 en (3.184), y eliminamos algunos términos positivos a la izquierda de la desigualdad resultante tenemos,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{4} - \left(\frac{1}{4} + 2C_2 h_0 \right) \Delta t \right) \|c_h^q\|_0^2 \leq \frac{5}{4} \|c_h^1\|_0^2 + \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} K_2 \Delta t \right) \|c_h^0\|_0^2 \\ & + \left(\frac{5}{4} \bar{K}_2 + C_2 h_0 \right) \Delta t \left(\sum_{n=1}^{q-1} \|c_h^n\|_0^2 + \sum_{n=0}^{q-2} \|c_h^n\|_0^2 \right) \\ & + \left(\frac{1}{4} + 2C_2 h_0 \right) \Delta t \sum_{n=2}^{q-1} \|c_h^n\|_0^2 + \Delta t \sum_{n=1}^{q-1} \|f^{n+1}\|_0^2. \end{aligned} \quad (3.187)$$

Podemos acotar algunos términos de la derecha de la desigualdad anterior. Así,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{5}{4} \bar{K}_2 + C_2 h_0 \right) \Delta t \left(\sum_{n=1}^{q-1} \|c_h^n\|_0^2 + \sum_{n=0}^{q-2} \|c_h^n\|_0^2 \right) \\ & + \left(\frac{1}{4} + 2C_2 h_0 \right) \Delta t \sum_{n=2}^{q-1} \|c_h^n\|_0^2 \leq \tilde{K} \Delta t \sum_{n=1}^{q-1} \|c_h^n\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.188)$$

con $\tilde{K} = \frac{10}{4} \bar{K}_2 + 4C_2 h_0 + \frac{1}{4}$.

Además, como $[c_h]$ verifica la primera ecuación del problema (3.88) con $v_h = c_h^1$, siguiendo los mismos pasos que para obtener la ecuación (3.121) en el Lema 3.8.5 (estabilidad del método $(MLG)_1$) llegamos a

$$(1 - \Delta t)\|c_h^1\|_0^2 - (1 + C_4\Delta t)\|c_h^0\|_0^2 + \leq \frac{\Delta t}{2}\|f^1\|_0^2. \quad (3.189)$$

Si tenemos en cuenta las acotaciones (3.188) y (3.189) en (3.187) y suponemos que

$$\Delta t \leq \min \left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{C_4}, \frac{1}{1 + 8C_2h_0}, \frac{1}{K_2} \right\},$$

llegamos a

$$\frac{1}{8}\|c_h^q\|_0^2 \leq \frac{11}{2}\|c_h^0\|_0^2 + \frac{5}{2}\Delta t \sum_{n=0}^{q-1} \|f^{n+1}\|_0^2 + \tilde{K}\Delta t \sum_{n=1}^{q-1} \|c_h^n\|_0^2.$$

Multiplicando (3.8.3) por 8, aplicando el Lema de Gronwall discreto, y tomando el máximo para $q \in \{1, \dots, N\}$ obtenemos inmediatamente el resultado con $K = 7e^{4\tilde{K}T}$.

□

Veremos a continuación un teorema de estimación de error para el método; para ello tenemos que probar un lema previo.

Lema 3.8.9. *Asumamos que $c \in Z^3$ y que $\mathbf{v} \in C^2(\mathbf{L}^\infty(\Omega)) \cap C^1(\mathbf{W}^{1,\infty}(\Omega)) \cap C^0(\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega))$ y se anula en Γ . Entonces la función ϕ definida por*

$$\phi^{n+1}(x) = \dot{c}(x, t_{n+1}) - \frac{3c^{n+1}(x) - 4\bar{c}^{n,1}(x) + \bar{c}^{n-1,2}(x)}{2\Delta t}, \quad (3.190)$$

está en $L^2(\Omega)$ y verifica

$$\|\phi\|_0 \leq \tilde{b}_2\Delta t^2\|c\|_{Z^2}, \quad (3.191)$$

siendo \tilde{b}_2 una constante que depende del campo de velocidad.

DEMOSTRACIÓN. Definimos la función

$$G(\tau) := c(\mathcal{X}(x, t_{n+1}, \tau), \tau),$$

y haciendo el desarrollo de Taylor de orden 2 centrado en el instante t_{n+1} para t_n y t_{n-1} se tiene

$$\begin{aligned} \frac{3G(t_{n+1}) - 4G(t_n) + G(t_{n-1}))}{2\Delta t} &= G'(t_{n+1}) + \frac{2}{6\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} G'''(\tau)(t_{n+1} - \tau)^2 d\tau \\ &\quad - \frac{1}{12\Delta t} \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} G'''(\tau)(t_{n+1} - \tau)^2 d\tau. \end{aligned}$$

Escribiendo esta expresión en función de c tenemos

$$\begin{aligned} \phi^{n+1}(x) &= -\frac{2}{6\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \ddot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}, \tau), \tau)(t_{n+1} - \tau)^2 d\tau \\ &\quad + \frac{1}{12\Delta t} \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} \ddot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}, \tau), \tau)(t_{n+1} - \tau)^2 d\tau. \end{aligned}$$

Si escribimos $\ddot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}, \tau), \tau)$ y tenemos en cuenta las hipótesis del enunciado se verifica que $\phi^{n+1} \in L^2(\Omega)$ y, elevando al cuadrado la expresión anterior y aplicando Cauchy-Schwartz llegamos a

$$|\phi^{n+1}(x)|^2 \leq \frac{2}{5} \Delta t^3 \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} (\ddot{c}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}, \tau), \tau))^2 d\tau,$$

de donde se obtiene inmediatamente el resultado, sin más que integrar en el dominio Ω y tener en cuenta el Lema 3.4.1. □

Hipótesis 3.9. *La velocidad pertenece al espacio $C^2(\mathbf{L}^\infty(\Omega)) \cap C^1(\mathbf{W}^{1,\infty}(\Omega)) \cap C^0(\mathbf{W}^{2,\infty}(\Omega))$ y se anula en la frontera.*

Teorema 3.8.3. (Estimación de error) *Supongamos que se verifican las Hipótesis 3.1, 3.2, 3.3, 3.4, 3.5 y 3.9 y sea*

$$c \in Z^3 \cap H^1(H^{m+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)) \cap C^0(H^{m+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)), \quad (3.192)$$

siendo c la solución del problema débil (3.12) y $[c_h] \in (V_h)^N$ la solución del problema discreto (3.88) sujeta a la condición inicial $c_h^0 = R_h^0 c^0 \in L^2(\Omega)$. Entonces, se verifica la estimación del error siguiente:

$$\begin{aligned} \|[c] - [c_h]\|_{l^\infty(0,T,L^2(\Omega))} &\leq F (\|c\|_{Z^2} + \|c\|_{Z^3}) \Delta t^2 + F \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} h^2 \\ &\quad + F \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \min(\overline{D}_1, \overline{D}_2 \Delta t, \overline{D}_3 \Delta t) \frac{h^{m+1}}{\Delta t} \\ &\quad + F (\|c\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(H^{m+1}(\Omega))}) h^{m+1} \\ &\quad + C \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} h^{m+1}, \end{aligned} \quad (3.193)$$

siendo

$$\begin{aligned} F &= K \exp \left\{ 4 \left(2\varepsilon_1 + \frac{10}{4} \overline{K}_2 + \frac{\overline{\nu}}{2L_0^2} + 4C_2 h_0 \right) T \right\}, \\ \overline{D}_1 &= \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\overline{\nu}}} \left(\frac{\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}}{1 + 2K_2 \Delta t} \right) \left(1 + \frac{C_p \overline{K}_2}{\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}} \right), \\ \overline{D}_2 &= \frac{\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}}{h}, \\ \overline{D}_3 &= \frac{5}{3} \frac{1 + \frac{5}{3} K_2 \Delta t}{1 + 2K_2 \Delta t}, \end{aligned}$$

con K y ε_1 constantes positivas independientes de los parámetros Δt y h , y de la viscosidad $\overline{\nu}$, y con K_2 la constante del Lema 3.8.1; $\overline{K}_2 = K_2(1 + \Delta t K_2)$ y C es la constante genérica de las acotaciones del error η .

DEMOSTRACIÓN. Recordemos que $[e_h] = [c] - [c_h] = [\eta] - [\xi_h]$ y, por lo tanto, como el error $[\eta]$ está acotado (véase 3.54), debemos obtener una estimación del error para $[\xi_h]$. En primer

lugar, veamos qué ecuación verifica $[\xi_h]$. Dado que podemos escribir $[\xi_h] = [\eta] - [c] + [c_h]$ llegamos a

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,2}[\xi_h], v_h \rangle &= \langle \tilde{D}_e^{n,2}\eta, v_h \rangle - \langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,2}[c], v_h \rangle + \langle \mathcal{F}_{\Delta t}^n, v_h \rangle \\ &= \langle \tilde{D}_e^{n,2}\eta, v_h \rangle + \langle (\Delta t \mathcal{L}^n - \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,2})[c], v_h \rangle, \end{aligned} \quad (3.194)$$

teniendo en cuenta que $[c]$ verifica la ecuación (3.89) y $[c_h]$ es solución de (3.88). Si utilizamos la descomposición dada en (3.176) para $\tilde{D}_e^{n,2}[\eta]$ y $\tilde{D}_e^{n,2}[c]$ y tomamos $v_h = \xi_h^{n+1}$ en (3.194), $n \in \{1, \dots, N-1\}$ obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,2}[\xi_h], \xi_h^{n+1} \rangle &= \left\langle \Delta t \left(\dot{c}^{n+1} - \frac{3c^{n+1} - 4\bar{c}^{n,1} + \bar{c}^{n-1,2}}{2\Delta t} \right), \xi_h^{n+1} \right\rangle \\ &+ \left\langle \frac{3\eta^{n+1} - 4\eta^n + \eta^{n-1}}{2}, \xi_h^{n+1} \right\rangle \\ &+ 2 \langle (\bar{c}^{n,1} - \bar{c}^{n-1,1}) - (\bar{\eta}^{n,1} - \bar{\eta}^{n-1,1}), \xi_h^{n+1} \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \langle (\bar{c}^{n-1,2} - \bar{c}^{n-1,2}) - (\bar{\eta}^{n-1,2} - \bar{\eta}^{n-1,2}), \xi_h^{n+1} \rangle \\ &+ \left\langle 2(\eta^n - \bar{\eta}^{n,1}) - \frac{1}{2}(\eta^{n-1} - \bar{\eta}^{n-1,2}), \xi_h^{n+1} \right\rangle \\ &= I_1 + I_2 + I_3 + I_4 + I_5. \end{aligned} \quad (3.195)$$

Acotemos superiormente cada uno de los términos I_i , $i = 1, \dots, 5$. Para I_1 podemos hacer uso del Lema 3.8.9 y de la desigualdad elemental (3.118) y así obtener

$$|I_1| \leq \frac{\tilde{b}_2^2 \Delta t^5}{2\varepsilon} \|c\|_{Z^3}^2 + \frac{\varepsilon}{2} \Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2. \quad (3.196)$$

Para acotar I_2 podemos proceder de forma similar a la empleada en el Teorema 3.8.1 para la acotación del término I_2 definido en el mismo. Así, haciendo desarrollos de Taylor de grado 1 y usando la desigualdad de Cauchy-Schwartz, tenemos que

$$\begin{aligned} \left| \frac{3\eta^{n+1} - 4\eta^n + \eta^{n-1}}{2\Delta t}(x) \right|^2 &= \frac{1}{4\Delta t^2} \left| 3 \int_{t_n}^{t_{n+1}} \eta'(x, \tau) d\tau - \int_{t_{n-1}}^{t_n} \eta'(x, \tau) d\tau \right|^2 \\ &\leq \frac{9}{4\Delta t} \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} (\eta'(x, \tau))^2 d\tau, \end{aligned}$$

e integrando esta expresión en Ω y usando la desigualdad elemental (3.118) llegamos a

$$|I_2| \leq \frac{9}{8\varepsilon} \|\eta'\|_{L^2(t_{n-1}, t_{n+1}, L^2(\Omega))}^2 + \frac{\varepsilon}{2} \Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2,$$

de donde, teniendo en cuenta (3.55), obtenemos

$$\begin{aligned} |I_2| &\leq \frac{9}{8\varepsilon} (Ch^{m+1})^2 (\|c\|_{L^2(t_{n-1}, t_{n+1}, H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(t_{n-1}, t_{n+1}, H^{m+1}(\Omega))})^2 \\ &+ \frac{\varepsilon}{2} \Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2. \end{aligned} \quad (3.197)$$

Para acotar I_3 e I_4 seguimos los mismos pasos que para acotar el término I_3 del Teorema 3.8.1; así llegamos a

$$\begin{aligned} |I_3| + |I_4| &\leq 2C_2h^2\Delta t (\|\text{grad } c^n\|_0 + \|\text{grad } \eta^n\|_0) \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\quad + C_2h^2\Delta t (\|\text{grad } c^{n-1}\|_0 + \|\text{grad } \eta^{n-1}\|_0) \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\leq 2C_2^2h^4\Delta t (\|\text{grad } c^n\|_0 + \|\text{grad } \eta^n\|_0)^2 \\ &\quad + \frac{1}{2}C_2^2h^4\Delta t (\|\text{grad } c^{n-1}\|_0 + \|\text{grad } \eta^{n-1}\|_0)^2 + \varepsilon\Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2. \end{aligned}$$

Si utilizamos la acotación dada en (3.54) se tiene

$$|I_3| + |I_4| \leq \frac{4C_2^2h^4}{\varepsilon}(1 + Ch^m)^2\Delta t \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2 + \varepsilon\Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2. \quad (3.198)$$

Finalmente, para I_5 podemos utilizar las tres acotaciones distintas dadas en el Lema 3.8.6, repitiendo los cálculos de éste para obtener las cotas del término $\|\eta^{n-1} - \eta^{n-1} \circ \mathcal{X}^{n-1, n+1}\|_0$. De esta forma, llegamos a

$$\begin{aligned} |I_5| &\leq \left(2\|\eta^n - \bar{\eta}^{n,1}\|_{H^{-1}(\Omega)} + \frac{1}{2}\|\eta^{n-1} - \bar{\eta}^{n-1,2}\|_{H^{-1}(\Omega)} \right) \|\xi_h^{n+1}\|_{H_0^1(\Omega)} \\ &\leq (2K_4\Delta t\|\eta^n\|_0 + K_4\Delta t\|\eta^{n-1}\|_0) \|\xi_h^{n+1}\|_{H_0^1(\Omega)} \\ &\leq 3K_4\Delta t(Ch^{m+1})\|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \|\xi_h^{n+1}\|_{H_0^1(\Omega)} \\ &\leq \frac{9K_4^2}{2\bar{\nu}}(Ch^{m+1})^2\Delta t \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2 + \frac{\bar{\nu}}{2}\Delta t \|\text{grad } \xi_h^{n+1}\|_0^2 \\ &\quad + \frac{\bar{\nu}}{2L_0^2}\Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.199)$$

usando la primera cota; con la segunda obtenemos

$$\begin{aligned} |I_5| &\leq K_7\Delta t \|\eta\|_{C^0(L^2(\Omega))} \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\leq \frac{K_7^2}{2\varepsilon}\Delta t (Ch^m)^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2 + \frac{\varepsilon}{2}\Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.200)$$

siendo $K_7 = 3\|\mathbf{v}\|_{C^0(\mathbf{L}^\infty(\Omega))}(1 + 2K_2\Delta t)$, y con la tercera tenemos

$$\begin{aligned} |I_5| &\leq K_8\|\eta\|_{C^0(L^2(\Omega))} \|\xi_h^{n+1}\|_0 \\ &\leq \frac{K_8^2}{2\varepsilon} \frac{1}{\Delta t} \|\eta\|_{C^0(L^2(\Omega))}^2 + \frac{\varepsilon}{2}\Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2 \\ &\leq \frac{K_8^2}{2\varepsilon} (Ch^{m+1})^2 \frac{1}{\Delta t} \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2 + \frac{\varepsilon}{2}\Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2, \end{aligned} \quad (3.201)$$

donde $K_8 = 5 \left(1 + \frac{3}{5}K_2\Delta t \right)$.

Por otro lado, si en el Lema 3.8.8 hacemos $\varphi = \xi_h$ y tenemos en cuenta la coercitividad

de a^{n+1} llegamos a

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,2}[\xi_h], \xi_h^{n+1} \rangle &\geq \frac{1}{4} \mathcal{R}_1^n [\|\xi_h\|_0^2] + \frac{1}{4} \left[\|2\xi_h^{n+1} - \bar{\xi}_h^{n,1}\|_0^2 - \|2\xi_h^n - \bar{\xi}_h^{n-1,1}\|_0^2 \right] \\
&+ \frac{1}{4} \|\xi_h^{n+1} - 2\bar{\xi}_h^{n,1} + \bar{\xi}_h^{n-1,2}\|_0^2 + \Delta t \bar{\nu} \|\text{grad } \xi_h^{n+1}\|_0^2 \\
&- \left(\frac{5}{4} \bar{K}_2 + C_2 h_0 \right) \Delta t (\|\xi_h^n\|_0^2 + \|\xi_h^{n-1}\|_0^2) \\
&- 2C_2 h_0 \Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2.
\end{aligned} \tag{3.202}$$

Si ahora utilizamos las acotaciones (3.196), (3.197), (3.198) y (3.199) y (3.202) en (3.195) y hacemos $\varepsilon = \varepsilon_1$ tenemos

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{4} \mathcal{R}_1^n [\|\xi_h\|_0^2] + \frac{1}{4} \left[\|2\xi_h^{n+1} - \bar{\xi}_h^{n,1}\|_0^2 - \|2\xi_h^n - \bar{\xi}_h^{n-1,1}\|_0^2 \right] \\
&\leq \left(2\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{2L_0^2} + 2C_2 h_0 \right) \Delta t \|\xi_h^{n+1}\|_0^2 + \left(\frac{5}{4} \bar{K}_2 + C_2 h_0 \right) \Delta t (\|\xi_h^n\|_0^2 + \|\xi_h^{n-1}\|_0^2) \\
&+ \frac{4C_2^2 h^4}{\varepsilon_1} (1 + Ch^m)^2 \Delta t \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2 + \frac{\tilde{b}_2^2 \Delta t^5}{2\varepsilon_1} \|c\|_{Z^3}^2 \\
&+ \frac{9}{8\varepsilon_1} (Ch^{m+1})^2 (\|c\|_{L^2(t_{n-1}, t_{n+1}, H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(t_{n-1}, t_{n+1}, H^{m+1}(\Omega))})^2 \\
&+ \frac{9K_4^2}{2\bar{\nu}} (Ch^{m+1})^2 \Delta t \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2,
\end{aligned} \tag{3.203}$$

después de haber eliminado algunos términos positivos a la izquierda de la desigualdad.

Dado un entero $q \geq 1$, si sumamos la desigualdad anterior desde $n = 1$ hasta $n = q - 1$ y tenemos en cuenta que $\sum_{n=1}^N \Delta t = T$, obtenemos

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{1}{4} - \left(2\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{2L_0^2} + 2C_2 h_0 \right) \Delta t \right) \|\xi_h^q\|_0^2 \leq B_1 \Delta t \sum_{n=1}^{q-1} \|\xi_h^n\|_0^2 \\
&+ \frac{1}{4} \|\xi_h^1\|_0^2 + \frac{1}{4} \|2\xi_h^1 - \bar{\xi}_h^{0,1}\|_0^2 \\
&+ \frac{4C_2^2 h^4}{\varepsilon_1} (1 + Ch^m)^2 T \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2 + \frac{\tilde{b}_2^2 \Delta t^4}{2\varepsilon_1} T \|c\|_{Z^3}^2 \\
&+ \frac{9}{8\varepsilon_1} (Ch^{m+1})^2 (\|c\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))} + \|c_t\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))})^2 \\
&+ \frac{9K_4^2}{2\bar{\nu}} (Ch^{m+1})^2 T \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2,
\end{aligned} \tag{3.204}$$

siendo $B_1 = 2\varepsilon_1 + \frac{10}{4} \bar{K}_2 + \frac{\bar{\nu}}{2L_0^2} + 4C_2 h_0$.

Podemos acotar algunos términos de la derecha de la desigualdad; así, dado que $\xi_h^0 = 0$, podemos escribir

$$\frac{1}{4} \|\xi_h^1\|_0^2 + \frac{1}{4} \|2\xi_h^1 - \bar{\xi}_h^{0,1}\|_0^2 \leq \frac{5}{4} \|\xi_h^1\|_0^2.$$

Como Δt es suficientemente pequeño podemos considerar que

$$\Delta t \leq \frac{1}{8 \left(2\varepsilon_1 + \frac{\bar{\nu}}{L_0^2} + 2C_2 h_0 \right)}. \quad (3.205)$$

De esta forma, multiplicando por 8 la desigualdad (3.204) podemos aplicar el Lema de Gronwall discreto, tomar el máximo para $q \in \{1, \dots, N-1\}$ y, calcular raíces cuadradas; obtenemos

$$\begin{aligned} \|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} &\leq F_1 \|\xi_h^1\|_0 + F_1 \varepsilon_1^{-1/2} \tilde{b}_2 \Delta t^2 T^{1/2} \|c\|_{Z^3} \\ &+ F_1 \varepsilon_1^{-1/2} C_2 (1 + Ch_0^m) T^{1/2} h^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\ &+ F_1 \varepsilon_1^{-1/2} Ch^{m+1} (\|c\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))}) \\ &+ F_1 \frac{K_4}{\sqrt{\nu}} Ch^{m+1} T^{1/2} \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}, \end{aligned} \quad (3.206)$$

con $F_1 = 6e^{4B_1 T}$.

Si en lugar de considerar la cota (3.199) utilizamos (3.200) junto con (3.196), (3.197), (3.198) y (3.202) en (3.195), hacemos $\varepsilon = \varepsilon_2$ y repetimos los pasos realizados hasta llegar a (3.206) obtenemos

$$\begin{aligned} \|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} &\leq F_2 \|\xi_h^1\|_0 + F_2 \varepsilon_2^{-1/2} \tilde{b}_2 \Delta t^2 T^{1/2} \|c\|_{Z^3} \\ &+ F_2 \varepsilon_2^{-1/2} C_2 (1 + Ch_0^m) T^{1/2} h^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\ &+ F_2 \varepsilon_2^{-1/2} Ch^{m+1} (\|c\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))}) \\ &+ F_2 \varepsilon_2^{-1/2} K_7 Ch^m T^{1/2} \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}, \end{aligned} \quad (3.207)$$

con $F_2 = 6e^{4B_2 T}$ y $B_2 = \left(\frac{5}{2} \varepsilon_2 + \frac{10}{4} \bar{K}_2 + 4C_2 h_0 \right)$ suponiendo en este caso, antes de aplicar el Lema de Gronwall discreto, que

$$\Delta t \leq \frac{1}{8 \left(\frac{5}{2} \varepsilon_2 + 2C_2 h_0 \right)}. \quad (3.208)$$

Por último, si en lugar de considerar la cota (3.200) utilizamos (3.201) junto con (3.196), (3.197), (3.198) y (3.202) en (3.195) y hacemos $\varepsilon = \varepsilon_2$ llegamos a

$$\begin{aligned} \|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} &\leq F_2 \|\xi_h^1\|_0 + F_2 \varepsilon_2^{-1/2} \tilde{b}_2 \Delta t^2 T^{1/2} \|c\|_{Z^3} \\ &+ F_2 \varepsilon_2^{-1/2} C_2 (1 + Ch_0^m) T^{1/2} h^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\ &+ F_2 \varepsilon_2^{-1/2} Ch^{m+1} (\|c\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))}) \\ &+ F_2 \varepsilon_2^{-1/2} K_8 (Ch^{m+1}) \frac{T^{1/2}}{\Delta t} \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}, \end{aligned} \quad (3.209)$$

suponiendo de nuevo que se cumple (3.208).

Elegimos ahora ε_2 de forma que $B_1 = B_2$ y, por lo tanto, $F_1 = F_2 = 6e^{4B_1T}$; sea $\varepsilon_M = \max\{\varepsilon_1^{-1/2}, \varepsilon_2^{-1/2}\}$, entonces se verifica

$$\begin{aligned} \|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} &\leq F_1 \|\xi_h^1\|_0 + F_1 \varepsilon_M \tilde{b}_2 \Delta t^2 T^{1/2} \|c\|_{Z^3} \\ &+ F_1 \varepsilon_M C_2 (1 + Ch_0^m) T^{1/2} h^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\ &+ F_1 \varepsilon_M Ch^{m+1} (\|c\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))}) \\ &+ F_1 \varepsilon_M Ch^{m+1} \frac{T^{1/2}}{\Delta t} \min\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\nu}} K_4 \Delta t, \frac{K_7}{h} \Delta t, K_8\right) \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}. \end{aligned} \quad (3.210)$$

Por último, veamos cómo acotar el término $\|\xi_h^1\|_0$. Para ello tendremos en cuenta que, por verificar c_h^1 la primera ecuación del problema (3.88), ξ_h^1 verifica

$$\left\langle \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1}[\xi_h], \xi_h^1 \right\rangle = \left\langle \mathcal{D}_\varepsilon^{n,1}[\eta], \xi_h^1 \right\rangle + \left\langle (\Delta t \mathcal{L} - \tilde{\mathcal{L}}_{\Delta t}^{n,1})[c], \xi_h^1 \right\rangle. \quad (3.211)$$

Así, como $\xi_h^0 = \eta^0 = 0$, tenemos que

$$\frac{1}{2} \|\xi_h^1\|_0^2 \leq \langle \eta^1, \xi_h^1 \rangle + \Delta t \left\langle \dot{c} - \frac{c^1 - \bar{c}^{0,1}}{\Delta t}, \xi_h^1 \right\rangle + \langle \bar{c}^{0,1} - \tilde{c}^{0,1}, \xi_h^1 \rangle = I_1 + I_2 + I_3. \quad (3.212)$$

Utilizando los lemas y la acotación del término I_1 en el Teorema 3.8.1, es fácil ver que

$$|I_1| \leq \frac{1}{2} \|\eta'\|_{L^2(0,t_1;L^2(\Omega))}^2 + \frac{\Delta t}{2} \|\xi_h^1\|_0^2, \quad (3.213)$$

$$|I_2| \leq \frac{\Delta t^3}{2} k_1 \tilde{b}_1 \|c\|_{Z^2}^2 + \frac{\Delta t}{2k_1} \|\xi_h^1\|_0^2, \quad (3.214)$$

$$|I_3| \leq \frac{1}{2k_2} C_2^2 h^4 \Delta t \|\text{grad } c^0\|_0^2 + \frac{\Delta t k_2}{2} \|\xi_h^1\|_0^2, \quad (3.215)$$

con k_1 y k_2 dos números positivos cualesquiera. Si tomamos $k_1 = 2\Delta t$ y $k_2 = \Delta t$ llegamos a

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{4} - \frac{\Delta t}{2} - \frac{\Delta t^2}{2}\right) \|\xi_h^1\|_0^2 &\leq \frac{1}{2} Ch^{m+1} (\|c\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))})^2 \\ &+ \Delta t^4 \tilde{b}_1^2 \|c\|_{Z^2}^2 + C_2^2 h^4 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}^2. \end{aligned} \quad (3.216)$$

Si suponemos que

$$\frac{1}{8} \leq \frac{1}{4} - \frac{\Delta t}{2} - \frac{\Delta t^2}{2}, \quad (3.217)$$

multiplicamos (3.216) por 8 y extraemos raíces cuadradas se tiene la acotación

$$\begin{aligned} \|\xi_h^1\|_0 &\leq 3Ch^{m+1} (\|c\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))}) \\ &+ 3\Delta t^2 \tilde{b}_1 \|c\|_{Z^2} + 3C_2 h^2 \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}. \end{aligned} \quad (3.218)$$

Si utilizamos esta última acotación en (3.210) y definimos

$$F = 3(1 + 2K_2 \Delta t) F_1 \varepsilon_M \max\left\{\tilde{b}_2 T^{1/2} + \varepsilon_M \tilde{b}_1, C_2(\varepsilon_M + (1 + Ch_0^m) T^{1/2}), C(1 + \varepsilon_M), CT^{1/2}\right\}$$

llegamos a

$$\begin{aligned} \|\xi_h\|_{l^\infty(L^2(\Omega))} &\leq F\Delta t^2(\|c\|_{Z^2} + \|c\|_{Z^3}) + Fh^2\|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))} \\ &+ Fh^{m+1}(\|c\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))} + \|c'\|_{L^2(0,T,H^{m+1}(\Omega))}) \\ &+ F \min(\bar{D}_1\Delta t, \bar{D}_2\Delta t, \bar{D}_3) \frac{h^{m+1}}{\Delta t} \|c\|_{C^0(H^{m+1}(\Omega))}. \end{aligned} \quad (3.219)$$

con \bar{D}_i , $i = 1, 2, 3$, definidas en el enunciado del teorema. Utilizando esta acotación junto con (3.54) se obtiene el resultado. □

Observación 3.8.4. *Las observaciones hechas para el Teorema 3.8.1 donde se daba una estimación del error del método $(MLG)_1$ siguen siendo válidas para el teorema del error del método $(MLG)_2$ que acabamos de ver.*

3.9. Resultados numéricos

En esta sección presentamos algunos resultados obtenidos con los métodos que hemos analizado para dos problemas muy utilizados para la validación de esquemas numéricos para ecuaciones de convección-difusión. En primer lugar, mostraremos el test de la esfera de Gauss² con un movimiento giratorio y, en segundo lugar, consideraremos un cilindro con una ranura con el mismo movimiento. La diferencia entre los dos test radica en la continuidad de la solución exacta. La falta de continuidad de la función de Heaviside que define el cilindro originará la aparición de oscilaciones en la solución aproximada con los métodos LG, en el entorno de las zonas de la solución con fuertes gradientes. Para evitar estas oscilaciones, en el caso de tener soluciones con fuertes gradientes, proponemos un método de los llamados semi-Lagrangianos, introducido por Bermejo *et al.* en [17] y analizado por Bermejo en [11] para ecuaciones de convección pura, que suprime las oscilaciones que aparecen al emplear métodos de alto orden.

3.9.1. Un método semi-Lagrangiano cuasi-monótono

La diferencia entre los métodos Lagrange-Galerkin presentados en esta sección (modificados o no) con respecto a los métodos semi-Lagrangianos (SL) radica en el cálculo de las integrales

$$(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, v_h), \quad v_h \in V_h. \quad (3.220)$$

En el método SL que proponemos consideraremos la aproximación

$$c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} \approx I_h^2(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}), \quad (3.221)$$

siendo $I_h^2 \in \mathcal{L}(C^0(\Omega), W_h)$ el operador de interpolación de Lagrange de grado 2 y, en este caso,

$$P(T_j) = \{p : T_j \rightarrow \mathbb{R} : p = \hat{p} \circ F_j^{-1}, \hat{p} \in P_2(\hat{T})\}.$$

²Este es el test clásico de la campana de Gauss pero en 3 dimensiones.

Si llamamos

$$\overline{C}_h^n := I_h^2(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}) \quad (3.222)$$

tenemos que

$$\overline{C}_{h|T_j}^n(x) = \sum_{i=1}^{N_n} \overline{C}_h^n(a_i^j) p_i^j(x), \forall T_j \in \Omega_h,$$

y, por lo tanto, si $v_{h|T_j} = p_k^j$,

$$(c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, p_k) \approx \sum_{i=1}^{N_n} \overline{C}_h^n(d_i^j) \int_{T_j} p_i^j(x) p_k^j(x) dx, \quad (3.223)$$

donde recordemos que por d_i^j se denotan los nodos de cada simplex. Teniendo en cuenta la definición (3.222) y que $c_h^n \in V_h$, llegamos a

$$\overline{C}_h^n(d_i^j) = c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}(d_i^j) = \sum_{s=1}^{N_n} c_h^n(d_s^{l(i)}) p_i^{l(i)}(\mathcal{X}^{n,n+1}(d_i^j)), \quad (3.224)$$

con $l(i)$ denotando el índice del tetraedro al que pertenece el punto $\mathcal{X}^{n,n+1}(d_i^j)$.

El método cuasi-monótono propuesto en [17] añade una modificación en el cálculo hecho en (3.224). Así, si para cada instante t_n , llamamos

$$\begin{aligned} C_j^+ &:= \max(c_h^n(d_1^j), \dots, c_h^n(d_{N_n}^j)), \\ C_j^- &:= \min(c_h^n(d_1^j), \dots, c_h^n(d_{N_n}^j)), \end{aligned}$$

calculamos $\overline{C}_h^n(d_i^j)$ como

$$\overline{C}_h^n(d_i^j) = \begin{cases} C_j^+ & \text{si } c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}(d_i^j) > C_j^+, \\ C_j^- & \text{si } c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}(d_i^j) < C_j^-, \\ c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}(d_i^j) & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (3.225)$$

El algoritmo para calcular numéricamente las integrales (3.220) sería el siguiente:

BUCLE $j = 1, \dots, N_e$

- BUCLE $i = 1, \dots, N_n$
 - (1) Calcular $z_i^j = \mathcal{X}^{n,n+1}(d_i^j)$. Para ello debemos resolver el problema (3.30) con condiciones iniciales $x = d_i^j$.
 - (2) Encontrar el elemento $T_{l(i)}$ que contiene al punto z_i^j .
 - (3) Calcular $\bar{C}_h^n(z_i^j)$ utilizando (3.225)

FIN BUCLE i

- Calcular la integral en T_j utilizando la fórmula (3.223). Para ello tendremos la matriz de masa calculada previamente.
- Ensamblar los valores obtenidos en el vector segundo miembro $R^n := (r_1^n, \dots, r_{N_{ng}}^n)$.

FIN BUCLE j

Observación 3.9.1. Como podemos observar, para este método no será necesario utilizar fórmulas de cuadratura para el cálculo de las integrales (3.220). La cuadratura se utilizará, si se quiere, solamente en el cálculo de las matrices de masa y rigidez.

Como podemos ver en [11], este método para la ecuación de convección pura es monótono, mantiene el mismo orden de convergencia que los esquemas SL convencionales en las regiones donde la solución es suficientemente regular y es conservativo si la velocidad tiene divergencia nula. Hemos probado también este método pero con la fórmula BDF2 y como podremos ver por los resultados ya no es monótono.

En los test que presentamos en esta sección, veremos que el error cometido por este método es mayor que el de los métodos LG o MLG. Como ventaja frente a éstos, elimina las oscilaciones que aparecen cuando la solución no es continua.

Computacionalmente, el método SL es algo más costoso que el método MLG pues en el primero tenemos que mover todos los nodos de la malla, mientras que en el último solo tenemos que mover y localizar los vértices. Sin embargo, es más rápido que el método LG, pues los nodos de cuadratura suelen ser más que los nodos de la malla.

3.9.2. Integración numérica

En las Secciones 3.6 y 3.7 vimos que tenemos que calcular las integrales

$$\int_{T_j} (c_h^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1})(x) v_h(x) dx \quad (3.226)$$

para el método estándar, y las integrales

$$\int_{T_j} (c_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}^{n,n+1})(x) v_h(x) dx, \quad (3.227)$$

para el método modificado, en cada uno de los tetraedros de la malla.

En general, estas integrales no se pueden calcular de forma exacta; por lo tanto, en ambos casos necesitamos utilizar fórmulas de cuadratura. Como consecuencia de la integración numérica aparecen términos adicionales en la estimación de error, que pueden hacer perder la estabilidad incondicional del método. Podemos encontrar algunos artículos, como por ejemplo Morton *et al* [75], y, más recientemente, Bermúdez *et al* [23] y Fujima y Tabata [46], donde se estudia el efecto de la integración numérica en la estabilidad de algunos métodos de Lagrange-Galerkin.

Hemos visto con nuestro código 3D que, cuando se integran de forma exacta las matrices de masa y rigidez, se hace necesario utilizar fórmulas de alto orden para mantener la estabilidad del método.

En nuestro caso hemos utilizado, además de fórmulas clásicas como la de los puntos medios o los vértices, diferentes fórmulas de tipo Gauss-Legendre que integran exactamente polinomios de grado 4 hasta grado 8 con las que hemos obtenido los mejores resultados. Estas fórmulas vienen dadas en Keast [61] y Rathod *et al* [86] y las que usamos tienen pesos positivos, salvo la de grado 8 cuyo primer peso es negativo ³.

Mostraremos cómo mejora la estabilidad del método al utilizar fórmulas de mayor orden en el test de la campana de Gauss.

Para la integración exacta en un tetraedro utilizamos la fórmula siguiente

$$\int_T \lambda_1^{\alpha_1} \lambda_2^{\alpha_2} \lambda_3^{\alpha_3} \lambda_4^{\alpha_4} dx = \frac{\alpha_1! \alpha_2! \alpha_3! \alpha_4!}{(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 + 3)!} 6\text{vol}(T). \quad (3.228)$$

En el cálculo de los distintos errores cometidos en los test que veremos a continuación, tendremos que aproximar la norma $\|\cdot\|_0$ utilizando integración numérica. A esta aproximación de la norma en el espacio $L^2(\Omega)$ la denotaremos por $\|\cdot\|_{L_h^2(\Omega)}$. Para que el error cometido al realizar esta aproximación sea despreciable utilizaremos la fórmula de cuadratura de orden más alto. En el espacio $l^\infty(L^2(\Omega))$, para calcular la norma de una sucesión $[c]$ utilizaremos la aproximación

$$\|[c]\|_{l^\infty(L_h^2(\Omega))} := \max_{0 \leq n \leq N} \|c^n\|_{L_h^2(\Omega)}. \quad (3.229)$$

3.9.3. Test de la esfera Gaussiana

Este test ha sido desarrollado a partir del que aparece en el artículo [60]. Se considera una función de distribución normal en un dominio tridimensional $\Omega = (-0.9, 0.9) \times (-0.9, 0.9) \times (-0.3, 0.3)$ cuya desviación típica y media iniciales son $\sigma_0 = 0.08$ y $x_c = (0.25, 0, 0)$, respectivamente. Suponemos que la velocidad es de la forma $\mathbf{v}(x, t) = (-x_2, x_1, 0)$ y la matriz de difusión es $\mathbf{D}(x, t) = \nu \mathbf{I}$ con ν tomando los valores 10^{-2} y 10^{-3} . Imponemos condiciones de contorno Dirichlet adecuadas para que la solución exacta del problema con $f = 0$ sea

$$c(x, t) = \left(\frac{\sigma_0}{\sqrt{\sigma_0^2 + 2\nu t}} \right)^3 \exp \left\{ -\frac{(\bar{x}_1(t) + 0.25)^2 + (\bar{x}_2(t))^2 + (\bar{x}_3(t))^2}{2(\sigma_0^2 + 2\nu t)} \right\},$$

³Esta fórmula en el artículo de Keast [61] tiene un error pues el primer peso aparece como positivo.

donde

$$\bar{x}_1(t) = x_1 \cos t + x_2 \sin t, \quad \bar{x}_2(t) = -x_1 \sin t + x_2 \cos t, \quad \bar{x}_3(t) = x_3.$$

En este caso es fácil calcular la expresión exacta de las curvas características. En efecto, la solución del problema (3.30) es

$$\mathcal{X}^{n,n+1}(x) = \begin{pmatrix} \cos(t^n - t^{n+1}) & -\sin(t^n - t^{n+1}) & 0 \\ \sin(t^n - t^{n+1}) & \cos(t^n - t^{n+1}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \quad (3.230)$$

El tiempo final considerado es el necesario para que la esfera de Gauss complete una vuelta, es decir, $T = 2\pi$.

En este caso, para la discretización espacial utilizaremos elementos finitos \mathbb{P}_2 . Para poder ver el orden del error obtenido mallamos el dominio espacial con diferentes tamaños y consideramos diferentes pasos de tiempo. Las mallas son estructuradas, formadas por tetraedros de igual volumen, resultantes de dividir cubos de tamaño h . Las características de las mallas pueden verse en la Tabla 3.1.

Malla	Elementos	Vértices	Nodos	h
1	11664	2527	17797	0.1
2	18522	3872	27735	0.0857
3	54000	10571	78141	0.06
4	93312	17797	133225	0.05
5	182250	33856	256711	0.04
6	432000	78141	600281	0.03

Tabla 3.1: Mallas utilizadas

Calcularemos el error relativo

$$Err_c = \frac{\|[c] - [c_h]\|_{l^\infty(L_h^2(\Omega))}}{\|[c]\|_{l^\infty(L_h^2(\Omega))}}. \quad (3.231)$$

En la Figura 3.2 podemos ver el orden del error para los métodos $(MLG)_2$ y $(LG)_2$ que se obtiene fijando el paso de tiempo a $\Delta t = 2\pi/1000$ y variando el tamaño de la malla, para el caso de $\nu = 10^{-2}$ y usando la fórmula de cuadratura de orden 6. En este caso, se tiene que el error es $O(h^3)$, como cabe esperar, y, además, se obtiene el mismo error para el método estándar y el modificado. Aunque conocemos la expresión exacta de las curvas características, dada por (3.230), para comparar el tiempo de cálculo de ambos métodos calculamos el pie de las características utilizando un método de Runge-Kutta de orden 4. En este caso, puesto que la velocidad es independiente del tiempo, podríamos mover una única vez los nodos de cuadratura pero, con el fin de obtener una comparación realista entre los dos métodos, repetimos el cálculo en cada iteración. Para la resolución del sistema lineal del problema discreto utilizamos un método directo, factorizando la matriz una única vez ya que sus coeficientes son constantes. Los tiempos son, para la malla más fina,

- Método Lagrange-Galerkin estándar: 4 horas y 54 minutos.

- Método Lagrange-Galerkin modificado: 2 horas y 38 minutos.

En este ejemplo la reducción de tiempo de cálculo obtenida con el método modificado es de un 44%. En la Sección 4.7.5 estudiaremos con más detalle la eficiencia de los métodos MLG y veremos algunas condiciones en la que ésta se puede ver reducida.

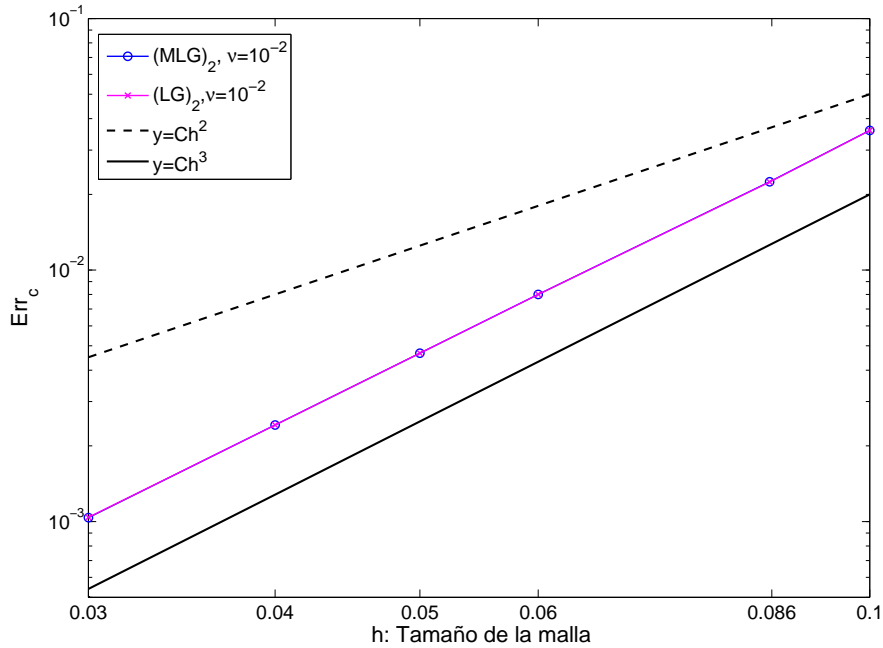


Figura 3.2: Error obtenido para diferentes mallas en escala logarítmica con $\Delta t = 2\pi/1000$ y $\nu = 10^{-2}$

En la Figura 3.3 podemos ver la curva del error temporal obtenida para los métodos $(MLG)_1$ y $(MLG)_2$ utilizando la malla de tamaño $h = 0.03$ y para la viscosidad $\nu = 10^{-2}$. Esta curva se obtuvo utilizando la fórmula de cuadratura que integra exactamente polinomios de hasta grado 6. En esta figura se puede observar orden 1 en tiempo para el método con la fórmula BDF1 y orden 2 en tiempo con la fórmula BDF2, como predicen los teoremas de estimación de error 3.8.1 y 3.8.3. A partir de cierto paso de tiempo el error permanece constante a medida que Δt se hace pequeño y ambos métodos dan el mismo error. Esto indica que el error temporal es tan pequeño que queda enmascarado por los errores debidos a la discretización espacial.

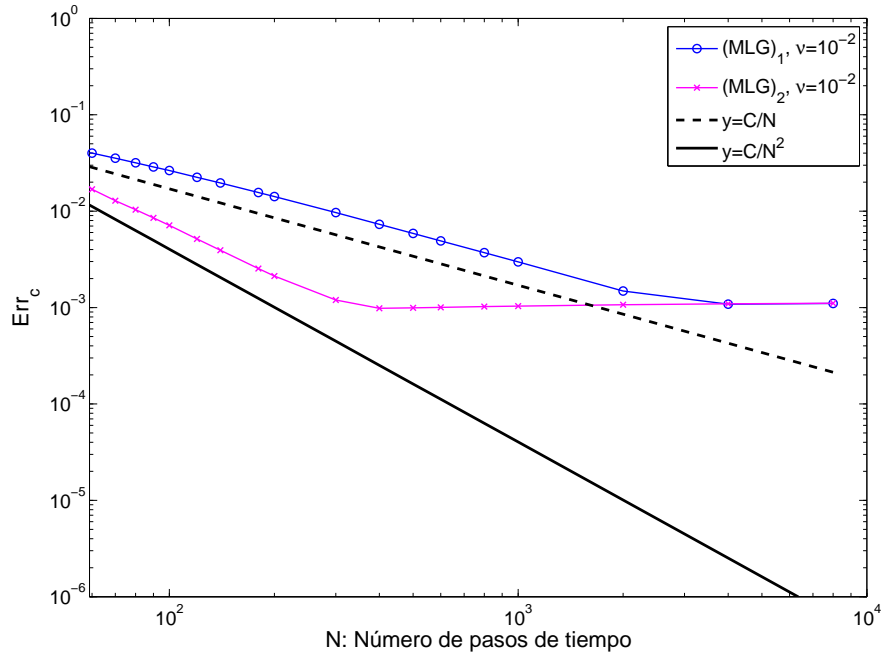


Figura 3.3: Error obtenido para diferentes pasos de tiempo en escala logarítmica con $h = 0.03$ y $\nu = 10^{-2}$

En el caso de viscosidad $\nu = 10^{-3}$, la curva del error temporal que podemos ver en la parte superior de la Figura 3.4 presenta oscilaciones cuando Δt está entre determinados valores menores que 1.5×10^{-2} , aunque recupera su monotonía para pasos de tiempo más pequeños. Atribuimos estas irregularidades al uso de fórmulas de cuadratura para el cálculo de las integrales del tipo (3.227), en el caso de los métodos modificados, y (3.226), en el caso de los métodos estándar. Como se mencionó en el apartado anterior, hay numerosos artículos en la literatura que estudian las inestabilidades que la integración numérica introduce en los métodos de Lagrange-Galerkin, que son incondicionalmente estables si se supone integración exacta. Para probar que estas irregularidades tienen que ver con la fórmula de cuadratura, repetimos los cálculos para los métodos $(MLG)_1$ y $(MLG)_2$ utilizando una fórmula de orden 8 en lugar de la de orden 6. Como se puede observar en la gráfica inferior de la Figura 3.4, estas irregularidades desaparecen para el método de orden 1 y se suavizan para el método de orden 2. Si la viscosidad es más alta, como vimos en el caso $\nu = 10^{-2}$ (Figura 3.3), las irregularidades desaparecen. Estas pruebas ponen de manifiesto la necesidad de utilizar fórmulas de cuadratura de alto orden cuando la viscosidad y los pasos de tiempo son pequeños, lo que justifica aún más la necesidad de los métodos modificados en lugar de los estándar para reducir el coste computacional que conlleva mover más nodos de cuadratura. En la Figura 3.5 podemos ver el error obtenido para las diferentes mallas al fijar el paso de tiempo $\Delta t = 2\pi/400$. Para obtener la solución aproximada se ha utilizado la fórmula de cuadratura de orden 8. Como puede verse se obtiene el orden de error que predice el teorema para los dos métodos.

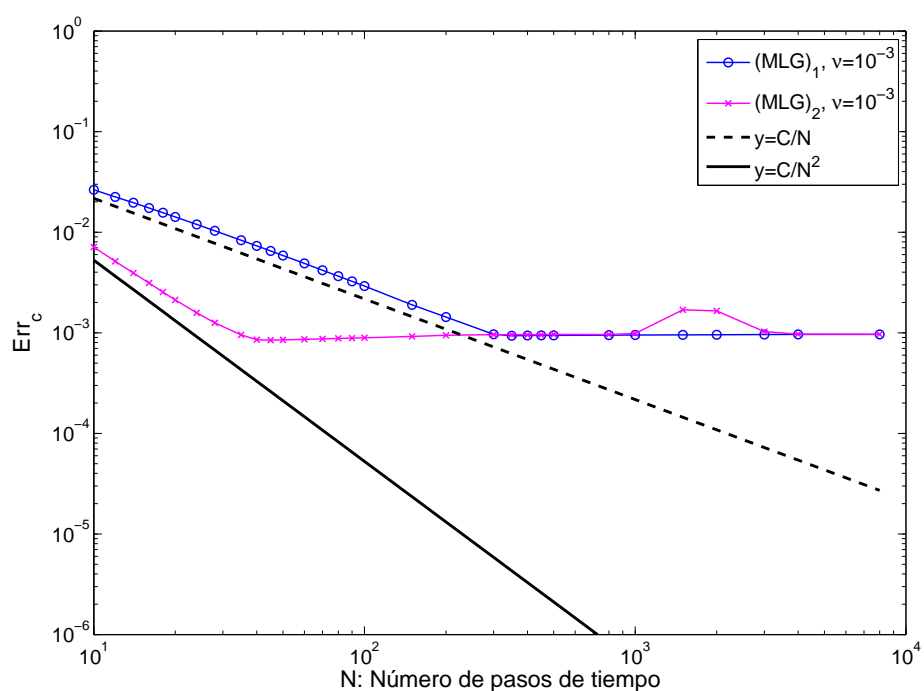
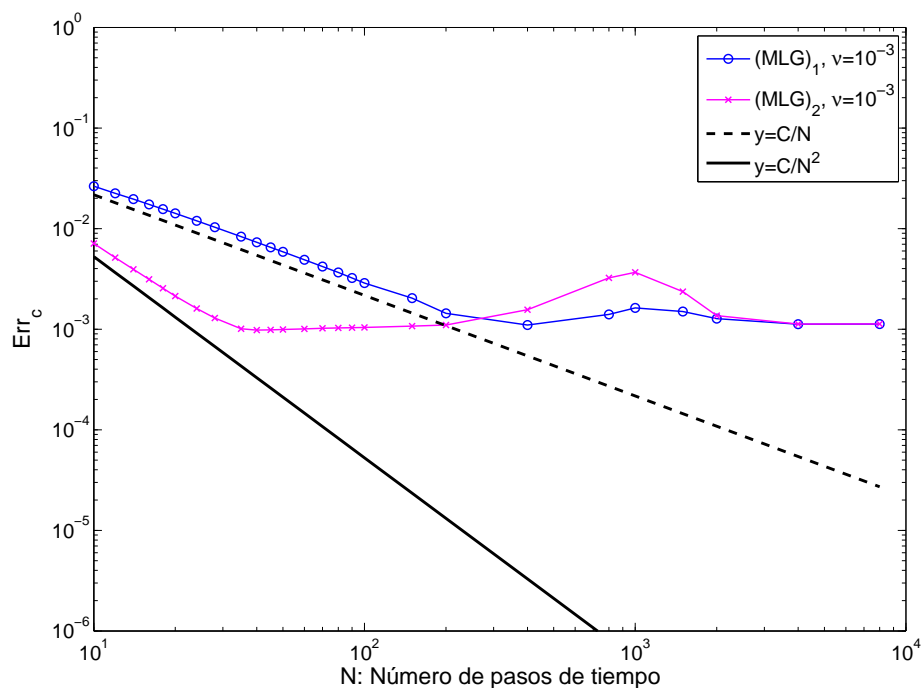


Figura 3.4: Error obtenido para diferentes pasos de tiempo en escala logarítmica, con $h = 0.03$ y $\nu = 10^{-3}$, usando la fórmula de cuadratura de orden 6 (arriba) y de orden 8 (abajo)

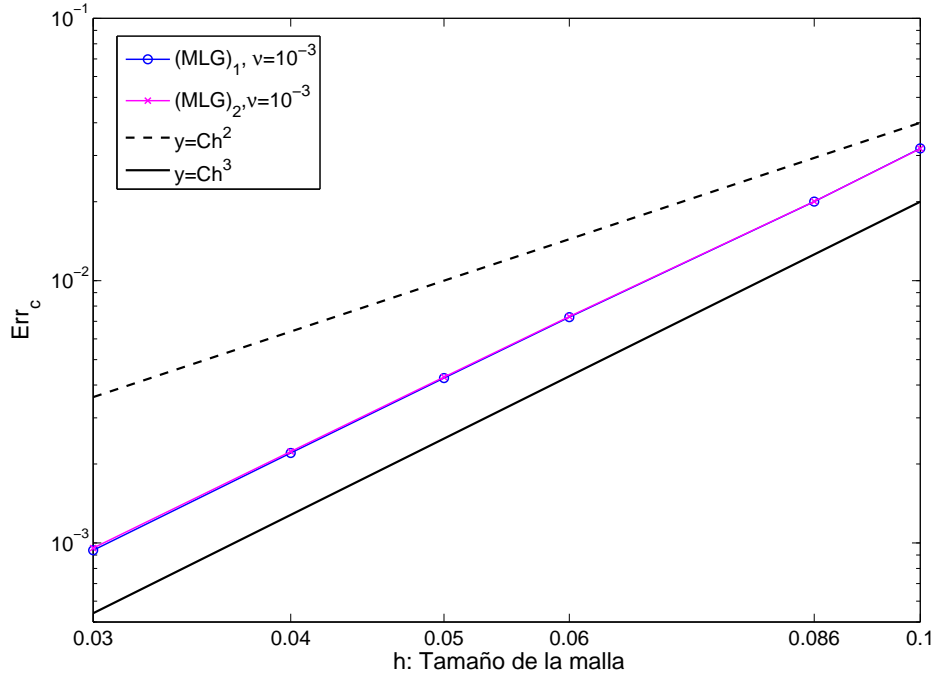


Figura 3.5: Error obtenido para diferentes mallas en escala logarítmica con $\Delta t = 2\pi/400$ y $\nu = 10^{-3}$

Por último compararemos los métodos propuestos con los métodos semi-Lagrangianos descritos en la Sección 3.9.1, para el caso de $\nu = 10^{-3}$. En la Tabla 3.2 podemos ver los resultados obtenidos para el test de la campana con la malla de tamaño $h = 0.04$ y con un paso de tiempo $\Delta t = 2\pi/200$, para los métodos $(MLG)_1$ y $(SLG)_1$. En esta tabla C_m , representa la conservación de la masa y viene dada por

$$C_m = \frac{\|c_h^N\|_{L_h^2(\Omega)}^2}{\|c^N\|_{L_h^2(\Omega)}^2}.$$

En la Figura 3.6 podemos ver la solución exacta y la obtenida con los dos métodos mencionados, en el plano $x_3 = 0.02$. Se puede observar que el método semi-Lagrangiano es más disipativo, lo que se aprecia con más detalle en la Figura 3.7 donde se han representado los perfiles de las distintas soluciones en la recta $x_2 = 0$ del plano $x_3 = 0.02$.

Método	C_m	Error	c_{max}	c_{min}	Tiempo
$(MLG)_1$	1.001	2.14×10^{-3}	0.1962	-3.73×10^{-12}	13m 39s
$(SLG)_1$	0.993	1.58×10^{-2}	0.1906	-6.46×10^{-13}	18m 47s

Tabla 3.2: Comparación de los resultados del test de la campana con distintos métodos, para $\nu = 10^{-3}$, $\Delta t = 2\pi/200$ y $h = 0.04$. El valor máximo de la solución exacta es 0.1955 y el mínimo es 0

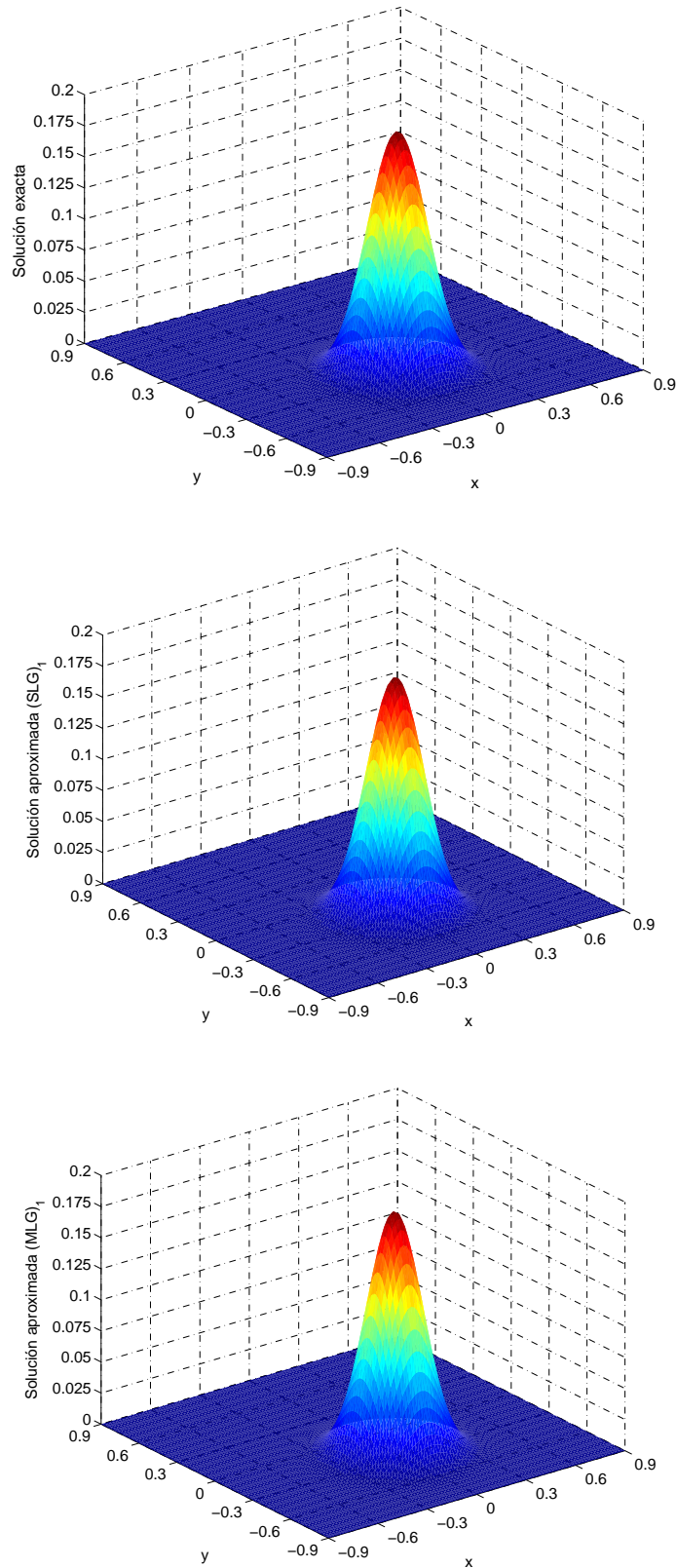


Figura 3.6: Solución exacta (arriba) y aproximada por el método $(SLG)_1$ (centro) y por el método $(MLG)_1$ (abajo) en el plano $x_3 = 0.02$, con viscosidad $\nu = 10^{-3}$, $\Delta t = 2\pi/200$ y $h = 0.04$

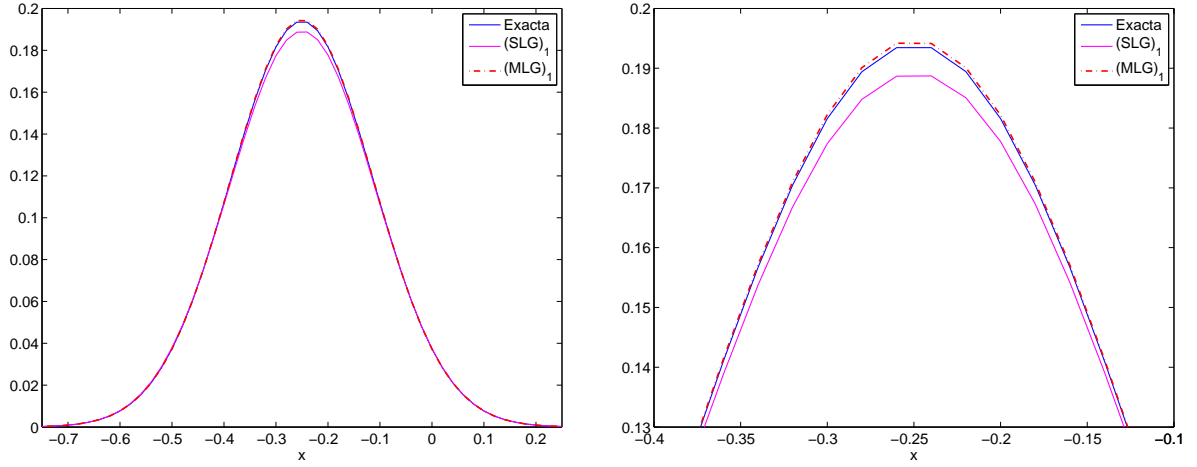


Figura 3.7: Comparación de los perfiles en la recta $x_2 = 0$ del plano $x_3 = 0.02$ de la solución exacta y aproximadas con los métodos $(MLG)_1$ y $(SLG)_1$ para $h = 0.04$ y $\Delta t = 2\pi/200$

3.9.4. El cilindro con ranura

El test del cilindro con ranura “slotted cylinder” fue propuesto por primera vez en [97] para dos dimensiones. En nuestro caso lo modificaremos para probar el código en tres dimensiones. Es uno de los test más duros para la ecuación de convección pura. Utilizaremos este test para ver las diferencias entre los métodos Lagrangianos y semi-Lagrangianos propuestos, cuando la solución exacta no es regular.

Consideramos el dominio $\Omega = (-0.5, 0.5) \times (-0.5, 0.5) \times (0, 0.03)$. La condición inicial del problema viene dada por

$$c^0(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in D \times [0.01, 0.02] \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases}$$

siendo D el conjunto

$$D = \{x \in \mathbb{R}^2 : (x_1 + 0.25)^2 + x_2^2 \leq 0.15^2\} \setminus \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 \in [-0.28, -0.22], x_2 \leq 0\}.$$

Se puede ver la condición inicial en el plano $x_3 = 0.015$, en la Figura 3.8. La velocidad será

$$\mathbf{v}(x, t) = (-2\pi x_2, 2\pi x_1, 0),$$

de forma que la solución exacta es

$$c(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \bar{x}(t) \in D \times [0.01, 0.02] \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases}$$

siendo $\bar{x}(t) = (\bar{x}_1(t), \bar{x}_2(t), \bar{x}_3(t))$, con

$$\begin{aligned} \bar{x}_1(t) &= x_1 \cos(2\pi t) + x_2 \sin(2\pi t), \\ \bar{x}_2(t) &= x_2 \cos(2\pi t) - x_1 \sin(2\pi t), \\ \bar{x}_3(t) &= x_3. \end{aligned}$$

Utilizaremos una malla con $h = 0.01$ constante en las tres direcciones, que estará formada por 180.000 elementos y 282.807 nodos, y un paso de tiempo $\Delta t = 0.05$ de forma que en $N = 20$ pasos recorra una vuelta completa. Calcularemos el error

$$E_r^N = \frac{\|c_h^N - c^N\|_{L_h^2(\Omega)}}{\|c^N\|_{L_h^2(\Omega)}},$$

para cada uno de los métodos y evaluaremos la “conservación de la masa” que mediremos por

$$C_m = \frac{\|c_h^N\|_{L_h^2(\Omega)}^2}{\|c^N\|_{L_h^2(\Omega)}^2}.$$

Compararemos los métodos semi-Lagrangianos propuestos con los métodos Lagrangianos modificados, cada uno de ellos con las fórmulas BDF de órdenes 1 y 2. En este ejemplo hemos comprobado que los métodos LG y MLG dan los mismos resultados, por lo tanto mostraremos sólo los obtenidos con los MLG. En la Tabla 3.3 resumimos los resultados obtenidos para este test con los diferentes métodos. La Figura 3.9 muestra, en un corte con el plano $x_3 = 0.015$, la solución obtenida con los distintos métodos después de una vuelta, mientras que la Figura 3.10 muestra los resultados después de cinco vueltas. Por último, en la Figura 3.11 representamos los perfiles en la recta $x_2 = -0.0111$ para cada uno de los métodos, después de una y cinco vueltas. En esas figuras se puede ver cómo con los métodos de Lagrange-Galerkin aparecen oscilaciones espurias, conocidas como “overshoots” en inglés, en torno a la discontinuidad de la función exacta. Este fenómeno, que se conoce con el nombre de *fenómeno de Gibbs*, suele aparecer en métodos basados en la proyección de Galerkin, como los de elementos finitos. Como se puede observar, el filtro definido en el método SL usado, elimina estas oscilaciones pero, a cambio, es mucho más disipativo.

Método	Nº vueltas	c_{max}	c_{min}	E_r^N	C_m	Tiempo
$(SL)_1$	1	1.000	-6×10^{-15}	0.544	0.974	1m 46s
$(SL)_1$	5	1.000	-1×10^{-7}	0.573	0.946	4m 52s
$(SL)_2$	1	1.071	-0.132	0.550	0.968	2m 38 s
$(SL)_2$	5	1.059	-0.180	0.599	0.920	9m 36s
$(MLG)_1$	1	1.180	-0.147	0.530	0.992	1m 37s
$(MLG)_1$	5	1.121	-0.201	0.537	0.981	4m 29s
$(MLG)_2$	1	1.229	-0.204	0.533	0.992	2m 0 s
$(MLG)_2$	5	1.117	-0.206	0.540	0.979	7m 28 s

Tabla 3.3: Resultados del test del cilindro para cada uno de los métodos

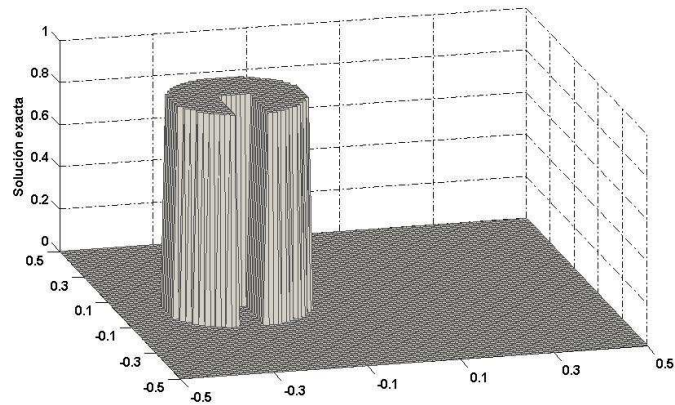


Figura 3.8: Condición inicial "slotted cylinder"

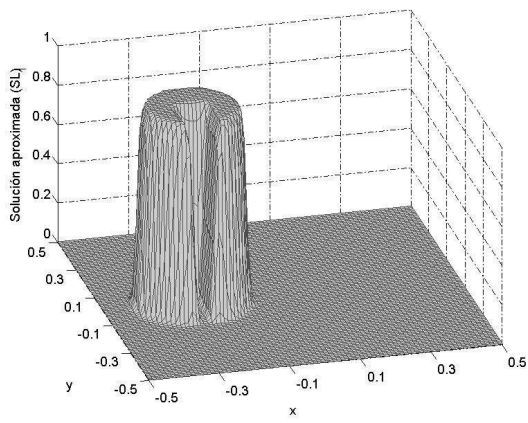
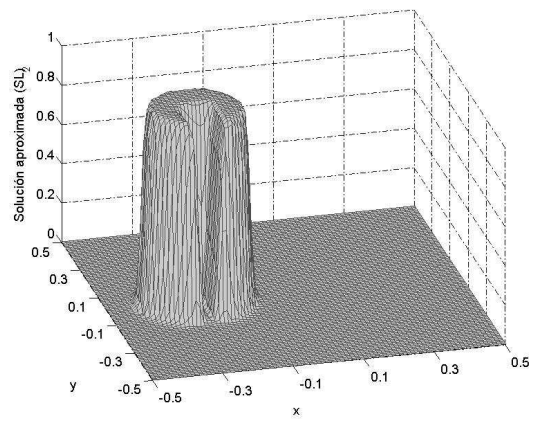
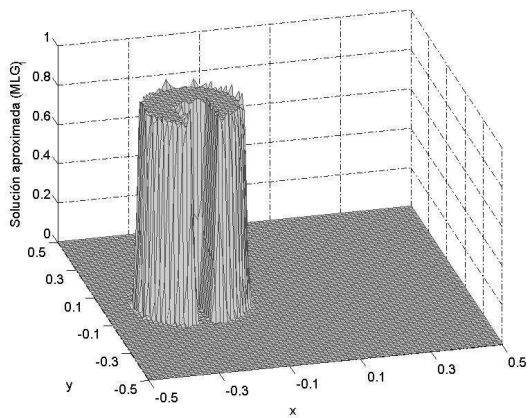
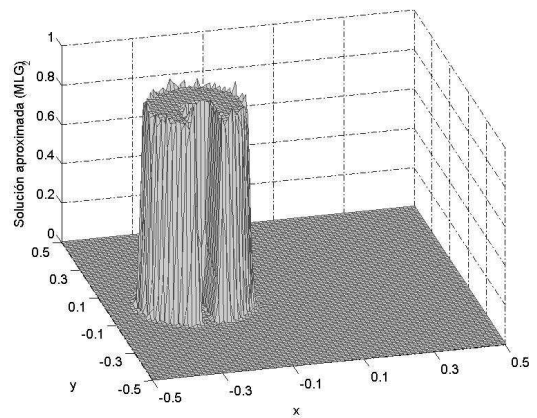
 $(SL)_1$  $(SL)_2$  $(MLG)_1$  $(MLG)_2$

Figura 3.9: Cilindro después de una vuelta

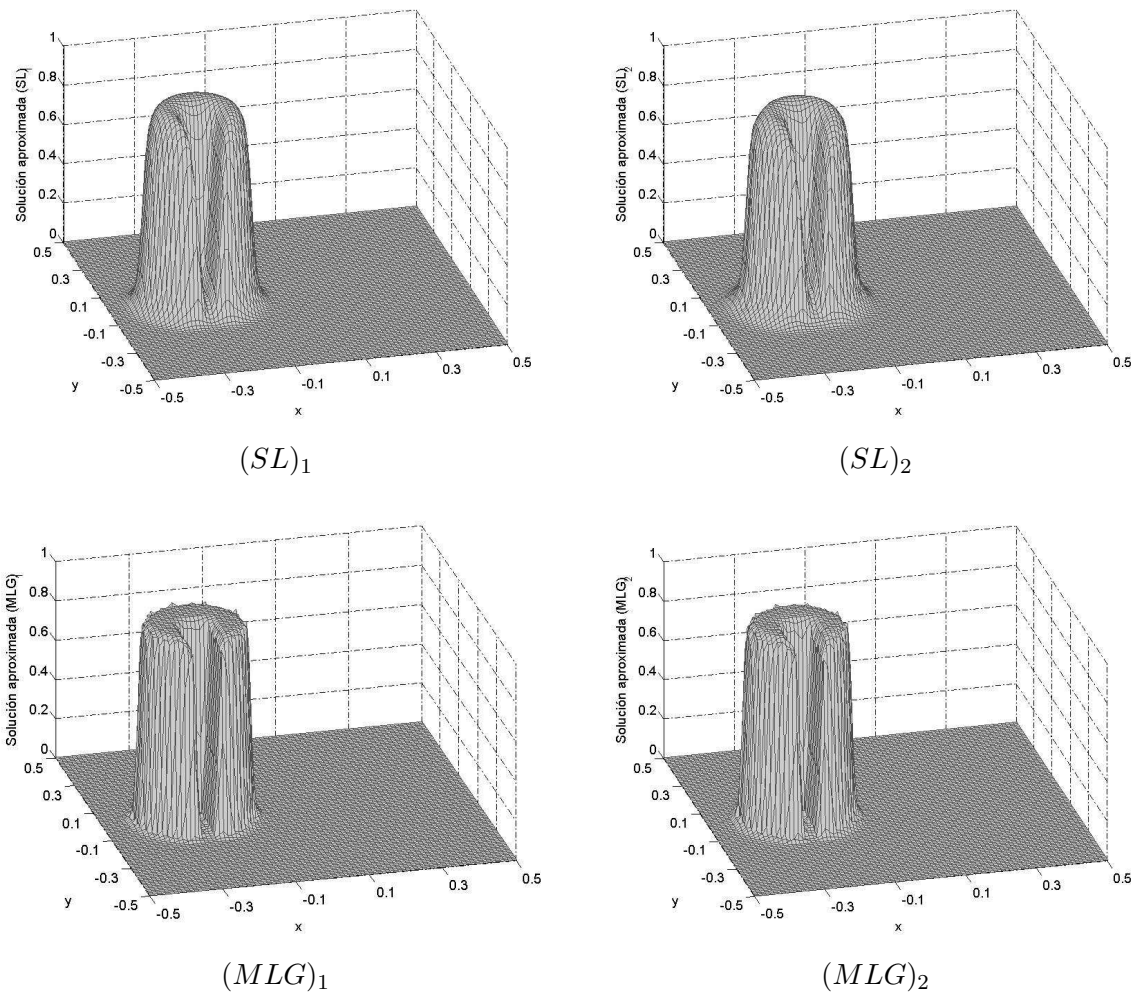


Figura 3.10: Cilindro después de cinco vueltas

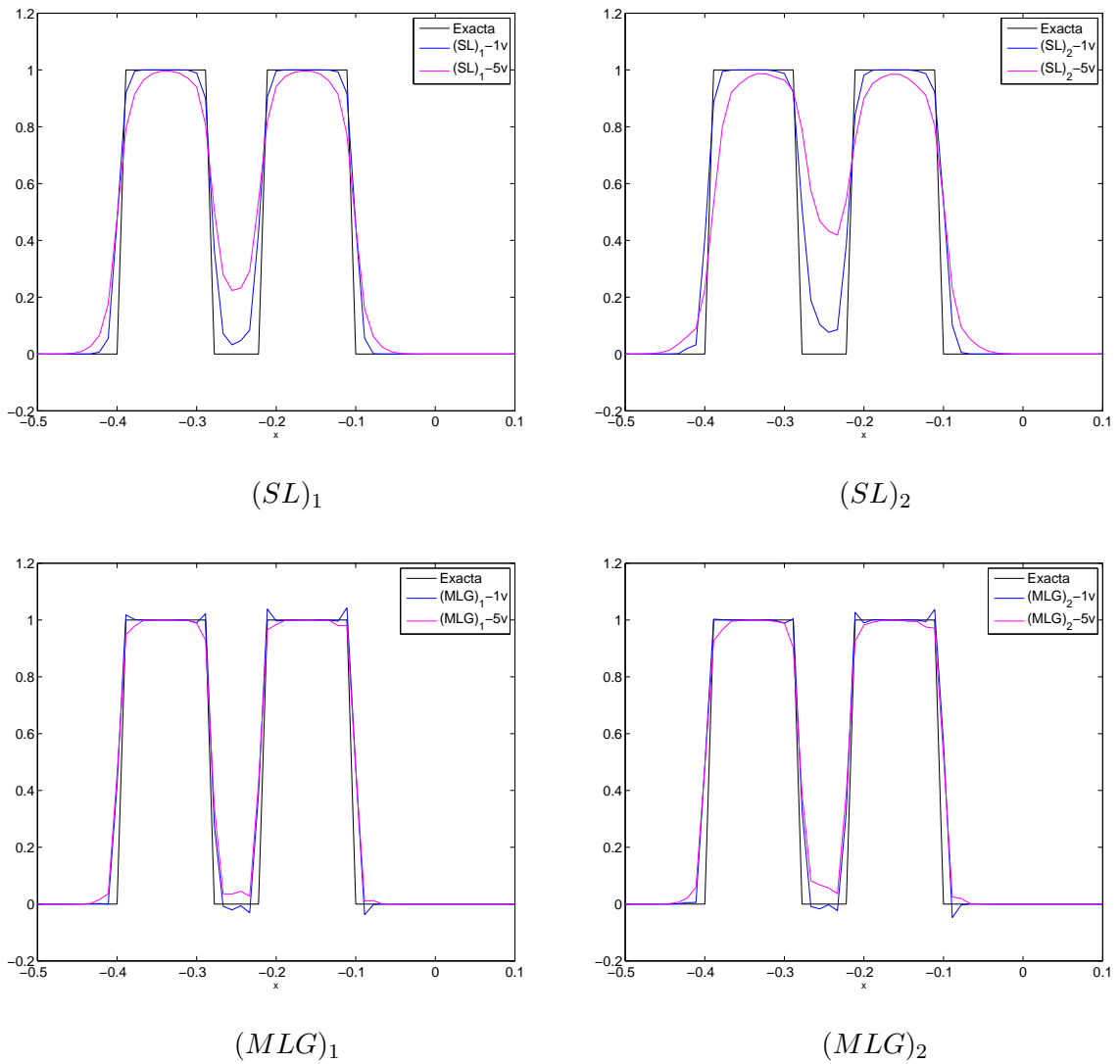


Figura 3.11: Perfiles de la solución exacta y la aproximada en $x_2 = -0.0111$ después de una y cinco vueltas

Capítulo 4

Métodos de Lagrange-Galerkin modificados para las ecuaciones de Navier-Stokes

4.1. Introducción

En este capítulo vamos a describir los métodos de Lagrange-Galerkin modificados para la integración de las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles.

En primer lugar, planteamos el problema de Cauchy en un dominio acotado y establecemos el marco funcional del problema de Navier-Stokes que vamos a aproximar.

En segundo lugar, discretizamos el problema utilizando métodos LG estándar de primero y segundo orden en tiempo. A diferencia de lo que ocurría en el Capítulo 3, en el que suponíamos que la ecuación de las curvas características se podía resolver exactamente, en el problema de Navier-Stokes la velocidad es la incógnita y, por lo tanto, esta hipótesis ya no será válida. Así, las curvas características asociadas a la velocidad exacta \mathbf{v} serán aproximadas por las trayectorias de la velocidad \mathbf{v}_h calculada en el espacio de elementos finitos correspondiente. Planteamos el problema de Cauchy que verifican estas curvas características asociadas a la velocidad calculada numéricamente y distintas fórmulas numéricas para la integración del mismo.

Los métodos modificados para el problema de Navier-Stokes se basan en el cálculo de curvas características modificadas que aproximarán a las de los métodos estándar calculadas con la velocidad \mathbf{v}_h , definidas de manera análoga a las de los métodos MLG en ecuaciones de convección-difusión-convección. Al igual que ocurría para estas ecuaciones, los métodos MLG presentan el mismo orden de convergencia que los estándar, siempre que se utilicen elementos finitos de tipo Lagrange de orden ≤ 2 como, por ejemplo, el MINI-elemento o el elemento de Taylor-Hood.

Por último, presentamos algunos resultados numéricos con los diferentes métodos con los que verificamos el orden de error esperado. Para estas ecuaciones, estos métodos no suponen una mejora tan clara sobre los métodos estándar como en el caso de las ecuaciones de convección-difusión-reacción. Esto se debe a que gran parte del coste computacional de

resolver las ecuaciones de Navier-Stokes se encuentra en la resolución de un problema de tipo Stokes donde ambos métodos tardarían el mismo tiempo. Como cabe esperar, los métodos modificados son tanto más eficientes cuanto menor coste computacional recaiga en la resolución del sistema lineal y más peso tenga la parte convectiva del problema.

4.2. Problema de Cauchy

Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^d , $d = 2, 3$ con frontera Γ Lipschitziana y T una constante positiva, consideramos el problema con condiciones iniciales y de contorno siguiente:

Problema fuerte: *Encontrar dos funciones $(\mathbf{v}, \pi) : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$ verificando*

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v})\mathbf{v} - \nu \Delta \mathbf{v} + \text{grad } \pi = \mathbf{f}, & \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \text{div } \mathbf{v} = 0, & \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \mathbf{v} = \mathbf{0}, & \text{en } \Gamma \times (0, T), \\ \mathbf{v}(0) = \mathbf{v}^0, & \text{en } \Omega. \end{array} \right. \quad (4.1)$$

Éste es el problema que verifica el flujo no estacionario de un fluido Newtoniano con viscosidad cinemática ν constante, siendo la primera ecuación la de conservación de la cantidad de movimiento y la segunda la condición de incompresibilidad.

La función $\mathbf{v} : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$ representa la descripción espacial de la velocidad del flujo, $\pi : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ la presión y $\mathbf{f} : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$ la densidad de fuerzas volúmicas (en general, la gravedad).

Nota 4.2.1. *Por simplicidad hemos supuesto que el fluido es incompresible y que las condiciones de contorno son de tipo Dirichlet homogéneas en toda la frontera, pero este caso se puede extender con facilidad al caso de un flujo compresible con divergencia conocida y con condiciones de contorno Dirichlet no homogéneas y de tipo salida libre. En el Apéndice A se muestran los cálculos para la implementación de los métodos MLG en un caso más general.*

Definimos los espacios funcionales

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &:= \{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}_0^1(\Omega) : \text{div } \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Omega \}, \\ \mathbf{W} &:= \{ \mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(\Omega) : \text{div } \mathbf{v} = 0 \text{ en } \Omega \text{ y } \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ en } \Gamma \}, \\ L_0^2(\Omega) &:= \left\{ f \in L^2(\Omega) : \int_{\Omega} f = 0 \right\}, \end{aligned}$$

y denotaremos por $\mathbf{H}^{-1}(\Omega)$ el espacio dual de $\mathbf{H}_0^1(\Omega)$ y por $\langle \cdot, \cdot \rangle$ al par de dualidad entre estos dos espacios.

Para obtener una solución numérica del Problema 4.1 vamos a utilizar la formulación débil mixta siguiente:

Problema débil: *Dadas $\mathbf{f} \in L^2(\mathbf{H}^{-1}(\Omega))$ y $\mathbf{v}_0 \in \mathbf{W}$, encontrar dos funciones $\mathbf{v} \in L^2(\mathbf{H}_0^1(\Omega)) \cap C^0(\mathbf{L}^2(\Omega))$ y $\pi \in L^2(L_0^2(\Omega))$ tales que para toda $\mathbf{w} \in \mathbf{H}_0^1(\Omega)$ y $q \in L_0^2(\Omega)$*

verifiquen:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(\mathbf{v}, \mathbf{w}) + ((\text{grad } \mathbf{v})\mathbf{v}, \mathbf{w}) + \nu(\text{grad } \mathbf{v}, \text{grad } \mathbf{w}) - (\pi, \text{div} \mathbf{w}) = \langle \mathbf{f}, \mathbf{w} \rangle, \\ (\text{div} \mathbf{v}, q) = 0, \end{cases} \quad (4.2)$$

y con $\mathbf{v}(0) = \mathbf{v}^0$.

Nota 4.2.2. Si (\mathbf{v}, π) es solución del Problema 4.1, el par $(\mathbf{v}, \pi + c)$, con c una constante, también lo será. Por ello, elegiremos las presiones pertenecientes al espacio $L_0^2(\Omega)$. Otra opción sería haber elegido el espacio cociente $L^2(\Omega)/\mathbb{R}$. Esto es necesario cuando tenemos condiciones Dirichlet para la velocidad en todo el dominio. En el caso de que la presión se determine en alguna región de la frontera o que se de una condición de tipo salida libre, la unicidad de la presión está asegurada. La unicidad de la presión para distintas condiciones de contorno se puede ver en Ern y Guermond [40].

Siguiendo los mismos pasos que para el caso de ecuaciones de convección-difusión-reacción en el Capítulo 3 y utilizando las notaciones definidas en el mismo, vamos a utilizar métodos de Lagrange-Galerkin modificados para aproximar la solución del problema débil.

4.3. Discretización temporal: método de las características

Para la aproximación del operador derivada material vamos a utilizar el método de las características. Si tenemos en cuenta la definición de curva característica dada en 3.3.1 podemos escribir la derivada total a lo largo de la trayectoria de las partículas fluidas como

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; s), s) &= \mathbf{v}'(\mathcal{X}(x, t; s), s) + \text{grad } \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; s), s) \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t; s), s) \\ &= \dot{\mathbf{v}}(\mathcal{X}(x, t; s), s). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Consideramos el intervalo $[0, T]$ dividido en N subintervalos de igual tamaño $\Delta t = T/N$ y aproximamos la derivada material de la velocidad a lo largo de las curvas características utilizando las fórmulas BDF1 y BDF2:

- con BDF1,

$$\dot{\mathbf{v}}(x, t_{n+1}) \approx \frac{\mathbf{v}^{n+1}(x) - \mathbf{v}^n(\mathcal{X}^{n,n+1}(x))}{\Delta t}, \quad (4.4)$$

- con BDF2,

$$\dot{\mathbf{v}}(x, t_{n+1}) \approx \frac{3\mathbf{v}^{n+1}(x) - 4\mathbf{v}^n(\mathcal{X}^{n,n+1}(x)) + \mathbf{v}^{n-1}(\mathcal{X}^{n-1,n+1}(x))}{2\Delta t}. \quad (4.5)$$

Introducimos ahora algunas notaciones para simplificar la escritura de los métodos numéricos. Si $\mathbf{u} \in C^0(\mathbf{H}^1(\Omega))$ definimos

$$\mathcal{D}^{n,1} \mathbf{u} := \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}, \quad (4.6)$$

$$\mathcal{D}^{n,2} \mathbf{u} := \frac{1}{2} (3\mathbf{u}^{n+1} - 4\mathbf{u}^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1} + \mathbf{u}^{n-1} \circ \mathcal{X}^{n-1,n+1}), \quad (4.7)$$

y los operadores $\mathcal{A}^{n,i}\mathbf{u} \in (\mathbf{H}^1(\Omega))'$, $i = 1, 2$ y $\mathcal{F}^n \in (\mathbf{H}^1(\Omega))'$ dados por

$$\langle \mathcal{A}^{n,i}\mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle := \frac{1}{\Delta t} \langle \mathcal{D}_e^{n,1}\mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle + \nu(\text{grad } \mathbf{u}^{n+1}, \text{grad } \mathbf{w}), \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{H}^1(\Omega), \quad (4.8)$$

$$\langle \mathcal{F}^n, \mathbf{w} \rangle := (\mathbf{f}^{n+1}, \mathbf{w}), \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{H}^1(\Omega). \quad (4.9)$$

Si $\mathbf{w} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ definimos el operador $\mathcal{B}\mathbf{w} \in L^2(\Omega)$ de la forma

$$\langle \mathcal{B}\mathbf{w}, q \rangle := -(\text{div}\mathbf{w}, q), \quad \forall q \in L^2(\Omega). \quad (4.10)$$

Utilizando estas notaciones podemos escribir los siguientes problemas semidiscretizados en tiempo:

- **Problema semidiscretizado BDF1:** Dadas $\mathbf{v}^0 \in \mathbf{W}$, $[f] \in (L^2(\Omega))^N$ encontrar $[\mathbf{v}] \in (\mathbf{H}_0^1(\Omega))^N$ y $[\pi] \in (L_0^2(\Omega))^N$ tales que

$$\langle \mathcal{A}^{n,1}\mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle + \langle \mathcal{B}\mathbf{w}, \pi^{n+1} \rangle = \langle \mathcal{F}^n, \mathbf{w} \rangle, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{H}_0^1(\Omega), \quad (4.11)$$

$$\langle \mathcal{B}\mathbf{v}^{n+1}, q \rangle = 0, \quad \forall q \in L_0^2(\Omega), \quad (4.12)$$

para todo $n \in \{1, \dots, N-1\}$.

- **Problema semidiscretizado BDF2:** Dadas $\mathbf{v}^0 \in \mathbf{W}$, $[f] \in (L^2(\Omega))^N$ encontrar $[\mathbf{v}] \in (\mathbf{H}_0^1(\Omega))^N$ y $[\pi] \in (L_0^2(\Omega))^N$ tales que

$$\langle \mathcal{A}^{1,1}\mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle + \langle \mathcal{B}\mathbf{w}, \pi^1 \rangle = \langle \mathcal{F}^1, \mathbf{w} \rangle, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{H}_0^1(\Omega), \quad (4.13)$$

$$\langle \mathcal{B}\mathbf{v}^1, q \rangle = 0, \quad \forall q \in L_0^2(\Omega), \quad (4.14)$$

para el primer paso de tiempo y

$$\langle \mathcal{A}^{n,2}\mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle + \langle \mathcal{B}\mathbf{w}, \pi^{n+1} \rangle = \langle \mathcal{F}^{n+1}, \mathbf{w} \rangle, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{H}_0^1(\Omega), \quad (4.15)$$

$$\langle \mathcal{B}\mathbf{v}^{n+1}, q \rangle = 0, \quad \forall q \in L_0^2(\Omega), \quad (4.16)$$

para $n \in \{2, \dots, N-1\}$.

4.4. Discretización espacial: método de elementos finitos

Consideramos una triangulación del espacio regular y cuasi-uniforme de tamaño característico h , que denotaremos por Ω_h , formada por N_e simplices de dimensión d . Por simplicidad supondremos que el dominio es poliédrico, así, para cada elemento de la triangulación, T_j , existirá una aplicación afín invertible F_j definida como vimos en (3.45).

Asociados a la partición Ω_h construimos los espacios de elementos finitos H^1 -conformes $\mathbf{V}_h \subset H^1(\Omega)$, $\mathbf{V}_{0h} = \mathbf{V}_h \cap \mathbf{H}_0^1(\Omega)$ y $M_h \subset L_0^2(\Omega)$. Aproximaremos los espacios \mathbf{V} y $L_0^2(\Omega)$ por los espacios de dimensión finita \mathbf{V}_{0h} y M_h , respectivamente.

Como ejemplos de espacios de elementos finitos V_h y M_h tenemos:

1. Elemento $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$ (Taylor-Hood): Se definen los espacios

$$\mathbf{V}_h = \{\mathbf{w}_h \in \mathbf{C}^0(\bar{\Omega}) : \mathbf{w}_h|_{T_j} \in \mathbf{P}_2(T_j), \forall T_j \in \Omega_h\}, \quad (4.17)$$

$$M_h = \{q_h \in C^0(\bar{\Omega}) : q_h|_{T_j} \in P_1(T_j), \forall T_j \in \Omega_h\} \cap L_0^2(\Omega), \quad (4.18)$$

siendo

$$\mathbf{P}_m(T_j) := \{\mathbf{p}|_{T_j} : \mathbf{p} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d \text{ polinomio de grado } \leq m\}, \quad (4.19)$$

$$P_m(T_j) := \{p|_{T_j} : p : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \text{ polinomio de grado } \leq m\}, \quad (4.20)$$

con $m \in \mathbb{N}$.

2. Elemento $\mathbb{P}_1 - \text{burbuja}/\mathbb{P}_1$ (MINI-elemento): La función burbuja se define en cada elemento T_j como

$$\phi_j(x) = (d+1)^d \prod_{i=1}^{d+1} \lambda_i^j(x), \quad (4.21)$$

siendo $\{\lambda_i^j(x)\}_{i=1}^{d+1}$ las coordenadas baricéntricas del punto x en el elemento. Si llamamos $\mathbf{P}_b(T_j)$ al espacio

$$\mathbf{P}_b(T_j) := \{\mathbf{p} : \mathbf{p} \in \mathbf{P}_1(T_j) \oplus \langle \phi_j \rangle^d\}, \quad (4.22)$$

podemos definir

$$\mathbf{V}_h = \{\mathbf{w}_h \in \mathbf{C}^0(\bar{\Omega}) : \mathbf{w}_h|_{T_j} \in \mathbf{P}_b(T_j), \forall T_j \in \Omega_h\}. \quad (4.23)$$

El espacio al que pertenecerán las presiones aproximadas será el dado en (4.18).

Los espacios \mathbf{V}_h y M_h que se elijan deben verificar las siguientes propiedades:

1. Condición inf-sup o de *Babuška-Brezzi* discreta: Existe una constante β tal que

$$\inf_{q_h \in M_h} \sup_{\mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{0h}} \frac{\langle \mathcal{B}\mathbf{w}_h, q_h \rangle}{\|\mathbf{w}_h\|_1 \|q_h\|_0} \geq \beta > 0. \quad (4.24)$$

2. Sea m el grado de los polinomios de \mathbf{V}_h y k un entero verificando $m \geq k \geq 1$, si $\mathbf{v} \in \mathbf{H}^{k+1}(\Omega) \cap \mathbf{H}_0^1(\Omega)$, entonces existe una constante positiva C_v independiente de h tal que

$$\inf_{\mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_{0h}} (\|\mathbf{v} - \mathbf{v}_h\|_0 + h\|\mathbf{v} - \mathbf{v}_h\|_1) \leq C_v h^{k+1} \|\mathbf{v}\|_{k+1}, \quad (4.25)$$

3. Sea l el grado de los polinomios de M_h y s un entero tal que $l \geq s \geq 1$, si $\pi \in H^{s+1}(\Omega) \cap L_0^2(\Omega)$, entonces existe una constante positiva C_p independiente de h tal que

$$\inf_{q_h \in M_h} (\|\pi - q_h\|_0 + h\|\pi - q_h\|_1) \leq C_p h^{s+1} \|\pi\|_{s+1}. \quad (4.26)$$

Nota 4.4.1. *Los espacios de elementos finitos que hemos utilizado como ejemplo (Taylor-Hood y MINI-elemento) verifican las tres propiedades que acabamos de ver (ver, por ejemplo, Ciarlet [32], Ern y Germond [40] o Parés [79]).*

En el capítulo anterior utilizábamos los métodos de características para las ecuaciones de convección-difusión-reacción y suponíamos conocidas la velocidad y las curvas características solución del Problema 3.30 en cada instante de tiempo t_{n+1} . Para las ecuaciones de Navier-Stokes esta hipótesis no es válida, pues la velocidad $\mathbf{v} \in C^0(\mathbf{H}_0^1(\Omega))$ es una incógnita. Esta velocidad es aproximada en cada instante de tiempo por una función $\mathbf{v}_h^{n+1} \in \mathbf{V}_{h0}$ entonces, la curva característica $\mathcal{X}(x, t_{n+1}; \cdot)$ se aproximará por $\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; \cdot)$ solución del problema de valor inicial

$$\begin{cases} \frac{d\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t)}{dt} = \mathbf{v}_h(\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t), t), \\ \mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1}) = x. \end{cases} \quad (4.27)$$

Como $\mathbf{v}_h \in l^\infty(\mathbf{V}_h)$, en el problema anterior $\mathbf{v}_h(\cdot, t)$ puede no existir si $t \notin \{t_0, \dots, t_N\}$; en este caso será una aproximación calculada generalmente con alguna fórmula de extrapolación utilizando algunos de los valores del conjunto $\{\mathbf{v}_h^m\}_{m=0}^n$. En nuestro caso, necesitamos calcular los puntos $\mathcal{X}_h^{n, n+1}(x)$ y $\mathcal{X}_h^{n-1, n+1}(x)$ y veremos cómo hacerlo en la siguiente sección.

El Problema 4.27 tiene solución y está será única siempre que $\mathbf{V}_h \subset \mathbf{C}^{0,1}(\bar{\Omega})$, propiedad que verifican los espacios de elementos finitos de Lagrange H^1 -conformes como los que acabamos de definir.

Utilizando las curvas características aproximadas \mathcal{X}_h podemos definir, para $[\mathbf{u}] \in (\mathbf{H}^1(\Omega))^N$, los operadores

$$\mathcal{D}_h^{n,1} \mathbf{u} := \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n \circ \mathcal{X}_h^{n, n+1}, \quad (4.28)$$

$$\mathcal{D}_h^{n,2} \mathbf{u} := \frac{1}{2} \left(3\mathbf{u}^{n+1} - 4\mathbf{u}^n \circ \mathcal{X}_h^{n, n+1} + \mathbf{u}^{n-1} \circ \mathcal{X}_h^{n-1, n+1} \right), \quad (4.29)$$

y $\mathcal{A}_h^{n,i} \mathbf{u} \in (\mathbf{H}^1(\Omega))'$, $i = 1, 2$ dados por

$$\langle \mathcal{A}_h^{n,i} \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle := \frac{1}{\Delta t} \langle \mathcal{D}_h^{n,i} \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle + \nu (\text{grad } \mathbf{u}^{n+1}, \text{grad } \mathbf{w}), \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{H}^1(\Omega). \quad (4.30)$$

Con estas notaciones podemos escribir los problemas totalmente discretizados:

Problema discretizado $(LG)_1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Sea } \mathbf{v}_h^0 = R_h \mathbf{v}^0 \in \mathbf{V}_{0h}, \text{ encontrar } [\mathbf{v}_h] \in (\mathbf{V}_{0h})^N \text{ y } [\pi] \in (M_h)^N \text{ tales que} \\ \langle \mathcal{A}_h^{n,1} \mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h \rangle + \langle \mathcal{B} \mathbf{w}_h, \pi_h^{n+1} \rangle = \langle \mathcal{F}^n, \mathbf{w}_h \rangle, \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{0h}, \\ \langle \mathcal{B} \mathbf{v}_h^{n+1}, q_h \rangle = 0, \forall q \in M_h, \\ \text{para todo } n \in \{1, \dots, N-1\}. \end{array} \right. \quad (4.31)$$

Problema discretizado $(LG)_2$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Sea } \mathbf{v}_h^0 = R_h \mathbf{v}^0 \in \mathbf{V}_{0h}, \text{ encontrar } [\mathbf{v}_h] \in (\mathbf{V}_{0h})^N \text{ y } [\pi] \in (M_h)^N \text{ tales que} \\ \langle \mathcal{A}_h^{1,1} \mathbf{v}_h^{n+1}, \mathbf{w}_h \rangle + \langle \mathcal{B} \mathbf{w}_h, \pi_h^1 \rangle = \langle \mathcal{F}^1, \mathbf{w} \rangle, \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{0h}, \\ \langle \mathcal{B} \mathbf{v}_h^1, q_h \rangle = 0, \forall q_h \in M_h, \\ \text{para el primer paso de tiempo y} \\ \langle \mathcal{A}_h^{n,2} \mathbf{v}_h^{n+1}, \mathbf{w}_h \rangle + \langle \mathcal{B} \mathbf{w}_h, \pi_h^{n+1} \rangle = \langle \mathcal{F}^{n+1}, \mathbf{w} \rangle, \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{0h}, \\ \langle \mathcal{B} \mathbf{v}_h^{n+1}, q_h \rangle = 0, \forall q_h \in M_h, \\ \text{para } n \in \{2, \dots, N-1\}. \end{array} \right. \quad (4.32)$$

4.5. Curvas características aproximadas

En esta sección describiremos los esquemas que utilizamos para calcular la solución del Problema 4.27 en $t = t_n$ y $t = t_{n-1}$, es decir, veremos cómo calcular los puntos $\mathcal{X}_h^{l,n+1}(x)$, con $l = n, n-1$. En algún ejemplo del Capítulo 3 se mencionaba que estos puntos se calculaban utilizando un esquema de Runge-Kutta de orden 4. El inconveniente de utilizar este método cuando se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes es que hay que extrapolar la velocidad en los instantes t_{n+1} y $t_{n+1/2}$. Para mantener la precisión del método, hay que usar fórmulas de extrapolación de, al menos, orden 4, lo que implica la necesidad de almacenar la velocidad en más de dos pasos de tiempo, que son los necesarios para los métodos que vamos a describir.

Los esquemas que veremos a continuación son los más eficientes, en nuestra experiencia, y tienen una precisión suficiente para mantener el orden de error de los métodos de Lagrange-Galerkin utilizados. El primero de ellos es de orden 1 y es el único de los propuestos válido para aproximar $\mathcal{X}_h^{0,1}(x)$ porque los otros métodos no se podrían utilizar, pues la velocidad no está definida en t_{-1} .

Consideramos los siguientes esquemas:

Esquema de Euler explícito de orden 1:

$$\mathcal{X}_E^{n,n+1}(x) = x - \Delta t \mathbf{v}_h^n(x), \quad (4.33)$$

$$\mathcal{X}_E^{n-1,n+1}(x) = x - 2\Delta t \mathbf{v}_h^n(x). \quad (4.34)$$

Esquema explícito de dos pasos de orden 2:

$$\mathcal{X}_{TS}^{n,n+1}(x) = x - \Delta t (2\mathbf{v}_h^n(x) - \mathbf{v}_h^{n-1}(x)), \quad (4.35)$$

$$\mathcal{X}_{TS}^{n-1,n+1}(x) = x - 2\Delta t (2\mathbf{v}_h^n(x) - \mathbf{v}_h^{n-1}(x)). \quad (4.36)$$

Esquema implícito multipaso de punto fijo de orden 2:

Este algoritmo fue inicialmente propuesto en Allievi y Bermejo [3] para un paso de tiempo fijo y modificado en Galán [47] con la introducción de un paso de tiempo que se modifica para obtener la convergencia del punto fijo. Por completitud vamos a describirlo aquí aunque para consultar resultados de existencia de solución y de orden de convergencia se puede recurrir a las referencias citadas.

Si $\mathbf{v} \in C^0(C^{0,1}(\overline{\Omega}))$ entonces el Problema 3.16 tiene solución única e integrando este problema en $[t_n, t_{n+1}]$ podemos escribir

$$x - \mathcal{X}^{n,n+1}(x) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; s), s) ds. \quad (4.37)$$

Si aproximamos la integral de esta expresión utilizando la regla del punto medio tenemos

$$x - \mathcal{X}^{n,n+1}(x) = \Delta t \mathbf{v}(\mathcal{X}(x, t_{n+1}; t_{n+1/2}), t_{n+1/2}) + O(\Delta t^3). \quad (4.38)$$

Si sustituimos en esta expresión \mathcal{X} por \mathcal{X}_h y \mathbf{v} por \mathbf{v}_h tenemos

$$x - \mathcal{X}_h^{n,n+1}(x) \approx \Delta t \mathbf{v}_h(\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1/2}), t_{n+1/2}). \quad (4.39)$$

Calculamos $\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1/2})$ de la forma

$$\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1/2}) = \frac{x + \mathcal{X}_h^{n,n+1}(x)}{2} + O(\Delta t^2) \quad (4.40)$$

y obtenemos $\mathbf{v}_h^{n+1/2}$ con la fórmula de Adams-Bashforth

$$\mathbf{v}_h^{n+1/2} = \frac{3}{2} \mathbf{v}_h^n - \frac{1}{2} \mathbf{v}_h^{n-1} + O(\Delta t^2). \quad (4.41)$$

De esta forma, el punto $\mathcal{X}_{PF}^{n,n+1}(x)$ que aproxima a $\mathcal{X}_h^{n,n+1}(x)$ se calcula como

$$\mathcal{X}_{PF}^{n,n+1}(x) = x - \alpha, \quad (4.42)$$

siendo α solución de la ecuación

$$\alpha = \Delta t \left(\frac{3}{2} \mathbf{v}_h^n - \frac{1}{2} \mathbf{v}_h^{n-1} \right) \left(x - \frac{\alpha}{2} \right). \quad (4.43)$$

Para resolver esta ecuación podemos utilizar el método de punto fijo definiendo el operador $G : \Omega \rightarrow \Omega$ como

$$G(\alpha) := \Delta t \left(\frac{3}{2} \mathbf{v}_h^n - \frac{1}{2} \mathbf{v}_h^{n-1} \right) \left(x - \frac{\alpha}{2} \right). \quad (4.44)$$

Para que el método de punto fijo converja a la solución α de la ecuación (4.43), el operador G debe ser contractivo, lo que sólo ocurre si el paso de tiempo es suficientemente pequeño.

La generalización de este algoritmo propuesta por Galán [47] consiste en dividir el paso de tiempo Δt por 2 hasta que el operador $G^m : \Omega \rightarrow \Omega$, definido como

$$G^m(\alpha) = \frac{\Delta t}{2^m} \left(\left(2 - \frac{1}{2^{m+1}} \right) \mathbf{v}_h^n - \left(1 - \frac{1}{2^{m+1}} \right) \mathbf{v}_h^{n-1} \right) \left(x - \frac{\alpha}{2} \right), \quad (4.45)$$

sea contractivo para algún $m \in \mathbb{N}$. Si utilizamos las aproximaciones de orden 2

$$\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-m-1}}) \approx \frac{1}{2}(x + \mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-m}})), \forall m \in \mathbb{N}, \quad (4.46)$$

$$\mathbf{v}_h^{n+1-2^{-m}} \approx \left(2 - \frac{1}{2^m}\right) \mathbf{v}_h^n - \left(1 - \frac{1}{2^m}\right) \mathbf{v}_h^{n-1}, \forall m \in \mathbb{N}, \quad (4.47)$$

se verifica que

$$x - \mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-m}}) \approx G^m(x - \mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-m}})). \quad (4.48)$$

Por lo tanto, si utilizamos un algoritmo iterativo de punto fijo para la ecuación $G^m(\alpha) = \alpha$, tenemos el punto

$$\mathcal{X}_{PF}(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-m}}) = x - \alpha. \quad (4.49)$$

A partir de este punto, podemos calcular

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_{PF}(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-i}}) = & x - 2^{-i} \Delta t (2 - 2^{-i-1}) \mathbf{v}_h^n(\mathcal{X}_{PF}(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-i-1}})) \\ & - 2^{-i} \Delta t (1 - 2^{-i-1}) \mathbf{v}_h^{n-1}(\mathcal{X}_{PF}(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-i-1}})), \end{aligned} \quad (4.50)$$

para $i = m - 1, m - 2, \dots, 0$. Como podemos observar, si $m = 0$ tenemos el esquema inicial.

Por lo tanto, para cada paso de tiempo t_{n+1} , el algoritmo que deberemos utilizar es:

- BUCLE $m = 1, \dots, M_{max}$
 1. Calculamos un punto fijo, α , para el operador G^m .
 2. Si converge hacemos $\mathcal{X}_{PF}(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-m}}) = x - \alpha$ y calculamos los puntos $\mathcal{X}_{PF}(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-i}})$ para $i = m - 1, m - 2, \dots, 0$, utilizando la fórmula (4.50) y acabamos.
- FIN BUCLE

El número M_{max} es el número máximo de refinamientos del paso de tiempo que permitimos.

Observación 4.5.1. *El método que acabamos de describir tiene la desventaja de que debemos evaluar las funciones \mathbf{v}_h^n y \mathbf{v}_h^{n-1} en los puntos obtenidos en cada iteración del algoritmo de punto fijo, para lo que será necesario conocer el tetraedro en el que se encuentra cada uno de estos puntos.*

Puede ocurrir que, debido a errores numéricos, en alguna iteración n del algoritmo de punto fijo $x - \frac{\alpha^n}{2} \notin \Omega$. Si suponemos que las velocidades \mathbf{v}_h^n y \mathbf{v}_h^{n-1} se pueden extender continuamente por cero, bastará con igualar las velocidades a cero en ese punto. Si considerásemos un problema con condiciones de contorno de tipo Dirichlet no homogéneas, es decir, $\mathbf{v}|_{\Gamma} = \mathbf{v}_d \neq \mathbf{0}$, habría que modificar el algoritmo propuesto para tener en cuenta la posibilidad de que los puntos calculados en alguna iteración salgan del dominio. Si estamos resolviendo un ejemplo test podemos usar la velocidad exacta conocida para sustituir los valores de \mathbf{v}_h^n y \mathbf{v}_h^{n-1} cuando sea necesario. En caso contrario, planteamos la siguiente modificación del algoritmo:

- BUCLE $m = 1, \dots, M_{max}$
 1. Calculamos un punto fijo del operador G^m dado por (4.45):
 - BUCLE $n = 1, \dots, N_{max}$
 - a) Buscamos α^n .
 - b) Si está fuera del dominio $m = m + 1$ y vamos al Paso 1. Si no hacemos $\alpha^{n+1} = G^m \alpha^n$.
 - c) Si $|\alpha^{n+1} - \alpha^n| < \epsilon$ vamos al Paso 3
 - FIN BUCLE n
 2. Hacemos $m = m + 1$ y vamos al Paso 1.
 3. Hacemos $\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-m}}) = x - \alpha$ y
 - BUCLE $i = m - 1, m - 2, \dots, 0$
 - a) Buscamos $\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-i+1}})$.
 - b) Si está fuera, $m = m + 1$ y vamos al Paso 1.
 - c) Calculamos $\mathcal{X}_h(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-i}})$ utilizando (4.50).
 - FIN BUCLE i
- FIN BUCLE m

Hay dos motivos por los que este algoritmo puede no converger: que, para todo $m \in \{0, \dots, M_{max}\}$ con el que encontramos un punto fijo de G^m , el punto $\mathcal{X}_{PF}(x, t_{n+1}; t_{n+1-2^{-m}})$ o los que se calculan a partir de él no estén en el dominio, o que el algoritmo de punto fijo nunca converja porque para todo m hay algún n tal que $\mathbf{x} - \frac{\alpha^n}{2} \notin \Omega$. En cualquiera de los casos, consideraremos que $\mathcal{X}_{PF}(x, t_{n+1}; t_n) \notin \Omega$.

Si $l = n - 1$ planteamos dos opciones: en primer lugar, utilizar la fórmula del punto medio y así

$$\mathcal{X}_{PF}^{n-1, n+1}(x) = x - 2\Delta t \mathbf{v}_h^n(\mathcal{X}_h^{n, n+1}(x)), \quad (4.51)$$

o, teniendo en cuenta que para las curvas características exactas se verifica $\mathcal{X}^{n-1, n+1}(x) = \mathcal{X}^{n-1, n}(\mathcal{X}^{n, n+1}(x))$, hacer

$$\mathcal{X}_{PF}^{n-1, n+1}(x) = \mathcal{X}_{PF}^{n-1, n}(\mathcal{X}_{PF}^{n, n+1}(x)), \quad (4.52)$$

donde el punto $\mathcal{X}_{PF}^{n-1, n}(\mathcal{X}_{PF}^{n, n+1}(x))$ se aproxima siguiendo los mismos pasos que vimos para obtener $\mathcal{X}_{PF}^{n, n+1}(x)$, teniendo en cuenta que para calcular los valores de la velocidad en $t \in (t_{n-1}, t_n)$ usamos fórmulas de interpolación de orden 2. Aunque esta última opción implica más coste computacional, la primera da lugar a errores mayores, según nuestra experiencia. Además, en los test numéricos que veremos en la Sección 4.7, en los que se estudia el comportamiento del error cuando la viscosidad se hace pequeña, las inestabilidades de los métodos aparecían para pasos de tiempos mayores con la primera opción.

Una vez aproximados los puntos $\mathcal{X}_h^{n, n+1}(x)$ y $\mathcal{X}_h^{n-1, n+1}(x)$, con cualquiera de los tres métodos, tendremos que calcular $\mathbf{v}_h^n(\mathcal{X}_h^{n, n+1}(x))$ y $\mathbf{v}_h^{n-1}(\mathcal{X}_h^{n-1, n+1}(x))$. El problema aparece si alguno de estos puntos aproximados está fuera del dominio algo que puede ocurrir

si no tenemos condiciones de Dirichlet homogéneas en toda la frontera o, incluso en caso contrario, debido a errores numéricos. Cuando esto ocurra aproximaremos $\mathbf{v}_h^n(\mathcal{X}_h^{n,n+1}(x))$ y $\mathbf{v}_h^{n-1}(\mathcal{X}_h^{n-1,n+1}(x))$ a partir de los valores de \mathbf{v}_h^n y \mathbf{v}_h^{n-1} , respectivamente, en la frontera por la que el punto ha abandonado el dominio.

Observación 4.5.2. *El algoritmo de búsqueda implementado (ver [2]) a partir de un elemento de la malla dado (que normalmente será en el que está el punto x) va recorriendo distintos elementos siguiendo la dirección del punto movido. Así, consideraremos que $\mathcal{X}_h^{n-l,n+1}(x)$, $l = 0, 1$, ha salido del dominio cuando, para salir del elemento en el que estamos, el algoritmo nos dice que hay que atravesar una cara o una arista de la frontera. De este modo, dependiendo del paso de tiempo y de la precisión del esquema numérico usado para aproximar \mathcal{X}_h , podemos saber con suficiente fiabilidad la cara o arista de la frontera por la que el punto ha abandonado el dominio.*

Observación 4.5.3. *Cuando utilizamos el esquema de punto fijo, cada vez que en una iteración el punto calculado sale del dominio, el paso de tiempo se divide por dos. Por este motivo, este algoritmo es mucho más preciso para aproximar la trayectoria de los puntos cercanos a las fronteras y, así, el número de puntos que abandonan debido a errores numéricos el dominio por las paredes o salidas, es mucho más pequeño que con los otros dos métodos.*

4.6. Métodos de Lagrange-Galerkin modificados

En esta sección veremos cómo aplicar los métodos de Lagrange-Galerkin modificados, descritos inicialmente para las ecuaciones de convección-difusión-reacción en la Sección 3.7, para la discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes. Recordemos que estos métodos son una modificación de los estándar que consiste en aproximar las curvas características \mathcal{X} por curvas características modificadas $\tilde{\mathcal{X}}$ definidas en (3.72). En el caso de un problema de Navier-Stokes las curvas características son aproximadas, \mathcal{X}_h , y tendremos que construir unas curvas características aproximadas modificadas, que denotaremos como $\tilde{\mathcal{X}}_h$.

En los métodos MLG para las ecuaciones de convección-difusión se consideraba una partición del dominio formada por los elementos $T_j^n = \mathcal{X}^{n,n+1}(T_j)$, $j \in \{1, \dots, N_e\}$, y, de forma análoga, podemos definir los elementos curvos

$$T_{hj}^{n,n+1} = \mathcal{X}_h^{n,n+1}(T_j), \quad 1 \leq j \leq N_e. \quad (4.53)$$

Por simplicidad, utilizaremos una única notación \mathcal{X}_h para las curvas características aproximadas, entendiéndolo que podemos haberlas aproximado con cualquiera de los métodos vistos en la sección anterior. Por el Lema 4.6.1, que veremos a continuación, se tiene que el conjunto de los elementos $T_{hj}^{n,n+1}$ forman una nueva partición del dominio que llamaremos Ω_h^{*n} . A partir de la aplicación $F_j : \hat{T} \rightarrow T_j$ definimos la aplicación casi-isométrica de clase $C^{0,1}$, $F_{hj}^{n,n+1} : \hat{T} \rightarrow T_j$, como

$$F_{hj}^{n,n+1}(\hat{x}) = \mathcal{X}_h^{n,n+1}(F_j(\hat{x})), \quad \forall \hat{x} \in \hat{T}. \quad (4.54)$$

Dado un elemento T_j podemos construir el simplex formado por los vértices movidos de éste, $\mathcal{X}_h^{n,n+1}(a_i^j)$, $i = 1, \dots, d + 1$, que denotaremos como $\tilde{T}_{hj}^{n,n+1}$. Estos elementos de caras

rectas forman una nueva triangulación del dominio (ver Lema 4.6.1) y, además, se verifica que, para cada $j \in \{1, \dots, N_e\}$, existe una única aplicación afín invertible

$$\tilde{F}_{hj}^{n,n+1} : \hat{T} \rightarrow \tilde{T}_{hj}^{n,n+1}, \quad (4.55)$$

definida como

$$\tilde{F}_{hj}^{n,n+1}(\hat{x}) = \tilde{B}_{hj}^{n,n+1}\hat{x} + \tilde{b}_{hj}^{n,n+1}, \quad (4.56)$$

siendo $\tilde{B}_{hj}^{n,n+1} \in \mathcal{M}_d(\mathbb{R}^d)$ y $\tilde{b}_{hj}^{n,n+1} \in \mathbb{R}^d$.

El simplex $\tilde{T}_{hj}^{n,n+1}$ es una aproximación lineal del elemento curvo T_{hj}^n y, por lo tanto,

$$\tilde{F}_{hj}^{n,n+1} = \hat{I}F_{hj}^{n,n+1}, \quad (4.57)$$

donde recordemos que \hat{I} es el interpolante lineal en el elemento de referencia \hat{T} .

Definición 4.6.1. Para cada instante de tiempo t_n , definimos la curva característica aproximada modificada como la función $\tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1} : \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}$ tal que

$$\tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1}(x) := (\tilde{F}_{hj}^{n,n+1} \circ F_j^{-1})(x), \quad \forall x \in T_j, \quad (4.58)$$

para cada T_j elemento de la triangulación Ω_h con $1 \leq j \leq N_e$ y siendo $\tilde{F}_{hj}^{n,n+1}$ la aplicación afín dada por (4.56).

Teniendo en cuenta la definición anterior es inmediato ver que se verifica

$$\tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1}(T_j) = \tilde{T}_{hj}^{n,n+1}. \quad (4.59)$$

Observación 4.6.1. Si suponemos que Ω es un polígono o un poliedro y que T_j es un “elemento de la frontera”¹, entonces $T_j^{n,n+1}$, $\tilde{T}_j^{n,n+1}$, $T_{hj}^{n,n+1}$ y $\tilde{T}_{hj}^{n,n+1}$ son también “elementos de la frontera”. En particular, dado que la velocidad en la frontera es nula, si $\Gamma_j := T_j \cap \Gamma$, se verifica que

$$T_j \cap \Gamma = T_{hj}^{n,n+1} \cap \Gamma = \tilde{T}_{hj}^{n,n+1} \cap \Gamma = \Gamma_j,$$

y

$$\bigcup_{1 \leq j \leq N_e} T_{hj}^{n,n+1} = \bigcup_{1 \leq j \leq N_e} \tilde{T}_{hj}^{n,n+1} = \bar{\Omega}$$

Los métodos de Lagrange-Galerkin modificados consisten en utilizar las curvas $\tilde{\mathcal{X}}_h$ en lugar de \mathcal{X}_h y así, las integrales $(\mathbf{v}_h^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1}, \mathbf{w}_h)$ se aproximan en cada tetraedro T_j de la forma

$$\int_{T_j} (\mathbf{v}_h^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1})(x) \cdot \mathbf{w}_h(x) dx \approx \int_{T_j} (\mathbf{v}_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1})(x) \cdot \mathbf{w}_h(x) dx. \quad (4.60)$$

Como es habitual en los métodos de elementos finitos, para calcular una integral en un tetraedro T_j usamos la aplicación afín F_j para hacer un cambio de variable y hacer la integral sobre \hat{T} . De esta forma, si suponemos que $\mathbf{w}_h = \hat{\mathbf{p}}_k^j$, $k \in \{1, \dots, N_n\}$, se tiene

$$\int_{T_j} (\mathbf{v}_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1})(x) \cdot \hat{\mathbf{p}}_k^j(x) dx = \int_{\hat{T}} |\det B_j| (\mathbf{v}_h^n \circ \tilde{F}_{hj}^{n,n+1})(\hat{x}) \cdot \hat{\mathbf{p}}_k(\hat{x}) d\hat{x}. \quad (4.61)$$

¹Decimos que $T \in \Omega_h$ es un elemento de la frontera, si al menos una de sus caras es un subconjunto de la frontera del dominio Γ .

El cálculo de estas integrales sobre el elemento de referencia suele hacerse mediante una fórmula de cuadratura de alto orden, con el fin de mantener la estabilidad y la precisión que tendría el método si estas integrales se pudiesen calcular de forma exacta. Por lo tanto,

$$\int_{\widehat{T}} |\det B_j| (\mathbf{v}_h^n \circ \widetilde{F}_{hj}^{n,n+1})(\widehat{x}) \cdot \mathbf{p}_k(\widehat{x}) d\widehat{x} \approx \mu(\widehat{T}) |\det B_j| \sum_{s=1}^{N_q} w_s (\mathbf{v}_h^n \circ \widetilde{F}_{hj}^{n,n+1})(\widehat{x}_s) \cdot \widehat{\mathbf{p}}_k(\widehat{x}_s), \quad (4.62)$$

siendo $\{w_s\}_{s=1}^{N_q}$ y $\{\widehat{x}_s\}_{s=1}^{N_q}$ los pesos y nodos, respectivamente, de la fórmula de cuadratura para la integración sobre el simplex \widehat{T} .

Veamos ahora cómo calcular los valores $\mathbf{v}_h^n(\widetilde{F}_{hj}^{n,n+1}(\widehat{x}_s))$. Dado que $\mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_h$ se tiene

$$\mathbf{v}_{h|T_j}^n(x) = \sum_{i=1}^{N_n} \mathbf{U}_{i(j)}^n \mathbf{p}_i^j(x), \quad \forall x \in \Omega, \quad (4.63)$$

siendo \mathbf{p}_i^j los polinomios de base del espacio $\mathbf{P}(T_j)$ y $\mathbf{U}^n \in \mathbb{R}^{N_{ng}}$ son los coeficientes de \mathbf{v}_h^n en la base de \mathbf{V}_h e $i(j)$ el índice global del nodo i del tetraedro T_j . Así, tenemos que

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_h^n(\widetilde{F}_{hj}^{n,n+1}(\widehat{x}_s)) &= \mathbf{v}_h^n(\widetilde{\mathcal{X}}_{hj}^{n,n+1}(x_s)) = \sum_{i=1}^{N_n} U_{i(l(s))}^n \mathbf{p}_i^{l(s)}(\widetilde{\mathcal{X}}_{hj}^{n,n+1}(x_s)) \\ &= \sum_{i=1}^{N_n} U_{i(l(s))}^n \widehat{\mathbf{p}}_i(F_{l(s)}^{-1}(\widetilde{\mathcal{X}}_{hj}^{n,n+1}(x_s))), \end{aligned} \quad (4.64)$$

donde hemos denotado por $l(s)$ el índice del tetraedro en el que se encuentra el punto $\widetilde{\mathcal{X}}_{hj}^{n,n+1}(x_s)$.

Entonces, teniendo en cuenta (4.61) y sustituyendo la expresión (4.64) en (4.62), llegamos a

$$\begin{aligned} &\int_{T_j} (\mathbf{v}_h^n \circ \widetilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1})(x) \cdot \mathbf{p}_k(x) dx \\ &\approx \mu(T_j) \sum_{s=1}^{N_q} w_s \left(\sum_{i=1}^{N_n} U_{i(l(s))}^n \widehat{\mathbf{p}}_i(F_{l(s)}^{-1}(\widetilde{F}_{hj}^{n,n+1}(\widehat{x}_s))) \right) \cdot \widehat{\mathbf{p}}_k(\widehat{x}_s) \\ &= \mu(T_j) \sum_{s=1}^{N_q} w_s \left[\sum_{i=1}^{N_n} U_{i(l(s))}^n (\mathbf{p}_i \circ F_{l(s)}^{-1}) \left(\widetilde{\mathbf{B}}_{hj}^{n,n+1} \widehat{x}_s + b_{hj}^{n,n+1} \right) \right] \cdot \widehat{\mathbf{p}}_k(\widehat{x}_s), \end{aligned} \quad (4.65)$$

donde la matriz $\widetilde{\mathbf{B}}_{hj}^{n,n+1}$ se puede calcular de la forma

$$\left(\mathcal{X}_h^{n,n+1}(a_1^j) - \mathcal{X}_h^{n,n+1}(a_{d+1}^j) \mid \dots \mid \mathcal{X}_h^{n,n+1}(a_d^j) - \mathcal{X}_h^{n,n+1}(a_{d+1}^j) \right) \quad (4.66)$$

y el punto $b_{hj}^{n,n+1} = \mathcal{X}_h^{n,n+1}(a_{d+1}^j)$.

Nota 4.6.1. Para el método de orden 2 debemos calcular además las integrales $(\mathbf{v}_h^{n-1} \circ \widetilde{\mathcal{X}}_h^{n-1,n+1}, \mathbf{w}_h)$, donde las curvas modificadas $\widetilde{\mathcal{X}}_h^{n-1,n+1}$ se calculan de la misma forma que $\widetilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1}$. Así,

$$\begin{cases} \widetilde{\mathcal{X}}_h^{n-1,n+1} : \overline{\Omega} \rightarrow \overline{\Omega} \\ \widetilde{\mathcal{X}}_h^{n-1,n+1}(x) := (\widetilde{F}_{hj}^{n-1,n+1} \circ F_j^{-1})(x), \quad \forall x \in T_j, \quad 1 \leq j \leq N_e, \end{cases} \quad (4.67)$$

siendo $\tilde{F}_{hj}^{n-1,n+1} : \hat{T} \rightarrow \tilde{T}_{hj}^{n-1,n+1}$, la aplicación afín dada por

$$\tilde{F}_{hj}^{n-1,n+1} = \hat{I}(\mathcal{X}_h^{n-1,n+1} \circ F_j).$$

y siendo $\tilde{T}_{hj}^{n-1,n+1}$ el simplex formado por los vértices $\mathcal{X}_h^{n-1,n+1}(a_1^j), \dots, \mathcal{X}_h^{n-1,n+1}(a_{d+1}^j)$.

El algoritmo para el cálculo de estas integrales seguiría los mismos pasos que el visto en la Sección 3.7 para ecuaciones de convección-difusión-reacción. Así, como ocurría en ese caso, para calcular las integrales $(\mathbf{v}_h^n \circ \tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1}, \mathbf{w}_h)$ y $(\mathbf{v}_h^{n-1} \circ \tilde{\mathcal{X}}_h^{n-1,n+1}, \mathbf{w}_h)$, si utilizamos el método de orden 2 en tiempo, se necesita calcular el pie de las características sólo de los vértices de la malla; es decir, $\mathcal{X}_h^{n,n+1}(a_i)$ y $\mathcal{X}_h^{n-1,n+1}(a_i)$, con $1 \leq i \leq N_v$. Como vimos, en los métodos estándar hay que calcular el pie de los $N_e \times N_q$ nodos de cuadratura de la malla, que suelen ser muchos más que los vértices de la malla si la fórmula de cuadratura es de orden alto y más aún en problemas en 3D. Como el cálculo y localización de estos puntos movidos es una parte costosa de los métodos de Lagrange-Galerkin, los modificados serán más eficientes que los estándar, tal y como veremos en los resultados numéricos de la Sección 4.7.

Utilizando las curvas características modificadas $\tilde{\mathcal{X}}_h$ podemos definir, para $[\mathbf{u}] \in (\mathbf{H}^1(\Omega))^N$, los operadores

$$\tilde{\mathcal{D}}_h^{n,1} \mathbf{u} := \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n \circ \tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1}, \quad (4.68)$$

$$\tilde{\mathcal{D}}_h^{n,2} \mathbf{u} := \frac{1}{2} \left(3\mathbf{u}^{n+1} - 4\mathbf{u}^n \circ \tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1} + \mathbf{u}^{n-1} \circ \tilde{\mathcal{X}}_h^{n-1,n+1} \right), \quad (4.69)$$

y $\tilde{\mathcal{A}}_h^{n,i} \mathbf{u} \in (\mathbf{H}^1(\Omega))'$, $i = 1, 2$ dados por

$$\langle \tilde{\mathcal{A}}_h^{n,i} \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle := \frac{1}{\Delta t} \langle \tilde{\mathcal{D}}_h^{n,1} \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle + \nu (\text{grad } \mathbf{u}^{n+1}, \text{grad } \mathbf{w}), \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{H}^1(\Omega). \quad (4.70)$$

Con estas notaciones podemos escribir los problemas totalmente discretizados:

Problema discretizado (MLG)₁:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Sea } \mathbf{v}_h^0 = R_h \mathbf{v}^0 \in \mathbf{V}_{0h}, \text{ encontrar } [\mathbf{v}_h] \in (\mathbf{V}_{0h})^N \text{ y } [\pi] \in (M_h)^N \text{ tales que} \\ \langle \tilde{\mathcal{A}}_h^{n,1} \mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h \rangle + \langle \mathcal{B} \mathbf{w}_h, \pi_h^{n+1} \rangle = \langle \mathcal{F}^n, \mathbf{w}_h \rangle, \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{0h}, \\ \langle \mathcal{B} \mathbf{v}_h^{n+1}, q_h \rangle = 0, \forall q_h \in M_h, \\ \text{para todo } n \in \{1, \dots, N-1\}. \end{array} \right. \quad (4.71)$$

Problema discretizado (MLG)₂:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Sea } \mathbf{v}_h^0 = R_h \mathbf{v}^0 \in \mathbf{V}_{0h}, \text{ encontrar } [\mathbf{v}_h] \in (\mathbf{V}_{0h})^N \text{ y } [\pi] \in (M_h)^N \text{ tales que} \\ \langle \tilde{\mathcal{A}}_h^{1,1} \mathbf{v}_h^{n+1}, \mathbf{w}_h \rangle + \langle \mathcal{B} \mathbf{w}_h, \pi_h^1 \rangle = \langle \mathcal{F}^1, \mathbf{w} \rangle, \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{0h}, \\ \langle \mathcal{B} \mathbf{v}_h^1, q_h \rangle = 0, \forall q_h \in M_h, \\ \text{para el primer paso de tiempo y} \\ \langle \tilde{\mathcal{A}}_h^{n,2} \mathbf{v}_h^{n+1}, \mathbf{w}_h \rangle + \langle \mathcal{B} \mathbf{w}_h, \pi_h^{n+1} \rangle = \langle \mathcal{F}^{n+1}, \mathbf{w} \rangle, \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{0h}, \\ \langle \mathcal{B} \mathbf{v}_h^{n+1}, q_h \rangle = 0, \forall q_h \in M_h, \\ \text{para } n \in \{2, \dots, N-1\}. \end{array} \right. \quad (4.72)$$

El siguiente resultado indica que los métodos modificados están bien definidos.

Lema 4.6.1. *Si Ω es un dominio poligonal o poliédrico, Δt y h son suficientemente pequeños y $n \in \{0, \dots, N - 1\}$, entonces se verifican las siguientes afirmaciones:*

1. La aplicación $\mathcal{X}_h^{n,n+1} : \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}$ es un homeomorfismo cuasi-isométrico.
2. La función $F_{hj} : \hat{T} \rightarrow T_{hj}^{n,n+1}$ es de clase $C^{0,1}(\Omega)$.
3. La aplicación $\tilde{\mathcal{X}}_h^{n,n+1} : \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}$ es un homeomorfismo cuasi-isométrico.

Este resultado, así como otros relativos al orden de convergencia de estos métodos aparecerán en el artículo Bermejo *et al* [15]. En este artículo se prueba que, bajo ciertas condiciones de regularidad, suponiendo Δt y h suficientemente pequeños y usando un método de orden mayor que 2 para el cálculo de las trayectorias de los puntos de la malla, el orden de convergencia del método $(MLG)_2$ es de la forma

$$\|[\mathbf{v}] - [\mathbf{v}_h]\|_{l^\infty(\mathbf{L}^2(\Omega))} \leq C_v \left(h^{m+1} + h^2 + \Delta t^2 + \min\left(\frac{K\Delta t}{\sqrt{\epsilon\nu}}, \frac{K\Delta t}{h}, 1\right) \frac{h^{m+1}}{\Delta t} \right), \quad (4.73)$$

$$\|[\pi] - [\pi_h]\|_{l^2(L^2(\Omega))} \leq C_p \left(h^l + h^2 + \Delta t^2 + \min\left(\frac{K\Delta t}{\sqrt{\epsilon\nu}}, \frac{K\Delta t}{h}, 1\right) \frac{h^{l+1}}{\Delta t} \right), \quad (4.74)$$

siendo $\epsilon = \epsilon(T)$, $K = \|\mathbf{v}\|_{C^0(L^\infty(\Omega))}$ y C_v y C_p dos constantes positivas que dependen de T , ν^{-1} y de distintas normas de \mathbf{v} y π .

4.7. Resultados numéricos

En esta sección vamos a mostrar los resultados obtenidos con los métodos de Lagrange-Galerkin modificados para algunos problemas de Navier-Stokes en dominios bidimensionales y tridimensionales. En primer lugar, resolveremos un test académico bidimensional con solución exacta conocida con el que comprobaremos los órdenes de convergencia de los métodos $(MLG)_1$ y $(MLG)_2$ con los elementos finitos \mathbb{P}_1 -burbuja/ \mathbb{P}_1 y $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$, para diferentes valores de la viscosidad. Además, estudiaremos la estabilidad de estos métodos en función de la fórmula de cuadratura empleada para la aproximación de las integrales que no pueden ser calculadas de forma exacta.

Para el caso tridimensional, hemos diseñado un test no lineal para analizar el orden de error de estos métodos y su comportamiento cuando disminuimos la viscosidad del problema. Hemos optado por un test propio por la dificultad de encontrar en la literatura un test de referencia con solución analítica conocida para validar métodos en dominios tridimensionales. Para la discretización de los problemas tridimensionales utilizaremos el elemento finito \mathbb{P}_1 -burbuja/ \mathbb{P}_1 .

Por último, mostraremos los resultados obtenidos con el método $(MLG)_2$ para el problema de referencia del flujo alrededor de un cilindro. Compararemos los coeficientes aerodinámicos calculados con los que aparecen en la literatura y con los que calculamos utilizando

el código comercial FLUENT. Estos coeficientes de arrastre y sustentación se pueden calcular de dos formas distintas que serán válidas sobre cualquier superficie.

4.7.1. Integración numérica

En los métodos de Lagrange-Galerkin modificados hay que calcular, usando fórmulas de cuadratura, las integrales

$$\int_{\Omega} \left(\mathbf{v}_h^n \circ \tilde{\chi}_h^{n,n+1} \right) (x) \cdot \mathbf{p}_k(x) dx, \quad \int_{\Omega} \left(\mathbf{v}_h^{n-1} \circ \tilde{\chi}_h^{n-1,n+1} \right) (x) \cdot \mathbf{p}_k(x) dx, \quad \forall k \in \{1, \dots, N_{ng}\},$$

en cada instante de tiempo. Para los test que vamos a mostrar a continuación hemos utilizado fórmulas de cuadratura de tipo Gauss-Legendre. Para el caso bidimensional consideraremos fórmulas de orden 4, 10 y 14 con 6, 25 y 42 nodos de cuadratura, respectivamente, y para para aproximar las integrales sobre tetraedros usaremos una fórmula que integra exactamente polinomios de hasta grado 6 con 24 nodos. Para el resto de las integrales utilizamos la fórmula

$$\int_T \lambda_1^{\alpha_1} \dots \lambda_{d+1}^{\alpha_{d+1}} dx = \frac{\alpha_1! \dots \alpha_{d+1}! d!}{(\alpha_1 + \dots + \alpha_{d+1} + d)!} \mu(T), \quad (4.75)$$

para la integración exacta de las funciones de base sobre triángulos ($d=2$) y tetraedros ($d=3$).

Al igual que ocurría para los problemas de convección-difusión-reacción, el uso de fórmulas de cuadratura puede hacer perder la estabilidad incondicional de los métodos. Por esto, es necesario utilizar fórmulas de cuadratura de alto orden.

Para reducir el tiempo de cálculo en problemas tridimensionales, en Parés [79] se propone el uso de fórmulas de cuadratura menos exactas. Como esta opción da esquemas inestables, en [79] se considera la utilizar la descomposición

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\mathbf{v}_h^n \circ \tilde{\chi}_h^{n,n+1} \right) (x) \cdot \mathbf{p}_k(x) dx &= \int_{\Omega} \left(\left(\mathbf{v}_h^n \circ \tilde{\chi}_h^{n,n+1} \right) (x) - \mathbf{v}_h^n(x) \right) \cdot \mathbf{p}_k(x) dx \\ &+ \int_{\Omega} \mathbf{v}_h^n(x) \cdot \mathbf{p}_k(x) dx, \end{aligned} \quad (4.76)$$

en la cual la primera integral de la derecha se calcula usando una fórmula de cuadratura y la segunda de forma exacta. Esta descomposición permite mantener la estabilidad en muchos casos. El uso de los métodos MLG permite considerar fórmulas de cuadratura de alto orden con bajo coste computacional con la ventaja de que los errores obtenidos son más pequeños que con la descomposición (4.76), como mostraremos más adelante en alguno de los ejemplos.

Observación 4.7.1. Si en la expresión (4.76) usamos fórmulas que integran de forma exacta polinomios de grado 4, el resultado será igual a usar esa fórmula en la integral de la izquierda de la igualdad. En el caso de que las integrales no incluyan al polinomio burbuja bastará con que la fórmula sea de orden 2.

En los test que veremos a continuación, calcularemos los errores para la velocidad y la

presión como

$$Err_{\mathbf{v}} = \|\mathbf{v} - \mathbf{v}_h\|_{l^2(\mathbf{L}_h^2(\Omega))} := \left\{ \Delta t \sum_{n=1}^N \|\mathbf{v}^n - \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}_h^2(\Omega)}^2 \right\}^{1/2}, \quad (4.77)$$

$$Err_p = \|p - p_h\|_{l^2(L_h^2(\Omega))} := \left\{ \Delta t \sum_{n=1}^N \|p^n - p_h^n\|_{L_h^2(\Omega)}^2 \right\}^{1/2}, \quad (4.78)$$

donde estamos utilizando una aproximación de las normas $\|\cdot\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}$ y $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$ mediante integración numérica, de la misma forma que lo hicimos en la Sección 3.9.2. Para que el error cometido en esta aproximación sea pequeño, vamos a utilizar la fórmula de orden 14, en el caso bidimensional, y una fórmula de cuadratura de tipo Gauss-Legendre que integra de forma exacta polinomios de hasta grado 8, para los problemas en tres dimensiones.

4.7.2. Un test académico bidimensional

Para comprobar el orden de error de nuestros métodos vamos a realizar el test propuesto en Notsu y Tabata [78]. Consideramos el dominio $\Omega = (0, 1)^2$, el intervalo temporal $[0, 1]$ y tres valores diferentes para la viscosidad,

$$\nu = 1, \quad \nu = 10^{-2}, \quad \nu = 10^{-4}.$$

Imponemos la condición inicial y condiciones de contorno Dirichlet adecuadas y elegimos el segundo miembro de forma que la solución exacta del problema (4.1), $(\mathbf{v}, p)^2$, sea

$$v_1(x, t) = (1 + \sin(\pi t)) \sin^2(\pi x_1) \sin(2\pi x_2), \quad (4.79)$$

$$v_2(x, t) = (1 + \sin(\pi t)) \sin^2(\pi x_2) \sin(2\pi x_1), \quad (4.80)$$

$$p(x, t) = (1 + \sin(\pi t)) \cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2). \quad (4.81)$$

Para la discretización espacial usamos mallas estructuradas, cuyas características podemos ver en la Tabla 4.1 y utilizaremos dos tipos de elementos finitos, \mathbb{P}_1 -burbuja/ \mathbb{P}_1 y $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$. Estudiaremos la convergencia de los métodos $(MLG)_1$ y $(MLG)_2$ con cada uno de los elementos y veremos como se obtienen los órdenes de error que predice el análisis teórico.

Malla	Elementos	Vértices	Nodos	h
1	128	81	289	1/8
2	512	289	1089	1/16
3	2048	1089	4225	1/32
4	8192	4225	16641	1/64
5	32768	16641	66049	1/128

Tabla 4.1: Mallas utilizadas para el test 2D

²En esta sección utilizaremos la notación p para la presión para distinguirla del número π .

Para tener la unicidad de la presión y además obtener un mejor condicionamiento del sistema lineal, sobre todo en el caso del elemento $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$, vamos a utilizar el método descrito en Gunzburger [51]. Este método consiste en la resolución del siguiente sistema iterativo

1. Hacemos $P^0 = 0$
2. Resolvemos hasta convergencia:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B}^t \\ \mathcal{B} & \mathcal{C} - \epsilon I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{U}^{l+1} \\ \widehat{P}^{l+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{S}_v^{n+1} \\ \mathcal{S}_p^{n+1} - \epsilon \widehat{P}^l \end{pmatrix}, l = 1, 2, \dots \quad (4.82)$$

3. Hacemos $P^{n+1} = \widehat{P}^{l+1}$ y $U^{n+1} = \widehat{U}^{l+1}$.

En el Apéndice A podemos ver la implementación detallada del método $(LG)_1$ utilizando el elemento \mathbb{P}_1 -burbuja/ \mathbb{P}_1 y, en particular, la obtención de la matriz \mathcal{C} a partir de la eliminación de los grados de libertad relativos a las burbujas. Para el elemento de Taylor-Hood la implementación sería similar pero la matriz \mathcal{C} sería nula y, en este test, también desaparecería el segundo miembro relativo a la presión. En [51] se afirma que la sucesión U^l definida en el paso 2 del algoritmo converge a la solución U^{n+1} del problema discreto de la forma

$$\|U^{n+1} - \widehat{U}^{l+1}\|_0 \leq C\epsilon \|U^{n+1} - \widehat{U}^l\|_0,$$

siendo C una constante positiva. Por lo tanto, la convergencia del algoritmo será más rápida cuanto más pequeño sea el valor de ϵ . En este problema, tomamos $\epsilon = 10^{-8}$, porque la matriz sigue estando bien condicionada para ese valor y el algoritmo propuesto converge en 3 o 4 iteraciones, dependiendo de la malla que estemos considerando.

Para la aproximación de las curvas características hemos usado el método explícito de orden 2 de dos pasos, propuesto en la Sección 4.5. Salvo que se indique lo contrario, la fórmula de cuadratura utilizada en todos los cálculos es la de orden 10.

En primer lugar mostraremos los resultados obtenidos con el elemento $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$ de Taylor-Hood. En la Figura 4.1 representamos los errores obtenidos con el método $(MLG)_2$, fijado el paso temporal $\Delta t = 10^{-5}$ y variando la malla espacial, para cada uno de los valores de la viscosidad considerados. Para este elemento finito, la teoría predice un orden espacial de 2 o 3 para la velocidad y de 1 o 2 para la presión, como se puede ver en (4.73) y (4.74), respectivamente. En esas ecuaciones se puede ver que el orden del error que se tiene en cada caso depende de ciertas relaciones entre la viscosidad, el tamaño de la malla y la velocidad media del problema. En la Figura 4.1 podemos ver que el orden de error de la velocidad es $O(h^3)$ cuando $\nu = 1$ y $O(h^2)$ cuando $\nu = 10^{-2}$ y que si la viscosidad es 10^{-4} el orden es 2 o 3 dependiendo del tamaño de la malla. Por otro lado, para la presión se observa un orden $O(h^2)$ independientemente del valor que tome la viscosidad.

En la Figura 4.2 representamos los errores obtenidos para la velocidad fijando la malla espacial, $h = 1/128$, y variando el número de pasos de tiempo, para los distintos valores de ν . En esta figura podemos ver los errores para los métodos $(MLG)_1$ y $(MLG)_2$ cuando se usa una fórmula de cuadratura de orden 10 para calcular las integrales que involucran a las curvas características. Para los dos métodos se obtienen los órdenes esperados aunque, como podemos ver en la curva obtenida para $\nu = 10^{-4}$, el método de orden 2 es inestable

para pasos de tiempo pequeños. Para analizar la influencia de la integración numérica en la estabilidad del método $(MLG)_2$, hemos calculado las curvas de error temporal con diferentes fórmulas de cuadratura, para el caso $\nu = 10^{-4}$. En la Figura 4.3 podemos ver los errores obtenidos para la velocidad y para la presión. En ambos casos se observa que con la única fórmula de cuadratura que tenemos un método estable es con la de orden 14. Con las demás fórmulas existen ciertos pasos de tiempo donde el método se hace inestable, aunque vuelve a dar errores pequeños al incrementar suficientemente el número de divisiones temporales.

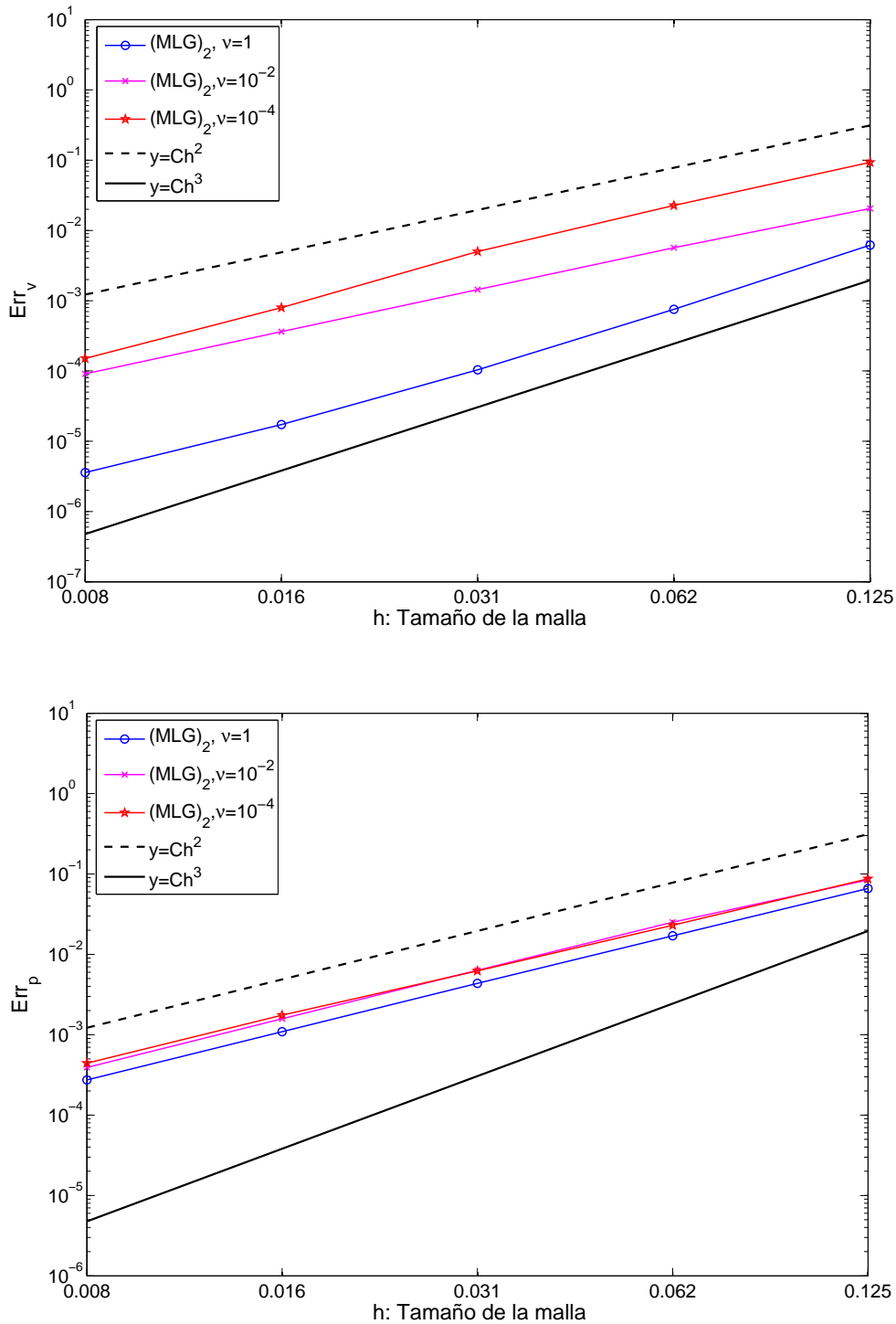


Figura 4.1: Errores en escala logarítmica para la velocidad (arriba) y para la presión (abajo) obtenidos con el elemento $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$. Fijamos el paso de tiempo, $\Delta t = 10^{-5}$, variamos el número de divisiones de la malla

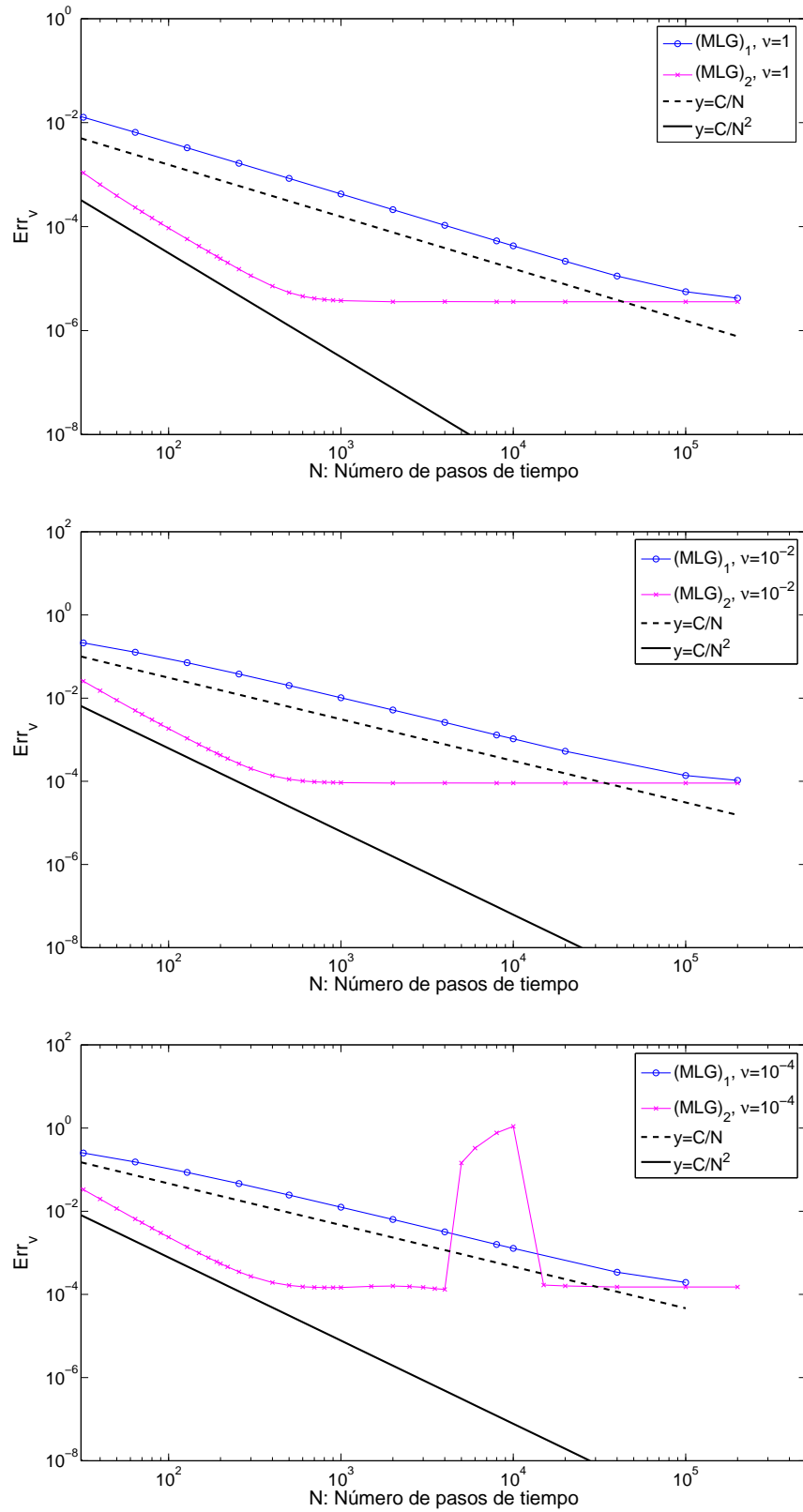


Figura 4.2: Error obtenido para la velocidad con el elemento $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$ para diferentes pasos de tiempo en escala logarítmica con $h = 1/128$

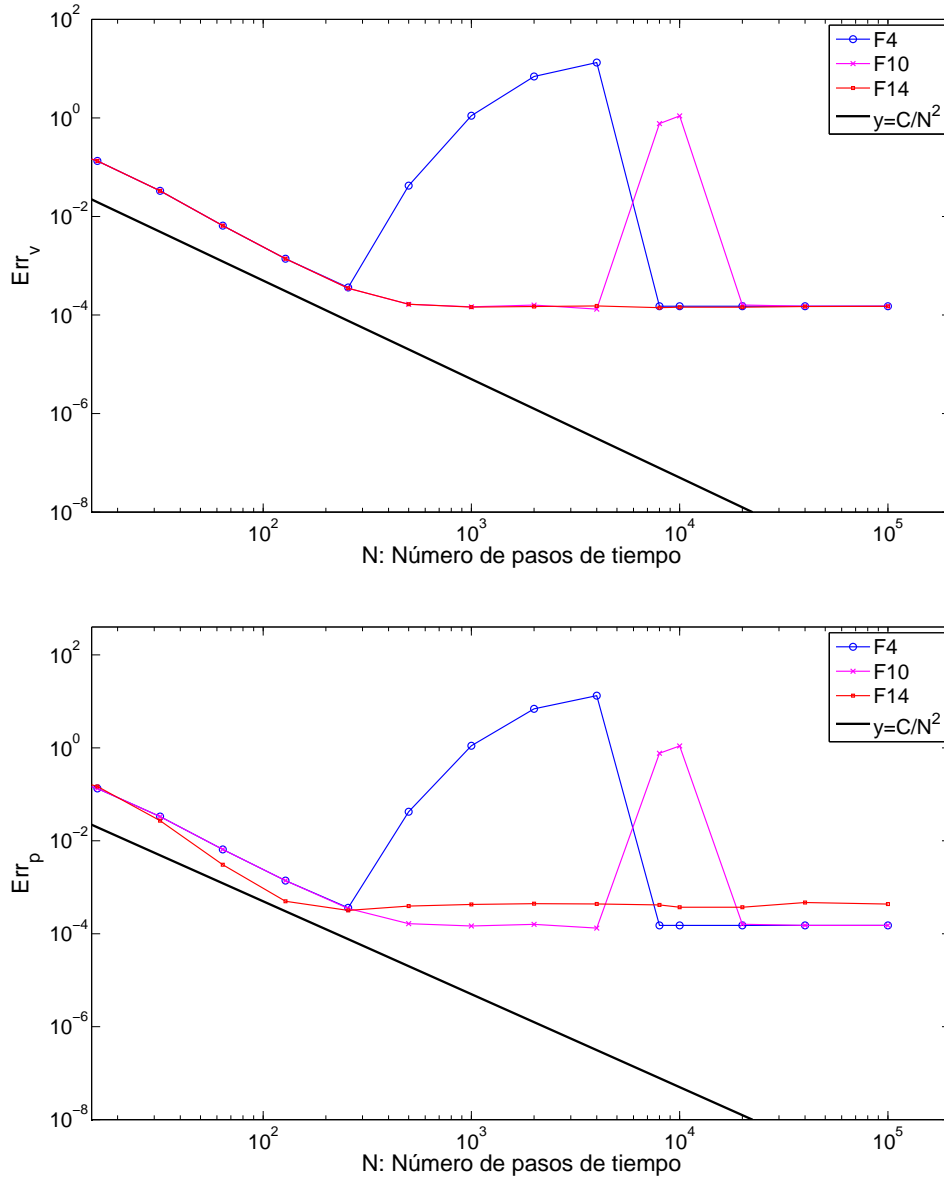


Figura 4.3: Errores en escala logarítmica obtenidos para la velocidad (arriba) y la presión (abajo) con el elemento $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$ para diferentes pasos de tiempo fijado $h = 1/128$

A continuación veremos los resultados calculados usando el MINI-elemento. En la Figura 4.4 podemos ver los errores Err_v y Err_p obtenidos con el método $(MLG)_2$ fijado el número de pasos de tiempo $N = 10^5$, con las distintas mallas, para cada uno de los valores de la viscosidad. Se puede observar que se tiene orden $O(h^2)$ tanto para la velocidad como para la presión, cuando $\nu = 1$ o $\nu = 10^{-2}$ y que el orden de error varía entre 1 y 2, para velocidad y presión, si $\nu = 10^{-4}$. Para este último valor, vemos que hay casos en los que el orden es incluso algo mayor que 2.

En la Figura 4.2 se pueden ver las curvas de error obtenidas para la velocidad fijando la malla espacial, $h = 1/128$, y variando el número de pasos de tiempo, para los distintos

valores de ν . Al igual que en el caso del elemento $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$ (Figura 4.2) se puede observar cómo el método se hace inestable para pasos de tiempo pequeños cuando la viscosidad disminuye. Al igual que en el caso anterior, comparamos la estabilidad del método con distintas fórmulas de cuadratura. Como muestra la Figura 4.6, cuanto mayor es el orden de la fórmula más estable es el método, aunque con todas las fórmulas tenemos inestabilidades para los pasos de tiempo más pequeños. Hemos probado a utilizar la descomposición dada en (4.76) junto con fórmulas de cuadratura de bajo orden como la de los vértices, para la malla de tamaño $h = 1/128$, con los distintos valores de la viscosidad. Si $\nu = 1$ el método es estable, pero los errores obtenidos son aproximadamente 4 veces mayores que si usamos la fórmula de orden 10. Además, si la viscosidad es más pequeña el método se hace inestable a partir de $\Delta t = 0.0625$, es decir, con pasos de tiempo mucho mayores que con las fórmulas de más alto orden. Por lo tanto, la única forma de que los métodos de Lagrange-Galerkin propuestos sean estables es utilizando fórmulas de cuadratura de alto orden, lo que hace necesario el uso de los métodos MLG con el fin de ahorrar tiempo de cálculo.

Además de que los errores son más pequeños con el elemento de Taylor-Hood, utilizando este elemento tenemos un método más estable para valores pequeños de la viscosidad. Sin embargo, el coste computacional es mucho mayor que si usamos el MINI-elemento, sobre todo en dominios tridimensionales. Por este motivo, este último elemento será el elegido para nuestro código de simulación 3D.

Por último, comparamos los métodos estándar y modificado de orden 2 en tiempo. En la Figura 4.7 podemos ver los errores Err_v y Err_p obtenidos con los dos métodos en diferentes mallas, fijando $N = 1000$, para el caso $\nu = 10^{-2}$. Los errores obtenidos con ambos métodos son similares pero, como veremos en la Sección 4.7.5, el ahorro de tiempo computacional es de aproximadamente un 45 % con todas las mallas.

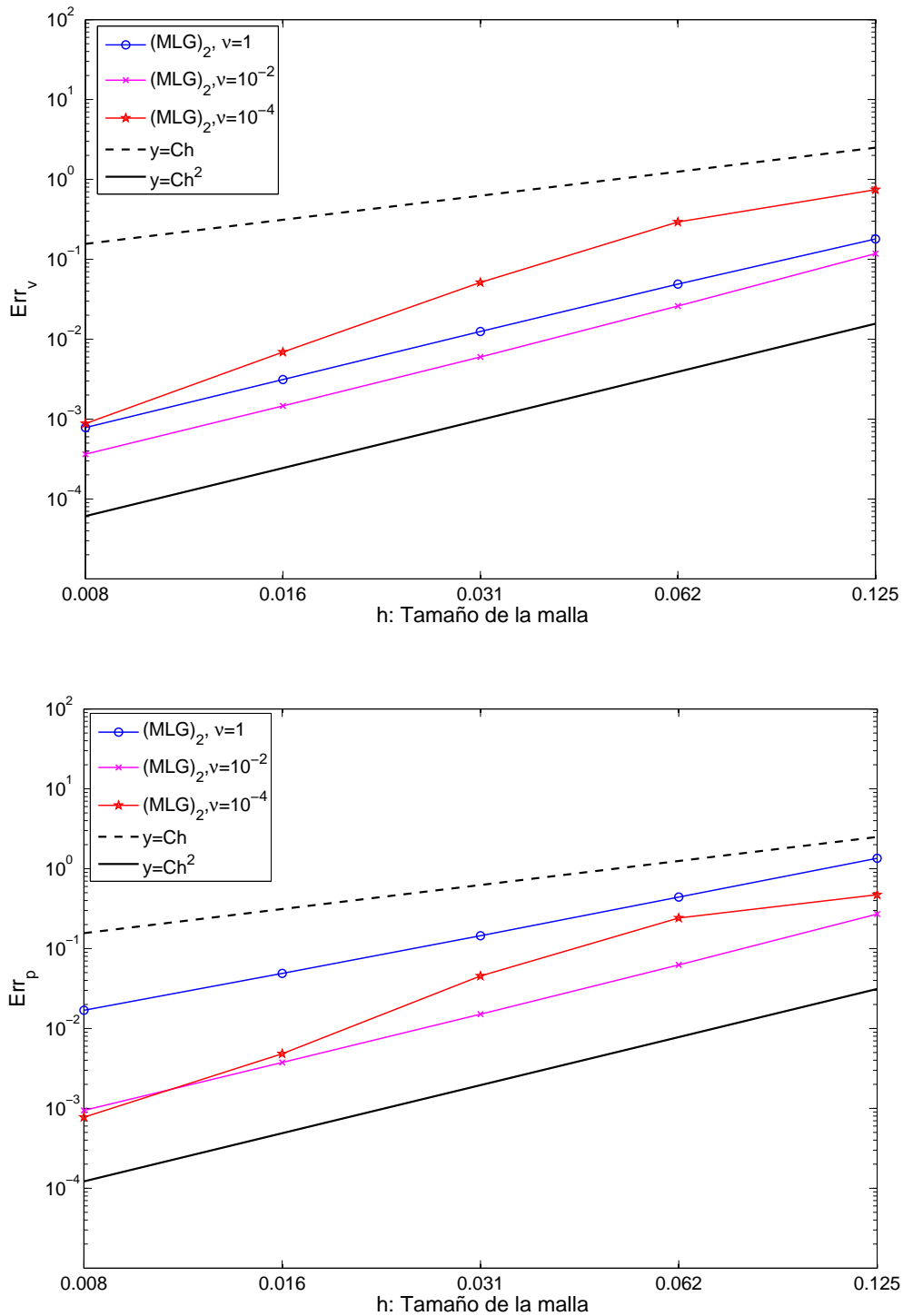


Figura 4.4: Errores en escala logarítmica para la velocidad (arriba) y para la presión (abajo) obtenidos con el elemento $\mathbb{P}_1 - burbuja / \mathbb{P}_1$. Fijamos el paso de tiempo, $\Delta t = 10^{-5}$, variamos el número de divisiones de la malla

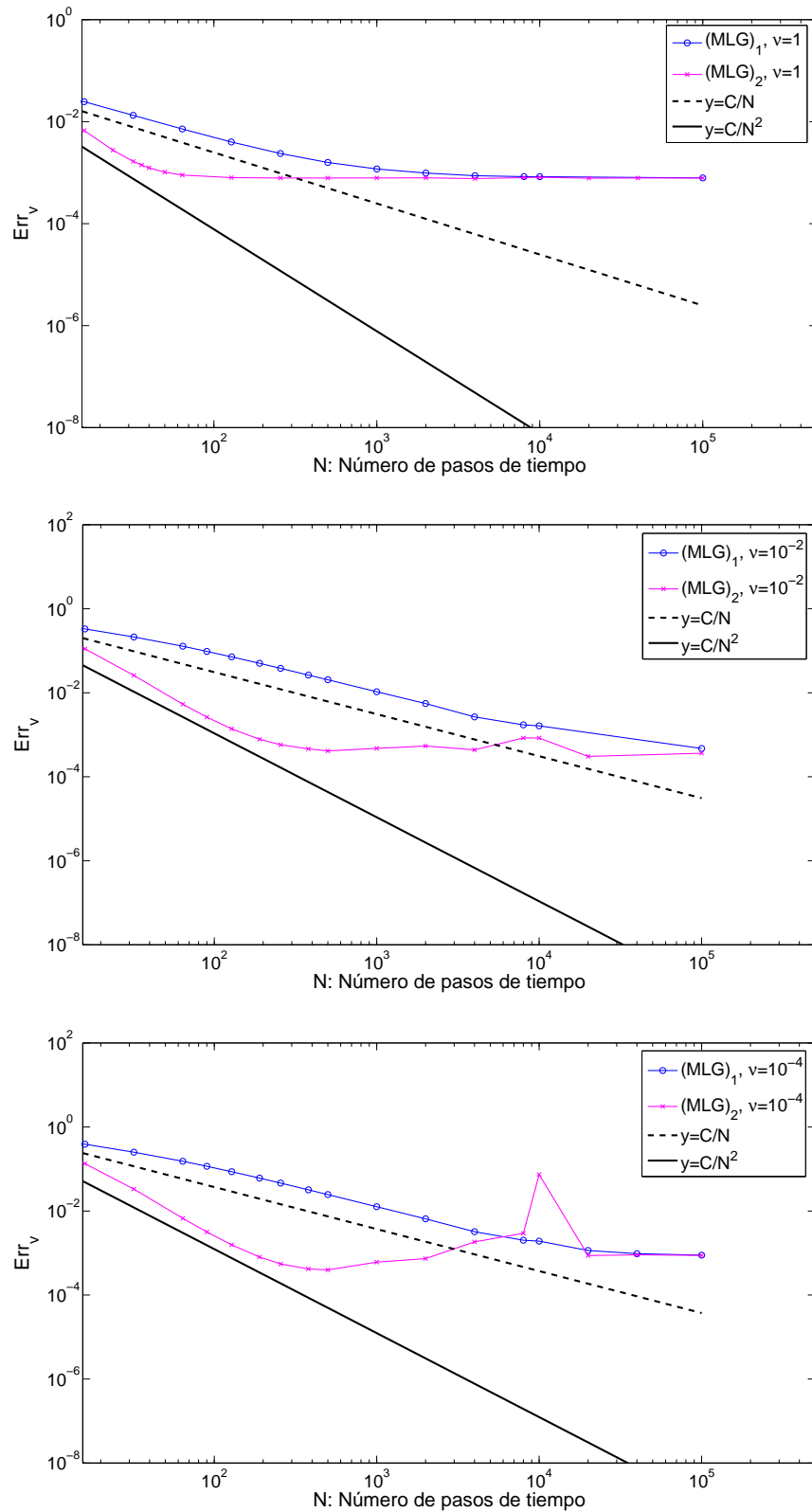


Figura 4.5: Error obtenido para la velocidad con el elemento $\mathbb{P}_1 - burbuja/\mathbb{P}_1$ para diferentes pasos de tiempo en escala logarítmica con $h = 1/128$

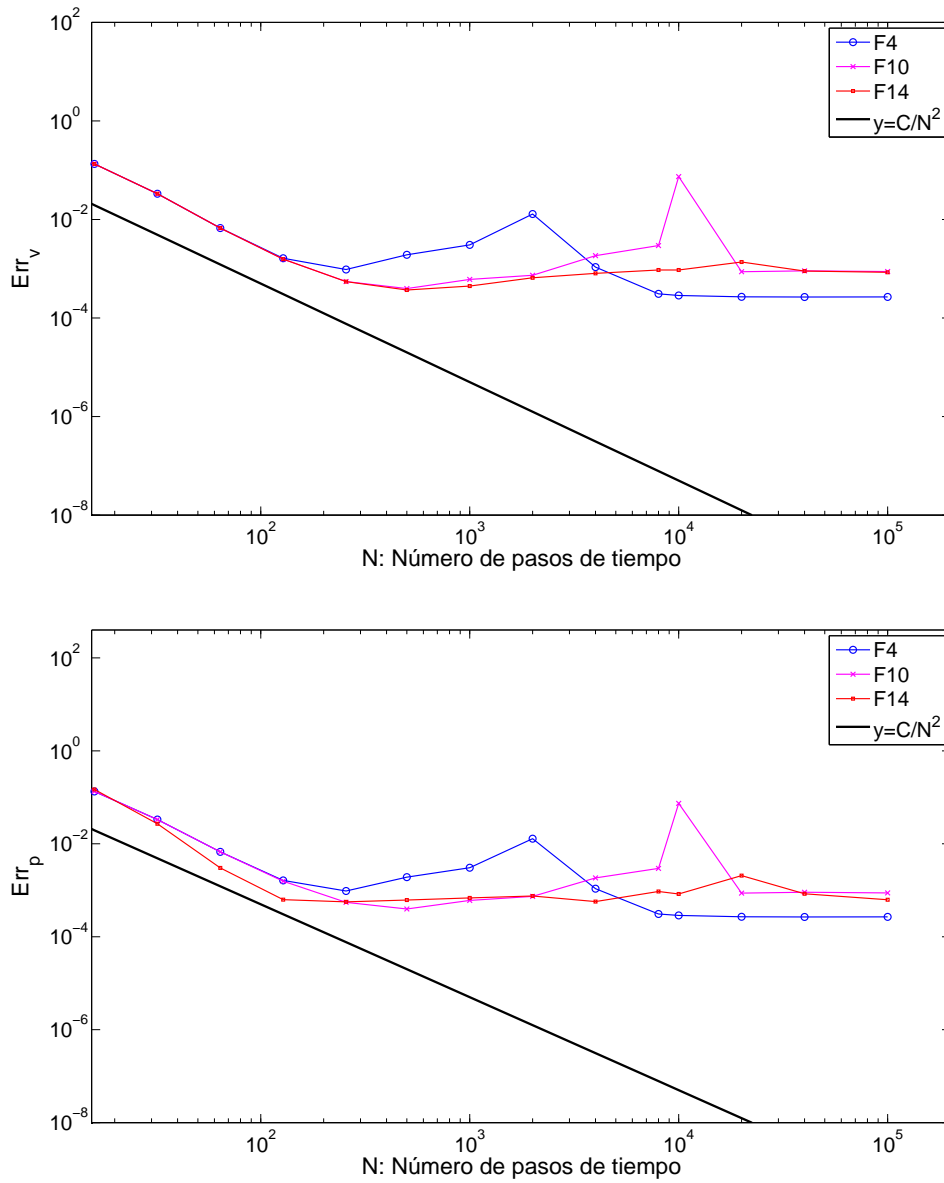


Figura 4.6: Errores en escala logarítmica de la velocidad (arriba) y la presión (abajo) obtenidos con el elemento $\mathbb{P}_1 - burbuja/\mathbb{P}_1$ variando el número de pasos de tiempo y la fórmula de cuadratura, fijando $h = 1/128$

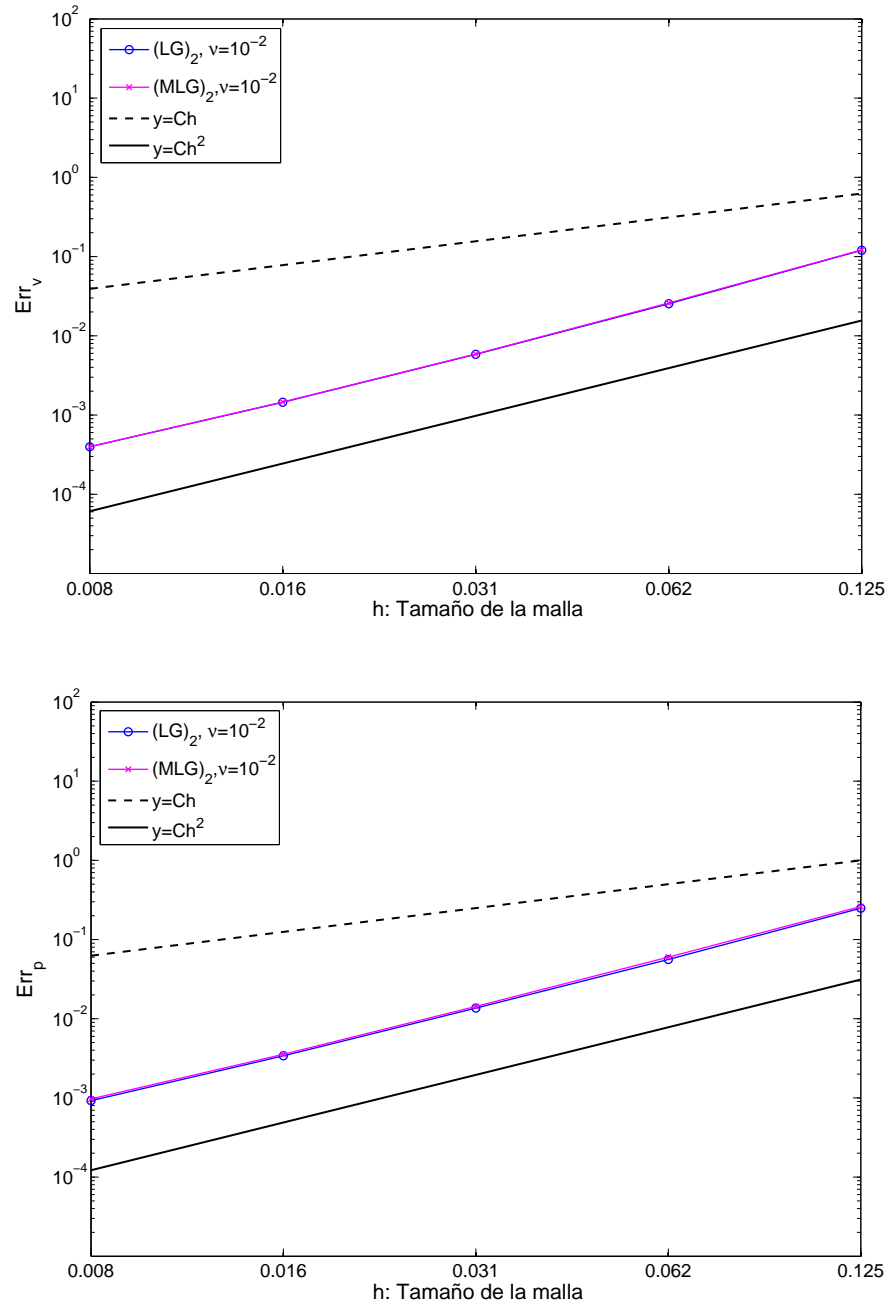


Figura 4.7: Errores en escala logarítmica de la velocidad (arriba) y la presión (abajo) obtenidos con los métodos $(LG)_2$ y $(MLG)_2$ y el elemento $\mathbb{P}_1 - burbuja/\mathbb{P}_1$. Variamos la malla espacial y fijamos el número de pasos de tiempo $N = 1000$, para el caso $\nu = 10^{-2}$

4.7.3. Un test académico tridimensional

Construimos un test académico para ver el orden de error de los métodos de Lagrange-Galerkin modificados en un ejemplo en tres dimensiones. El dominio considerado es $\Omega = (-0.5, 0.5)^3$ y el tiempo final $T = 1$. La viscosidad tomará los valores $\nu = 1, 10^{-2}, 10^{-4}, 10^{-6}$. Consideramos el segundo miembro \mathbf{f} , la condición inicial \mathbf{v}^0 y condiciones de contorno Dirichlet adecuadas para que la solución exacta del problema (4.1) sea

$$v_1(x, t) = \sin(\pi x_2 t), \quad (4.83)$$

$$v_2(x, t) = -\cos(\pi x_3 t), \quad (4.84)$$

$$v_3(x, t) = e^{-\pi x_1 t}, \quad (4.85)$$

$$p = \cos(\pi(x_1 + x_2 + x_3)t). \quad (4.86)$$

Para conseguir unicidad de la presión realizamos el bloqueo de la misma a su valor exacto en un punto.

Para este test vamos a considerar el elemento $\mathbb{P}_1 - burbuja / \mathbb{P}_1$ y mallas estructuradas de tetraedros de tamaño $h = 1/N_\Omega$, siendo N_Ω el número de divisiones de cada lado de Ω . Las características de estas mallas las podemos ver en la Tabla 4.2. Hemos utilizado el método explícito de dos pasos de orden 2 para el cálculo del pie de las características. Para analizar

Malla	Elementos	Nodos	Vértices	h
1	384	729	125	1/4
2	3072	4913	729	1/8
3	24576	35937	4913	1/16
4	196608	274625	35937	1/32

Tabla 4.2: Mallas utilizadas para el test 3D

el orden del error del método $(MLG)_2$ tomamos $\Delta t = h$ y calculamos los errores obtenidos para cada valor de los parámetros h y ν . Si hacemos $\Delta t = h$ en la ecuación (4.73) tenemos que si

$$h \max(\|\mathbf{v}\|_{C^0(L^\infty(\Omega))}, 1) > \sqrt{\varepsilon\nu},$$

el orden del error en la velocidad es de la forma $O(h^2 + h)$ y, en caso contrario, el orden es $O(h^2)$. Así, para valores pequeños de la viscosidad el orden de convergencia obtenido para la velocidad puede ser 1. En el caso de la presión, si tomamos $\Delta t = h$ en (4.74) vemos como la estimación del error en la presión es siempre de la forma $O(h + h^2)$. En la Figura 4.8 podemos ver los órdenes del error obtenidos para la presión y la velocidad, respectivamente, para las diferentes viscosidades consideradas. En esta figura, se puede observar el cambio de orden de error mencionado para la velocidad cuando la viscosidad disminuye.

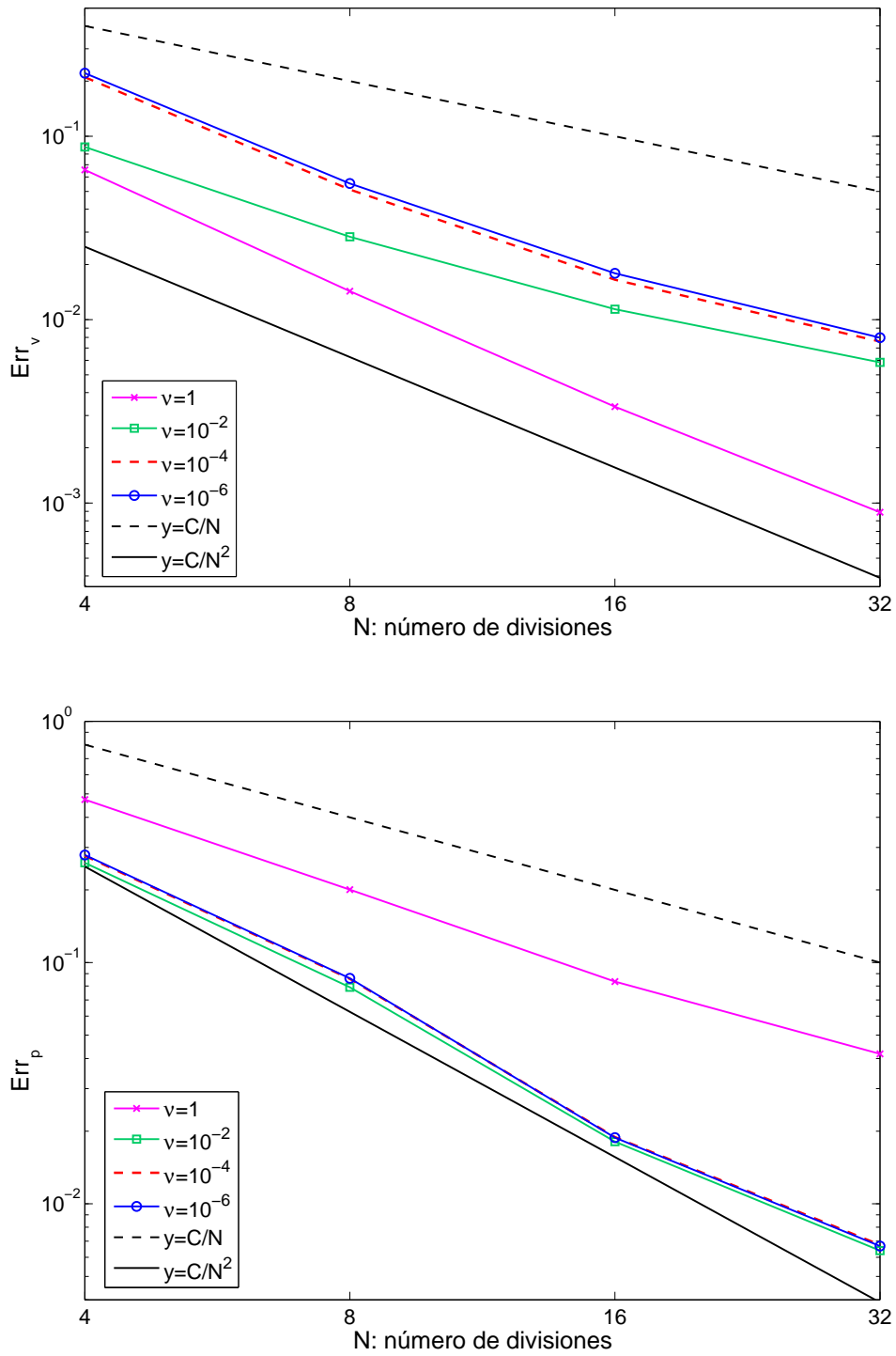


Figura 4.8: Errores Err_v (arriba) y Err_p (abajo) en función del número de divisiones de la malla

4.7.4. Flujo alrededor de un cilindro

Mostraremos en esta sección los resultados obtenidos con los métodos de Lagrange-Galerkin descritos en esta memoria para un flujo estacionario 3D en torno a un cilindro definido en John [59]. El dominio computacional es un canal con un cilindro en su interior cuyo esquema y dimensiones podemos ver en la Figura 4.9.

La malla empleada para obtener la solución numérica está formada por 491415 elementos y 86674 vértices. El tamaño característico de la malla alrededor del cilindro es $h = 0.008$. En la Figura 4.10 se puede ver una sección de la malla en el entorno del cilindro.

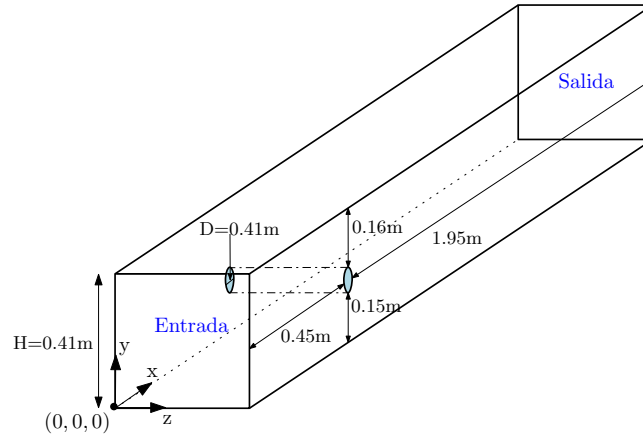


Figura 4.9: Esquema del dominio computacional

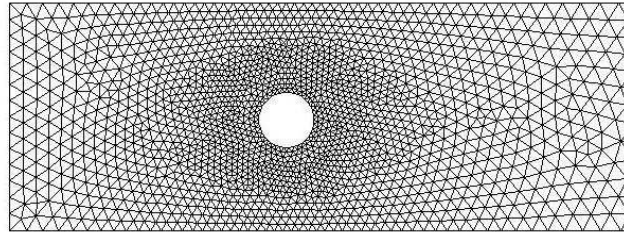


Figura 4.10: Malla cerca del cilindro

La viscosidad cinemática del fluido es $\nu = 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ y la velocidad en la entrada viene dada por el perfil parabólico

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 16Ux_1x_3(H-x_1)(H-x_3)/H^4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.87)$$

con $U = 0.45 \text{ m/s}$. El número de Reynolds del flujo es 20, calculado a partir de ν , del diámetro del cilindro D y de la velocidad media de entrada $v_0 = 0.2 \text{ m/s}$.

Los coeficientes que vamos a calcular son los coeficientes de arrastre y sustentación en el cilindro, c_d y c_l , respectivamente, y la diferencia de presiones entre los puntos $(0.45, 0.2, 0.205)$

y (0.55, 0.2, 0.205), que denotaremos por Δp .

Los coeficientes de arrastre y sustentación se definen en este caso como

$$c_d = \frac{2}{\rho v_0^2 DH} F_d = \frac{500}{0.41} F_d, \quad c_l = \frac{2}{\rho v_0^2 DH} F_l = \frac{500}{0.41} F_l, \quad (4.88)$$

donde F_d y F_l son las fuerzas de arrastre y sustentación, respectivamente. Sea C la superficie del cilindro, $\mathbf{n} = (n_x, n_y, 0)^T$ su vector normal unitario apuntando al interior del dominio Ω y $\tau_1 = (n_y, -n_x, 0)^T$ y $\tau_2 = (0, 0, 1)^T$ sus vectores tangentes. Entonces, las fuerzas de arrastre y sustentación se pueden escribir como

$$F_d = \int_C \left(\nu \frac{\partial \mathbf{v} \cdot \tau_1}{\partial \mathbf{n}} n_y - \pi n_x \right), \quad F_l = - \int_C \left(\nu \frac{\partial \mathbf{v} \cdot \tau_1}{\partial \mathbf{n}} n_x + \pi n_y \right). \quad (4.89)$$

Hay dos formas de calcular estas integrales en un código de elementos finitos: una primera (la habitual) aproximando las integrales de superficie y una segunda como integrales de volumen. Esta última forma es la que se describe en [59] y nos lleva a las fórmulas

$$F_d^{n+1} = - \left[(\nu \nabla \mathbf{v}_h^{n+1}, \nabla \mathbf{v}_d) + ((\nabla \mathbf{v}_h^{n+1}) \mathbf{v}_h^{n+1}, \mathbf{v}_d) - (\pi_h^{n+1}, \nabla \cdot \mathbf{v}_d) \right], \quad (4.90)$$

$$F_l^{n+1} = - \left[(\nu \nabla \mathbf{v}_h^{n+1}, \nabla \mathbf{v}_l) + ((\nabla \mathbf{v}_h^{n+1}) \mathbf{v}_h^{n+1}, \mathbf{v}_l) - (\pi_h^{n+1}, \nabla \cdot \mathbf{v}_l) \right], \quad (4.91)$$

donde $\mathbf{v}_d, \mathbf{v}_l \in \tilde{V}_h$ y

$$\mathbf{v}_d(x) = (1, 0, 0)^t, \quad \mathbf{v}_l(x) = (0, 1, 0)^t, \quad \text{si } x \in \bar{C}, \quad (4.92)$$

y son cero para el resto de los nodos de la malla. El espacio \tilde{V}_h es una extensión de V_h formada por todas las funciones del mismo espacio de elementos finitos y añadiéndole los grados de libertad sobre \bar{C} .

Esta forma de calcular las integrales nos permite una implementación muy sencilla. La formulación matricial del problema de Navier-Stokes para el espacio de elementos finitos considerado es³

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{n+1} U^{n+1} + (\mathcal{B}^{n+1})^t P^{n+1} &= \mathcal{S}_v^{n+1}, \\ \mathcal{B}^{n+1} U^{n+1} + \mathcal{C}^{n+1} P^{n+1} &= \mathcal{S}_p^{n+1}, \end{aligned} \quad (4.93)$$

donde hemos utilizado la notación del Apéndice A. Entonces, si $(\mathbf{v}_h^N, \pi_h^N)$ es la solución final estacionaria, para obtener las fuerzas de arrastre y sustentación debemos calcular

$$F_d = R^N \cdot U_d, \quad F_l = R^N \cdot U_l, \quad (4.94)$$

donde $R^N = \mathcal{A}^N U^N + (\mathcal{B}^N)^t P^N - \mathcal{S}_v^N$ y U_d y U_l son los vectores de los valores de \mathbf{v}_d y \mathbf{v}_l en los vértices de la malla. Por supuesto, las matrices \mathcal{A}^N y \mathcal{B}^N y el vector \mathcal{S}_v^N no incluyen el bloqueo en los vértices Dirichlet. Así, calcular las fuerzas de arrastre y sustentación se reduce a la realización de cuatro productos de una matriz dispersa por un vector y de dos productos escalares.

³Podemos ver la implementación de método de Lagrange-Galerkin para el elemento $\mathbb{P}_1 - \text{burbuja}/\mathbb{P}_1$ en el Apéndice A.

Para realizar la simulación, utilizamos el paso de tiempo $\Delta t = 0.001$ y el algoritmo de punto fijo para el cálculo del pie de las características. Como test de parada, consideramos que el flujo alcanza el estado estacionario cuando se verifican las dos desigualdades

$$\frac{\|\mathbf{v}_h^{n+1} - \mathbf{v}_h^n\|_0}{\Delta t} \leq 10^{-5}, \quad \frac{\|\pi_h^{n+1} - \pi_h^n\|_0}{\Delta t} \leq 10^{-5}.$$

En la Tabla 4.3 se muestran los resultados obtenidos con nuestros métodos $(LG)_2$ y $(MLG)_2$ y los intervalos de referencia para esos coeficientes. Además, comparamos nuestros resultados con los obtenidos con el software FLUENT, con la misma malla, y eligiendo los esquemas de volúmenes finitos de orden 2.

Coefficientes	Min.	Máx.	MLG superficie	MLG volumen	LG superficie	LG volumen	Fluent
c_d	6.05	6.25	6.48046	6.10563	6.47928	6.10534	6.40239
c_l	0.008	0.01	0.00971	0.01240	0.00974	0.01241	0.01406
$p(b)-p(a)$	0.165	0.175	0.17953		0.17948		0.16224

Tabla 4.3: Valores obtenidos para los coeficientes aerodinámicos

En la Figura 4.11 se puede ver la evolución de los coeficientes de arrastre y sustentación calculados de las dos formas posibles con el método de Lagrange-Galerkin modificado. Además, en la Figura 4.12 se compara la evolución de la diferencia de presiones Δp con los métodos $(LG)_2$ y $(MLG)_2$. Por último, en las Figuras 4.13-4.16 se pueden ver los cortes en el plano $z = 0$ de cada una de las componentes de la velocidad y de la presión, respectivamente, calculados con el método $(MLG)_2$.

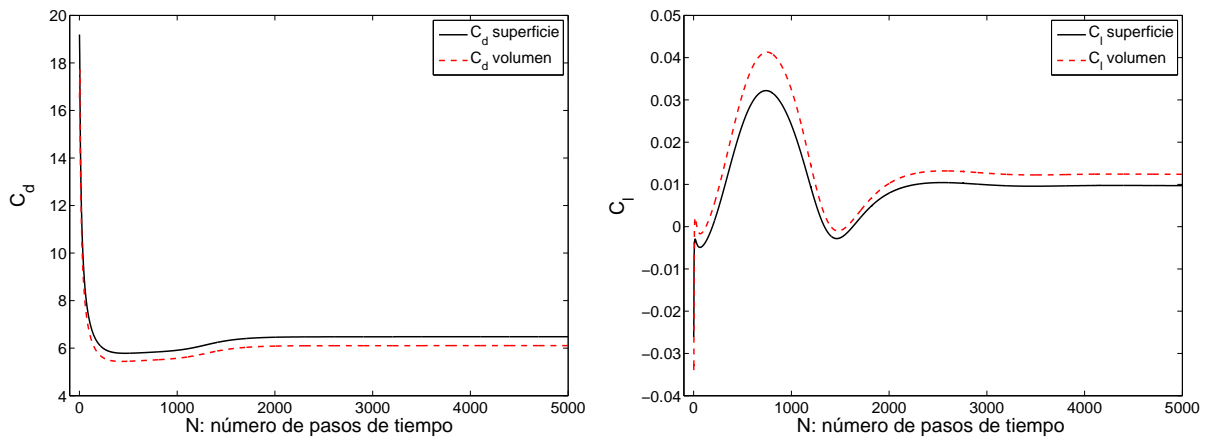


Figura 4.11: Evolución de los coeficientes de arrastre (derecha) y sustentación (izquierda) con el método MLG

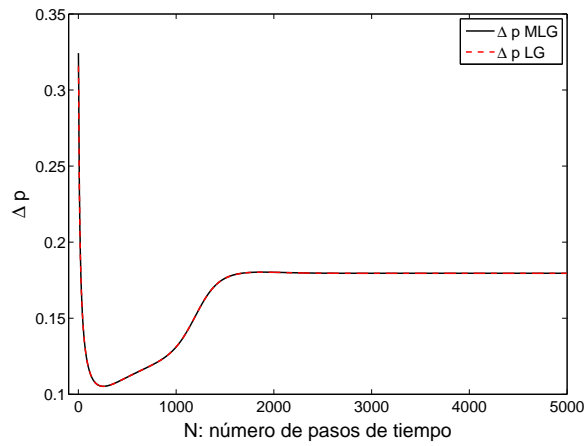
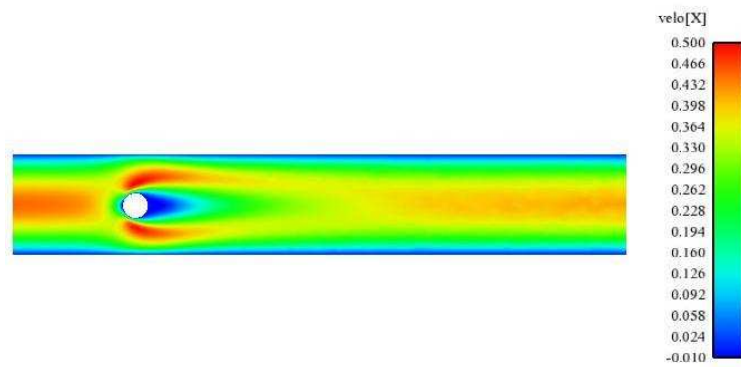


Figura 4.12: Evolución de la diferencia de presiones con los métodos LG y MLG

Figura 4.13: Componente v_x de la velocidad en el plano $z = 0$ Figura 4.14: Componente v_y de la velocidad en el plano $z = 0$

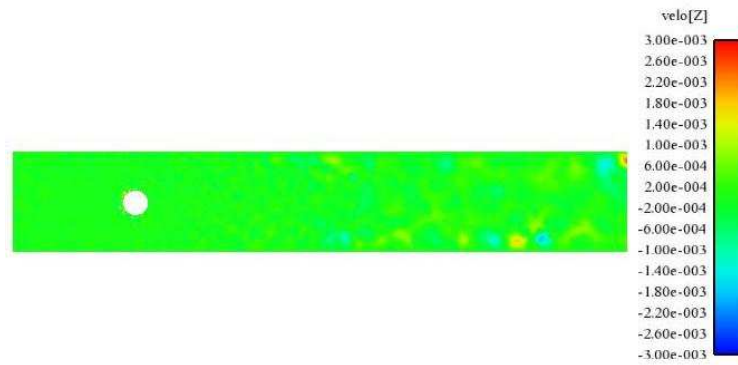


Figura 4.15: Componente v_z de la velocidad en el plano $z = 0$

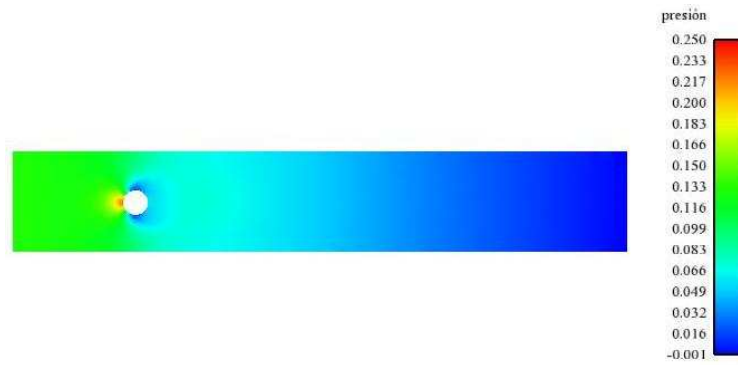


Figura 4.16: Presión en el plano $z = 0$

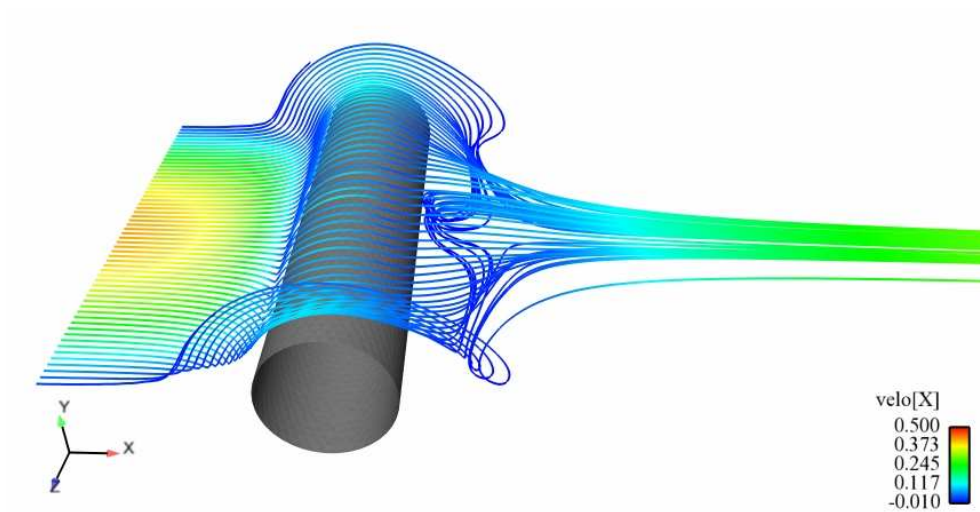


Figura 4.17: Líneas de corriente a la altura $y = 0.2$ m coloreadas por v_x

4.7.5. Eficiencia de los métodos modificados

Como se puede observar en el ejemplo del flujo alrededor de un cilindro, los resultados numéricos obtenidos con los métodos LG y MLG son muy parecidos. La diferencia la encontramos en el tiempo de CPU que requiere cada método. El método de LG estándar necesita 28 horas y 48 minutos para completar 5000 pasos de tiempo, mientras que el método MLG necesita 18 horas y 37 minutos. Esta gran reducción del tiempo de cálculo, aproximadamente un 35 %, se debe a que la matriz del sistema solo se calcula una vez, dado que la densidad y viscosidad del problema son constantes. De esta forma, como usamos un método directo para resolver el sistema, factorizamos una sola vez la matriz y la mayoría de tiempo de cálculo del problema se emplea en el movimiento de los nodos de cuadratura de la malla. El uso del algoritmo de punto fijo para integrar la ecuación de las características y de una fórmula de cuadratura con 25 puntos, hace que este coste sea aún mayor. Por lo tanto, en problemas de este tipo es en los que se observa una mayor eficiencia de los métodos MLG frente a los estándar.

En 3.9.3 comparábamos los tiempos de cálculo obtenidos con los métodos Lagrange-Galerkin estándar y modificados para el test de la esfera de Gauss. En este caso, el ahorro de tiempo que suponía usar los métodos modificados era aproximadamente de un 46 %. Aunque, en el ejemplo del flujo alrededor de un cilindro, las simplificaciones realizadas han reducido el coste de la resolución del sistema lineal, se observa que los métodos MLG son menos eficientes cuando se usan para un problema de Navier-Stokes.

Para analizar la diferencia de los métodos estándar y los modificados en un caso menos favorable, comparamos los tiempos de cálculo obtenidos al resolver el test de la Sección 4.7.3, calculando y factorizando la matriz en cada iteración, aunque, de nuevo, sólo sería necesario hacerlo una vez. Además, vamos a utilizar el método explícito de dos pasos de tiempo, visto en la Sección 4.5, para mover los nodos de cuadratura, que es mucho menos costoso que el de punto fijo. La fórmula de cuadratura para las integrales que no se calculan de forma exacta es la de 25 puntos. En la Tabla 4.4 podemos observar los tiempos de cálculo al realizar 100 iteraciones con un paso de tiempo $\Delta t = 0.01$, con dos mallas distintas. Las características de las dos mallas utilizadas se pueden ver en la Tabla 4.2. En la malla más gruesa el ahorro que obtenemos al utilizar el método modificado es de casi un 22 %, aproximadamente, mientras que en la malla más fina el ahorro es de un 9 %. Así, en este caso, el coste de la resolución del sistema lineal aumenta más que el de mover los puntos a medida que la malla es más fina. Por lo tanto, los métodos serán menos efectivos cada vez. Si en lugar de usar un método directo para la resolución del sistema usásemos uno iterativo, probablemente la eficiencia de los métodos modificados no disminuiría tanto.

Método \ Malla	3	4
$(LG)_2$	2m 3.022s	34m 54.743s
$(MLG)_2$	1m 36.412s	29m 52.041s
Reducción	21.62 %	9.25 %

Tabla 4.4: Tiempos de cálculo de los métodos LG y MLG para un problema de convección-difusión-reacción

En el caso de un código bidimensional la eficiencia de los métodos modificados se ve incrementada, incluso si resolvemos el problema de Navier-Stokes. En la Tabla 4.5 tenemos los tiempos de cálculo obtenidos para el test de la Sección 4.7.2 con las distintas mallas consideradas, cuando el número de pasos de tiempo es $N = 1000$. En este ejemplo estamos usando un método directo para la resolución del sistema lineal, factorizando la matriz una única vez, y una fórmula de cuadratura con 42 nodos. En este caso se observa que el tamaño de la malla no influye en la eficiencia del método, esto se debe a que en dos dimensiones el coste de resolver el sistema lineal es mucho menor que en el caso tridimensional, pasando a ser la etapa convectiva (movimiento y localización de los nodos de cuadratura) la que determina el tiempo de cálculo del método.

Método \ Malla	1	2	3	4	5
$(LG)_2$	7.34s	29.98s	2m 8.05s	8m 54.64s	37m 50.75s
$(MLG)_2$	4.05s	15.60s	1m 5.76s	5m 4.93s	20m 26.16s
Reducción	44.73 %	47.98 %	48.65 %	42.99 %	46.00 %

Tabla 4.5: Tiempos de cálculo de los métodos *LG* y *MLG* para un problema de Navier-Stokes

Los resultados que acabamos de ver nos permiten concluir que los métodos modificados son tanto más eficientes cuanto más eficiente sea la resolución del sistema lineal y más costosa sea la resolución de la parte convectiva del problema.

Parte III

Resolución numérica. Aplicación a un chorro de carbón pulverizado

Introducción

En la actualidad, la utilización de códigos para la simulación de procesos industriales tiene una gran importancia, sobre todo con el fin de abaratar los costes que supondrían la realización de ensayos en laboratorios, para el diseño y desarrollo de nuevos productos y procesos.

La tecnología para la combustión de carbón pulverizado en calderas industriales históricamente se ha basado en la experiencia acumulada y en los datos obtenidos con test a pequeña escala. Es complicado analizar los fenómenos que tienen lugar en el interior de una caldera industrial por la dificultad de realizar medidas. Los únicos datos que se pueden extraer son relativos a los productos que salen de la misma como, por ejemplo, la cantidad de carbón sin quemar o la temperatura del gas en la salida de la caldera. Por lo tanto, la realización de simulaciones numéricas juega un papel fundamental en la comprensión de los procesos que ocurren, aportando información que no se puede obtener de forma experimental. Para que estas simulaciones sean fiables es necesario, por un lado, utilizar modelos que estén validados y, por otro lado, métodos numéricos precisos para la resolución numérica de estos modelos.

La validación de un modelo para la combustión de carbón pulverizado suele realizarse comparando los resultados de simulaciones con medidas experimentales en llamas obtenidas en inyectores construidos en laboratorios. Los experimentos elegidos para realizar la comparación, deben incluir distintos aspectos de la combustión turbulenta de carbón. La elección de experimentos a escala de laboratorio se debe a la facilidad de obtener medidas utilizando instrumentos como láseres o pirómetros ópticos, y, además, por la posibilidad de controlar las condiciones de funcionamiento de los test realizados. Podemos encontrar numerosos artículos para validar modelos de combustión, por ejemplo, Barlow *et al* [7, 6] donde se dan medidas de una llama turbulenta formada por la combustión de CO y H_2 con aire, o Peters y Weber [80] donde se dan datos y se modeliza una llama de combustión de carbón pulverizado en un horno de laboratorio de la fundación IFRF (International Flame Research Foundation).

En cuanto a la elección de los métodos numéricos, debemos tener en cuenta que los modelos para flujos de gases con combustión de carbón pulverizado están formados por un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales, ecuaciones diferenciales ordinarias y ecuaciones algebraicas acopladas entre sí. La complejidad de la resolución numérica del modelo propuesto reside, por un lado, en encontrar métodos numéricos estables y precisos para la resolución de cada una de las ecuaciones y, por otro lado, en encontrar un tratamiento adecuado para el acoplamiento de las mismas. Este acoplamiento es aún más complicado en el caso de ecuaciones no lineales como, por ejemplo, las ecuaciones del modelo $k - \epsilon$.

Por otro lado, aunque la capacidad de los ordenadores en los últimos años ha crecido

enormemente, no es suficiente en muchos casos para la resolución de problemas industriales en 3D. Por este motivo es importante el desarrollo de nuevos métodos numéricos más eficientes, como los de Lagrange-Galerkin modificados propuestos en la Parte II de esta memoria.

Esta parte de la tesis está compuesta por dos capítulos.

En el Capítulo 5, describimos los métodos numéricos empleados para la resolución del modelo propuesto en la Parte I de este trabajo. Este modelo se divide en uno para el flujo de gases reactivos formado por ecuaciones en derivadas parciales y algebraicas, y otro para la combustión de las partículas de carbón, que se compone de ecuaciones diferenciales ordinarias y algebraicas. Se proponen métodos de resolución numérica para cada uno de ellos. Aunque en el código desarrollado se ha implementado más de un método para cada ecuación, en este capítulo mencionaremos los más precisos y eficientes. Por último, escribiremos los algoritmos implementados para la resolución del modelo completo. En el Apéndice B se hace una descripción más detallada del programa de simulación que hemos desarrollado.

En el Capítulo 6, mostramos los resultados obtenidos en la simulación de un chorro de carbón pulverizado. Los objetivos de este capítulo son, por un lado, analizar las posibilidades que ofrece el modelo matemático para la combustión de partículas de carbón pulverizado descrito en el Capítulo 2 y, por otro lado, comprobar la aplicabilidad y fiabilidad de la herramienta de simulación numérica desarrollada. Para conseguir estos objetivos se consideró el experimento realizado por Hwang *et al* en las referencias [55, 56, 57]. La elección de este experimento se debe a que se trata de un flujo en un dominio abierto, lo que nos permite desprestigiar el transporte de energía por radiación y evita el uso de leyes de pared; además, no es muy turbulento, pudiendo así considerar válido el modelo laminar de combustión desarrollado.

Capítulo 5

Métodos numéricos y algoritmos

5.1. Introducción

En este capítulo haremos una descripción de los métodos numéricos utilizados y de los algoritmos implementados en el código que hemos desarrollado para la simulación de flujos de gases reactivos, incluyendo la combustión de carbón pulverizado. Los modelos matemáticos utilizados para este tipo de flujos fueron descritos en la primera parte de este trabajo.

En la primera sección se proponen los esquemas numéricos para la resolución de las ecuaciones del modelo de la fase gaseosa. Para la discretización de las ecuaciones en derivadas parciales de ese modelo utilizamos métodos de Lagrange-Galerkin que podrán ser de primero o segundo orden en tiempo. La ventaja de los métodos de segundo orden en tiempo es que permiten considerar pasos de tiempo mayores y, como el objetivo del código es resolver problemas tridimensionales, se hace necesario prestar especial atención al coste computacional. Por esta razón, hemos incluido los métodos de Lagrange-Galerkin modificados con los que, como hemos visto, se tiene la misma precisión que con los estándar pero con menor tiempo de cálculo. Además, es imprescindible que algunas de las variables del problema, como k y ϵ , estén acotadas y, por lo tanto, hemos implementado, para las ecuaciones de convección-difusión-reacción del modelo, los métodos semi-Lagrangianos descritos en el Capítulo 3. Estos métodos son menos precisos pero, a cambio, mantienen la solución acotada. Por simplicidad, únicamente mostraremos, para cada ecuación, el método que mejores resultados ha proporcionado con menor coste computacional, para la mayoría de los problemas.

En la segunda sección se describe la resolución numérica de las ecuaciones del modelo de fase sólida. Este modelo está compuesto por ecuaciones diferenciales ordinarias, para las que utilizaremos métodos de Euler, y por ecuaciones algebraicas que se resolverán con métodos de Newton. Para la integración de las ecuaciones diferenciales se va a considerar un paso de tiempo variable que dependerá de tiempos característicos relativos al movimiento y a la gasificación de la partícula. Además, describiremos los diferentes comportamientos que consideramos que puede tener una partícula al alcanzar una frontera del dominio computacional.

La discretización temporal que proponemos en las dos secciones previas nos llevará al diseño de los algoritmos que hemos implementado en nuestro código y que se describirán en

la tercera sección. En primer lugar, se propone un algoritmo general para el modelo de fase gaseosa y su acoplamiento con el correspondiente de fase sólida. Posteriormente se describe el algoritmo para calcular la evolución seguida por cada partícula, en cada instante de tiempo.

5.2. Resolución numérica de la fase gaseosa

Utilizando la notación introducida en el Capítulo 1, consideramos Ω , un dominio en \mathbb{R}^3 cuya frontera Γ está dividida en tres partes $\Gamma = \Gamma_E \cup \Gamma_P \cup \Gamma_S$, siendo Γ_E las entradas, Γ_S las salidas y Γ_P las paredes.

Consideramos un flujo turbulento de gases reactivos que incluye una fase dispersa formada por partículas de carbón pulverizado. Para simplificar la escritura, denotaremos las variables promediadas sin la barra o la tilde (por ejemplo, $\tilde{\mathbf{v}}$ será denotada por \mathbf{v}).

Como vimos en la primera parte de esta memoria, el modelo completo que queremos resolver, escrito en forma no conservativa, es

$$\rho \dot{Z}_i - \operatorname{div} \left(\left(\frac{k_T}{c_\pi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \operatorname{grad} Z_i \right) + f^m Z_i = f_i, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.1)$$

$$\rho \dot{H} - \operatorname{div} \left(\left(\frac{k_T}{c_\pi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \operatorname{grad} H \right) + f^m H = f_H, \quad (5.2)$$

$$\rho \dot{k} - \operatorname{div} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \operatorname{grad} k \right) + f^m k = P_k - \rho \epsilon, \quad (5.3)$$

$$\rho \dot{\epsilon} - \operatorname{div} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \operatorname{grad} \epsilon \right) + f^m \epsilon = C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}, \quad (5.4)$$

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = f^m, \quad (5.5)$$

$$\rho \dot{\mathbf{v}} - \operatorname{div} (\mathbb{T}_v + \mathbb{T}_t) + \operatorname{grad} \pi + f^m \mathbf{v} = \rho \mathbf{g}, \quad (5.6)$$

$$\bar{\pi} = \rho R \theta \quad (5.7)$$

donde

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (5.8)$$

$$\mathbb{T}_t = 2\mu_t \mathbb{D} - \frac{2}{3}\mu_t \operatorname{div} \mathbf{v} \mathbb{I} - \frac{2}{3}\rho k \mathbb{I}, \quad (5.9)$$

$C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$, σ_k , σ_ϵ y C_μ son las constantes del modelo $k - \epsilon$ estándar, P_k es la producción de energía cinética turbulenta dada por

$$P_k = 2\mu_t \|\mathbb{D}\|^2 - \frac{2}{3}(\operatorname{div} \mathbf{v})^2 - \frac{2}{3}\rho k \operatorname{div} \mathbf{v}, \quad (5.10)$$

Sc_t es el número de Schmidt turbulento, k_T la conductividad térmica y, por simplicidad,

hemos definido las fuentes

$$f_1 = f_{O_2}^m - \frac{4}{7}f_{CO}^m - \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V}f_V^m - 8f_{H_2}^m, \quad (5.11)$$

$$f_2 = f_{CO_2}^m + \frac{11}{7}f_{CO}^m + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V}f_V^m, \quad (5.12)$$

$$f_3 = f_{H_2O}^m + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V}f_V^m + 9f_{H_2}^m, \quad (5.13)$$

$$f_4 = f_{SO_2}^m + \frac{64\nu_4}{\mathcal{M}_V}f_V^m, \quad (5.14)$$

$$f_H = f^e + q_6f_{CO}^m + q_7f_V^m + q_8f_{H_2}^m. \quad (5.15)$$

Recordemos que las combinaciones de Shvab-Zeldovich eran

$$Z_1 = Y_{O_2} - \frac{4}{7}Y_{CO} - \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V}Y_V - 8Y_{H_2},$$

$$Z_2 = Y_{CO_2} + \frac{11}{7}Y_{CO} + \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V}Y_V,$$

$$Z_3 = Y_{H_2O} + \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V}Y_V + 9Y_{H_2},$$

$$Z_4 = Y_{SO_2} + \frac{64\nu_4}{\mathcal{M}_V}Y_V,$$

$$H = h_T + q_6Y_{CO} + q_7Y_V + q_8Y_{H_2},$$

y que, a partir de éstas, se podía recuperar la composición y la entalpía térmica de la mezcla.

Para obtener la fracción másica de N_2 usaremos la relación

$$\sum_{i=1}^8 Y_i = 1.$$

Por último, debemos tener en cuenta que la temperatura se relaciona con la entalpía térmica y la composición mediante la ecuación

$$h_T = \sum_{i=1}^8 Y_i \int_{\theta_0}^{\theta} c_{\pi,i}(s) ds.$$

Las condiciones de contorno para las ecuaciones (5.1)-(5.6) del modelo implementado en nuestro código son:

- En las entradas:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_E, \quad (5.16)$$

$$Z_i = Z_i^E, \quad (5.17)$$

$$H = H_E, \quad (5.18)$$

$$k = k_E, \quad (5.19)$$

$$\epsilon = \epsilon_E, \quad (5.20)$$

siendo $\mathbf{v}_E : \Gamma_E \rightarrow \mathbb{R}^3$, $Z_i^E : \Gamma_E \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, 4$, $H_E : \Gamma_E \rightarrow \mathbb{R}$, $k_E : \Gamma_E \rightarrow \mathbb{R}$ y $\epsilon_E : \Gamma_E \rightarrow \mathbb{R}$ funciones dadas.

- En las salidas:

$$(\mathbb{T} + \mathbb{T}_t) \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (5.21)$$

$$\frac{\partial Z_i}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial k}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (5.22)$$

- En las paredes:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\infty \quad (5.23)$$

$$\frac{\partial Z_i}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial k}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (5.24)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{n}} = h_w(\theta_P - \theta), \quad (5.25)$$

siendo $\mathbf{v}_\infty : \Gamma_E \rightarrow \mathbb{R}^3$ un campo vectorial dado, que será nulo salvo en problemas de “flujo abierto”, $\theta_P : \Gamma_P \rightarrow \mathbb{R}$ una función dada representando la temperatura de las paredes del dominio y h_w el coeficiente de transferencia de calor a las paredes.

Las condiciones de contorno que acabamos de ver para los escalares de Shvab-Zeldovich se deducen inmediatamente de las condiciones de contorno establecidas en el Capítulo 1 para las especies y la entalpía térmica. En el código se pedirán los valores de la composición y la temperatura en las entradas y se calcularán las condiciones de contorno para los escalares conservados.

Para resolver numéricamente cada una de las ecuaciones vamos a considerar el intervalo de tiempo dividido en N subintervalos con la misma longitud $\Delta t = T/N$ y una malla del dominio Ω_h formado por N_e tetraedros T_j de tamaño medio h . Para las ecuaciones en derivadas parciales hemos implementado métodos de Lagrange-Galerkin, tanto estándar como modificados, que han sido descritos en la Parte II de esta memoria. La elección de métodos de Lagrange-Galerkin modificados se aconseja por su menor coste computacional, excepto cuando la divergencia de la velocidad del fluido sea muy alta, lo que invalidaría la aproximación realizada en ellos.

Si φ es una variable cualquiera del modelo (escalar o vectorial), la aproximación de su derivada material se hará de la forma

$$\dot{\varphi}(x, t_{n+1}) \approx \frac{\varphi^{n+1}(x) - \varphi^n \circ \mathcal{X}_h^{n, n+1}(x)}{\Delta t}, \quad (5.26)$$

si elegimos el método de orden 1, mientras que si se elige el método de orden 2 se utilizará

$$\dot{\varphi}(x, t_{n+1}) \approx \frac{3\varphi^{n+1}(x) - 4\varphi^n \circ \mathcal{X}_h^{n, n+1}(x) + \varphi^{n-1} \circ \mathcal{X}_h^{n-1, n+1}(x)}{2\Delta t}, \quad (5.27)$$

excepto para el primer paso de tiempo, en el que se utiliza (5.26). Recordemos que, como vimos en el Capítulo 4, \mathcal{X}_h denota la curva característica solución del problema (4.27). Supondremos que, para cada instante de tiempo t_{n+1} , $n \in \{0, \dots, N-1\}$, conocemos los valores aproximados de la velocidad \mathbf{v}_h^{n-1} y \mathbf{v}_h^n (veremos más adelante cómo se calculan). Si en lugar del método LG estándar utilizamos el modificado, bastará con sustituir \mathcal{X}_h por $\tilde{\mathcal{X}}_h$ en (5.26) y (5.27). Para simplificar la escritura escribiremos siempre \mathcal{X}_h entendiendo que

cuando hablemos de los modificados será $\tilde{\mathcal{X}}_h$. Para aproximar las curvas \mathcal{X}_h utilizaremos los métodos descritos en la Sección 4.5. En esa sección vimos que al calcular la posición de un punto en un instante anterior al presente, aquél podía salir del dominio. Si esto ocurría aproximábamos el valor de la variable en ese punto exterior utilizando los valores de esa variable en la frontera. Sea x un punto del dominio, que será un nodo de cuadratura si el método usado para la discretización es de Lagrange-Galerkin estándar, un vértice si es de Lagrange-Galerkin modificado o un nodo si es un semi-Lagrangiano, y ϕ la variable del problema que queremos evaluar en el punto x movido; si $\mathcal{X}_h^{n,n+1}(x)$ (o $\mathcal{X}_h^{n-1,n+1}(x)$) no están en el dominio, haremos

$$\phi(\mathcal{X}_h^{n,n+1}(x)) = \begin{cases} \phi\left(\frac{1}{3}(a_1 + a_2 + a_3)\right), & \text{si } \mathcal{X}_h^{n,n+1}(x) \text{ salió por } \Gamma_E, \\ \phi(x), & \text{en caso contrario.} \end{cases} \quad (5.28)$$

siendo a_i , $i = 1, \dots, 3$, los vértices de la cara del tetraedro de la frontera Γ_E por la que ha salido el punto. Recordemos que el algoritmo de búsqueda implementado nos dice, además de si el punto que buscamos ha salido, la cara de la frontera por la que lo hace.

De los métodos descritos en la Sección 4.5 para aproximar \mathcal{X}_h , se recomienda el uso del esquema de punto fijo. Aunque es algo más costoso que los demás, es mucho más preciso, sobre todo cerca de las fronteras del dominio, evitando que los puntos salgan del mismo por una frontera distinta de Γ_E .

5.2.1. Conservación de la masa de las especies y de la energía

Para obtener la composición de la mezcla y su temperatura resolveremos las ecuaciones para las variables de Shvab-Zeldovich y después, utilizaremos la hipótesis de Burke-Schumann.

Supondremos que conocemos los escalares conservados en el instante inicial

$$Z_i(x, 0) = Z_i^0(x), \quad \forall x \in \Omega, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.29)$$

$$H(x, 0) = H^0(x), \quad \forall x \in \Omega. \quad (5.30)$$

Definimos el espacio funcional

$$W_0 = \{z \in H^1(\Omega) : z = 0 \text{ en } \Gamma_E\}. \quad (5.31)$$

Si multiplicamos las ecuaciones (5.1) y (5.2) por una función test $z \in W_0$, integramos en el dominio Ω , aplicamos la fórmula de Green y consideramos las condiciones de contorno (5.22), (5.24) y (5.25), obtenemos una formulación débil para las ecuaciones de las variables conservadas. Consideramos el siguiente problema:

Problema 5.1. Encontrar funciones $Z_i : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, 4$, $H : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$

verificando $Z_i(\cdot, t) = Z_i^E(\cdot, t)$, $H(\cdot, t) = H_E(\cdot, t)$ en Γ_E , y

$$\int_{\Omega} \rho \dot{Z}_i z dx + \int_{\Omega} \left(\frac{k_T}{c_\pi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \text{grad } Z_i \cdot \text{grad } z dx + \int_{\Omega} f^m Z_i z dx = \int_{\Omega} f_i z dx, \quad \forall z \in W_0, \forall t \in (0, T), \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.32)$$

$$\int_{\Omega} \rho \dot{H} z dx + \int_{\Omega} \left(\frac{k_T}{c_\pi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \text{grad } H \cdot \text{grad } z dx + \int_{\Omega} f^m H z dx = \int_{\Omega} f_H z dx + \int_{\Gamma_P} h_w (\theta_P - \theta) z dA, \quad \forall z \in W_0, \forall t \in (0, T), \quad (5.33)$$

con

$$Z_i(x, 0) = Z_i^0(x), \quad \forall x \in \Omega, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.34)$$

$$H(x, 0) = H^0(x), \quad \forall x \in \Omega. \quad (5.35)$$

Para obtener el problema discreto utilizamos un método de Lagrange-Galerkin de segundo orden en espacio y tiempo. Así, las derivadas materiales se aproximan con la fórmula (5.26) para el primer paso de tiempo y con (5.27) para los restantes. Para la discretización espacial hemos elegido el elemento finito de Lagrange cuadrático. Se define el espacio de polinomios

$$P_2(T_j) = \{p|_{T_j} : p : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R} \text{ polinomio de grado } \leq 2\}, \quad (5.36)$$

con el cual se construyen los espacios funcionales

$$W_h^2 = \{z_h \in C^0(\bar{\Omega}) : z_h|_{T_j} \in P_2(T_j)\}, \quad (5.37)$$

$$W_{0h}^2 = \{z_h \in W_h^2 : z_h = 0 \text{ en } \Gamma_E\}, \quad (5.38)$$

que usaremos para aproximar $H^1(\Omega)$ y W_0 , respectivamente. Los nodos de la malla, en este caso, son los vértices y puntos medios de las aristas de cada tetraedro, como se muestra en la Figura 5.1.

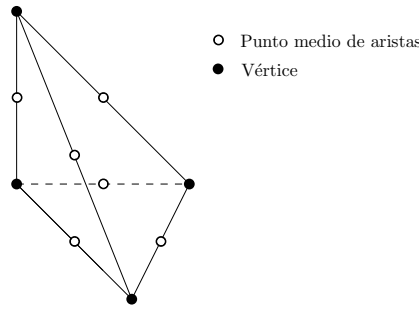


Figura 5.1: Elemento finito \mathbb{P}_2

Las ecuaciones del Problema 5.1 están acopladas ya que ρ , μ_t y c_π dependen de la concentración y de la temperatura de la mezcla. Para poder desacoplarlas evaluaremos las ecuaciones del problema en $t = t_{n+1}$, salvo esas tres variables y la temperatura θ que las consideraremos en el instante anterior. Así, si definimos las formas bilineales

$$a_{Z1}^1(u, v) = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^0 u v dx + \int_{\Omega} \left(\frac{k_T}{c_{\pi, h}^0} + \frac{\mu_{t, h}^0}{Sc_t} \right) \text{grad } u \cdot \text{grad } v dx + \int_{\Omega} (f^m)^1 u v dx, \quad (5.39)$$

para $n = 1$ y

$$\begin{aligned} a_{Z_2}^n(u, v) = & \frac{3}{2\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^{n-1} uv dx + \int_{\Omega} \left(\frac{k_T}{c_{\pi, h}^{n-1}} + \frac{\mu_{t, h}^{n-1}}{Sc_t} \right) \text{grad } u \cdot \text{grad } v dx \\ & + \int_{\Omega} (f^m)^n uv dx, \end{aligned} \quad (5.40)$$

para $n > 1$, con $u, v \in H^1(\Omega)$, tendremos los siguientes problemas discretos desacoplados:

Para $n = 1$:

Problema 5.2. Encontrar funciones $Z_{i, h}^1 \in W_h^2$, $i = 1, \dots, 4$, tales que

$$a_{Z_1}^1(Z_{i, h}^1, z_h) = \int_{\Omega} f_i^1 z_h dx - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^0 Z_{i, h}^0 \circ \mathcal{X}_h^{0,1} z_h dx, \quad \forall z_h \in W_{0h}^2, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.41)$$

sujetas a las condiciones de contorno

$$Z_{i, h}^1 = Z_{iE, h}^1, \quad \text{en } \Gamma_E, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.42)$$

donde $Z_{iE, h}^1$ y $Z_{i, h}^0$ se han obtenido a partir de Z_{iE}^1 y Z_i^0 , respectivamente, por interpolación.

Problema 5.3. Encontrar una función $H_h^1 \in W_h^2$ tal que

$$\begin{aligned} a_{Z_1}^1(H_h^1, z_h) = & \int_{\Omega} f_H^1 z_h dx - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^0 Z_{i, h}^0 \circ \mathcal{X}_h^{0,1} z_h dx \\ & + \int_{\Gamma_P} h_w (\theta_P - \theta^0) z_h dA, \quad \forall z_h \in W_{0h}^2, \end{aligned} \quad (5.43)$$

sujeta a la condición de contorno

$$H_h^1 = H_{E, h}^1 \quad \text{en } \Gamma_E, \quad (5.44)$$

donde $H_{E, h}^1$ y H_h^0 se han obtenido por interpolación a partir de H_E^1 y H^0 , respectivamente.

Para $n \geq 1$:

Problema 5.4. Dadas $Z_{i, h}^{n-1}$, $Z_{i, h}^n \in W_h^2$, encontrar funciones $Z_{i, h}^{n+1} \in W_h^2$, con $i = 1, \dots, 4$, tales que

$$\begin{aligned} a_{Z_2}^{n+1}(Z_{i, h}^{n+1}, z_h) = & \int_{\Omega} f_i^{n+1} z_h dx + \frac{2}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^n Z_{i, h}^n \circ \mathcal{X}_h^{n, n+1} z_h dx \\ & - \frac{1}{2\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^n Z_{i, h}^{n-1} \circ \mathcal{X}_h^{n-1, n+1} z_h dx, \quad \forall z_h \in W_{0h}^2, \quad i = 1, \dots, 4, \end{aligned} \quad (5.45)$$

y verificando las condiciones de contorno

$$Z_{i, h}^{n+1} = Z_{iE, h}^{n+1} \quad \text{en } \Gamma_E, \quad i = 1, \dots, 4. \quad (5.46)$$

Problema 5.5. Dadas H_h^{n-1} , $H_h^n \in W_h^2$, encontrar una función $H_h^{n+1} \in W_h^2$ tal que

$$\begin{aligned} a_{Z_2}^{n+1}(H_h^{n+1}, z_h) &= \int_{\Omega} f_H^{n+1} z_h dx + \frac{2}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^n H_h^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1} z_h dx \\ &- \frac{1}{2\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^n H_h^{n-1} \circ \mathcal{X}_h^{n-1,n+1} z_h dx + \int_{\Gamma_P} h_w (\theta_P - \theta^n) z_h dA, \quad \forall z_h \in W_{0h}^2, \end{aligned} \quad (5.47)$$

y además

$$H_h^{n+1} = H_{E,h}^{n+1} \text{ en } \Gamma_E. \quad (5.48)$$

Una vez resueltos estos problemas en cada instante, se tienen que calcular las fracciones másicas y la entalpía térmica de la mezcla.

Si suponemos cierta la hipótesis de Burke-Schumann; una vez calculado Z_1 podemos determinar las regiones Ω_O y Ω_F , así como la zona que ocupa la llama de difusión que las separa Γ_F . Como vimos en el Capítulo 2, si nos encontramos en la región Ω_O , se tiene que $Y_V = Y_{H_2} = Y_{CO} = 0$ y, por lo tanto,

$$Y_{O_2} = Z_1, \quad Y_{CO_2} = Z_2, \quad Y_{H_2O} = Z_3, \quad Y_{SO_2} = Z_4, \quad h_T = H, \quad (5.49)$$

mientras que si estamos en Ω_F tendremos que resolver, además, dos de las tres ecuaciones de conservación de la masa de los combustibles. Así, por ejemplo, tendremos que resolver numéricamente el problema continuo siguiente:

Problema 5.6. Encontrar funciones $Y_V, Y_{H_2} : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ tales que

$$\rho \dot{Y}_V - \text{div} \left(\left(\frac{k_T}{c_\pi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \text{grad } Y_V \right) + f^m Y_V = f_V^m, \text{ en } \Omega_F \quad (5.50)$$

$$\rho \dot{Y}_{H_2} - \text{div} \left(\left(\frac{k_T}{c_\pi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \text{grad } Y_{H_2} \right) + f^m Y_{H_2} = f_{H_2}^m, \text{ en } \Omega_F, \quad (5.51)$$

$$Y_V = Y_{H_2} = 0, \text{ en } \Omega_O, \quad (5.52)$$

junto con las condiciones de contorno

$$Y_V = Y_{H_2} = 0 \text{ en } \Gamma_F \times [0, T], \quad (5.53)$$

$$Y_V = Y_V^E, \quad Y_{H_2} = Y_{H_2}^E \text{ en } \Gamma_E \times [0, T], \quad (5.54)$$

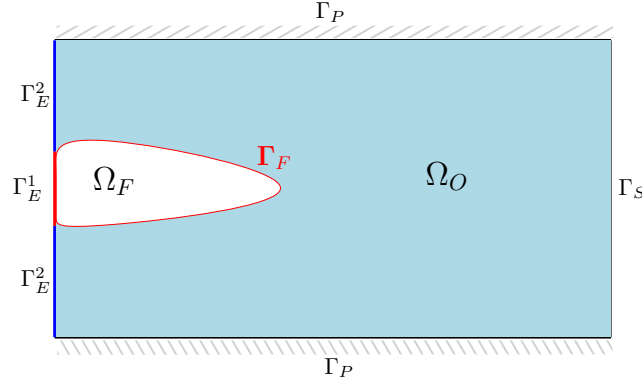
$$\frac{\partial Y_V}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial Y_{H_2}}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ en } (\Gamma_P \cup \Gamma_S) \times [0, T], \quad (5.55)$$

y las condiciones iniciales

$$Y_V(x, 0) = Y_V^0(x), \quad \forall x \in \Omega, \quad (5.56)$$

$$Y_{H_2}(x, 0) = Y_{H_2}^0(x), \quad \forall x \in \Omega. \quad (5.57)$$

En este caso, como los volátiles y el H_2 son nulos en Ω_O , vamos a considerar como dominio computacional Ω_F . La frontera de este dominio viene dada por la llama de difusión Γ_F y por las partes de la frontera Γ que intersecan con la clausura $\overline{\Omega_F}$. Por ejemplo, consideremos un caso simple como el esquematizado en la Figura 5.2. En ese ejemplo suponemos que entran

Figura 5.2: Ejemplo de una configuración de Ω_F

combustibles por Γ_E^1 y oxígeno por Γ_E^2 . De esta forma, se tendría una llama de difusión anclada a la entrada Γ_E^1 , siendo la frontera de Ω_F igual a $\Gamma_F \cup \Gamma_E^1$. Para simplificar la escritura introducimos las siguientes definiciones

$$\Gamma_E^F := \overline{\Omega_F} \cap \Gamma_E, \quad (5.58)$$

$$\Gamma_S^F := \overline{\Omega_F} \cap \Gamma_S, \quad (5.59)$$

$$\Gamma_P^F := \overline{\Omega_F} \cap \Gamma_P. \quad (5.60)$$

Las fracciones másicas Y_V e Y_{H_2} verifican las siguientes condiciones de contorno

$$Y_V = Y_V^E, \quad Y_{H_2} = Y_{H_2}^E, \quad \text{en } \Gamma_E^F \times [0, T], \quad (5.61)$$

$$\frac{\partial Y_V}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial Y_{H_2}}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \text{en } (\Gamma_S^F \cup \Gamma_P^F) \times [0, T], \quad (5.62)$$

$$Y_V = Y_{H_2} = 0, \quad \text{en } \Gamma_F \times [0, T]. \quad (5.63)$$

Utilizando estas notaciones podemos definir los espacios

$$L_0^F = \{z \in H^1(\Omega_F) : z = 0 \text{ en } \Gamma_F\}, \quad (5.64)$$

$$L_0 = \{z \in H^1(\Omega_F) : z = 0 \text{ en } \Gamma_E^F \cup \Gamma_F\}. \quad (5.65)$$

Si multiplicamos las ecuaciones del Problema 5.6 por una función test $z \in L_0$, integramos en Ω_F , aplicamos Green y tenemos en cuenta las condiciones de contorno (5.61)-(5.63) obtenemos el problema débil siguiente:

Problema 5.7. Encontrar $Y_V(\cdot, t), Y_{H_2}(\cdot, t) \in L_0^F$ verificando (5.61) y tales que

$$\int_{\Omega_F} \rho \dot{Y}_V z dx + \int_{\Omega_F} \left(\frac{k_T}{c_\pi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \text{grad } Y_V \cdot \text{grad } z dx + \int_{\Omega_F} f^m Y_V z dx = \int_{\Omega_F} f_V^m z dx, \quad \forall z \in L_0, \forall t \in (0, T), \quad (5.66)$$

$$\int_{\Omega_F} \rho \dot{Y}_{H_2} z dx + \int_{\Omega_F} \left(\frac{k_T}{c_\pi} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \text{grad } Y_{H_2} \cdot \text{grad } z dx + \int_{\Omega_F} f^m Y_{H_2} z dx = \int_{\Omega_F} f_{H_2}^m z dx, \quad \forall z \in L_0, \forall t \in (0, T). \quad (5.67)$$

Sea $n \in \{0, \dots, N-1\}$ y supongamos que hemos obtenido $Z_{1,h}^{n+1}$ resolviendo el Problema 5.2, si $n = 0$, o el Problema 5.4, si $n \geq 1$. Dada la dificultad de definir la geometría de la llama Γ_F^{n+1} a partir de la función $Z_{1,h}^{n+1}$ y, por lo tanto, del dominio Ω_F^{n+1} , vamos a emplear la siguiente metodología:

1. Definimos el subconjunto de los nodos de la malla

$$S_0^{n+1} = \left\{ \beta_i : Z_{1,h}^{n+1}(\beta_i) > 0 \right\}. \quad (5.68)$$

2. Construimos los espacios discretos

$$L_{0h}^{F,n+1} := \{z_h \in W_h^2 : z_h(x) = 0, \forall x \in S_0^{n+1}\}, \quad (5.69)$$

$$L_{0h}^{n+1} := \{z_h \in L_{0h}^{F,n+1} : z_h(x) = 0, \forall x \in \Gamma_E^F\}, \quad (5.70)$$

para intentar aproximar L_0^F y L_0 , respectivamente, en cada instante de tiempo t_{n+1} . Aunque estos espacios están formados por funciones definidas en Ω , se anulan en los nodos de la malla que están en Ω_O .

3. Definimos los siguientes problemas:

Para $n = 1$:

Problema 5.8. Encontrar $Y_{V,h}^1 \in L_{0h}^{F,1}$ tal que

$$a_{Z_1}^1(Y_{V,h}^1, z_h) = \int_{\Omega} (f_V^m)^1 z_h dx - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^0 Y_{V,h}^0 \circ \mathcal{X}_h^{0,1} z_h dx, \quad \forall z_h \in L_{0h}^1, \quad (5.71)$$

sujeta a la condición de contorno

$$Y_{V,h}^1 = Y_{VE,h}^1 \text{ en } \Gamma_E^F, \quad (5.72)$$

con $Y_{VE,h}^1$ obtenida por interpolación a partir de $Y_V^E(\cdot, t_1)$.

Problema 5.9. Encontrar $Y_{H_2,h}^1 \in L_{0h}^{F,1}$ tal que

$$a_{Z_1}^1(Y_{H_2,h}^1, z_h) = \int_{\Omega} (f_{H_2}^m)^1 z_h dx - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^0 Y_{H_2,h}^0 \circ \mathcal{X}_h^{0,1} z_h dx, \quad \forall z_h \in L_{0h}^1, \quad (5.73)$$

sujeta a la condición de contorno

$$Y_{H_2,h}^1 = Y_{H_2E,h}^1 \text{ en } \Gamma_E^F \quad (5.74)$$

con $Y_{H_2E,h}^1$ obtenida por interpolación a partir de $Y_{H_2}^E(\cdot, t_1)$.

Para $n \geq 1$:

Problema 5.10. Dadas $Y_{V,h}^{n-1} \in L_{0h}^{F,n-1}$ y $Y_{V,h}^n \in L_{0h}^{F,n}$, encontrar $Y_{V,h}^{n+1} \in L_{0h}^{F,n+1}$ tal que

$$\begin{aligned} a_{Z_2}^1(Y_{V,h}^{n+1}, z_h) &= \int_{\Omega} (f_V^m)^{n+1} z_h dx + \frac{2}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^n Y_{V,h}^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1} z_h dx \\ &- \frac{1}{2\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^n Y_{V,h}^{n-1} \circ \mathcal{X}_h^{n-1,n+1} z_h dx, \quad \forall z_h \in L_{0h}^{n+1} \end{aligned} \quad (5.75)$$

y verificando

$$Y_{V,h}^{n+1} = I_{h,\Gamma_E}^2(Y_V^E(\cdot, t_{n+1})) \text{ en } \Gamma_E^F. \quad (5.76)$$

Problema 5.11. Dadas $Y_{H_2,h}^{n-1} \in L_{0h}^{F,n-1}$ y $Y_{H_2,h}^n \in L_{0h}^{F,n}$, encontrar $Y_{H_2,h}^{n+1} \in L_{0h}^{F,n+1}$ tal que

$$\begin{aligned} a_{Z_2}^1(Y_{H_2,h}^{n+1}, z_h) &= \int_{\Omega} (f_{H_2}^m)^{n+1} z_h dx + \frac{2}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^n Y_{H_2,h}^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1} z_h dx \\ &- \frac{1}{2\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^n Y_{H_2,h}^{n-1} \circ \mathcal{X}_h^{n-1,n+1} z_h dx, \quad \forall z_h \in L_{0h}^{n+1} \end{aligned} \quad (5.77)$$

y verificando

$$Y_{H_2,h}^{n+1} = I_{h,\Gamma_E}^2(Y_{H_2}^E(\cdot, t_{n+1})) \text{ en } \Gamma_E^F. \quad (5.78)$$

Observación 5.2.1. En los problemas que acabamos de definir, las condiciones iniciales $Y_{V,h}^0$ e $Y_{H_2,h}^0$ se obtienen con el interpolante I_h^2 y, por lo tanto, están definidas en todo Ω . De forma análoga, en cada instante de tiempo, las condiciones de contorno $I_{h,\Gamma_E}^2(Y_V^E)$ y $I_{h,\Gamma_E}^2(Y_{H_2}^E)$ están definidas en toda la frontera Γ_E aunque sólo vamos a utilizar sus valores en los nodos de $\Gamma_E \cap \Gamma_F$ dado que en $\Gamma_E \setminus (\Gamma_E \cap \Gamma_F)$ valen 0.

Una vez que resolvemos estos problemas, podemos recuperar el valor de las fracciones másicas y de la entalpía térmica en la región Ω_F^{n+1} . Así, dado un nodo de la malla β_i , si $Z_1^{n+1}(\beta_i) < 0$, tendremos

$$Y_{O_2,h}^{n+1}(\beta_i) = 0, \quad (5.79)$$

$$Y_{CO,h}^{n+1}(\beta_i) = -\frac{7}{4} \left(Z_{1,h}^{n+1} + \frac{32\nu_1}{\mathcal{M}_V} Y_{V,h}^{n+1} + 8Y_{H_2,h}^{n+1} \right), \quad (5.80)$$

$$Y_{CO_2,h}^{n+1}(\beta_i) = Z_{2,h}^{n+1} - \frac{11}{7} Y_{CO,h}^{n+1} - \frac{44\nu_2}{\mathcal{M}_V} Y_{V,h}^{n+1}, \quad (5.81)$$

$$Y_{H_2O,h}^{n+1}(\beta_i) = Z_{3,h}^{n+1} - \frac{18\nu_3}{\mathcal{M}_V} Y_{V,h}^{n+1} - 9Y_{H_2,h}^{n+1}, \quad (5.82)$$

$$h_{T,h}^{n+1}(\beta_i) = H_h^{n+1} - q_6 Y_{CO,h}^{n+1} - q_7 Y_{V,h}^{n+1} - q_8 Y_{H_2,h}^{n+1}, \quad (5.83)$$

y, en caso contrario,

$$Y_{V,h}^{n+1}(\beta_i) = Y_{H_2,h}^{n+1}(\beta_i) = Y_{CO,h}^{n+1}(\beta_i) = 0, \quad (5.84)$$

$$Y_{O_2,h}^{n+1}(\beta_i) = Z_{1,h}^{n+1}(\beta_i), \quad (5.85)$$

$$Y_{CO_2}^{n+1}(\beta_i) = Z_{2,h}^{n+1}(\beta_i), \quad (5.86)$$

$$Y_{H_2O,h}^{n+1}(\beta_i) = Z_{3,h}^{n+1}(\beta_i), \quad (5.87)$$

$$Y_{SO_2}^{n+1}(\beta_i) = Z_{4,h}^{n+1}(\beta_i), \quad (5.88)$$

$$h_{T,h}^{n+1}(\beta_i) = H_h^{n+1}(\beta_i). \quad (5.89)$$

5.2.2. Conservación de k y ϵ

Suponemos conocidas las funciones ρ , \mathbf{v} , μ y f^m . Entonces, para obtener la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación turbulenta debemos resolver el problema continuo:

Problema 5.12. *Encontrar funciones $k : \overline{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ y $\epsilon : \overline{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ tales que*

$$\rho \dot{k} - \operatorname{div} \left(\left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma_k} \right) \operatorname{grad} k \right) + f^m k = P_k - \rho \epsilon, \quad (5.90)$$

$$\rho \dot{\epsilon} - \operatorname{div} \left(\left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma_\epsilon} \right) \operatorname{grad} \epsilon \right) + f^m \epsilon = C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}, \quad (5.91)$$

junto con las condiciones de contorno (5.19), (5.20), (5.22) y (5.24) y las condiciones iniciales

$$k(x, 0) = k^0(x), \quad \forall x \in \Omega \quad (5.92)$$

$$\epsilon(x, 0) = \epsilon^0(x), \quad \forall x \in \Omega \quad (5.93)$$

con $k^0 : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ y $\epsilon^0 : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ funciones dadas.

Además de las limitaciones del modelo $k - \epsilon$ para simular cierto tipo de flujos como, por ejemplo, en regiones con número de Reynolds pequeño, la resolución numérica de las ecuaciones de este modelo presenta dificultades que han sido objeto de numerosos estudios que podemos encontrar en la literatura. Los principales problemas son la preservación de la positividad de k y ϵ , algo esencial por razones físicas y matemáticas, y la posible inestabilidad del método debida a la no linealidad de las ecuaciones. En Mohammadi y Pironneau [74] encontramos un análisis de estas dificultades cuando se utilizan métodos de tipo Lagrange-Galerkin y el planteamiento de algunos métodos para solventarlas.

Si consideramos de nuevo el espacio W_0 definido en (5.31) y seguimos un procedimiento análogo al realizado para obtener el Problema 5.1, obtenemos el problema débil siguiente:

Problema 5.13. *Encontrar $k(\cdot, t), \epsilon(\cdot, t) \in H^1(\Omega)$ tales que $k|_{\Gamma_E} = k_E$, $\epsilon|_{\Gamma_E} = \epsilon_E$ y*

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \dot{k} z dx + \int_{\Omega} \left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma_k} \right) \operatorname{grad} k \cdot \operatorname{grad} z dx + \int_{\Omega} f^m k z dx \\ = \int_{\Omega} P_k z - \int_{\Omega} \rho \epsilon z dx, \quad \forall z \in W_0, \quad \forall t \in (0, T), \end{aligned} \quad (5.94)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \dot{\epsilon} z dx + \int_{\Omega} \left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma_\epsilon} \right) \operatorname{grad} \epsilon \cdot \operatorname{grad} z dx + \int_{\Omega} f^m \epsilon z dx \\ = C_{1\epsilon} \int_{\Omega} \frac{\epsilon}{k} P_k z dx - C_{2\epsilon} \int_{\Omega} \rho \frac{\epsilon^2}{k} z dx, \quad \forall z \in W_0, \quad \forall t \in (0, T), \end{aligned} \quad (5.95)$$

con

$$k(x, 0) = k^0(x), \quad \epsilon(x, 0) = \epsilon^0(x), \quad \forall x \in \Omega. \quad (5.96)$$

Para la discretización de este problema hemos elegido un método de Lagrange-Galerkin de primer orden en tiempo y segundo orden en espacio. Para la aproximación de las derivadas materiales de las ecuaciones utilizamos la fórmula (5.26) y para la discretización espacial de las ecuaciones (5.94) y (5.95) utilizaremos, como en el caso anterior, elementos finitos

cuadráticos. Si denotamos las aproximaciones de $k^n = k(\cdot, t_n)$ y $\epsilon^n = \epsilon(\cdot, t_n)$ en el espacio W_h^2 por k_h^n y ϵ_h^n , la viscosidad turbulenta obtenida con estos valores será

$$\mu_{t,h}^n := \rho_h^n C_\mu \frac{(k_h^n)^2}{\epsilon_h^n} \quad (5.97)$$

y el parámetro w será aproximado por

$$w_h^n = \frac{\epsilon_h^n}{k_h^n}. \quad (5.98)$$

Definimos, además, las formas bilineales $a_k^{n+1}, a_\epsilon^{n+1} : H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ como

$$\begin{aligned} a_k^{n+1}(u, v) &:= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^{n+1} u v dx + \int_{\Omega} \left(\mu_h^{n+1} + \frac{\mu_{t,h}^n}{\sigma_k} \right) \text{grad } u \cdot \text{grad } v dx \\ &+ \int_{\Omega} ((f^m)^{n+1} + \rho_h^{n+1} w_h^n) u v dx, \end{aligned} \quad (5.99)$$

$$\begin{aligned} a_\epsilon^{n+1}(u, v) &:= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^{n+1} u v dx + \int_{\Omega} \left(\mu_h^{n+1} + \frac{\mu_{t,h}^n}{\sigma_\epsilon} \right) \text{grad } u \cdot \text{grad } v dx \\ &+ \int_{\Omega} ((f^m)^{n+1} + C_{2\epsilon} \rho_h^{n+1} w_h^n) u v dx, \end{aligned} \quad (5.100)$$

con $u, v \in H^1(\Omega)$, para cada $n \in \{0, \dots, N-1\}$.

Nota 5.2.1. La densidad y la viscosidad laminar se obtienen a partir de los valores aproximados de las fracciones másicas y de la temperatura de la mezcla. Si para calcular k y ϵ en t_{n+1} , resolvemos antes las ecuaciones de las especies y de la energía, tendremos las aproximaciones de la densidad y de la viscosidad laminar en ese instante, que hemos denotado como ρ_h^{n+1} y μ_h^{n+1} , respectivamente.

Para resolver las ecuaciones del modelo $k - \epsilon$, proponemos una discretización semi-implícita que nos permite resolver de forma desacoplada las ecuaciones del Problema 5.13. Así, para cada $n \in \{0, \dots, N-1\}$, resolveremos los dos problemas siguientes:

Problema 5.14. Dada $k_h^n \in W_h^2$, encontrar una función $k_h^{n+1} \in W_h^2$ con $k_h^{n+1} = k_{E,h}^{n+1}$ en Γ_E , tal que

$$a_k^{n+1}(k_h^{n+1}, z_h) = (f_k^n, z_h), \quad \forall z_h \in W_{0h}^2 \quad (5.101)$$

siendo

$$f_k^n := P_{k,h}^n + \frac{1}{\Delta t} \rho_h^{n+1} k_h^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1}. \quad (5.102)$$

Problema 5.15. Dada $\epsilon_h^n \in W_h^2$, encontrar $\epsilon_h^{n+1} \in W_h^2$ verificando $\epsilon_h^{n+1} = \epsilon_{E,h}^{n+1}$ en Γ_E y

$$a_\epsilon^{n+1}(\epsilon_h^{n+1}, z_h) = (f_\epsilon^n, z_h), \quad \forall z_h \in W_{0h}^2 \quad (5.103)$$

con

$$f_\epsilon^n := C_{1\epsilon} w_h^n P_{k,h}^n + \frac{1}{\Delta t} \rho_h^{n+1} \epsilon_h^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1}. \quad (5.104)$$

En cada instante t_{n+1} , las condiciones de contorno $k_{E,h}^{n+1}$ y $\epsilon_{E,h}^{n+1}$ son polinomios de grado 2 cuando se restringen a cada cara de la frontera Γ_E y se obtienen interpolando las funciones k_E^{n+1} y ϵ_E^{n+1} , respectivamente, que supondremos continuas sobre Γ_E .

Si estos problemas se resuelven para $n = 0$, debemos tener en cuenta que k_h^0 y ϵ_h^0 , se obtienen a partir de las funciones dadas $k^0 \in C^0(\bar{\Omega})$ y $\epsilon^0 \in C^0(\bar{\Omega})$, respectivamente, utilizando interpolación de Lagrange.

Observación 5.2.2. *En Mohammadi y Pironneau [74] proponen esta misma discretización temporal, pero con elementos finitos lineales, y se dice que ese método no es muy estable. Además, se propone un método combinado de elementos y volúmenes finitos, en el que se resuelven las ecuaciones en dos etapas: una convectiva y otra difusiva. La etapa de transporte convectivo la resuelven utilizando el método de características. En Codina y Soto [34] se da otra discretización temporal que necesita de la realización de dos bucles internos en cada paso de tiempo, lo que implica un elevado coste computacional inviable para un método LG tridimensional.*

Dado que hemos decidido emplear métodos de elementos finitos de segundo orden para todas las ecuaciones de tipo convección-difusión-reacción que aparecen en la memoria, también empleamos el mismo método para estos problemas. El inconveniente con el que nos encontramos para estas ecuaciones es que ese método no garantiza la positividad de k y ϵ , por lo que proponemos algunas estrategias para conseguirla, así como para evitar inestabilidades debidas a los términos de reacción:

- Acotamos inferiormente k por 10^{-3} y ϵ por 2×10^{-3} .
- Calculamos $\mu_{t,h}^n$ como

$$\mu_{t,h}^n = \max \left[\min \left(\rho_h^n C_\mu \frac{(k_h^n)^2}{\epsilon_h^n}, \mu_{max}^n \right), \mu_{min}^n \right] \quad (5.105)$$

y w^n de la forma

$$w^n = \max \left(\rho_h^n C_\mu \frac{k_h^n}{\mu_{t,h}^n}, 10^{-5} \right). \quad (5.106)$$

Los valores μ_{max}^n y μ_{min}^n se definen en función de la viscosidad laminar. Por ejemplo, como valores habituales tomaremos $\mu_{max}^n = 10^4 \mu_h^n$ y $\mu_{min}^n = 10^{-2} \mu_h^n$. La idea para estas acotaciones se ha tomado de las propuestas dadas en Kuzmin *et al* [65] y Lew *et al* [66] para flujos incompresibles.

- Limitación de la producción de k . En Han *et al* [53] se propone una cota superior para la producción de la energía cinética turbulenta en flujos compresibles dada por

$$P_{k-lim} = \sqrt{\frac{8}{3}} \rho k \left\| \mathbb{D} - \frac{1}{3} \text{div} \mathbf{v} \mathbb{I} \right\| - \frac{2}{3} \rho k \text{div} \mathbf{v}. \quad (5.107)$$

En FLUENT se propone calcular la producción de k de la forma

$$P_k = 2(\mu_t + \mu) \|\mathbb{D}\|^2, \quad (5.108)$$

en el caso de usar el modelo $k - \epsilon$ estándar.

Los resultados obtenidos con estas dos propuestas y con la producción de la turbulencia calculada por la fórmula (5.10) fueron muy diferentes en las pruebas realizadas. En el caso de flujos transicionales o poco turbulentos hemos obtenido mejores resultados con la producción dada por (5.108).

- Si utilizamos la fórmula de cuadratura de los vértices para aproximar todas las integrales del problema discreto, hemos visto que el método es más estable, y que k y ϵ son siempre positivos sin necesidad de acotaciones. Este mismo resultado se obtiene si utilizamos, con el mismo elemento finito, el método semi-Lagrangiano propuesto en 3.9.1. Para la resolución de las ecuaciones del modelo $k - \epsilon$ hemos implementado el método de Lagrange-Galerkin de segundo orden en tiempo, resultado de utilizar la fórmula BDF2, pero los resultados obtenidos en los problemas resueltos no fueron satisfactorios porque, para estas ecuaciones, la precisión no era mucho mayor y aparecían inestabilidades en muchos casos.

Estas técnicas han funcionado en diversos test académicos pero se hace necesario un estudio más profundo de la resolución numérica de estas ecuaciones para desarrollar un método más robusto. Además, como comentamos antes, es necesario la modificación del modelo para zonas con bajo número de Reynolds, utilizando leyes de pared o con variaciones del modelo como, por ejemplo, el modelo $k - \epsilon$ para bajo número de Reynolds de Chien [30] probado por Kuzmin *et al* en [65] para el test del flujo en un escalón.

5.2.3. Conservación de la masa y cantidad de movimiento

Supongamos conocidas las funciones ρ , k , μ_t y f^m . Resolveremos de forma acoplada la ecuación del movimiento junto con la ecuación de conservación de la masa, que se utilizará como una restricción para la velocidad. Así, teniendo en cuenta que $\rho(x, t) > 0$, $\forall (x, t) \in \Omega \times [0, T]$, si escribimos la ecuación (5.5) como

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \frac{1}{\rho} (f^m - \dot{\rho}), \quad (5.109)$$

para obtener la velocidad y la presión resolveremos el problema acoplado siguiente:

Problema 5.16. *Encontrar dos funciones $\mathbf{v} : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^3$ y $\pi : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ tales que*

$$\begin{aligned} \rho \dot{\mathbf{v}} - \operatorname{div} (\mathbb{T}_v + \mathbb{T}_t) + \operatorname{grad} \pi + f^m \mathbf{v} &= \rho \mathbf{g}, \\ \operatorname{div} \mathbf{v} &= \frac{1}{\rho} (f^m - \dot{\rho}), \end{aligned} \quad (5.110)$$

junto con las condiciones de contorno (5.16), (5.21), (5.23) y la condición inicial

$$\mathbf{v}(x, 0) = \mathbf{v}^0(x), \quad \forall x \in \Omega, \quad (5.111)$$

con $\mathbf{v}^0 : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^3$ dada.

Como se puede observar, las ecuaciones (5.110) son las ecuaciones de Navier-Stokes generalizadas para fluidos compresibles con divergencia conocida y, como veremos, su resolución será similar a la de las ecuaciones para un flujo incompresible vista en el Capítulo 4.

Si definimos el espacio funcional

$$\mathbf{V}_0 = \{\mathbf{w} \in H^1(\Omega) : \mathbf{w} = 0 \text{ en } \Gamma_E \cup \Gamma_P\}, \quad (5.112)$$

y tenemos en cuenta las fórmulas de Green (ver Gurtin [52]):

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} S \mathbf{w} dx = - \int_{\Omega} S \cdot \operatorname{grad} \mathbf{w} dx + \int_{\Gamma} S \mathbf{n} \mathbf{w} d\Gamma, \quad (5.113)$$

$$\int_{\Omega} \operatorname{grad} \varphi \mathbf{w} dx = - \int_{\Omega} \varphi \operatorname{div} \mathbf{w} dx + \int_{\Gamma} \varphi \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} d\Gamma, \quad (5.114)$$

siendo S un campo tensorial, \mathbf{w} un campo vectorial y φ un campo escalar, podemos obtener la formulación variacional de las ecuaciones del Problema 5.16, resultando el siguiente:

Problema 5.17. *Encontrar funciones $\mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$ y $\pi \in H^1(\Omega)$ tales que*

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{w} dx + \int_{\Omega} (\mu + \mu_t) (\operatorname{grad} \mathbf{v} + \operatorname{grad} \mathbf{v}^t) \cdot \operatorname{grad} \mathbf{w} dx \\ - \frac{2}{3} \int_{\Omega} (\mu + \mu_t) \operatorname{div} \mathbf{v} \operatorname{div} \mathbf{w} dx - \int_{\Omega} \left(\pi + \frac{2}{3} \rho k \right) \operatorname{div} \mathbf{w} dx \\ + \int_{\Omega} f^m \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} dx = \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{w} dx, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{V}_0, \\ \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{v} q dx = \int_{\Omega} \frac{1}{\rho} (f^m - \dot{\rho}) q dx, \quad \forall q \in L^2(\Omega), \end{aligned} \quad (5.115)$$

sujetas a las condiciones de contorno

$$\mathbf{v}(\cdot, t) = \mathbf{v}_E(\cdot, t) \text{ en } \Gamma_E, \mathbf{v}(\cdot, t) = \mathbf{v}_{\infty}(\cdot, t) \text{ en } \Gamma_P, \quad (5.116)$$

y verificando la condición inicial

$$\mathbf{v}(x, 0) = \mathbf{v}^0(x), \forall x \in \Omega. \quad (5.117)$$

Para la resolución numérica del problema débil obtenido utilizaremos un método de Lagrange-Galerkin de segundo orden en tiempo.

En primer lugar, para calcular la divergencia de la velocidad, discretizaremos $\dot{\rho}(x, t_{n+1})$ con la fórmula BDF1, de forma que $\operatorname{div} \mathbf{v}^{n+1} \approx f_d^{n+1}$, con

$$f_d^{n+1} = \frac{1}{\rho^{n+1}} \left((f^m)^{n+1} - \frac{\rho^{n+1} - \rho^n \circ \mathcal{X}^{n,n+1}}{\Delta t} \right). \quad (5.118)$$

Los elementos finitos elegidos, que podemos ver en la Figura 5.3, son los \mathbb{P}_1 – *burbuja* para la velocidad y \mathbb{P}_1 para la presión (elemento P1-burbuja/P1 o MINI-elemento). Así,

aproximaremos $\mathbf{H}^1(\Omega)$, \mathbf{V}_0 y $H^1(\Omega)$ por sus subespacios de dimensión finita V_h , V_{h0} y W_h^1 , respectivamente, definidos como

$$\mathbf{V}_h = \{\mathbf{w}_h \in [C^0(\bar{\Omega})]^3 : \mathbf{w}_h|_{T_j} \in P_b(T_j)^3, \forall T_j \in \Omega_h\}, \quad (5.119)$$

$$\mathbf{V}_{h0} = \{\mathbf{w}_h \in X_h : \mathbf{w}_h = 0 \text{ en } \Gamma_E \cup \Gamma_P\}, \quad (5.120)$$

$$W_h^1 = \{q_h \in C^0(\bar{\Omega}) : q_h|_{T_j} \in P_1(T_j)\}, \quad (5.121)$$

donde $P_1(T_j)$ y $P_b(T_j)$ son los espacios

$$P_1(T_j) = \{p|_{T_j} : p : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R} \text{ polinomio de grado } \leq 1\}, \quad (5.122)$$

$$P_b(T_j) = \{p + \alpha \lambda_5^j : p \in P_1(T_j), \alpha \in \mathbb{R}\}, \quad (5.123)$$

siendo $\lambda_5^j = 256 \prod_{i=1}^4 \lambda_i^j$ la función burbuja asociada al elemento T_j con λ_i^j , $i = 1, \dots, 4$ denotando las coordenadas baricéntricas respecto a los vértices del elemento T_j .

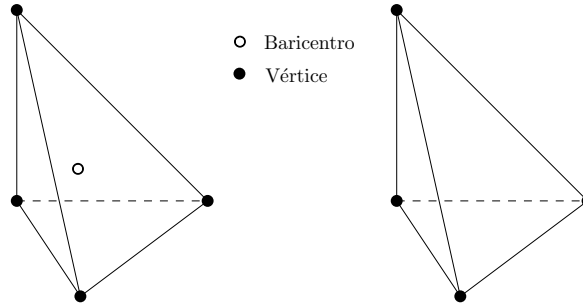


Figura 5.3: Elementos finitos \mathbb{P}_b y \mathbb{P}_1

Si la condición inicial dada $\mathbf{v}^0 \in C^0(\bar{\Omega})$, definimos \mathbf{v}_h^0 como su interpolación sobre el espacio \mathbf{V}_h . Suponemos que, para cada $n \in \{0, \dots, N-1\}$, las funciones \mathbf{v}_E^{n+1} y \mathbf{v}_∞^{n+1} son funciones continuas sobre Γ_E y Γ_P , respectivamente, y definimos $\mathbf{v}_{E,h}^{n+1}$ y $\mathbf{v}_{\infty,h}^{n+1}$ como sus interpolaciones de tipo Lagrange. Estas interpolaciones, restringidas a los tetraedros de la frontera, serán polinomios de grado 1 que están unívocamente determinadas por los valores de \mathbf{v}_E^{n+1} y \mathbf{v}_∞^{n+1} en los vértices de la malla que pertenecen a las fronteras Γ_E y Γ_P , respectivamente.

Para poder desacoplar las ecuaciones del Problema 5.17 del resto de las ecuaciones del modelo vamos a suponer que conocemos ρ_h^{n+1} y μ_h^{n+1} cuando vamos a calcular $(\mathbf{v}_h^{n+1}, \pi_h^{n+1})$, para $n \in \{0, \dots, N-1\}$.

Si definimos las formas bilineales $a_1^{n+1}(\cdot, \cdot)$, $a_2^{n+1}(\cdot, \cdot)$ y $b^{n+1}(\cdot, \cdot)$ como

$$\begin{aligned} a_1^{n+1}(\mathbf{v}, \mathbf{w}) &= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^{n+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} dx + \int_{\Omega} (f^m)^{n+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} dx \\ &+ \int_{\Omega} \mu_h^{n+1} (\text{grad } \mathbf{v} + (\text{grad } \mathbf{v})^t) \cdot \text{grad } \mathbf{w} dx \\ &- \frac{2}{3} \int_{\Omega} \mu_h^{n+1} \text{div} \mathbf{v} \text{div} \mathbf{w} dx \end{aligned} \quad (5.124)$$

$$\begin{aligned} a_2^{n+1}(\mathbf{v}, \mathbf{w}) &= \frac{3}{2\Delta t} \int_{\Omega} \rho_h^{n+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} dx + \int_{\Omega} (f^m)^{n+1} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} dx \\ &+ \int_{\Omega} \mu_h^{n+1} (\text{grad } \mathbf{v} + (\text{grad } \mathbf{v})^t) \cdot \text{grad } \mathbf{w} dx \\ &- \frac{2}{3} \int_{\Omega} \mu_h^{n+1} \text{div} \mathbf{v} \text{div} \mathbf{w} dx \end{aligned} \quad (5.125)$$

$$b^{n+1}(\mathbf{v}, q) = - \int_{\Omega} q \text{div} \mathbf{v} dx, \quad (5.126)$$

tenemos los siguientes problemas discretizados:

Para $n = 1$:

Problema 5.18. Encontrar dos funciones $\mathbf{v}_h^1 \in \mathbf{V}_h$ y $\bar{\pi}_h^1 \in W_h^1$ tales que

$$a_1^1(\mathbf{v}_h^1, \mathbf{w}_h) + b^1(\mathbf{w}_h, \bar{\pi}_h^1) = (\mathbf{f}_{v1,h}^1, \mathbf{w}_h), \quad \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{h0}, \quad (5.127)$$

$$b^1(\mathbf{v}_h^1, q_h) = -(f_{dh}^1, q_h), \quad \forall q_h \in W_h^1, \quad (5.128)$$

donde

$$\mathbf{f}_{v1,h}^1 = \rho_h^1 \mathbf{g} - \frac{1}{\Delta t} \rho_h^1 \mathbf{v}_h^0 \circ \mathcal{X}_h^{0,1}, \quad (5.129)$$

$$f_{dh}^1 = \frac{1}{\rho_h^1} \left((f^m)^1 - \frac{\rho_h^1 - \rho_h^0 \circ \mathcal{X}_h^{0,1}}{\Delta t} \right), \quad (5.130)$$

verificando las condiciones de contorno

$$\mathbf{v}_h^1|_{\Gamma_E} = \mathbf{v}_{E,h}^1, \quad \mathbf{v}_h^1|_{\Gamma_P} = \mathbf{v}_{\infty,h}^1. \quad (5.131)$$

Para $n \geq 1$:

Problema 5.19. Dadas \mathbf{v}_h^{n-1} , $\mathbf{v}_h^n \in \mathbf{V}_h$, encontrar $\mathbf{v}_h^{n+1} \in \mathbf{V}_h$ y $\bar{\pi}_h^{n+1} \in W_h^1$ tales que

$$a_2^{n+1}(\mathbf{v}_h^{n+1}, \mathbf{w}_h) + b^{n+1}(\mathbf{w}_h, \bar{\pi}_h^{n+1}) = (\mathbf{f}_{v2,h}^{n+1}, \mathbf{w}_h), \quad \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_{h0}, \quad (5.132)$$

$$b^{n+1}(\mathbf{v}_h^{n+1}, q_h) = -(f_{dh}^{n+1}, q_h), \quad \forall q_h \in W_h^1, \quad (5.133)$$

donde

$$\mathbf{f}_{v2,h}^{n+1} = \rho_h^{n+1} \mathbf{g} + \frac{2}{\Delta t} \rho_h^{n+1} \mathbf{v}_h^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1} - \frac{1}{2\Delta t} \rho_h^{n+1} \mathbf{v}_h^{n-1} \circ \mathcal{X}_h^{n-1,n+1}, \quad (5.134)$$

$$f_{dh}^{n+1} = \frac{1}{\rho_h^{n+1}} \left((f^m)^{n+1} - \frac{\rho_h^{n+1} - \rho_h^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1}}{\Delta t} \right), \quad (5.135)$$

verificando las condiciones de contorno

$$\mathbf{v}_{h|\Gamma_E}^{n+1} = \mathbf{v}_{E,h}^{n+1}, \quad \mathbf{v}_{h|\Gamma_P}^{n+1} = \mathbf{v}_{\infty,h}^{n+1}. \quad (5.136)$$

Una vez calculada $\bar{\pi}_h^{n+1}$, si el flujo es turbulento, recuperamos el valor de la presión de la forma

$$\pi_h^{n+1} = \bar{\pi}_h^{n+1} - \frac{2}{3} \rho_h^{n+1} k_h^{n+1}, \quad \forall n \in \{0, \dots, N-1\}. \quad (5.137)$$

Observación 5.2.3. Si se quiere resolver el problema del movimiento con un método de orden 1 en tiempo basta considerar el Problema 5.18 para todos los pasos de tiempo.

La formulación matricial de los Problemas 5.18 y 5.19 así como la eliminación (condensación estática) del grado de libertad asociado a las burbujas para reducir el almacenamiento en este caso¹, pueden verse en el Apéndice A.

5.3. Resolución numérica de la fase sólida

En esta sección se presentan los métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de los modelos para la fase sólida, obtenidos en el Capítulo 2. En ese capítulo se proponían tres modelos diferentes según el tipo de carbón y el tamaño de la partícula. El primer modelo era válido para partículas grandes con alto contenido en cenizas, el segundo para partículas pequeñas con alto contenido en cenizas y el tercero para partículas pequeñas y con bajo contenido en cenizas. Denotaremos estos modelos como BFL, BFLs1 y BFLs2, respectivamente. Los tres modelos están formados por un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias y, además, por ecuaciones numéricas no lineales para la obtención de las velocidades de gasificación del “char”.

Como vimos, en los tres modelos de combustión considerados se hace una descripción Lagrangiana de la fase sólida. Así, las partículas de carbón se consideran un medio discreto y para cada una de ellas se caracteriza la velocidad, temperatura, composición y tamaño a lo largo de su trayectoria. Estas partículas se tratan como fuentes o sumideros de masa y energía dentro de cada uno de los elementos de la malla por los que pasan. Los modelos que realizan este tratamiento para una mezcla de gases (medio continuo) y partículas (medio discreto) se conocen como PSI-cell (“Particle Source In Cell”). Así, en primer lugar calcularemos la velocidad y la posición en la que se encuentra la partícula. Para obtener la velocidad de la partícula podemos resolver de forma exacta la ecuación diferencial (2.115). Para ello, basta suponer que la velocidad del gas es constante en el corto período de tiempo de la integración

¹Ver Pironneau [82] para el caso incompresible y con viscosidad constante.

de la ecuación. De esta forma, la ecuación puede ser integrada formalmente para dar

$$\mathbf{v}_p^{n+1} = \mathbf{v}^n - (\mathbf{v}^n - \mathbf{v}_p^n) e^{-\frac{\Delta t_s}{\tau_p}} + \mathbf{g} \frac{\tau_p}{f} \left(1 - e^{-\frac{\Delta t_s}{\tau_p}} \right), \quad (5.138)$$

siendo Δt_s el paso de tiempo utilizado para integrar las ecuaciones de la fase sólida, \mathbf{v}^n la velocidad del gas en la posición x_p^n , τ_p el tiempo de relajación de la partícula definido en (2.131) y

$$f = \frac{C_D \mathcal{R}_e}{24}. \quad (5.139)$$

Este esquema analítico es muy eficiente aunque puede ser impreciso si se utilizan pasos de tiempo grandes; por ello, tendremos en cuenta el tiempo de relajación de la partícula para calcular Δt_s .

Nota 5.3.1. El radio de la partícula, r_p , solo varía en el caso del modelo BFLs2 aunque por simplicidad en la escritura lo escribiremos siempre como dependiente del tiempo, teniendo en cuenta que en los otros dos modelos $r_p^n = a$.

La posición de la partícula se obtiene discretizando la ecuación (2.118) utilizando un método de diferencias finitas de un paso (Euler implícito). Así,

$$x_p^{n+1} = x_p^n + \Delta t_s \mathbf{v}_p^{n+1}. \quad (5.140)$$

Los valores de las densidades de los volátiles y del agua obtenidos a partir de las ecuaciones (2.55) y (2.56), respectivamente, se aproximarán en cada paso por

$$\rho_V^{n+1} = \rho_V^n \frac{1}{1 + \Delta t_s B_4 e^{-E_4/\mathcal{R}T_p^n}}, \quad (5.141)$$

$$\rho_{H_2O}^{n+1} = \rho_{H_2O}^n \frac{1}{1 + \Delta t_s B_5 e^{-E_5/\mathcal{R}T_p^n}}, \quad (5.142)$$

y, a continuación podemos calcular λ_4^{n+1} y λ_5^{n+1} de la forma

$$\lambda_4^{n+1} = \frac{\rho_V^{n+1} - \rho_V^n \frac{(r_p^n)^2}{3\rho\mathcal{D}}}{\Delta t_s}, \quad (5.143)$$

$$\lambda_5^{n+1} = \frac{\rho_{H_2O}^{n+1} - \rho_{H_2O}^n \frac{(r_p^n)^2}{3\rho\mathcal{D}}}{\Delta t_s}. \quad (5.144)$$

En el caso de que partícula se encuentre en la segunda etapa hay que obtener los valores de λ_1^{n+1} , λ_2^{n+1} , λ_3^{n+1} , r_c^{n+1} y r_f^{n+1} , según el modelo y el tipo de combustión que esté ocurriendo. En el caso del modelo BFL hay que resolver (2.66) si estamos en Ω_F , (2.68) si estamos en Ω_O y hay una llama de difusión en el interior de la partícula, y (2.71) estando en Ω_O y con la llama de difusión en la vecindad, pero fuera, de la partícula. Si estamos considerando el modelo BFLs1 tendremos de nuevo el sistema (2.66) si estamos en Ω_F , mientras que si estamos en la región con oxígeno resolveremos (2.83). Por último, si el modelo es el BFLs2 tendremos (2.90), si la partícula se encuentra en una región en la que no hay oxígeno, y (2.92) en caso contrario.

Conocidas las velocidades λ_4^{n+1} y λ_5^{n+1} y las fracciones másicas de oxígeno, dióxido de carbono y agua en la posición x_p^{n+1} de la partícula, que denotaremos como $Y_{O_2}^{n+1}$, $Y_{CO_2}^{n+1}$ e

$Y_{H_2O}^{n+1}$, respectivamente, y tomando $r_c = r_c^n$, podemos suponer que todos los sistemas de ecuaciones tienen la forma general

$$G(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, r_f) = 0, \quad (5.145)$$

aunque para algunos modelos se eliminen algunas dependencias. Para obtener una solución de (5.145) utilizamos el método de Newton discretizado.

Para calcular r_c^{n+1} usamos la fórmula

$$r_c^{n+1} = \left((r_c^n)^3 - \frac{(\lambda_1^{n+1} + \lambda_2^{n+1} + \lambda_3^{n+1}) \Delta t_s \rho^{n+1} r_p^n \mathcal{D}}{\rho_C^0} \right)^{1/3}, \quad (5.146)$$

tomando como condición inicial $r_c^0 = a$. Si el modelo es el BFLs2 haremos $r_p^{n+1} = r_c^{n+1}$.

La ecuación de la energía tiene la forma general (2.48) y se diferencia en cada situación por el aporte o consumo de calor debido a las distintas reacciones que tienen lugar. Para la discretización de cada una de las ecuaciones se utiliza el método de Euler implícito. Debido al término de calor por radiación, representado por la ley de Stefan-Boltzmann, queda una ecuación no lineal de la forma

$$a(T_p^{n+1})^4 + bT_p^{n+1} + c = 0, \quad (5.147)$$

que se resuelve mediante el método de Newton.

El paso de tiempo utilizado para la integración de las ecuaciones diferenciales de la fase sólida se calcula de la siguiente forma

$$\Delta t_s = \min(\tau_x, \tau_p, \tau_t, \tau_q, \Delta t_m), \quad (5.148)$$

siendo τ_x el tiempo que tarda la partícula en atravesar el tetraedro en el que se encuentra, que definiremos como

$$\tau_x = \frac{(V_T)^{1/3}}{\|\mathbf{v}_p\|} C, \quad (5.149)$$

con V_T el volumen del tetraedro y C el número de Courant-Friedrichs-Levy, τ_t el tiempo dado por

$$\tau_t = \frac{r_p^2 c_p \rho_p}{3k_T}, \quad (5.150)$$

y τ_q

$$\tau_q = \min\left(\frac{1}{B_4 e^{-\varepsilon_4/\mathcal{R}T_p}}, \frac{1}{B_5 e^{-\varepsilon_5/\mathcal{R}T_p}}\right), \quad (5.151)$$

que representa el mínimo de los tiempos característicos para la liberación de volátiles y humedad. Por último, Δt_m es el paso de tiempo máximo que se definirá teniendo en cuenta las escalas de cada problema particular.

El paso de tiempo varía en cada instante ya que se calcula a partir de la temperatura de la partícula, de su densidad, de su tamaño y del tamaño del tetraedro en el que se encuentra. Para cada partícula se calculará su trayectoria hasta un número máximo de pasos de tiempo o hasta que abandone el dominio computacional.

5.3.1. Condiciones de contorno para la fase sólida

Cuando calculamos la trayectoria de una partícula es necesario determinar su comportamiento en caso de que se alcance una de las fronteras del dominio. En nuestro código se han implementado las siguientes condiciones de contorno:

1. Partícula que entra: si una superficie de la frontera se define como entrada de carbón se considera que las partículas entran de manera uniforme a través de ésta. Esto quiere decir que por cada uno de los triángulos que forman la superficie entrarán partículas, a la misma velocidad, cuya posición inicial será el baricentro del mismo. En la Figura 5.4 se puede ver un esquema de una superficie definida como entrada de partículas. El número de partículas que atraviesa cada triángulo será igual al número de tamaños

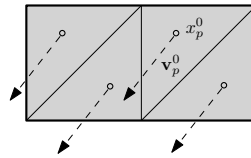


Figura 5.4: Esquema de la condición de contorno de entrada.

considerado multiplicado por el número de intentos que se definen para el modelo de dispersión. Para tener en cuenta la granulometría del carbón, el número de partículas real al que representa cada una de las partículas calculadas, se determinará a partir de la distribución de masa considerada para el carbón, aproximada con una función de Rosin-Rammler que describiremos con detalle en el Capítulo 6.

2. Partícula que rebota: si definimos esta condición en una frontera, todas las partículas que llegan hasta ella rebotarán. Cuando esto ocurre la velocidad de la partícula se determina de la forma

$$\mathbf{v}_p^{n+1} = -\sigma_n(\mathbf{v}_p^n \cdot \mathbf{n}) + \sigma_s(\mathbf{v}_p^n \cdot \mathbf{s}_1 + \mathbf{v}_p^n \cdot \mathbf{s}_2), \quad (5.152)$$

siendo \mathbf{n} el vector normal a la frontera y \mathbf{s}_1 , \mathbf{s}_2 los vectores tangentes en el punto de colisión de la partícula (que será la nueva posición de la partícula x_p^{n+1}). Los coeficientes σ_n y σ_s determinan la cantidad de movimiento que pierde la partícula en el choque con la frontera en las direcciones normal y tangencial, respectivamente. Éste es el

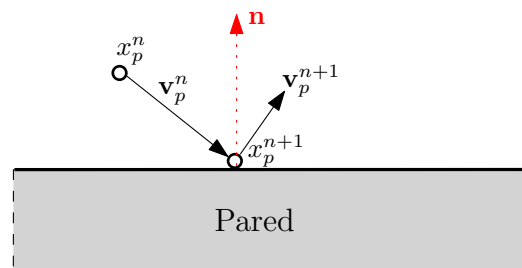


Figura 5.5: Esquema de la condición de contorno de rebote.

tipo de condición de contorno habitual en las paredes. Podemos ver un esquema del comportamiento de la partícula en este caso en la Figura 5.5.

3. Partícula que queda atrapada: cuando ponemos esta condición la partícula se queda parada en la frontera, es decir $\mathbf{v}_p^{n+1} = 0$, aunque continuaría gasificando hasta quedar reducida a cenizas (ver esquema en la Figura 5.6). Este tipo de condición de contorno se pone en la parrilla de una caldera industrial.

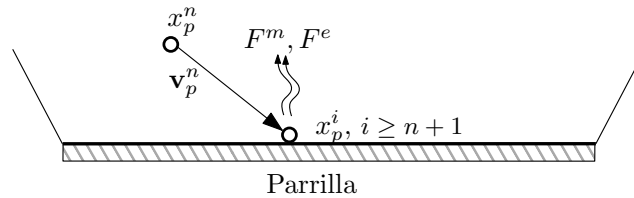


Figura 5.6: Esquema de la condición de contorno de partícula atrapada.

4. Partícula que sale: si la condición de contorno es de este tipo la partícula abandona el dominio. En ese caso se deja de calcular la trayectoria de la partícula y la evolución de su masa y su temperatura, dando lugar a los correspondientes inquemados.

5.4. Algoritmos utilizados

Hemos visto en las secciones anteriores los métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones del modelo que vamos a resolver. Teniendo en cuenta la discretización temporal de las ecuaciones, hemos diseñado algoritmos para su implementación. Dado que el modelo consta de dos fases que están acopladas, éstas se resolverán alternativamente hasta que se alcance la convergencia deseada, tal y como se muestra en la Figura 5.7. En cada simulación se podrá establecer la frecuencia con la que se resuelve la fase dispersa en el cálculo global. Recordamos que el acoplamiento de los dos modelos viene dado porque la fase gaseosa determina la atmósfera en la que se queman las partículas y éstas, al gasificarse, serán fuentes de masa y energía para aquélla.

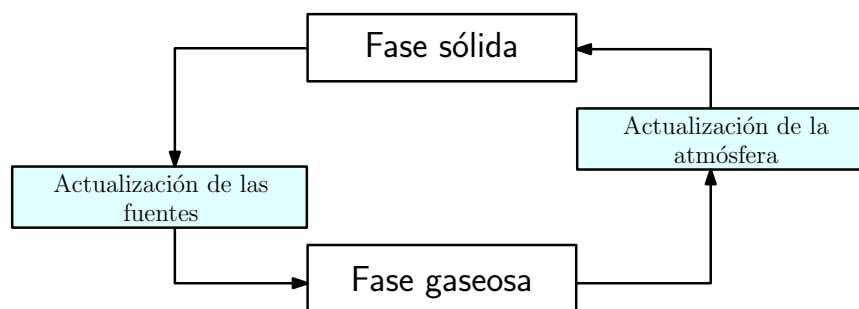


Figura 5.7: Algoritmo para el acoplamiento de las dos fases

Para facilitar la escritura, en esta sección omitiremos el subíndice h en las funciones, entendiendo que todas las que mencionemos serán aproximaciones en los espacios discretos de elementos finitos correspondientes.

Teniendo en cuenta la discretización de las ecuaciones en fase gaseosa, hemos diseñado el siguiente algoritmo (véase el esquema en la Figura 5.8):

1. Inicialización de las variables principales: $k^0, \epsilon^0, \theta^0, \mathbf{v}^0, Y_i^0, i = 1, \dots, 8$ y cálculo de las secundarias: $\mu_t^0, c_\pi^0, \rho^0, h_T^0, H^0, Z_i^0, i = 1, \dots, 4$.
2. Cálculo de las variables de Shvab-Zeldovich H^{n+1} y $Z_i^{n+1}, i = 1, \dots, 4$. Para ello, si estamos en el primer paso de tiempo se resuelven los Problemas 5.2 y 5.3 con los valores $\mathbf{v}^0, \rho^0, c_\pi^0$ dados. Para el resto de los pasos de tiempo consideraremos los Problemas 5.4 y 5.5 utilizando los valores $\mathbf{v}^{n-1}, \mathbf{v}^n, \rho^n, c_\pi^n$.
3. Obtención de las variables Y_V^{n+1} e $Y_{H_2}^{n+1}$ a partir de Z_1^{n+1} , mediante los Problemas 5.8 y 5.9 en el primer paso de tiempo y mediante los Problemas 5.10 y 5.11, para el resto de los pasos de tiempo.
4. Cálculo de la temperatura θ^{n+1} . Se usa un método de Newton en la ecuación (5.2).
5. Obtención de ρ^{n+1} de la ecuación de estado (5.7).
6. Cálculo de la divergencia $\text{div}\mathbf{v}^{n+1}$ con la fórmula (5.118).
7. Resolución de los Problemas 5.14 y 5.15 para obtener k^{n+1}, ϵ^{n+1} y, por lo tanto, μ_t^{n+1} utilizando (5.97). Para obtener k^{n+1} y ϵ^{n+1} necesitamos conocer los valores de la velocidad en t_n y t_{n-1} , la densidad en t_{n+1} , y el gradiente y la divergencia de la velocidad en el instante t_n para el cálculo de P_k^n .

En este punto proponemos el siguiente algoritmo interno, opcional, para calcular k^{n+1}, ϵ^{n+1} , con \mathbf{v}^n y ρ^n fijadas:

- DESDE $i = 1, N_L$:
 - a) Calcular k^{i+1} y ϵ^{i+1} como el límite de dos sucesiones k^m y ϵ^m que resultan de resolver los Problemas 5.14 y 5.15.
 - b) Actualizar el valor de la viscosidad μ_t^{i+1} , de $w^{i+1} = \epsilon^{i+1}/k^{i+1}$ y de la producción P_k^{i+1} .
 - c) Calcular la longitud característica L^{i+1} para el modelo $k - \epsilon$ dada por $L = C_\mu \frac{k^{3/2}}{\epsilon}$.
 - d) Si $|L^{i+1} - L^i| < C$ FIN
- FIN DESDE

8. Obtención de la velocidad \mathbf{v}^{n+1} y la presión π^{n+1} .
9. Relajación de las variables principales:

$$\mathbf{v}^{n+1} \leftarrow \alpha_v \mathbf{v}^{n+1} + (1 - \alpha_v) \mathbf{v}^n, \quad (5.153)$$

$$\pi^{n+1} \leftarrow \alpha_\pi \pi^{n+1} + (1 - \alpha_\pi) \pi^n, \quad (5.154)$$

$$Z_i^{n+1} \leftarrow \alpha_i Z_i^{n+1} + (1 - \alpha_i) Z_i^n, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.155)$$

$$H^{n+1} \leftarrow \alpha_h H^{n+1} + (1 - \alpha_h) H^n, \quad (5.156)$$

con $\alpha_v, \alpha_\pi, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ y α_h números reales en $[0, 1]$ llamados *parámetros de relajación*.

10. Comprobación del test de parada:

$$\|\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)} \leq C_v, \quad (5.157)$$

$$\|\pi^{n+1} - \pi^n\|_{L^2(\Omega)} \leq C_p, \quad (5.158)$$

$$\|Z_i^{n+1} - Z_i^n\|_{L^2(\Omega)} \leq C_i, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.159)$$

$$\|H^{n+1} - H^n\|_{L^2(\Omega)} \leq C_h, \quad (5.160)$$

con $C_v, C_p, C_1, C_2, C_3, C_4$ y C_h constantes dadas. Si no se verifican simultáneamente todas esas desigualdades se vuelve al paso 2. Si el problema incluye fase sólida, se calcularán las fuentes procedentes de ésta antes de volver al paso 2.

Observación 5.4.1. *Algunos coeficientes y términos fuente de las ecuaciones del modelo dependen de otras variables que han sido obtenidas previamente. Por esta razón, para tener un método estable es necesario controlar los cambios en las variables principales del problema en cada instante de tiempo. Para ello se relajan las variables como se indica en el paso 9 del algoritmo para la resolución del modelo de fase gaseosa que acabamos de describir. La elección de los parámetros de relajación se realiza de forma empírica, teniendo en cuenta que cuanto más pequeños sean estos parámetros más lenta será la convergencia del método pero mayor su estabilidad. En el algoritmo desarrollado para la fase sólida relajaremos también las fuentes de masa y energía homogeneizadas en cada iteración. En nuestra experiencia, es especialmente importante la relajación de la velocidad de la mezcla gaseosa y de las fuentes provenientes de la fase sólida, siendo conveniente utilizar parámetros pequeños, sobre todo en las primeras iteraciones.*

Observación 5.4.2. *Además de la relajación de las variables del problema, otra estrategia para favorecer la estabilidad es la realización de iteraciones internas en las ecuaciones en derivadas parciales del modelo. Si se elige esta técnica en una de estas ecuaciones, se fijarán sus coeficientes y sus términos fuente en cada instante de tiempo, de forma que la matriz correspondiente permanece constante durante el proceso iterativo interno, y se realizarán iteraciones hasta alcanzar cierta convergencia.*

5.4.1. Algoritmo para la fase sólida

En esta sección se describe el algoritmo empleado para la resolución numérica del modelo de fase sólida. El algoritmo se caracteriza por su capacidad para distinguir la etapa de combustión en la que se encuentra la partícula en cada instante de tiempo.

Para cada partícula se siguen los siguientes pasos (que podemos ver de forma esquemática en la Figura 5.9):

1. Inicialización de las variables: las densidades $\rho_V^0, \rho_{H_2O}^0, \rho_C^0$, la temperatura T_p^0 , los radios de las dos llamas de difusión r_c^0, r_f^0 , las velocidades de reacción $\{\lambda_i^0\}_{i=1}^5$, la posición x_p^0 , la velocidad \mathbf{v}_p^0 y el paso de tiempo Δt_s^0 . Se inicia también el contador $t_{fluc} = \Delta t_s^0$ que permitirá saber cuándo calcular de nuevo la fluctuación de la velocidad en el modelo de dispersión.

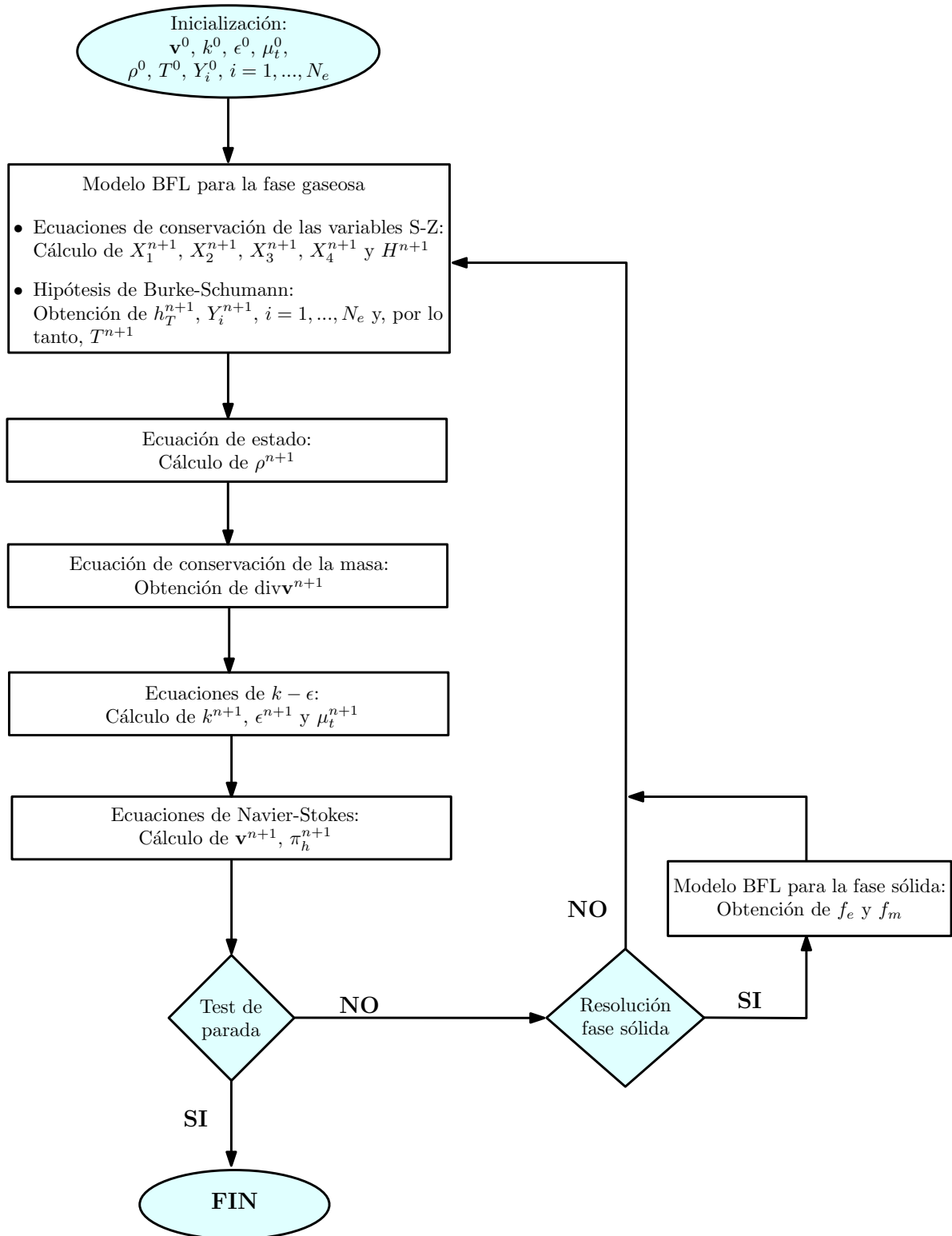


Figura 5.8: Algoritmo global del programa

2. Obtención de \mathbf{v}_p^{m+1} a partir de (5.138) y de x_p^{m+1} con (5.140).
3. Localización del tetraedro en el que está la partícula (x_p^{m+1}). Para este paso se utiliza el algoritmo de búsqueda-localización desarrollado por Allievi y Bermejo [2] que permite localizar de manera eficiente puntos en mallas no estructuradas². Si la partícula ha salido del dominio se aplica una de las condiciones de contorno vistas en 5.3.1. Si la frontera con la que se encuentra la partícula es una salida, se finaliza el cálculo. La masa que todavía contenga la partícula se contabiliza para saber la cantidad de combustible que ha quedado sin quemar al final de la iteración de fase sólida.
4. Interpolación de las fracciones másicas Y_{O_2} , Y_{H_2O} e Y_{CO_2} , la temperatura θ , los parámetros de la turbulencia k y ϵ , el calor específico c_π y la velocidad \mathbf{v} de la fase gaseosa en la posición x_p^{m+1} en la que se encuentra la partícula.
5. Cálculo de ρ_V^{m+1} , $\rho_{H_2O}^{m+1}$, λ_4^{m+1} y λ_5^{m+1} con las expresiones (5.141)-(5.144).
6. Si $T_p^m < T_c$ las reacciones de gasificación del carbono fijo están congeladas. Entonces hacemos

$$\begin{aligned}\lambda_1^{m+1} &= \lambda_2^{m+1} = \lambda_3^{m+1} = 0, \\ r_c^{m+1} &= r_c^m, \\ r_f^{m+1} &= r_f^m,\end{aligned}$$

y vamos al Paso 9.

7. Si $r_c^m = 0$, se ha consumido todo el carbono fijo y, por lo tanto, no tendrán lugar las reacciones de gasificación del char, lo que implica que

$$\lambda_1^{m+1} = \lambda_2^{m+1} = \lambda_3^{m+1} = r_c^{m+1} = r_f^{m+1} = 0.$$

Además, si estamos en el caso del submodelo *BFLs2*, como $r_p^m = r_c^m = 0$, finaliza el cálculo de la trayectoria de la partícula.

8. Si $r_c^m > 0$ (lo que equivale a decir que todavía hay carbono fijo en la partícula) se calculan r_c^{m+1} , r_f^{m+1} y $\{\lambda_i^{m+1}\}_{i=1}^3$ de la forma:

- 8.1. Si el carbón tiene alto contenido en cenizas y $a \geq 50 \mu\text{m}$ resolvemos el modelo BFL:

- $\lambda_2^{m+1} = 0$.
- Si $Y_{O_2}^{m+1} = 0$ la partícula está en la región Ω_F y se resuelve el sistema (2.66).
- Si $Y_{O_2}^{m+1} > 0$ la partícula está en la región Ω_O . Se resuelve en primer lugar el sistema (2.71) correspondiente a la situación en la que la llama está fuera de la partícula ($r_f^{m+1} > a$). Si al resolver este sistema resulta que $r_f^{m+1} \leq a$, es que nos encontramos en la situación en la que la llama está dentro de la partícula y se resolvería el sistema (2.68), comprobando que, efectivamente, $r_f^{m+1} \leq a$ (y, por tanto, la consistencia del modelo).

² Este algoritmo es el mismo que hemos usado para buscar los nodos de cuadratura movidos por las curvas características en los métodos de Lagrange-Galerkin.

- 8.2. Si el carbón tiene alto contenido en cenizas y $a < 50 \mu\text{m}$ resolveremos el modelo BFLs1:
- Si $Y_{O_2}^{m+1} = 0$ se resuelve de nuevo el sistema (2.66) y $\lambda_2^{m+1} = 0$.
 - Si $Y_{O_2}^{m+1} > 0$ se calcula la solución del sistema (2.83).
- 8.3. Si el carbón tiene bajo contenido en cenizas, se considera el modelo BFLs2:
- Si $Y_{O_2}^{m+1} = 0$, $\lambda_2^{m+1} = 0$ y para obtener λ_1^{m+1} y λ_3^{m+1} se resuelve (2.90).
 - Si $Y_{O_2}^{m+1} > 0$ se calcula la solución de (2.92).
- 8.4. Se calcula r_c^{m+1} utilizando (5.146).
9. Se resuelve la ecuación de la energía.
10. Se calculan las fuentes para la fase gaseosa según el modelo y la región del dominio en la que se encuentra la partícula, utilizando las expresiones dadas en 2.6.
11. Cálculo de la velocidad instantánea usando el siguiente algoritmo:
- 11.1. Si $t_{flu}^m \leq 0$, calculamos de nuevo tres números aleatorios ξ_1^{m+1} , ξ_2^{m+1} y ξ_3^{m+1} y un nuevo tiempo de actualización de la fluctuación de la forma
- $$t_{flu}^{m+1} = \text{mín}(\tau_c^{m+1}, \tau_e^{m+1}). \quad (5.161)$$
- Para calcular los valores de los tiempos τ_c^{m+1} y τ_e^{m+1} evaluamos las fórmulas (2.129) y (2.130), respectivamente, dadas en el Apartado 2.8.1, en el instante t_{m+1} , calculando previamente un número aleatorio r .
- 11.2. Si $t_{flu}^m > 0$, $t_{flu}^{m+1} = t_{flu}^m - \Delta t_s^m$ y $\xi_1^{m+1} = \xi_1^m$, $\xi_2^{m+1} = \xi_2^m$ y $\xi_3^{m+1} = \xi_3^m$.
- 11.3. Actualizamos el valor de la velocidad instantánea con la fórmula (2.128) evaluada en el instante t_{m+1} .
12. Si se supera el número máximo de pasos de tiempo, $m > N_s$, se finaliza el cálculo, pasando la partícula a contar como incompleta. Antes de que $m = N_s$ la partícula debería haber salido del dominio o gasificarse por completo. Si el número de partículas incompletas es elevado debe aumentarse N_s hasta que se complete el cálculo en la mayoría de partículas.
13. Cálculo del paso de tiempo Δt_s^{m+1} mediante la fórmula (5.148).

Observación 5.4.3. *Para obtener las fuentes que la fase sólida aporta a la gaseosa en el instante t_{n+1} , se sigue la trayectoria de todas las partículas hasta que éstas abandonan el dominio computacional o se gasifican completamente. Como vimos en la Sección 5.3, las ecuaciones del modelo para la fase sólida, incluyendo la que nos permite obtener la trayectoria de una partícula, se discretizan utilizando pasos de tiempo Δt_s^m y, por lo tanto, tenemos las variables asociadas a una partícula en los instantes $t_{m+1} = t_0 + \Delta t_s^m$, $0 \leq m \leq N_s$. De esta forma, en cada instante t_{m+1} conocemos la posición de la partícula y su contribución de masa y energía a las fuentes homogeneizadas que estamos calculando en t_{n+1} .*

Una vez obtenidas las fuentes de masa y energía homogeneizadas en un instante t_{n+1} , calculamos las fuentes para los escalares de Schwab-Zeldovich dadas en (5.11)-(5.15) y hacemos

$$f_i^{n+1} \leftarrow \alpha_{f,i} f_i^{n+1} + (1 - \alpha_{f,i}) f_i^n, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5.162)$$

$$f_H^{n+1} \leftarrow \alpha_{f,h} f_H^{n+1} + (1 - \alpha_{f,h}) f_H^n, \quad (5.163)$$

siendo $\alpha_{f,1}$, $\alpha_{f,2}$, $\alpha_{f,3}$, $\alpha_{f,4}$ y $\alpha_{f,h}$, los parámetros de relajación elegidos para las fuentes procedentes de la fase sólida.

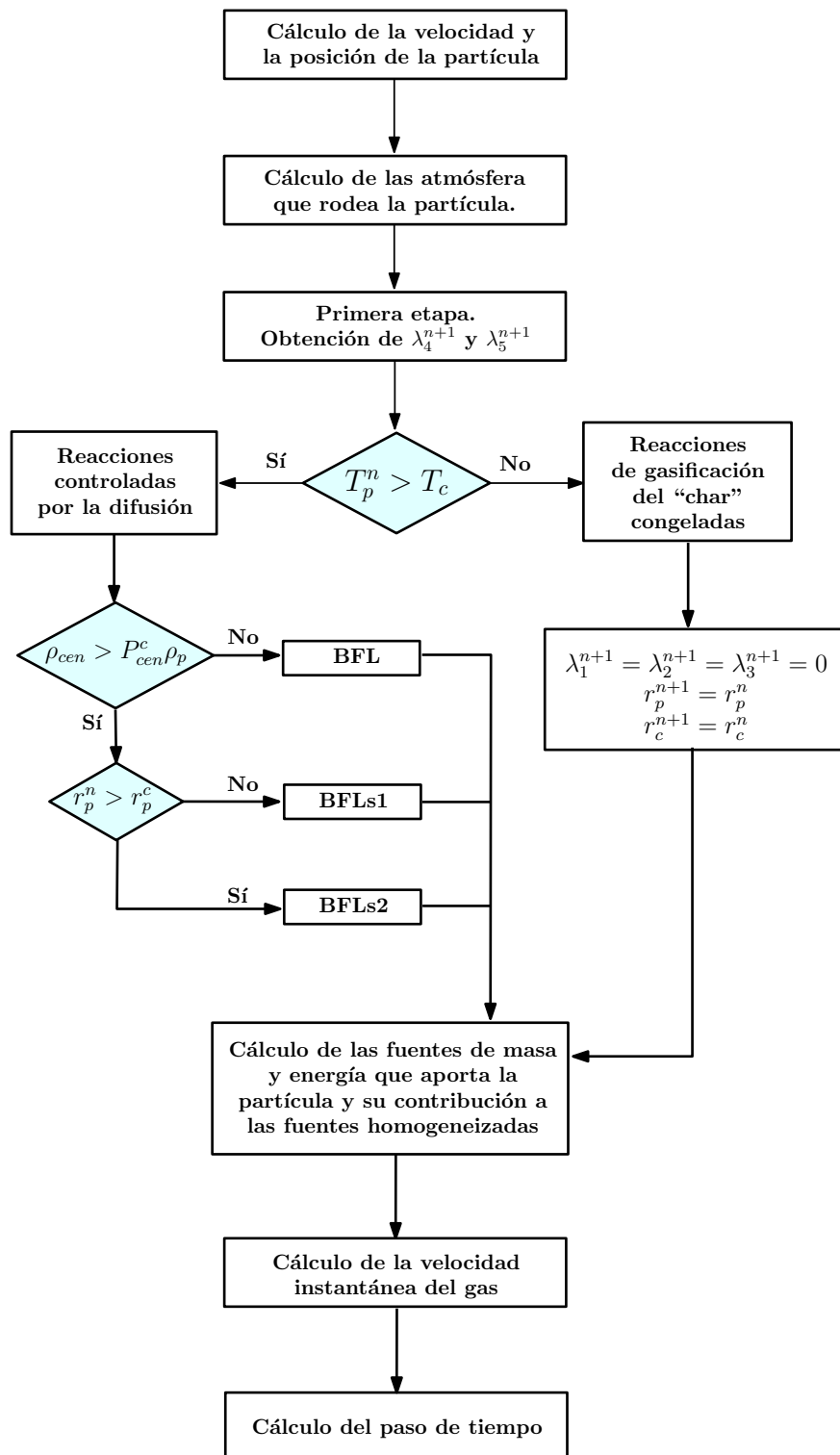


Figura 5.9: Algoritmo para la fase sólida

Capítulo 6

Simulación de un chorro de carbón pulverizado

6.1. Introducción

Uno de los objetivos de este trabajo era el desarrollo de un código para la simulación de flujos de gases reactivos que podrían incluir la combustión de partículas de carbón pulverizado. En este capítulo mostraremos las capacidades de la herramienta desarrollada y estudiaremos la aplicabilidad y el comportamiento de los modelos de combustión introducidos en el Capítulo 2, así como las ventajas que estos modelos tienen frente a otros que se pueden encontrar en la literatura. Con este objetivo vamos a simular el experimento llevado a cabo por Hwang *et al* [56, 57], en el que se realiza un estudio de la estructura de una llama de carbón pulverizado. Los autores de estos artículos presentan medidas obtenidas utilizando herramientas ópticas que ayudan a clarificar los procesos involucrados, así como la estructura de la llama formada en el experimento. Para obtener esta llama se considera un chorro de carbón pulverizado arrastrado por aire a temperatura ambiente que se inyecta en una región con aire casi estancado también a temperatura ambiente. El chorro de carbón está rodeado a la salida del inyector por una corriente de metano. Después de que la llama de metano y aire se inicie los productos de la combustión calientan el gas inyectado y, por lo tanto, las partículas. Éstas, cuando se calientan, actúan como fuentes distribuidas de masa de volátiles, CO y H_2 . En nuestras simulaciones, estas especies se queman con el oxígeno del aire calentado, tan pronto como son liberadas al gas. Las reacciones de oxidación en fase gaseosa, que inicialmente tienen lugar de forma distribuida, consumen todo el oxígeno en una región Ω_F por la que pasarán las partículas que se están gasificando. Las especies liberadas durante esta gasificación de las partículas en Ω_F se queman en una llama de difusión Γ_F , que rodea a esta región, cuando se encuentran con el oxígeno procedente del aire ambiente exterior.

La simulación de esta llama se trata de un problema sencillo pero real, que incluye los fenómenos más importantes que tienen lugar en flujos con combustión de carbón, y que nos permitirá analizar el comportamiento y fiabilidad del modelo BFL y sus dos variantes. El experimento realizado por Hwang *et al* es transicional, lo que nos permite considerar válida la formulación laminar empleada en los tres modelos, aunque cabría esperar resultados algo

mejores con una formulación completamente turbulenta. Además, al tratarse de un problema de flujo abierto no es necesario incluir leyes de pared y, debido a los tamaños característicos, también se puede despreciar la transferencia de energía por radiación.

Este capítulo se estructura de la siguiente forma: en la primera sección se hace una descripción del experimento y se dan los datos del mismo; en la segunda se explica la metodología usada para la realización de las simulaciones; en la última sección se mostrarán los resultados obtenidos para los distintos modelos de combustión de carbón y se compararán con las medidas experimentales.

6.2. Descripción y datos del experimento

Para la realización de este experimento se utiliza un quemador diseñado específicamente para la obtención de una llama de carbón pulverizado en el laboratorio. Este quemador, cuyo esquema se puede ver en la Figura 6.1, tiene una estructura coaxial formada por un quemador principal y otro, con forma anular, que lo rodea.

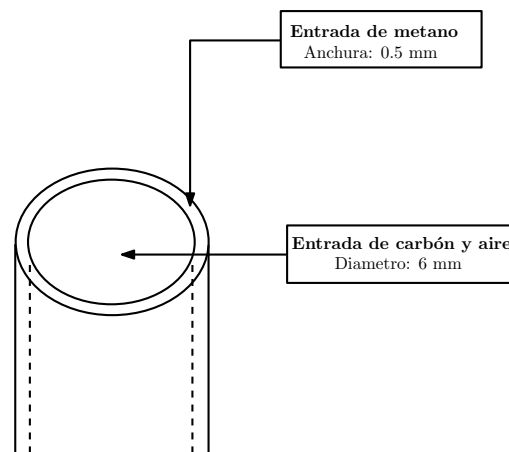


Figura 6.1: Esquema del quemador de carbón pulverizado

Cuando se realizan este tipo de experimentos en un laboratorio, el problema principal es conseguir la estabilización de la llama, para lo cual se utilizan diversas técnicas. Una de ellas consiste en formar un remolino en el flujo mediante la introducción del combustible con un movimiento rotatorio (“swirl”). Esta estabilización de la llama es muy frecuente en calderas y quemadores industriales. Uno de los problemas que aparece al simular este tipo de flujos es que el modelo $k-\epsilon$, el más extendido, no los predice bien. En Edge *et al* [39] se comparan los resultados obtenidos con los modelos $k-\epsilon$ y de Smagorinsky para tres quemadores, pudiéndose observar cómo las simulaciones LES predicen mucho mejor las medidas experimentales. Otra posibilidad es el uso de una llama piloto, que es la técnica elegida en este experimento.

Así, en este experimento se introduce metano a través del anillo circular que rodea al quemador para formar una llama de difusión producida por la combustión del metano con el oxígeno del aire. El caudal de carbón pulverizado introducido es muy pequeño y sin la utilización del metano sería imposible estabilizar la llama. La cantidad de metano introducida

es la mínima para conseguir esta estabilización. Por todo esto, el experimento se puede descomponer en dos etapas: una primera en la que se inyecta aire por el quemador principal y el metano por el anillo que lo rodea, formándose una llama de difusión y, una segunda etapa, cuando la llama del metano ya se ha estabilizado, en la que comienzan a lanzarse las partículas de carbón.

En la Tabla 6.1 se muestran los caudales y temperaturas de entrada consideradas en el experimento; mientras, en la Tabla 6.2 se pueden ver los análisis inmediato y elemental, y otras propiedades como densidad, calor específico o poder calorífico, del carbón bituminoso de la mina de Newlands utilizado en el experimento.

Compuesto	Caudal	Temperatura
Aire	$1.80 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$	300 K
CH ₄	$2.33 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$	300 K
Carbón pulverizado	$1.49 \times 10^{-4} \text{ kg/s}$	300 K

Tabla 6.1: Condiciones de contorno en el inyector

Poder calorífico superior	29.1 MJ/kg
Poder calorífico inferior	28.1 MJ/kg
Análisis inmediato (base seca)	% másico
Cenizas	15.20
Materias volátiles	26.90
Carbono fijo	57.90
Análisis elemental (base seca)	% másico
C	71.90
H	4.40
N	1.58
O	6.53
S	0.39
Densidad	1000 kg/m ³
Calor específico	1000 J/kgK

Tabla 6.2: Propiedades del carbón

De los artículos de Hwang *et al* sabemos que la mediana de los diámetros de partículas medidos en el experimento es $33 \mu\text{m}$ y la media de la distribución de diámetros, basada en el número de partículas, es $25 \mu\text{m}$. Para obtener la media de $25 \mu\text{m}$, hemos considerado la distribución de tamaños de partículas que se puede ver en la Figura 6.2, en la que se representan los porcentajes de partículas que hay de cada diámetro. En ella se observa que el rango de tamaños utilizado es de $5 - 61 \mu\text{m}$, en consonancia con los valores mostrados en los experimentos. Teniendo en cuenta la masa que tiene una partícula de cada diámetro, obtenemos la distribución en masa de las partículas, es decir, la fracción másica de las partículas de un determinado diámetro. En la Figura 6.3 podemos ver la distribución en masa

de las partículas. Para aproximar esta distribución en masa utilizamos una función de Rosin-Rammler, que establece una relación exponencial entre el diámetro de una partícula, d_p , y la fracción másica que suman las partículas con tamaño mayor que ésta. Así, si denotamos por Y^d la fracción másica de las partículas con diámetro mayor que d , se tiene

$$Y^d = e^{-(d/\bar{d})^n}, \quad (6.1)$$

siendo \bar{d} el diámetro medio y n el factor de dispersión. El diámetro medio y el factor de dispersión que nos permiten ajustar la curva a la granulometría elegida es $\bar{d} = 33.3 \mu\text{m}$ y $n = 4.02$, respectivamente. En la Figura 6.4 podemos ver el ajuste de la curva de Rosin-Rammler a la distribución de tamaños.

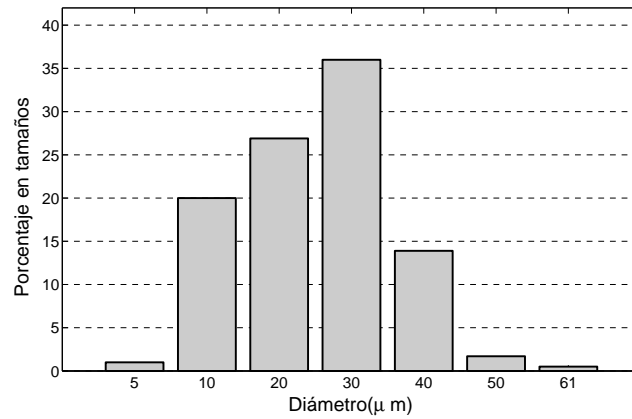


Figura 6.2: Distribución de tamaños de partículas

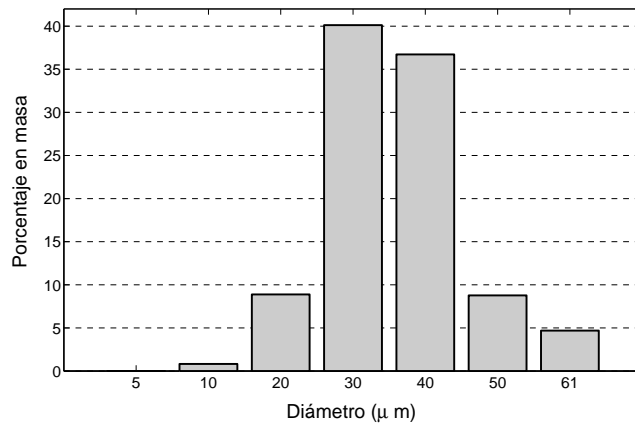


Figura 6.3: Distribución de masa de partículas

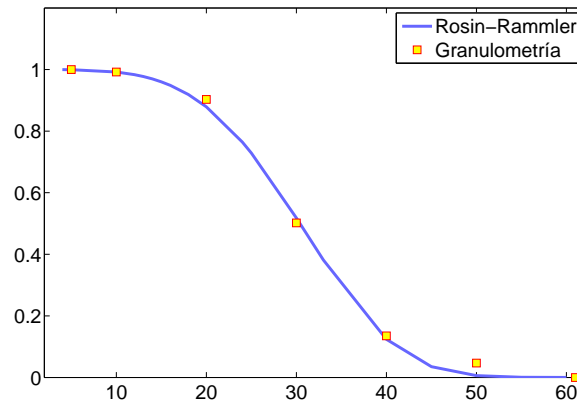


Figura 6.4: Ajuste de la curva de Rosin-Rammler a la granulometría

6.3. Descripción y datos de las simulaciones

En primer lugar definimos la geometría que vamos a considerar para las simulaciones. Como estamos interesados en la llama, la cual se encuentra en las cercanías del eje del inyector, si bien en la realidad la combustión ocurre en una cámara con sección octogonal, simplificaremos esa geometría por una de sección circular. Dado que la altura máxima a la que se muestran los resultados experimentales es 195 mm, consideramos que la altura del dominio es igual a 200 mm. Aunque no se proporcionan datos de la distancia a la que se encuentra la pared con respecto al eje del quemador, suponemos que está lo bastante lejos como para no distorsionar la llama. Así, hemos situado las paredes laterales del dominio a una distancia de 60 mm del eje del quemador, de forma que las condiciones de contorno elegidas no afecten a la llama.

Para mallar el dominio elegido usamos el programa GAMBIT, propiedad de ANSYS, Inc. La malla es no estructurada y se hizo más fina por la zona central cercana al quemador, con un tamaño medio en esa región de $h = 5.6 \times 10^{-4}$ mm. Está formada por 126268 tetraedros y tiene 23240 vértices y 176992 nodos¹. En la Figura 6.5 podemos ver la malla en un plano axial con los elementos de la misma coloreados por su volumen.

En el experimento, además de la gasificación del carbón y de la combustión de los gases producidos, tiene lugar la combustión del metano utilizado para la estabilización de la llama. En ninguno de los tres modelos desarrollados se tiene en cuenta esta especie y, por lo tanto, habría que modificarlos. Para evitar hacerlo, se realizó una simulación de la primera etapa del experimento, con la que se obtuvo la composición y temperatura de la mezcla de gases producida por la combustión del metano, así como la velocidad y la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación turbulenta.

Para hacer esta simulación se utilizó el código comercial FLUENT (versión 12.1.4). Se

¹Recordemos que para resolver las ecuaciones de convección-difusión escalares del modelo utilizamos elementos finitos de tipo Lagrange de orden 2. Así, cada tetraedro tendrá 10 nodos que serán sus vértices y los puntos medios de sus aristas.

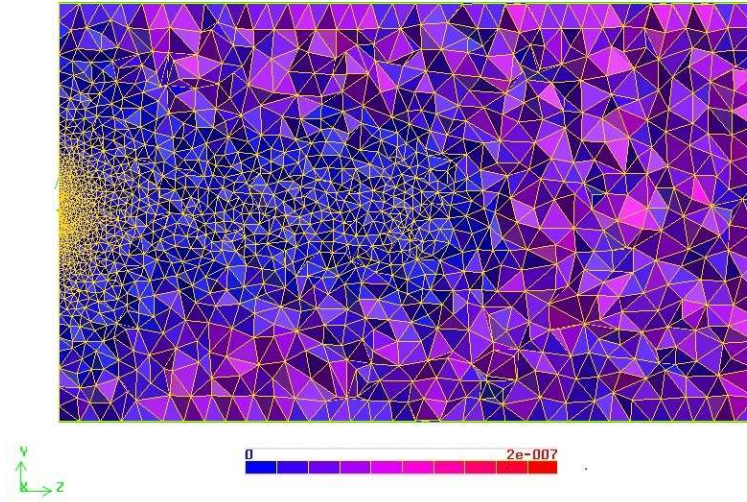


Figura 6.5: Malla en un plano axial con los tetraedros coloreados por su volumen

eligió un dominio 2D, para hacer un cálculo axisimétrico, partiendo de 60 mm antes de la salida del inyector y hasta 40 mm después de dicha salida, de forma que se tiene un flujo desarrollado en la salida del inyector. Como el flujo de aire alrededor del quemador (también llamado coflujo) no ha sido proporcionado, hemos obtenido un perfil de velocidad, utilizando una condición de contorno con presión conocida, en el que la velocidad media es 0.3 m/s. Los modelos utilizados fueron: para la turbulencia el modelo $k - \epsilon$ estándar y para la conservación de la masa de las especies y de la energía el método de la fracción de mezcla con una tabla PDF para el tratamiento de la interacción entre turbulencia y química. En la Figura 6.6 podemos ver la fracción másica del metano y la temperatura que resultan de la simulación. Se puede ver que el metano se consume rápidamente al entrar en contacto con el oxígeno y, por lo tanto, a la altura $h=20$ mm de la salida del inyector su contenido será despreciable. Por esta razón, definimos los perfiles de entrada para las simulaciones 3D como aquellos obtenidos a esa altura en la simulación 2D axisimétrica. Estos perfiles se muestran en la Figura 6.7, para las especies y la temperatura, y en la Figura 6.8, para las velocidades axial y radial, para k y ϵ .

Una vez definidas las condiciones de entrada en el dominio 3D, elegimos para la salida una condición de tipo salida libre y para la pared, junto con la condición de flujo difusivo de especies y entalpía nulo, consideramos, por simplicidad y dado que la pared está suficientemente lejos de la llama,

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\infty = (0, 0, 0.3). \quad (6.2)$$

En cuanto a los métodos numéricos, para la resolución de las ecuaciones de la fase gaseosa hemos utilizado los métodos de Lagrange-Galerkin modificados de orden 2 en tiempo con $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$ s. El test de parada elegido para alcanzar el estado estacionario fue

$$\frac{\|\mathbf{v}_h^{n+1} - \mathbf{v}_h^n\|_{\mathbf{L}^2(\Omega)}}{\Delta t} \leq 0.02, \quad (6.3)$$

siendo el número mínimo de iteraciones $N = 6000$, con lo cual el tiempo final será, al menos, 1.2 s.

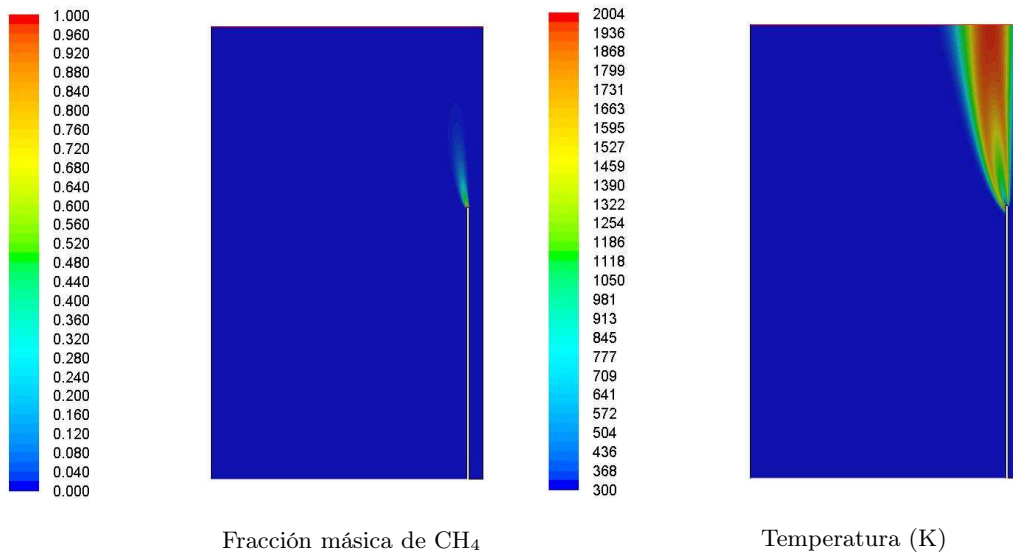


Figura 6.6: Resultados de la simulación 2D axisimétrica

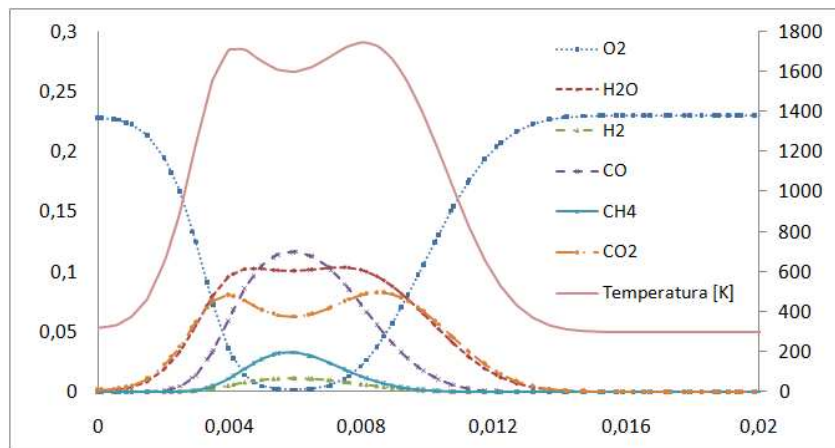


Figura 6.7: Perfiles radiales de fracciones másicas y temperatura a 20 mm del quemador

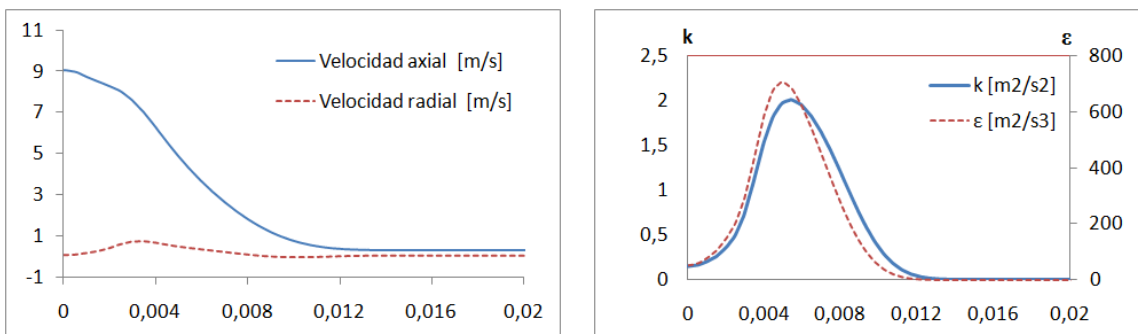


Figura 6.8: Perfiles radiales de velocidades, k y ϵ a 20 mm del quemador

La resolución del modelo de fase sólida se hace cada 50 iteraciones de fase gaseosa y los parámetros de relajación se fijan para todas las ecuaciones y para las fuentes procedentes de la fase sólida a 0.6.

6.3.1. Datos sobre el carbón

Para realizar las simulaciones, además de los análisis elemental e inmediato del carbón, dados en la Tabla 6.2, y de la granulometría, mostrada en la Figura 6.3, necesitamos proporcionar los parámetros cinéticos de las reacciones de liberación de humedad y volátiles y los correspondientes al modelo de gasificación del “char”.

Los coeficientes de la molécula de volátiles y los coeficientes estequiométricos de la reacción de combustión de los volátiles con oxígeno, calculados a partir de los análisis inmediato y elemental del carbón, se pueden ver en las Tablas 6.3 y 6.4, respectivamente. Utilizando los valores de las masas moleculares dados en la Tabla 2.1, los coeficientes de la molécula de volátiles calculados se escalan para que $\mathcal{M}_V = 30$. Una vez conocida la molécula de volátiles y los coeficientes estequiométricos de su reacción de combustión, podemos calcular todos los calores de las reacciones de la siguiente forma: suponiendo que la humedad de las partículas ya se ha evaporado antes de entrar en el dominio, la energía que tiene el carbón se debe a los volátiles y al carbono fijo. Para tener en cuenta esta energía calculamos el calor de la reacción 7 a partir del poder calorífico del carbón, de la forma

$$q_7 = \frac{100}{p_V} \left(P_c - \frac{p_{cf}}{100} q_{cf} \right), \quad (6.4)$$

siendo P_c el poder calorífico inferior, p_V el porcentaje másico de volátiles, p_{cf} el porcentaje de carbono fijo del carbón (cuyos valores podemos ver en la Tabla 6.2) y q_{cf} el calor de la reacción global de combustión del carbono con el oxígeno para producir dióxido de carbono. Este calor se calcula como

$$q_{cf} = \frac{\Delta h_{CO_2}}{\mathcal{M}_C}. \quad (6.5)$$

En ese proceso se ha supuesto que $q_4 = 0$. El resto de los calores de reacción, calculados mediante la fórmula 1.18, los mostramos en la Tabla 6.5.

Elemento	Coeficiente
C	1.3823
H	5.2133
O	0.4836
S	0.0144

Tabla 6.3: Coeficientes de la molécula de volátiles

Podemos considerar, sin cometer un gran error, que la humedad de las partículas se evapora antes de dejar el quemador. Para la devolatilización utilizamos los parámetros cinéticos $E_4 = 3.11 \times 10^7$ J/kgmol y $B_4 = 2021$ s⁻¹. Estos parámetros se han elegido a partir de la información mostrada en Kurose *et al* [64].

Llevaremos a cabo las simulaciones con cada uno de los tres modelos BFL para la fase sólida, dados en el Capítulo 2. Recordemos que el primer modelo era válido para partículas

Especie	Coefficiente estequiométrico
V	1
O_2	2.4583
CO_2	1.3823
H_2O	2.6066
SO_2	0.0144

Tabla 6.4: Coeficientes estequiométricos molares de la reacción de oxidación de los volátiles

q_1	1.43711×10^7	J/kg de C
q_2	-9.21163×10^6	J/kg de C
q_3	1.09414×10^7	J/kg de C
q_6	-1.01069×10^7	J/kg de CO
q_7	-1.88479×10^7	J/kg de V
q_8	-1.20918×10^8	J/kg de H_2

Tabla 6.5: Calores de reacción

grandes con alto contenido en cenizas, el segundo para partículas pequeñas con alto contenido en cenizas, en el que se produce la extinción de la llama de difusión en la vecindad de la partícula, y el tercero para partículas pequeñas y con bajo contenido en cenizas, en el cual tampoco se puede anclar una llama de difusión y la capa porosa de cenizas se desprende del núcleo de “char”. Recordemos que denotábamos estos modelos como BFL, BFLs1 y BFLs2, respectivamente. Teniendo en cuenta los tamaños de las partículas y su contenido en cenizas, el modelo que mejor se ajustará al experimento que pretendemos simular es el BFLs1. Ajustaremos los parámetros T_c y \mathcal{D}_e para este modelo, a partir de los resultados obtenidos en la Sección 6.4.1, y los utilizaremos para los otros dos.

6.4. Resultados obtenidos

En esta sección mostraremos tres tipos de resultados: en primer lugar haremos un análisis de la sensibilidad del modelo BFLs1 a los parámetros \mathcal{D}_e y T_c . En segundo lugar mostraremos los resultados de los tres modelos para unos valores determinados de estos parámetros. Por último, compararemos los resultados obtenidos con el modelo BFLs1, con los datos experimentales.

6.4.1. Sensibilidad de los modelos

La temperatura crítica T_c establece el punto a partir del cual las reacciones de gasificación del “char” empiezan. Así, cuando la temperatura de la partícula es menor que este valor crítico, las tres reacciones están congeladas; mientras que, si la partícula supera este valor, esas reacciones serán muy rápidas y controladas por la difusión. El coeficiente de difusión del gas en el interior de los poros determinará la velocidad con la que ocurren las reacciones de gasificación del “char” y la temperatura que alcanza la partícula. Este coeficiente se ha elegido proporcional al coeficiente de difusión de la mezcla de gases en el entorno de la partícula, de

la forma

$$\mathcal{D}_e = \frac{\mathcal{D}}{C}, \quad (6.6)$$

con C una constante positiva. Esta constante C tomará los valores 5, 50, 500, 5000, 50000 y 500000 y la temperatura T_c será 400 K, 600 K, 800 K y 1100 K.

Para realizar las pruebas fijaremos unos valores para la condición inicial del flujo, para la energía de activación y para el prefactor de Arrhenius de la reacción de liberación de los volátiles, y haremos una iteración de fase sólida con cada una de las diferentes combinaciones de los parámetros del modelo de gasificación.

En primer lugar veremos resultados sobre una partícula de diámetro $29 \mu\text{m}$ que sale de la celda por la que pasa el eje. En la Figura 6.9 podemos ver la trayectoria que sigue la partícula elegida. Dado que la semilla para la generación de números aleatorios utilizada para la dispersión de la partícula es siempre la misma, si fijamos el paso de tiempo, la partícula elegida pasará por los mismos puntos del dominio en todas las pruebas y, por lo tanto, siempre tendrá la misma atmósfera, lo que hace válida la comparación.

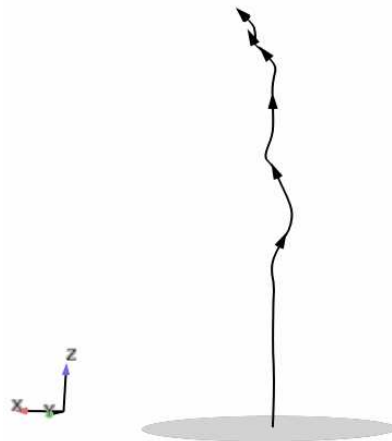


Figura 6.9: Trayectoria de la partícula elegida para mostrar los resultados del análisis

En la Figura 6.10 se pueden ver los valores de la temperatura, T_p , de la masa de carbono fijo, m_C , y de las velocidades de reacción adimensionales λ_i , $i = 1, \dots, 4$, de la partícula en función del tiempo para los distintos valores del coeficiente de difusión \mathcal{D}_e , siendo $T_c = 1100\text{K}$. Si analizamos las gráficas de esa figura, vemos cómo las velocidades de las tres reacciones de gasificación del “char” empiezan en el mismo instante de tiempo y que su valor es menor a medida que disminuye el parámetro \mathcal{D}_e . Así, el valor de la masa de carbono fijo será menor cuanto mayor sea el parámetro \mathcal{D}_e . Podemos ver también cómo, al bajar ese parámetro, la temperatura alcanzada por la partícula disminuye y, por lo tanto, el tiempo durante el que ésta se está gasificando se acorta. Es por esto que en las gráficas de las velocidades de gasificación podemos ver cómo éstas se anulan antes en los casos con difusión más pequeña. Además, debido a que la temperatura es mayor cuando \mathcal{D}_e crece, vemos que también λ_4 será mayor.

Otro detalle que podemos observar es que para todos los valores de \mathcal{D}_e

$$\lambda_1 < \lambda_3 < \lambda_2, \quad (6.7)$$

lo que pone de manifiesto que, en este caso en que la partícula pasa siempre por una región con O_2 , ésta es la especie que más influye en la gasificación del carbono fijo.

En la Figura 6.11 se mostrarán de nuevo T_p , m_C y λ_i , $i = 1, \dots, 4$, pero para los distintos valores de T_c y con $\mathcal{D}_e = 0.002\mathcal{D}$. Viendo las gráficas de las velocidades de gasificación, es claro que, al disminuir T_c éstas empiezan antes y, además, sus valores máximos son más pequeños, salvo para $T_c = 800$ K y $T_c = 1100$ K donde ya son parecidos. Además, si T_c es pequeña, la partícula se continúa gasificando hasta abandonar el dominio, puesto que la temperatura de la partícula siempre es mayor que 500 K. La razón para que λ_3 y λ_1 se hagan 0 antes que λ_2 es que siempre hay O_2 en el dominio. Esto no sucede con el CO_2 y el H_2O . Por último, como cabe esperar, la masa de carbono gasificada aumentará si hacemos que las reacciones que consumen al carbono empiecen antes, tal y como podemos ver en la gráfica de m_C .

Por último, mostraremos los porcentajes de volátiles liberados y “char” gasificado para las distintas pruebas. En la Tabla 6.6 podemos ver los distintos porcentajes obtenidos al variar el coeficiente \mathcal{D}_e , con $T_c = 1100$ K. De forma análoga, en la Tabla 6.7 podemos ver estos porcentajes al variar la temperatura crítica T_c , siendo $\mathcal{D}_e = 0.002\mathcal{D}$. En esas tablas se observa cómo al disminuir el coeficiente \mathcal{D}_e se reduce el porcentaje de carbono fijo gasificado, mientras que al disminuir la temperatura T_c este porcentaje aumenta, dado que la gasificación empezará antes.

$\mathcal{D}/\mathcal{D}_e$	Volátiles liberados (%)	“Char” gasificado (%)
5×10^0	86.78	65.65
5×10^1	80.99	24.90
5×10^2	78.62	7.88
5×10^3	77.84	2.19
5×10^4	77.71	0.52
5×10^5	77.65	0.12

Tabla 6.6: Masa gasificada en función del coeficiente \mathcal{D}_e con $T_c = 1100$ K

T_c (K)	Volátiles liberados (%)	Char gasificado (%)
400	81.56	33.12
600	81.19	27.58
800	79.91	15.98
1100	78.62	7.88

Tabla 6.7: Masa gasificada en función del coeficiente T_c con $\mathcal{D}_e = 0.002\mathcal{D}$

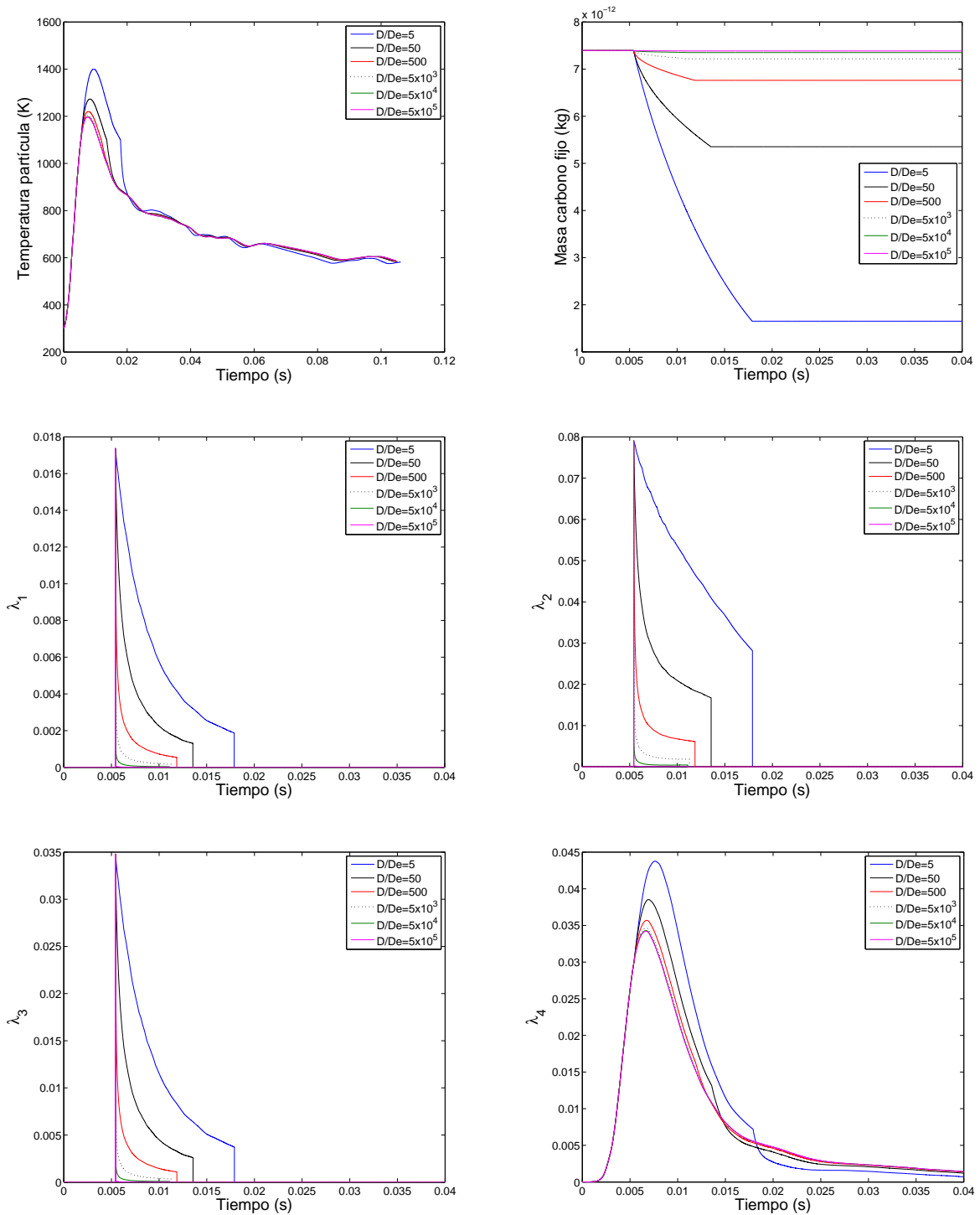


Figura 6.10: Sensibilidad del modelo de combustión BFLs1 al coeficiente de difusión D_e

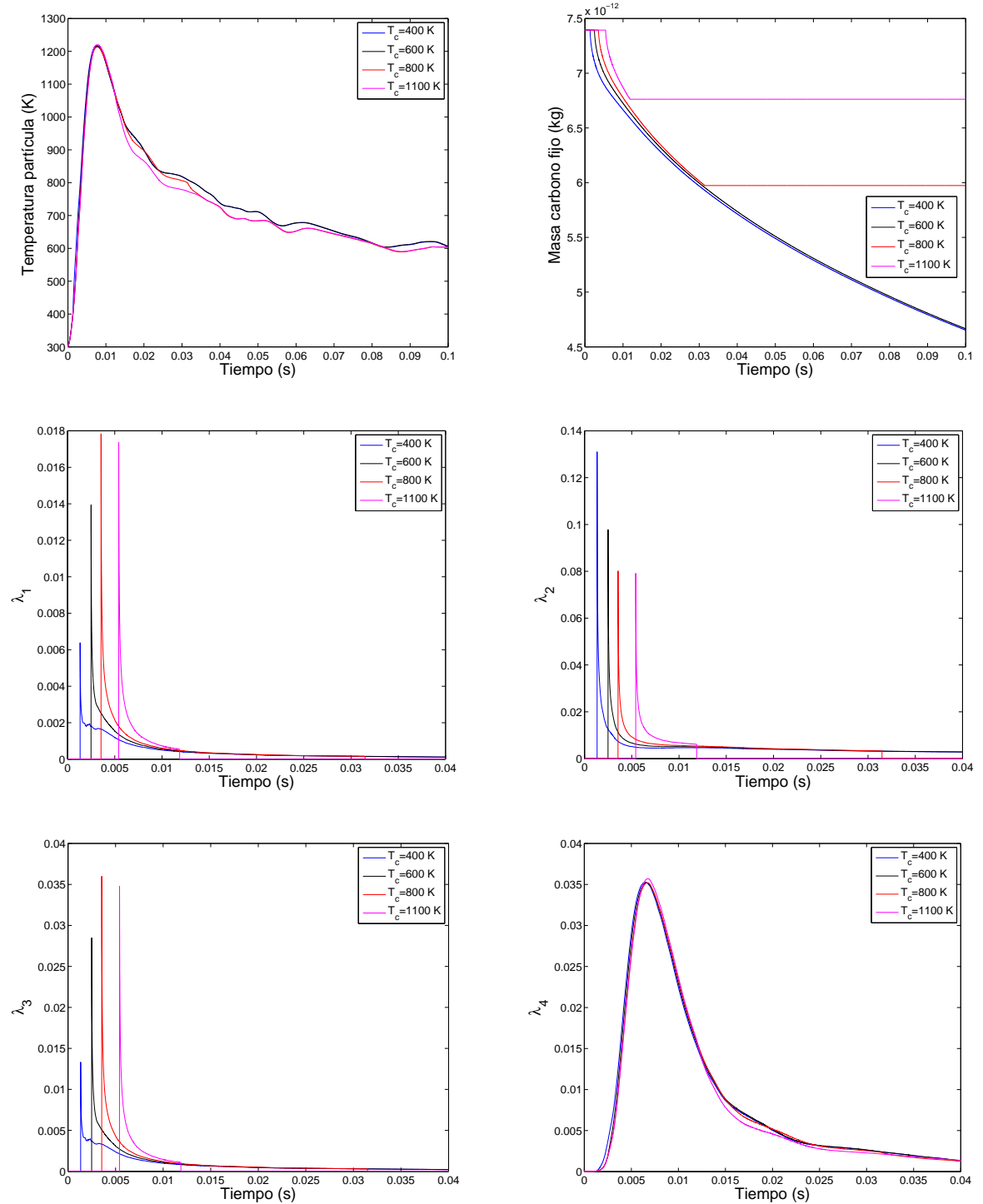


Figura 6.11: Sensibilidad del modelo de combustión BFLs1 a la temperatura T_c

6.4.2. Comparación de los modelos de combustión

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos en la sección anterior y dado que el porcentaje de carbono fijo gasificado en el experimento es 11.3%, elegimos

$$T_c = 1100 \text{ K y } \mathcal{D}_e = \frac{\mathcal{D}}{3000}. \quad (6.8)$$

Así, cuando la temperatura de las partículas cae por debajo de 1100 K, debido al enfriamiento producido por la entrada de aire ambiente, las reacciones de gasificación del “char” se extinguirán. Resolvemos el problema con los tres modelos, considerando en todas las simulaciones 20 intentos para el modelo de dispersión turbulenta.

Como mencionamos antes, el “char” gasificado en el experimento es el 11.3% mientras que los volátiles liberados son el 44.6% (todos los porcentajes en términos de masa). Los volátiles que permanecen en la partícula se unen a las cenizas y, probablemente, facilitarán la estabilidad estructural de la cáscara de cenizas. En la Tabla 6.8 podemos ver los porcentajes obtenidos con cada uno de los modelos. Como se puede observar en esa tabla, los porcentajes de volátiles liberados son mucho mayores que en el experimento. Esto nos indicaría que nuestros modelos deben extenderse para tener en cuenta la presencia de dos tipos de volátiles con diferentes tasas de volatilización.

Modelo	Volátiles liberados	Char gasificado
BFL	99.99 %	11.87 %
BFLs1	99.99 %	11.51 %
BFLs2	99.99 %	98.49 %

Tabla 6.8: Porcentajes de masa liberada

A continuación mostramos en un plano axial algunas de las variables del problema, obtenidas con los tres modelos. En primer lugar, en la Figura 6.12 podemos ver los contornos de las dos llamas de difusión Γ_F que encontramos con cada uno de los modelos, que encierran dos regiones Ω_F en las que no hay oxígeno, pues las llamas de difusión que las rodean impiden que éste entre y solo se encuentre en el exterior, en el dominio Ω_O . Una de estas llamas de difusión corresponde a la llama anular de metano utilizada en el experimento, debido a la ausencia de efectos significativos de la radiación para calentar el aire inyectado y, de esta forma, calentar las partículas y facilitar la liberación de sus volátiles y la gasificación de su carbono fijo. Las reacciones de oxidación en fase gaseosa de los combustibles (volátiles, H_2 y CO) generados por la gasificación de las partículas, consideradas infinitamente rápidas, tienen lugar de dos formas: en forma de llama de difusión en la segunda de las llamas Γ_F que encontramos aguas abajo, o en el dominio Ω_O , bien de forma distribuida, como se contempla en los modelos BFLs1 y BFLs2, o bien en forma de llamas de difusión cerradas, en el interior o en el entorno de las partículas, como se predice en el modelo BFL. Las concentraciones de combustibles son despreciables en el dominio Ω_O como podemos ver, por ejemplo, en la Figura 6.13 y también en la Figura 6.22, en la que se muestran las fracciones máxicas de CO obtenidas con los tres modelos. En esas figuras se puede ver que los valores distintos de cero están confinados en los dominios Ω_F y cómo esos valores decrecen hasta valer cero a medida

que se aproximan a la llama de difusión Γ_F . En la Figura 6.14 y, como veremos, también en la Figura 6.22 observamos el comportamiento contrario para el O_2 .

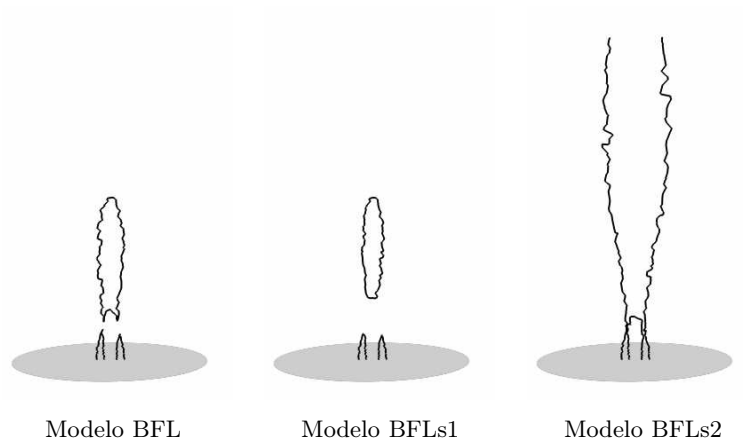


Figura 6.12: Posición de la llama de difusión Γ_F

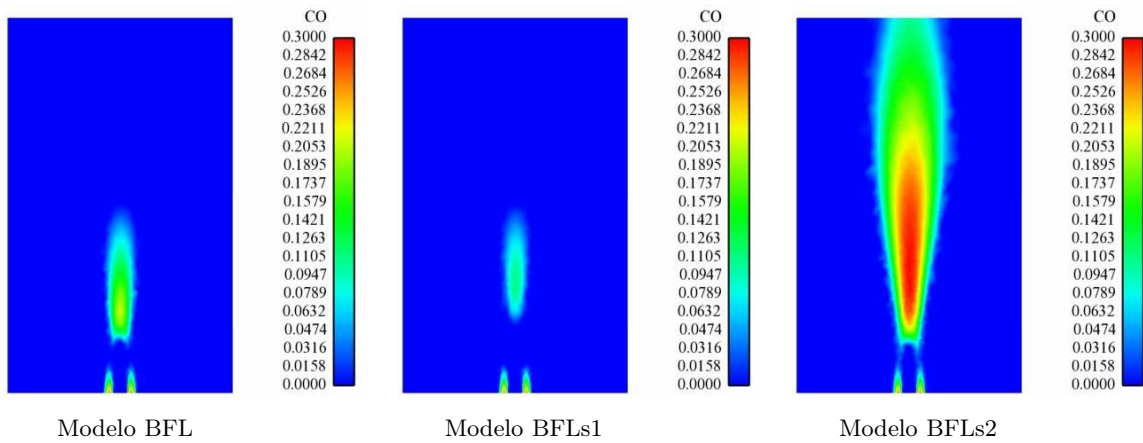


Figura 6.13: Fracción másica de CO

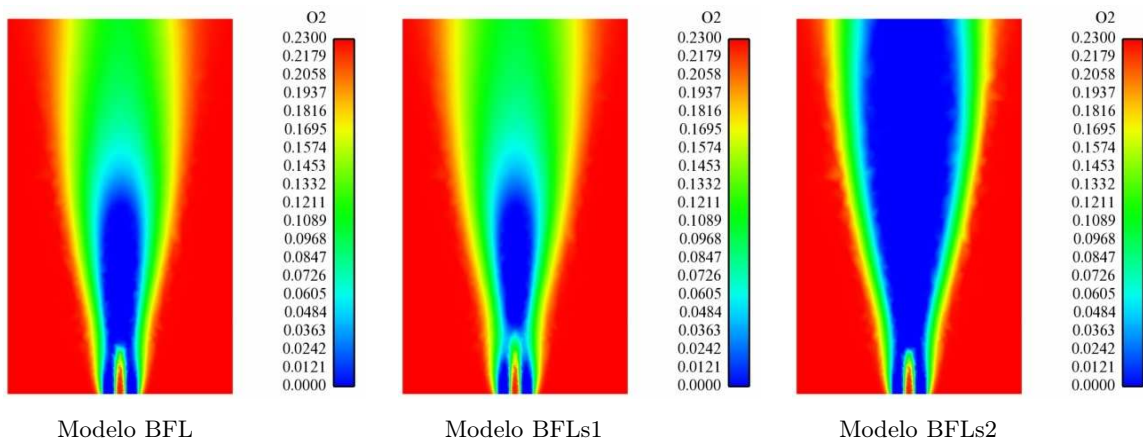


Figura 6.14: Fracción másica de O_2

Las fuentes de masa y energía homogeneizadas provenientes de la fase sólida, calculadas con cada modelo, se pueden ver en las Figuras 6.15 y 6.16, respectivamente.

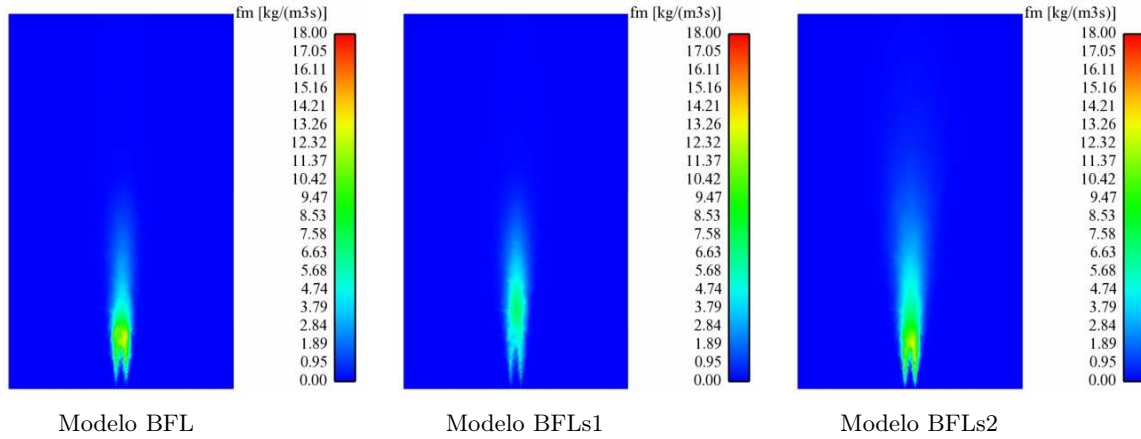


Figura 6.15: Fuente de masa homogeneizada ($\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$)

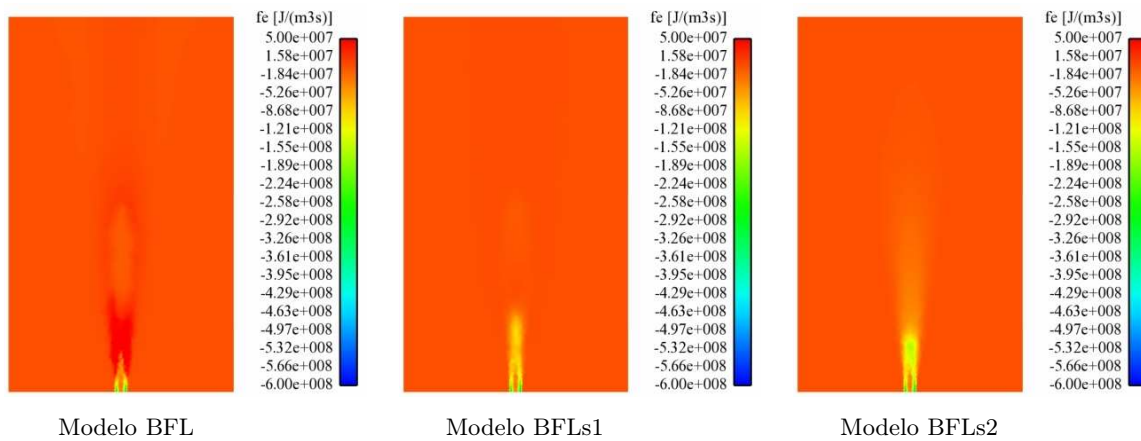


Figura 6.16: Fuente de energía homogeneizada ($\text{J}/\text{m}^3\text{s}$)

Las fracciones máscas de SO_2 obtenidas con los tres modelos se muestran en la Figura 6.17. La fracción máscica de SO_2 (un importante contaminante) se debe, en nuestros modelos, a la cantidad de S dada en el análisis elemental del carbón que incorporamos a las materias volátiles que serán oxidadas en fase gaseosa. En la Figura 6.18 se comparan las fracciones máscicas de CO_2 que se predicen con cada uno de los modelos. Esta especie aparece aguas abajo debido a la combustión en fase gaseosa del CO y de los volátiles producidos por la gasificación de las partículas y, además, encontramos CO_2 aguas arriba por la oxidación del CO procedente de la combustión del CH_4 . En el caso del H_2O , cuya fracción máscica se puede ver en la Figura 6.19, ocurre algo similar: por un lado, se produce por la oxidación del H_2 y de los volátiles que se producen al gasificarse las partículas y, por otro lado, aparece aguas arriba como producto de la combustión del CH_4 .

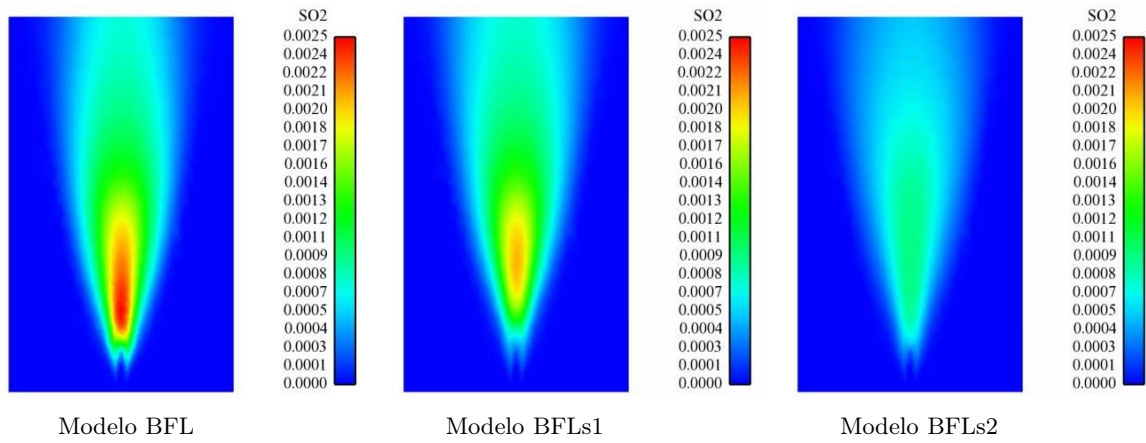


Figura 6.17: Fracción másica de SO_2

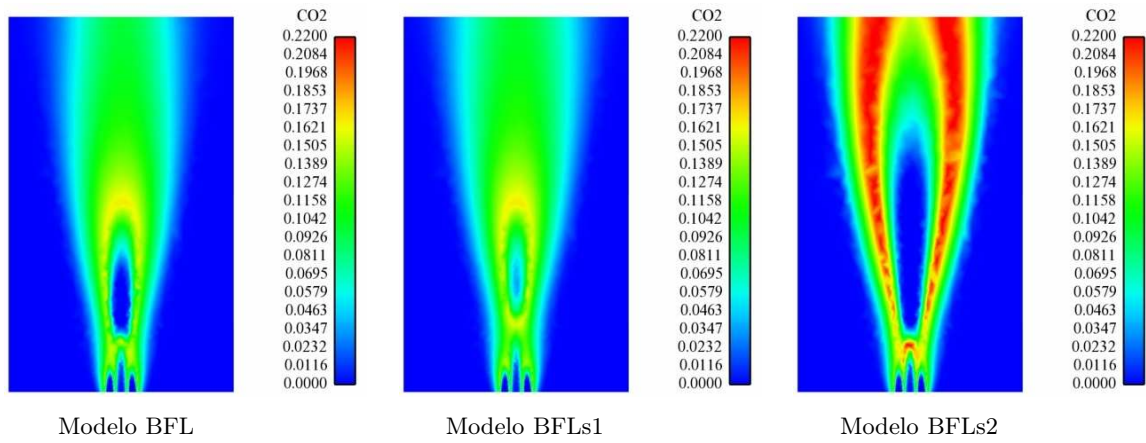


Figura 6.18: Fracción másica de CO_2

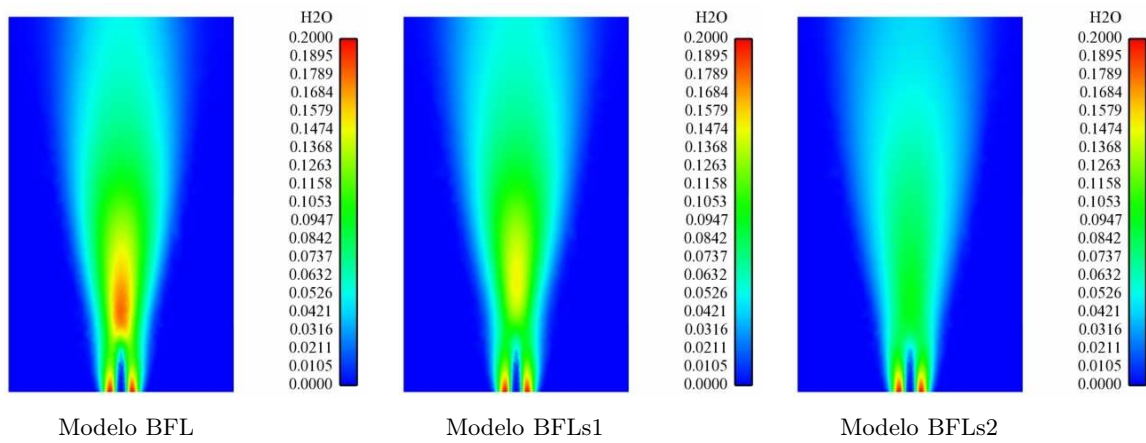


Figura 6.19: Fracción másica de H_2O

La temperatura del gas obtenida con nuestros modelos se muestra en la Figura 6.20,

con algunas isoterma indicadas en la escala de colores. Las irregularidades que se observan en la llama de difusión y la falta de simetría axial se debe a imprecisiones de la resolución numérica. En la Figura 6.21 pintamos la distribución axial de la temperatura del gas. La Figura 6.22 muestra la distribución radial, a la altura $z=90$ mm, de las fracciones másicas de O_2 y CO obtenidas con el modelo BFLs1 y la temperatura del gas calculada con los tres modelos. El primer pico de temperatura en la distribución axial de la misma corresponde a la aparición de la llama de difusión aguas arriba y el segundo pico al corte de la llama de difusión aguas abajo. Este segundo pico no aparece en el modelo BFLs2 por la interrupción del dominio computacional. Estos dos picos en la temperatura media del gas no son suaves, debido a que no usamos un modelo completamente turbulento que incluya una PDF para modelizar las fluctuaciones turbulentas de los escalares conservados.

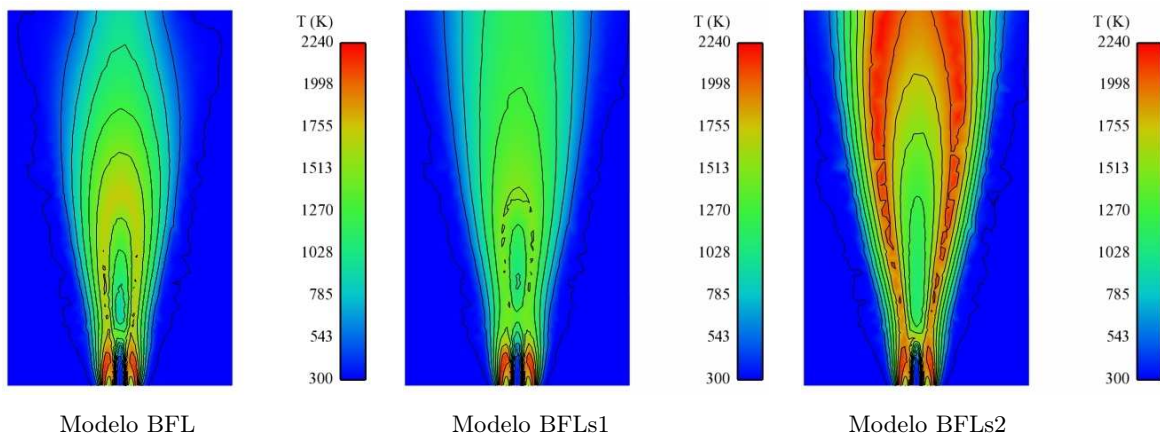


Figura 6.20: Temperatura (K) de la mezcla de gases

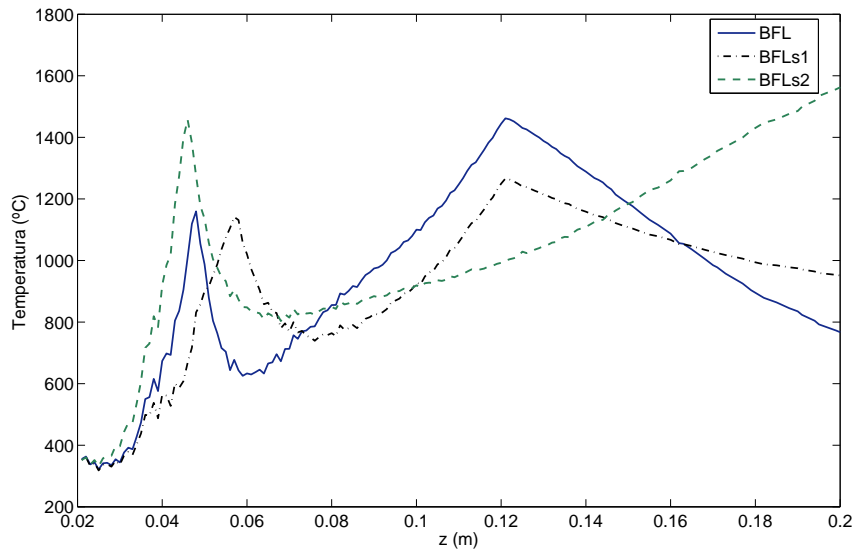


Figura 6.21: Distribución de la temperatura del gas en el eje

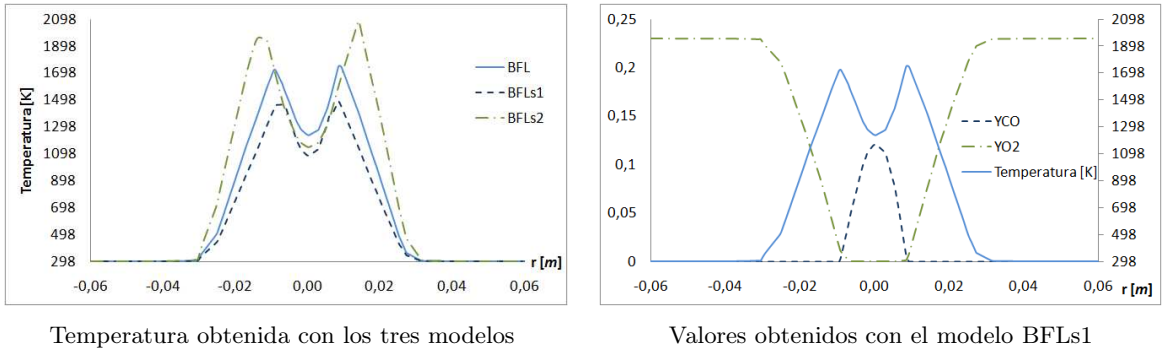


Figura 6.22: Distribución radial de la temperatura del gas y de Y_{O_2} e Y_{CO} en $z = 90\text{mm}$

Por último, en la Figura 6.23 se pueden ver las velocidades medias y en la Figura 6.24 las presiones obtenidas para los distintos modelos.

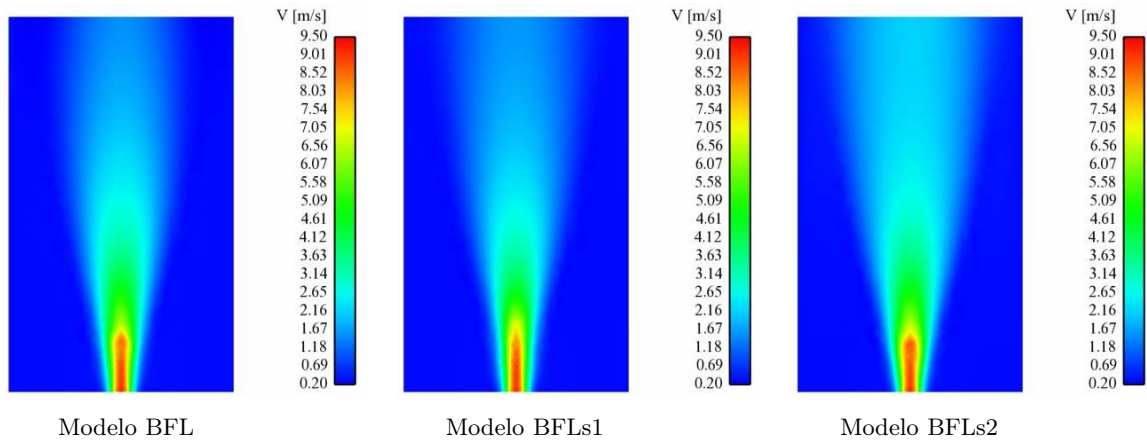


Figura 6.23: Módulo de la velocidad (m/s) de la mezcla de gases

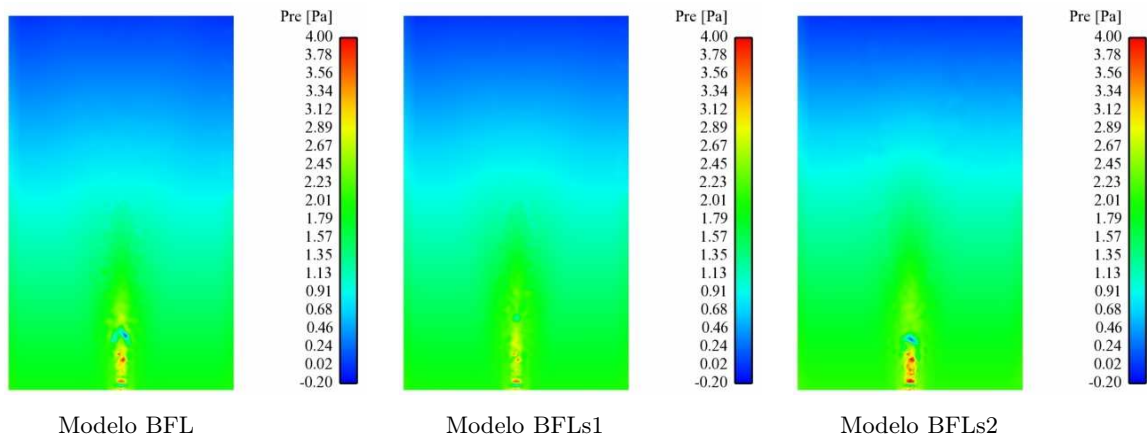


Figura 6.24: Presión (Pa) de la mezcla de gases

La resolución de los tres modelos de combustión, utilizando los mismos parámetros, nos

permite observar que los dos primeros producen resultados muy parecidos, a diferencia de lo que ocurre con el tercero. Recordemos que la diferencia entre los dos primeros modelos es que el BFLs1 supone que las partículas son tan pequeñas que no pueden alojar una llama de difusión en fase gaseosa en el interior de sus poros ni en su vecindad. Esto se traduce en que la temperatura de las partículas, alcanzada durante la liberación de volátiles y la gasificación, es menor en este modelo y, como consecuencia, estas reacciones serán algo más lentas. Que el coeficiente de difusión \mathcal{D}_e sea tan pequeño hace que, comparado con el modelo BFL, la diferencia no sea muy importante, ya que impide que en este último la partícula se caliente demasiado y las reacciones de gasificación del “char” sean demasiado rápidas. En la Figura 6.15 vemos que, efectivamente, la fuente de masa liberada por las partículas está más concentrada en el modelo BFL, lo que se refleja también en una mayor cantidad de “char” gasificado, como podemos ver en la Tabla 6.8. En ambos modelos, la cáscara de cenizas tiene un efecto inhibitorio sobre la llegada por difusión de las especies gasificantes del “char” y, por lo tanto, ralentiza la generación de CO y H_2 y el calentamiento de la partícula debido a la oxidación de estas especies. Así, el aire ambiente que entra en la llama pronto enfría el gas y, en consecuencia, baja la temperatura de las partículas. Por esto, ambos modelos proporcionan una gran cantidad de carbono fijo sin quemar, ya que, cuando la temperatura de las partículas cae por debajo de la temperatura crítica de transición T_c , las reacciones de gasificación del “char” se consideran congeladas. Si ahora observamos la Figura 6.12, vemos que la región sin oxígeno es mayor, y empieza antes en el modelo BFL que en el BFLs1. Esto tiene que ver, de nuevo, con la posibilidad de que la llama de difusión esté en la vecindad de la partícula y, en consecuencia afectando a su gasificación, lo que hace que se acabe antes el oxígeno y en mayor cantidad.

Por otro lado, el modelo BFLs2 supone que el contenido en cenizas de las partículas es pequeño y, por lo tanto, éstas disminuyen su tamaño a medida que se gasifican. Esta hipótesis no es válida para el tipo de carbón que estamos considerando, ya que el porcentaje de cenizas es aproximadamente el 15%; de ahí los malos resultados obtenidos. Si suponemos que la partícula pierde su tamaño al gasificarse, aunque no pueda tener la llama de difusión en su vecindad, ésta se calentará más rápido. Como consecuencia, una vez iniciada esta segunda etapa, su temperatura difícilmente bajará de T_c y, por lo tanto, la mayoría de las partículas se gasifican completamente antes de abandonar el dominio. Esto se refleja en los resultados obtenidos en la fase gaseosa. Así, podemos ver en la Figura 6.15 que con el tercer modelo la fuente de masa está más extendida que en los otros dos. Dado que en este modelo el oxígeno ataca al “char” y la gasificación dura más que en los otros dos, la región Ω_F es más extensa (ver Figura 6.12).

6.4.3. Comparación con los resultados experimentales

En esta sección compararemos algunos resultados sobre partículas obtenidos con el modelo BFLs1, con las medidas experimentales.

En primer lugar mostraremos resultados relativos a la temperatura. En los artículos [55]-[57] se explica que, como las medidas de la temperatura se realizan con un pirómetro óptico de radiación, éstas son imprecisas. Como dicen los autores: *más que la temperatura de las partículas en un punto concreto, representan la temperatura de las partículas y del gas*

en una región relativamente grande en torno al eje. Por esta razón, nosotros hacemos un promedio de la temperatura de las partículas que pasan un cilindro de radio 3 mm centrado en el eje. En la Figura 6.25 podemos ver este promedio pintado con una línea continua y las medidas experimentales representadas con puntos. En esa figura se puede ver cómo la temperatura obtenida con la simulación muestra dos picos: uno se alcanza en $z = 30$ mm, que coincide con el valor más alto de las medidas experimentales, y otro en $z = 120$ mm. El primer pico de temperatura se debe a la llama de difusión del metano que hace que la temperatura del gas y de las partículas sea muy alta cerca de la salida del inyector. Sin embargo, el segundo pico no se refleja en las medidas experimentales, porque en ese punto el valor de la temperatura del gas no es tan alto como en la llama de metano (podemos ver en la Figura 6.21 que $T = 1200$ K) lo que baja el promedio de temperatura de gas y partículas de la medida. En [55] se muestra una fotografía de la llama en la que se puede ver que en $z = 30$ mm la combustión de las partículas acaba de empezar y la temperatura más alta aparece, aproximadamente, en $z = 120$ mm. En la Figura 6.21, en la que se representaban las temperaturas de la mezcla de gases en el eje obtenidas con los tres modelos, podemos ver que el pico de temperatura obtenido con el modelo BFLs1 coincide también con el de la fotografía.

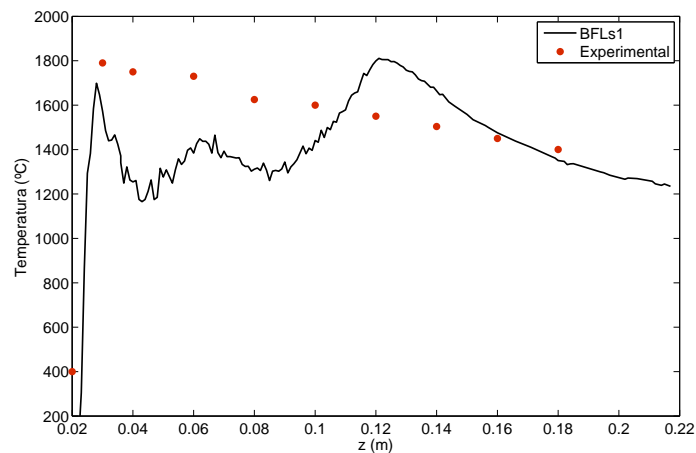


Figura 6.25: Temperatura promedio de las partículas que pasan por el eje central

En segundo lugar, mostraremos resultados relativos a la dispersión y tamaños de las partículas. En la Figura 6.26 se pueden ver las trayectorias de las partículas de los diferentes radios considerados que salen de la celda situada en el eje del inyector. En esa figura se observa cómo las partículas se dispersan más cuanto menor es su tamaño. Para ilustrar el comportamiento de las partículas según su tamaño, pintamos la trayectoria de las más pequeñas y de las más grandes coloreadas por su velocidad, temperatura y densidad. Así, en la Figura 6.27 podemos ver, además de que las partículas pequeñas se dispersan más, que éstas alcanzan una mayor temperatura y se gasifican más. Si observamos en esa figura las gráficas de las temperaturas de las partículas vemos cómo las pequeñas, al dispersarse más, alcanzan una temperatura muy alta debido a la llama de metano.

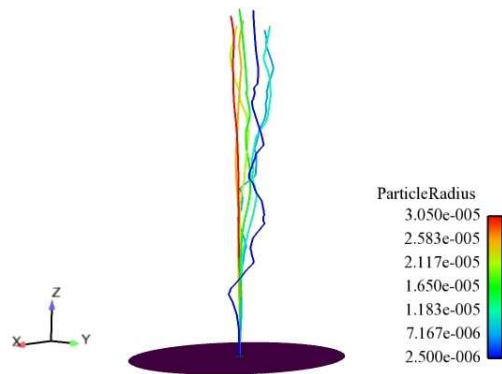


Figura 6.26: Trayectorias de partículas coloreadas por su tamaño

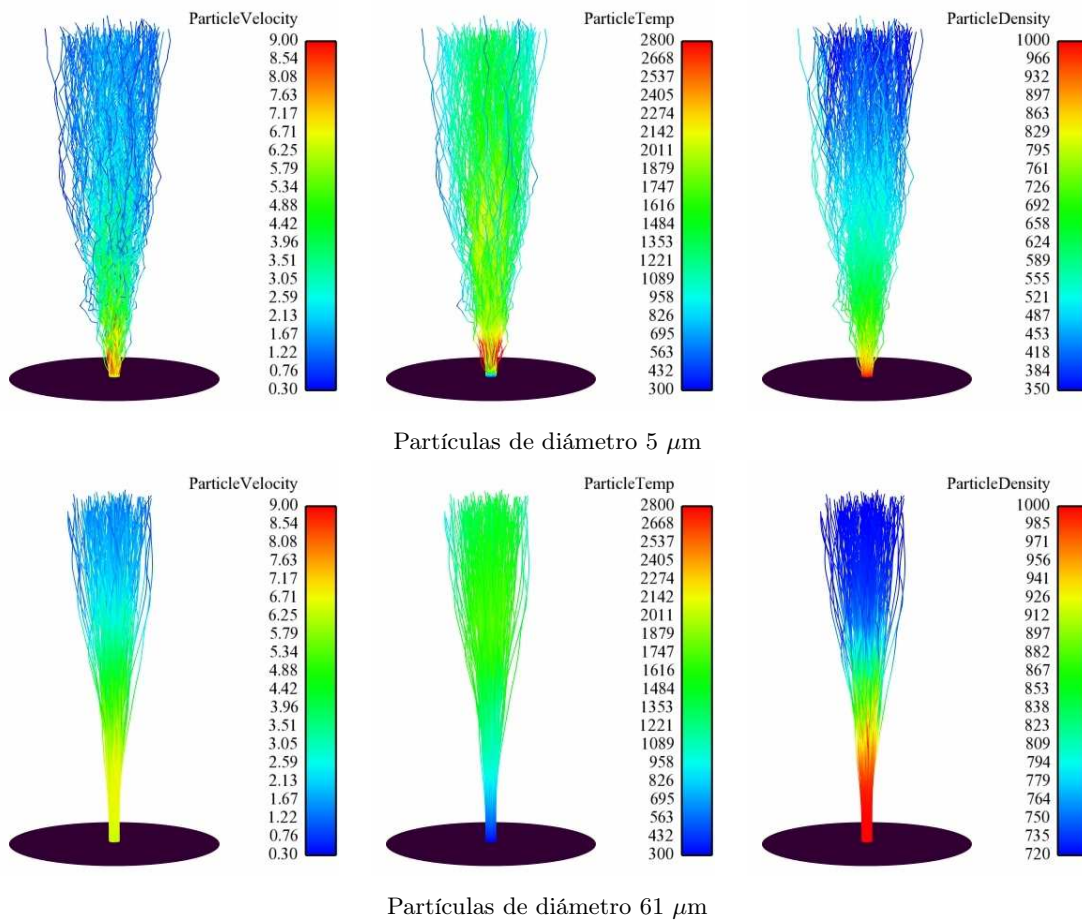


Figura 6.27: Trayectoria de partículas de carbón coloreadas por v_p , T_p y ρ_p

Calculamos el diámetro medio de las partículas en cada elemento de la malla como

$$\bar{d}_i = \frac{1}{N_p^i} \sum_{j=1}^{N_p^i} d_j, \quad (6.9)$$

siendo N_p^i el número de partículas que pasan por el tetraedro i y d_j el diámetro de la partícula j -ésima. La Figura 6.28 muestra la distribución de diámetros de las partículas que pasan por el eje, es decir, el diámetro medio dado por (6.9) en los elementos por los que pasa el eje. Podemos ver que éste es mayor cuanto más lejos se encuentre de la salida del quemador hasta $z \approx 120$ mm. Esto se debe a que las partículas más pequeñas son las que más se dispersan y tienden a alejarse de la zona central. La simulación predice que el diámetro medio vuelve a descender a partir de $z \approx 120$ mm, al contrario de lo que ocurre en las medidas experimentales. Esto se explica si tenemos en cuenta que nuestro modelo supone constante el radio de las partículas durante el proceso de gasificación y además que, a partir de esa altura, las partículas grandes comienzan también a dispersarse, como podemos ver en la Figura 6.27. Este comportamiento se refleja también en la Figura 6.29 en la que se puede ver la distribución radial de los diámetros medios en $z = 60$ mm, $z = 120$ mm y $z = 180$ mm. Como podemos ver en estas figuras, el tamaño medio de las partículas es mayor en el centro de la llama mientras que, a medida que nos movemos hacia el exterior, éste descende. Se puede ver que la simulación predice una mayor dispersión de las partículas, sobre todo a partir de cierta altura. Esto se debe a que utilizamos el modelo $k - \epsilon$ estándar para resolver un problema transicional y, por lo tanto, la simulación es algo más difusa que la realidad.

Por último, en la Figura 6.30 se tienen las distribuciones de tamaños de partículas en el eje a las distancias $z = 60$ mm, $z = 120$ mm y $z = 180$ mm del quemador, las cuales se comparan con los valores mostrados en [55]. Para calcular estas distribuciones tenemos en cuenta las partículas que pasan por el cilindro

$$C_a = \{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 / x^2 + y^2 \leq 0.002, a - 0.001 \leq z \leq a + 0.001 \},$$

con a la altura en m a la que calculamos la distribución. De esta forma, se tiene en $z = 60$ mm un diámetro medio de $23.60 \mu\text{m}$, en $z = 120$ mm de $25.04 \mu\text{m}$ y en $z = 180$ mm de $22.62 \mu\text{m}$.

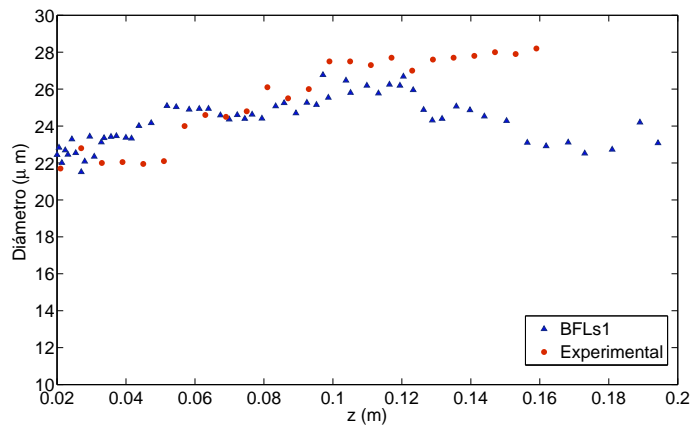


Figura 6.28: Diámetro promedio de las partículas que pasan por el eje central

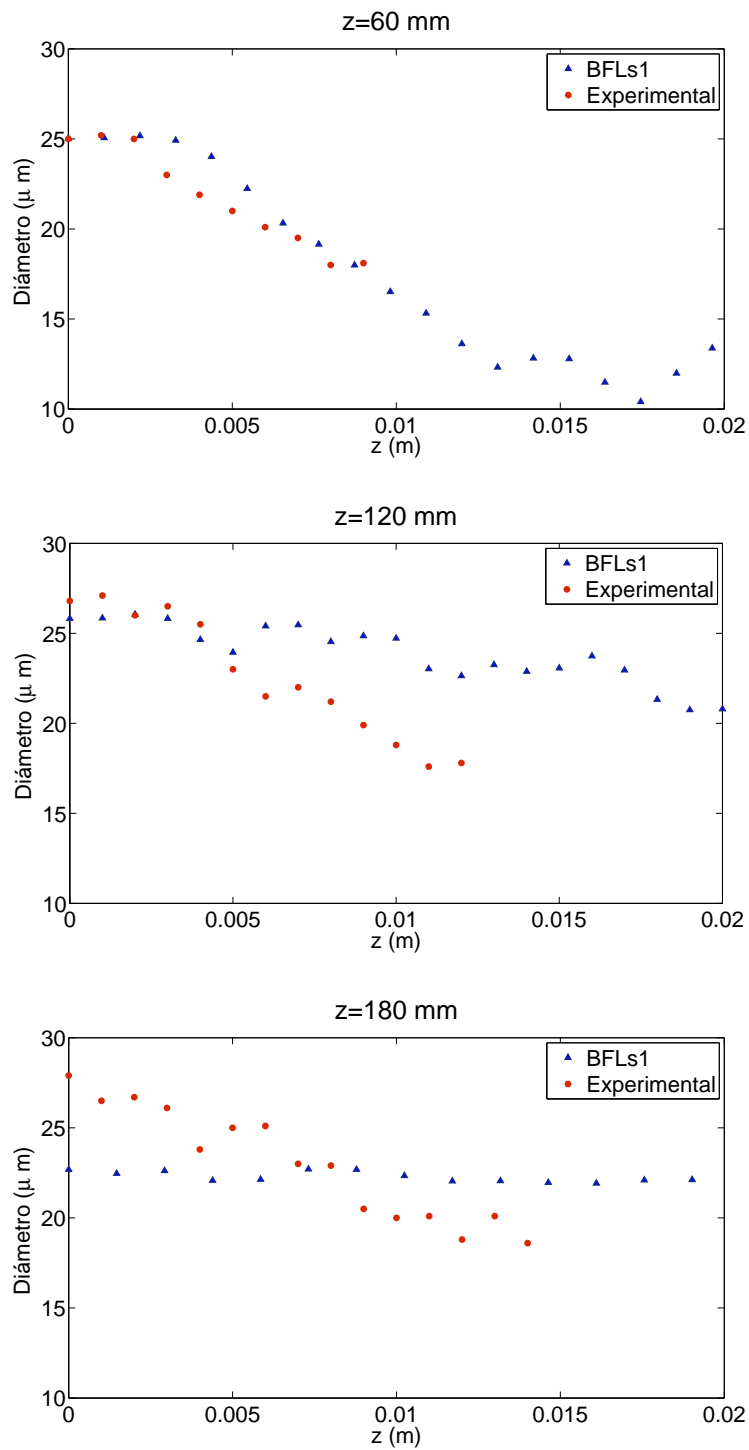


Figura 6.29: Distribución radial del diámetro medio de las partículas a distintas alturas

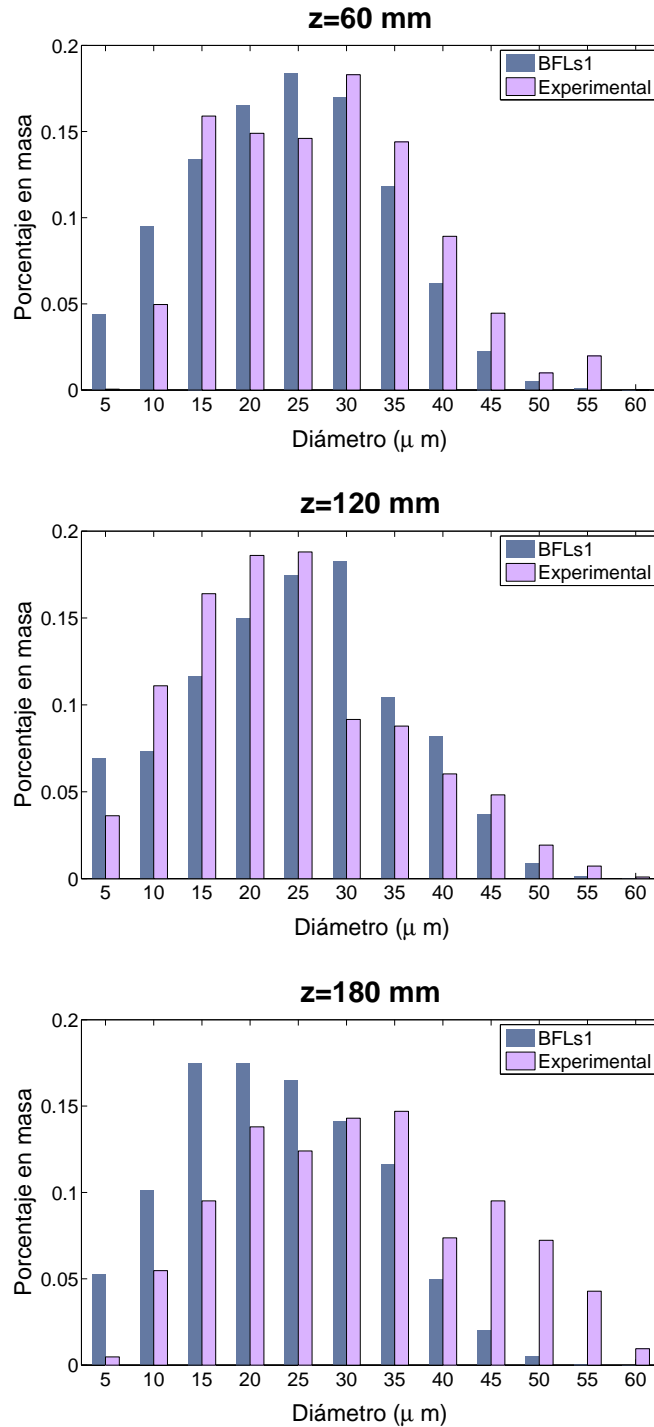


Figura 6.30: Distribución de masa de partículas en el eje central a distintas alturas

Por último, los artículos [56] y [57] dan una descripción detallada de la estructura de la llama, incluyendo algunas imágenes. Puede verse que en la región aguas arriba, las reacciones de combustión 6-8 se producen sólo en la periferia del grupo de partículas, donde el gas a alta temperatura procedente de la llama piloto de metano es arrastrado y el suministro de

oxígeno es suficiente, mientras que en la región aguas abajo las reacciones de combustión entran en el grupo de partículas, debido a la mezcla de los combustibles procedentes de la gasificación de las partículas con el oxígeno. Este comportamiento se refleja en nuestros resultados, como puede verse, por ejemplo, en la Figura 6.12 de la región Γ_F obtenida con el modelo BFLs1.

Los resultados obtenidos muestran un buen ajuste con los resultados experimentales, a pesar de la incertidumbre en algunas de las medidas realizadas. Podemos observar una mayor dispersión que la observada en las medidas experimentales que, como hemos mencionado, creemos que puede deberse al uso del modelo $k - \epsilon$ para simular un flujo no muy turbulento. Para obtener una comparación aún mejor necesitaríamos conocer más datos (velocidad del coflujo, granulometría, etc.) y deberíamos utilizar técnicas de alta precisión como simulaciones DNS o LES. Además, en caso de no realizar simulaciones DNS, habría que desarrollar una formulación completamente turbulenta para el modelo BFL con el fin de obtener el valor instantáneo de Z_1 y, por lo tanto, de la llama Γ_F , teniendo en cuenta las fluctuaciones debidas a la turbulencia.

Conclusiones

En este trabajo hemos realizado un estudio de diferentes aspectos involucrados en la simulación de problemas de carbón pulverizado.

En primer lugar, describimos los modelos matemáticos para flujos de gases reactivos con combustión de carbón. El modelo de combustión propuesto en Bermúdez *et al* [19] fue extendido para tener en cuenta partículas de carbón con bajo contenido en cenizas. Además, se escribió una primera versión de este modelo para flujos turbulentos.

En la segunda parte, analizamos los nuevos métodos de Lagrange-Galerkin modificados que, como vimos, tienen la misma precisión que los estándar pero son más eficientes. Además, esta afirmación se probó con varios resultados que dan una idea del tiempo de cálculo que permiten ahorrar estos nuevos métodos.

Utilizando estos y otros métodos numéricos para la resolución del modelo, hemos desarrollado un programa para la simulación de flujos de combustión de carbón pulverizado. En la última parte de esta memoria, se describieron los métodos numéricos y algoritmos utilizados en el programa. Además, en el Apéndice B se muestra una descripción detallada del código. El lenguaje de programación utilizado fue FORTRAN 95 y se realizó una programación de tipo “orientada a objeto”, aunque debido a las limitaciones del lenguaje se conservaron algunos programas en forma secuencial.

Por último validamos el modelo de combustión y el programa haciendo la simulación de un chorro de carbón pulverizado. En primer lugar, estudiamos la sensibilidad a los parámetros del modelo de combustión para la fase sólida y, en segundo lugar, comparamos los resultados obtenidos con los tres modelos desarrollados. Esta comparación nos permitió concluir que el modelo BFLs2 (considera partículas pequeñas con alto contenido en cenizas) es el más adecuado para simular ese experimento, como cabía esperar por las características del carbón utilizado en el mismo. Con el modelo BFLs2, obtuvimos una buena coincidencia entre los resultados obtenidos y los datos experimentales.

Como trabajo futuro tendríamos, entre otras, las siguientes tareas:

- Realizar la formulación turbulenta del modelo de combustión.
- Incorporar al código leyes de pared o bien modelos de turbulencia para regiones con bajo número de Reynolds.
- Implementar un modelo para la radiación que nos permita simular flujos en dominios cerrados.

- Simular una caldera industrial de carbón pulverizado. Una primera simulación, en la que solo se resolvía el modelo de combustión para la fase sólida, fue realizada con una primera versión de nuestro código en Saavedra [88].
- Desarrollar la interface gráfica para el programa de simulación que hemos desarrollado.
- Paralelizar el código para disminuir el tiempo de cálculo.

Apéndice A

Implementación de un método MLG para Navier-Stokes

En este apéndice mostraremos la formulación matricial obtenida para la implementación del método de Lagrange-Galerkin (estándar o modificado) descrito en el Capítulo 5 para la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes. Este método utiliza la fórmula BDF2 para la discretización de la derivada material y el elemento finito \mathbb{P}_1 -burbuja/ \mathbb{P}_1 para la discretización espacial. La motivación para escribir este apéndice es mostrar los cálculos detallados para la formulación más general de las ecuaciones y la metodología seguida para la eliminación de los grados de libertad asociados a las burbujas en el sistema lineal obtenido.

A.1. Formulación del problema

En primer lugar vamos a escribir la forma general del problema de Navier-Stokes que vamos a resolver, en el que se enmarcaría el Problema 5.16 visto en 5.2.3.

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un dominio cuya frontera Γ está dividida en dos partes: Γ_D , donde se conoce el valor de la velocidad, y Γ_N , donde se impone una condición natural de tipo salida libre. Consideramos el siguiente problema de Cauchy:

Problema A.1. *Encontrar dos funciones $\mathbf{v} : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathcal{V}$ y $\pi : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ tales que*

$$\rho \dot{\mathbf{v}} - \operatorname{div} \left(\mu(\operatorname{grad} \mathbf{v} + \operatorname{grad} \mathbf{v}^t) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{v} \mathbb{I} \right) + \operatorname{grad} \pi + l \mathbf{v} = \mathbf{f}, \quad (\text{A.1})$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = g, \quad (\text{A.2})$$

en $\Omega \times (0, T)$, y verificando las condiciones de contorno e iniciales

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_D, \text{ en } \Gamma_D \times (0, T), \quad (\text{A.3})$$

$$-\pi \mathbf{n} + 2\mu(\operatorname{grad} \mathbf{v} + \operatorname{grad} \mathbf{v}^t) \mathbf{n} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{v} \mathbf{n} = \mathbf{0}, \text{ en } \Gamma_N \times (0, T), \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{v}(x, 0) = \mathbf{v}^0(x), \forall x \in \bar{\Omega}. \quad (\text{A.5})$$

En este problema $\mu : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ es una función que representa la viscosidad del gas y que no podremos considerar constante si el flujo es turbulento, $g : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ representa la conservación de la masa, y $g \neq 0$ si el flujo es compresible, $\rho : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ será la densidad, $\mathbf{f} : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}^3$ serán las fuerzas volúmicas, $l : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ el término de reacción, $\mathbf{v}_D : \Gamma_D \rightarrow \mathbb{R}^3$ la velocidad definida en la frontera Dirichlet y $\mathbf{v}^0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, la condición inicial dada. Debemos tener en cuenta que, en caso de un flujo turbulento que haya sido modelizado con una aproximación de tipo RANS, la presión π es, en realidad, $\bar{\pi} := \pi + \frac{2}{3}k$.

A continuación, introducimos algunas notaciones que vamos a utilizar en este apéndice y recordaremos otras ya definidas a lo largo de la memoria. Definimos el espacio funcional

$$\mathbf{V}_D = \{\mathbf{w} \in \mathbf{H}^1(\Omega) : \mathbf{w}|_{\Gamma_D} = 0\}. \quad (\text{A.6})$$

Dividimos el intervalo $[0, T]$ en N subintervalos de tamaño $\Delta t = T/N$ y denotamos por $t_n = n\Delta t$ y Ω_h la malla regular de tetraedros, de tamaño característico h , del dominio Ω . Para la discretización espacial del problema consideramos los espacios de elementos finitos \mathbf{V}_{0h} y M_h que se definen como

$$\mathbf{V}_h = \{\mathbf{w}_h \in \mathbf{C}^0(\bar{\Omega}) : \mathbf{w}_h|_T \in P_b(T)^3, \forall T \in \Omega_h\}, \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{V}_{0h} = \mathbf{V}_h \cap \mathbf{V}_D, \quad (\text{A.8})$$

$$M_h = \{q_h \in C^0(\bar{\Omega}) : q_h|_T \in P_1(T), \forall T \in \Omega_h\}, \quad (\text{A.9})$$

donde $P_1(T)$ y $P_b(T)$ son los espacios

$$P_1(T) = \{p : T \rightarrow \mathbb{R} : p = \hat{p} \circ F_j^{-1}, \hat{p} \in P_1(\hat{T})\}, \quad (\text{A.10})$$

$$P_b(T) = \{p + \alpha \lambda_5^T : p \in P_1(T), \alpha \in \mathbb{R}\}, \quad (\text{A.11})$$

siendo $\lambda_5^T = 256\lambda_1^T \lambda_2^T \lambda_3^T \lambda_4^T$ la función burbuja asociada al elemento T y $\lambda_i^T, i = 1, \dots, 4$ las coordenadas baricéntricas con respecto a los vértices del elemento T .

Observación A.1.1. Si definimos el espacio funcional

$$B_h = \{v \in C^0(\bar{\Omega}) : v|_T = \alpha_T \lambda_5^T, \forall T \in \Omega_h, \alpha_T \in \mathbb{R}\}, \quad (\text{A.12})$$

se tiene

$$\mathbf{V}_h = (M_h \oplus B_h)^3. \quad (\text{A.13})$$

El elemento finito asociado a los espacios P_b y P_1 se conoce con el nombre de elemento \mathbb{P}_1 -burbuja/ \mathbb{P}_1 o MINI-elemento. Es el elemento finito con menor número de grados de libertad que verifica la condición de Babuška-Brezzi (ver [40]).

Por simplicidad en los cálculos, para la discretización de la derivada material consideramos la fórmula BDF1; los cálculos para la implementación de la fórmula BDF2 serían análogos. Siguiendo los mismos pasos que en 5.2.3 obtenemos el problema discretizado siguiente:

Problema A.2. Sea $\mathbf{v}_h^0 = I_h^b \mathbf{v}_0$, encontrar sucesiones $[\mathbf{v}_h] \in (\mathbf{V}_h)^N$ y $[\pi_h] \in (M_h)^N$ verificando para cada $n \in \{0, \dots, N-1\}$ que $\mathbf{v}_h^{n+1} = I_h^b \mathbf{v}_D^{n+1}$ y

$$a^{n+1}(\mathbf{v}_h^{n+1}, \mathbf{w}_h) + b^{n+1}(\mathbf{w}_h, \pi_h^{n+1}) = (\mathbf{F}^{n+1}, \mathbf{w}_h), \quad \forall \mathbf{w} \in X_{h0} \quad (\text{A.14})$$

$$b^{n+1}(\mathbf{v}_h^{n+1}, q_h) = -(g^{n+1}, q_h), \quad \forall q_h \in M_h, \quad (\text{A.15})$$

siendo

$$\mathbf{F}^{n+1} = \mathbf{f}^{n+1} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{v}_h^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1}, \quad (\text{A.16})$$

y las formas bilineales a^{n+1} y b^{n+1} definidas como

$$\begin{aligned} a^{n+1}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) &= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho^{n+1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{w} dx + \int_{\Omega} \mu^{n+1} (\text{grad } \mathbf{u} + \text{grad } \mathbf{u}^t) \text{grad } \mathbf{w} dx \\ &+ \int_{\Omega} l^{n+1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{w} dx, \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{w} \in \mathbf{H}^1(\Omega) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$b^{n+1}(\mathbf{w}, q) = - \int_{\Omega} q \text{div } \mathbf{w} dx, \quad \forall \mathbf{w} \in H^1(\Omega), \quad q \in L^2(\Omega). \quad (\text{A.18})$$

A.2. Escritura matricial del problema discretizado. Eliminación de las burbujas

Para hacer la formulación matricial del Problema A.2, utilizaremos la siguiente notación:

- N_v número de vértices de la malla,
- N_e número de tetraedros de la malla,
- $a_i, i = 1, \dots, N_v$ vértices de la malla,
- $b_i, i = 1, \dots, N_e$ baricentros de los tetraedros de la malla,
- $w_i, i = 1, \dots, N_v$ funciones de base del espacio M_h ,
- $\phi_k, k = 1, \dots, N_e$ funciones de base del espacio B_h .

Tenemos entonces que una base del espacio \mathbf{V}_h es

$$B = \left\{ \left(\begin{array}{c} w_i \\ 0 \\ 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0 \\ w_i \\ 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ w_i \end{array} \right) \right\}_{i=1}^{N_v} \cup \left\{ \left(\begin{array}{c} \phi_k \\ 0 \\ 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0 \\ \phi_k \\ 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \phi_k \end{array} \right) \right\}_{k=1}^{N_e}. \quad (\text{A.19})$$

Como $\mathbf{v}_h^{n+1} = (v_1^{n+1}, v_2^{n+1}, v_3^{n+1})^t \in \mathbf{V}_h$ podemos escribir cada una de sus componentes como

$$v_r^{n+1} = \sum_{j=1}^{N_v} U_j^r w_j + \sum_{k=1}^{N_e} \bar{U}_k^r \phi_k, \quad r = 1, 2, 3, \quad (\text{A.20})$$

siendo los vectores $U^r \in \mathbb{R}^{N_v}$, los grados de libertad en los vértices y $\bar{U}^r \in \mathbb{R}^{N_e}$, los grados de libertad en las burbujas, de cada componente $r = 1, 2, 3$.

De forma análoga, $\pi_h^{n+1} \in V_h$ se puede expresar de la forma

$$\pi_h^{n+1} = \sum_{j=1}^{N_v} P_j w_j, \quad (\text{A.21})$$

donde $P \in \mathbb{R}^{N_v}$ es el vector de los grados de libertad de la presión en los vértices de la malla.

Las funciones burbuja verifican las siguientes propiedades:

$$\text{sop}(\phi_k) = \text{int}(T_k), \quad \forall k \in \{1, \dots, N_e\}, \quad (\text{A.22})$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi_k}{\partial x_r} \frac{\partial w_j}{\partial x_l} = 0, \quad r, l \in \{1, 2, 3\}, \quad \forall k \in \{1, \dots, N_e\}, \quad \forall j \in \{1, \dots, N_v\}, \quad (\text{A.23})$$

$$\int_{\Omega} \phi_k \phi_m = \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_k}{\partial x_r} \frac{\partial \phi_m}{\partial x_l} = 0, \quad \text{si } k \neq m, \quad r, l \in \{1, 2, 3\}, \quad \forall k, m \in \{1, \dots, N_e\}. \quad (\text{A.24})$$

Para obtener la formulación matricial del problema vamos a suponer que la viscosidad es constante por tetraedro. De esta forma, podemos simplificar las cuentas pues las integrales en las que aparece, y que incluyen las derivadas de las funciones burbujas con funciones de base del espacio M_h , serán nulas.

Si sustituimos en el Problema A.2 \mathbf{w}_h por cada uno de los elementos de la base B de \mathbf{V}_h , obtenemos el sistema lineal por bloques siguiente:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} A^1 & L^{12} & L^{13} & N^t & 0 & 0 & (B^1)^t & & & \\ L^{21} & A^2 & L^{23} & 0 & N^t & 0 & (B^2)^t & & & \\ L^{31} & L^{32} & A^3 & 0 & 0 & N^t & (B^3)^t & & & \\ \hline N & 0 & 0 & D^1 & T^{12} & T^{13} & (Q^1)^t & & & \\ 0 & N & 0 & T^{21} & D^2 & T^{23} & (Q^2)^t & & & \\ 0 & 0 & N & T^{31} & T^{32} & D^3 & (Q^3)^t & & & \\ \hline B^1 & B^2 & B^3 & Q^1 & Q^2 & Q^3 & 0 & & & \end{array} \right) \begin{pmatrix} U^1 \\ U^2 \\ U^3 \\ \bar{U}^1 \\ \bar{U}^2 \\ \bar{U}^3 \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F^1 \\ F^2 \\ F^3 \\ \bar{F}^1 \\ \bar{F}^2 \\ \bar{F}^3 \\ H \end{pmatrix} \quad (\text{A.25})$$

donde, para $r, l \in \{1, 2, 3\}$, las matrices $A^r, L^{lr}, B^r \in \mathcal{M}_{N_v \times N_v}(\mathbb{R})$, se definen de la forma

$$(A^r)_{ij} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho^{n+1} w_j w_i dx + \int_{\Omega} \mu^{n+1} \text{grad } w_j \cdot \text{grad } w_i dx + (L^{rr})_{ij}, \quad (\text{A.26})$$

$$(L^{lr})_{ij} = \int_{\Omega} \mu^{n+1} \frac{\partial w_j}{\partial x_r} \frac{\partial w_i}{\partial x_l} dx - \frac{2}{3} \int_{\Omega} \mu^{n+1} \frac{\partial w_j}{\partial x_l} \frac{\partial w_i}{\partial x_r} dx, \quad (\text{A.27})$$

$$(B^r)_{ij} = - \int_{\Omega} \frac{\partial w_j}{\partial x_r} w_i dx, \quad (\text{A.28})$$

las matrices $N, Q^r \in \mathcal{M}_{N_e \times N_v}(\mathbb{R})$, son

$$(N)_{kj} = \frac{1}{\Delta t} \int_{T_k} \rho^{n+1} \phi_k w_j dx, \quad (\text{A.29})$$

$$(Q^r)_{ik} = - \int_{T_k} \frac{\partial \phi_k}{\partial x_r} w_i dx, \quad (\text{A.30})$$

$D^r, T^{rl} \in \mathcal{M}_{N_e \times N_e}(\mathbb{R})$ son matrices diagonales cuyos elementos de la diagonal principal son

$$(D^r)_{kk} = \frac{1}{\Delta t} \int_{T_k} \rho^{n+1} \phi_k^2 dx + \int_{T_k} \mu^{n+1} (\text{grad } \phi_k)^2 dx + (T^{rr})_{kk}, \quad (\text{A.31})$$

$$(T^{rl})_{kk} = \frac{1}{3} \int_{T_k} \mu^{n+1} \frac{\partial \phi_k}{\partial x_r} \frac{\partial \phi_k}{\partial x_l} dx, \quad (\text{A.32})$$

y los segundos miembros vienen dados por

$$(F^r)_i = \int_{\Omega} f_r^{n+1} w_i dx + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho^{n+1} v_r^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1} w_i dx, \quad (\text{A.33})$$

$$(\bar{F}^r)_k = \int_{T_k} f_r^{n+1} \phi_k dx + \frac{1}{\Delta t} \int_{T_k} \rho^{n+1} v_r^n \circ \mathcal{X}_h^{n,n+1} \phi_k dx, \quad (\text{A.34})$$

$$(H)_i = - \int_{\Omega} g^{n+1} w_i dx. \quad (\text{A.35})$$

Observación A.2.1. Las matrices L^{lr} , verifican $L^{rl} = (L^{lr})^t$, $r, l \in \{1, 2, 3\}$. Así, la matriz del sistema (A.25) será simétrica.

Para ahorrar coste computacional y memoria vamos a eliminar del sistema lineal los grados de libertad en las burbujas. A partir de las ecuaciones presentes en los bloques 4-6 del sistema (A.25) se tiene

$$\begin{pmatrix} D^1 & T^{12} & T^{13} \\ T^{21} & D^2 & T^{23} \\ T^{31} & T^{32} & D^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U}^1 \\ \bar{U}^2 \\ \bar{U}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{F}^1 - NU^1 - (Q^1)^t P \\ \bar{F}^2 - NU^2 - (Q^2)^t P \\ \bar{F}^3 - NU^3 - (Q^3)^t P \end{pmatrix}. \quad (\text{A.36})$$

Dado que la matriz de este sistema está formada por matrices diagonales, invertirla se reduce a invertir las matrices 3×3

$$\begin{pmatrix} D_{kk}^1 & T_{kk}^{12} & T_{kk}^{13} \\ T_{kk}^{21} & D_{kk}^2 & T_{kk}^{23} \\ T_{kk}^{31} & T_{kk}^{32} & D_{kk}^3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.37})$$

en cada elemento k .

Nota A.2.1. Si los elementos de las matrices definidas en (A.37) se calculan con integración exacta, entonces estas matrices son invertibles. Si se quieren usar fórmulas de cuadratura, habrá que tener cuidado con su elección.

Si denotamos por $I_k \in \mathcal{M}_{3 \times 3}(\mathbb{R})$ la matriz inversa de la dada en (A.37) para cada elemento T_k y definimos las matrices diagonales $R^{rl} \in \mathcal{M}_{N_e \times N_e}(\mathbb{R})$ de la forma

$$(R^{rl})_{kk} = (I_k)_{rl}, \quad (\text{A.38})$$

tenemos que

$$\begin{pmatrix} \bar{U}^1 \\ \bar{U}^2 \\ \bar{U}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^{11} & R^{12} & R^{13} \\ R^{21} & R^{22} & R^{23} \\ R^{31} & R^{32} & R^{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{F}^1 - NU^1 - (Q^1)^t P \\ \bar{F}^2 - NU^2 - (Q^2)^t P \\ \bar{F}^3 - NU^3 - (Q^3)^t P \end{pmatrix}. \quad (\text{A.39})$$

Sustituyendo la igualdad (A.39) en el sistema (A.25), éste se puede escribir como

$$\begin{aligned} \mathcal{A}U + \mathcal{B}^t P &= \mathcal{S}_v, \\ \mathcal{B}U + \mathcal{C}P &= \mathcal{S}_p, \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

siendo \mathcal{A} una matriz por bloques 3×3 , \mathcal{B} una matriz por bloques 1×3 y \mathcal{S}_v un vector por bloques de la forma

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \tilde{A}^1 & \tilde{L}^{12} & \tilde{L}^{13} \\ \tilde{L}^{21} & \tilde{A}^2 & \tilde{L}^{23} \\ \tilde{L}^{31} & \tilde{L}^{32} & \tilde{A}^3 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.41})$$

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} \tilde{B}^1 & \tilde{B}^2 & \tilde{B}^3 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.42})$$

$$\mathcal{S}_v = \begin{pmatrix} S_v^1 \\ S_v^2 \\ S_v^3 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.43})$$

donde

$$\tilde{A}^r = A + \tilde{L}^{rr}, \quad (\text{A.44})$$

$$\tilde{L}^{rl} = L^{rl} - N^t R^{rl} N, \quad (\text{A.45})$$

$$\tilde{B}^r = B^r - \sum_{l=1}^3 Q^l R^{rl} N, \quad (\text{A.46})$$

$$\tilde{C} = - \sum_{l=1}^3 \sum_{s=1}^3 Q^l R^{ls} (Q^s)^t, \quad (\text{A.47})$$

$$S_v^r = F^r - \sum_{l=1}^3 N^t R^{rl} \bar{F}^l, \quad (\text{A.48})$$

$$S_p = H - \sum_{l=1}^3 \sum_{s=1}^3 Q^l R^{ls} \bar{F}^s. \quad (\text{A.49})$$

En cada instante de tiempo t_{n+1} , una vez resuelto el sistema (A.40) se obtienen los grados de libertad de \mathbf{v}_h^{n+1} en las burbujas utilizando (A.39) que, de nuevo, pueden calcularse como el producto de una matriz 3×3 por un vector en cada tetraedro de la malla.

Nota A.2.2. Siguiendo la metodología habitual en los métodos de elementos finitos, una vez construido el sistema se procedería a su bloqueo en los vértices de la frontera Γ_D . Se debe tener en cuenta que, si $\Gamma_N \neq \emptyset$, la presión es única, como se puede ver, por ejemplo, en Ern y Guermond [40] o Bernardi et al [58]. En caso contrario sería necesario utilizar estrategias como el bloqueo de la presión en un punto de la frontera, el método de penalización, que podemos ver en Shen [89] y que también hemos implementado, o la construcción de un sistema orlado como se describe en Bochev y Lehoucq [24].

Apéndice B

Descripción del programa de simulación

Utilizando los métodos numéricos y algoritmos descritos en el Capítulo 5 hemos desarrollado un paquete de simulación en 3D de flujos para gases reactivos con combustión de carbón pulverizado. Éste es el caso más general pero el programa se puede utilizar para la simulación de flujos más simples; bastará con no tener en cuenta las ecuaciones que describen los fenómenos que no forman parte del problema que se quiera resolver.

El lenguaje de programación utilizado para el código es FORTRAN 90/95 y se ha realizado, siempre que ha sido posible, una programación orientada a objeto (OOP) para facilitar la incorporación de nuevos modelos o métodos numéricos. Así, hay un programa principal programado de forma secuencial que realiza un bucle en tiempo y llama de manera ordenada a los distintos objetos que integran en código.

La estructura principal del programa (ver Figura B.1) es: introducción de datos, resolución y postproceso.

B.1. Datos del programa

Los datos que debemos introducir en el programa se estructuran de la siguiente forma (ver Figura B.2):

Geometría. Como dato referente a la geometría debemos introducir el fichero con la malla del dominio. La malla se admite en dos formatos: el formato neutral de Gambit o el formato Modulf.

Modelos. Se eligen los modelos que se van a resolver. En este punto se puede activar uno de los modelos o todos. Como modelos de turbulencia podemos elegir $k-\epsilon$ o Smagorinsky. Si elegimos este último, no podremos utilizar el modelo de dispersión de las partículas. Si los modelos permiten la definición de sus parámetros también se introducen en este punto. Por ejemplo, en el modelo de fase sólida elegiremos el número de intentos, su frecuencia de resolución, parámetro de difusión, temperatura crítica, etc.

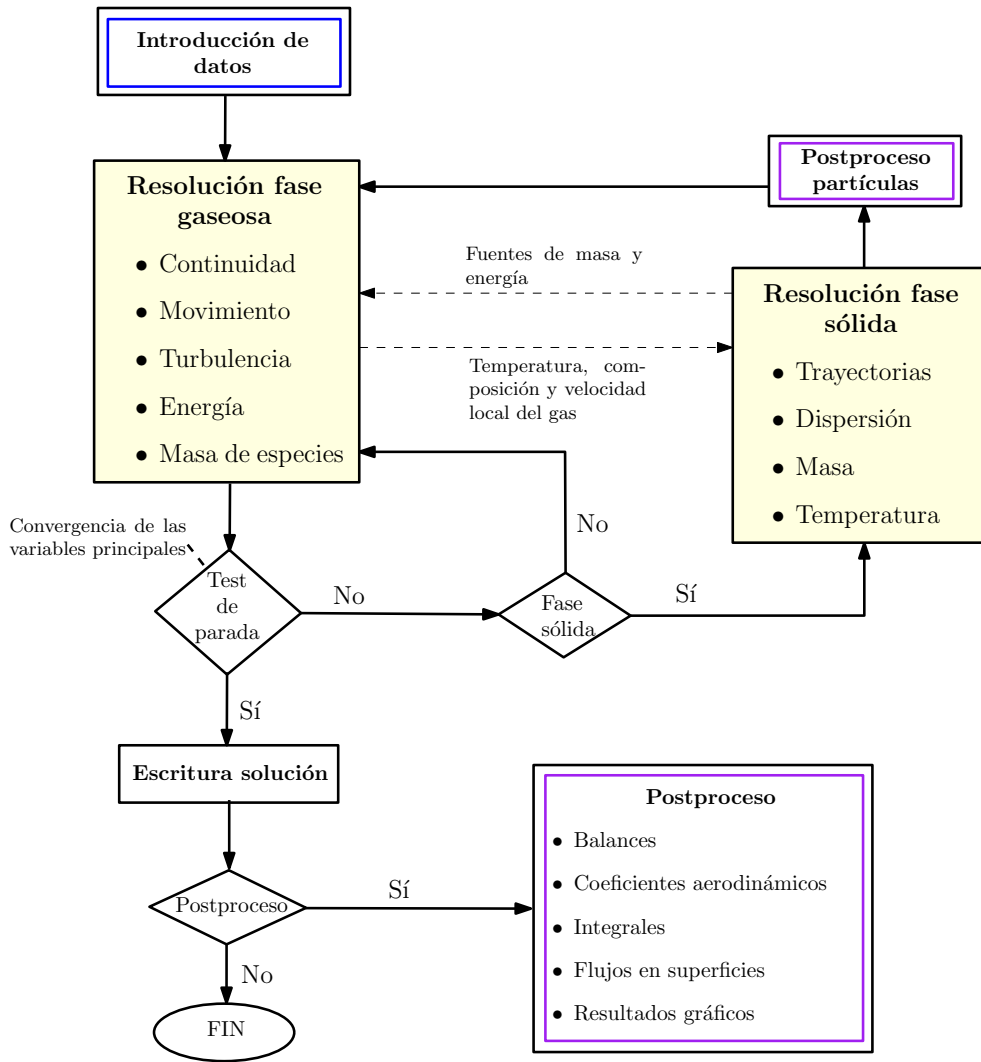


Figura B.1: Esquema del programa de simulación con todos los modelos activados

Materiales. Hay dos tipos de materiales: gas y carbón. Para el gas debemos definir las masas moleculares y los calores específicos. Para el carbón se necesitan más datos; entre ellos el calor específico, la densidad, el análisis inmediato o el poder calorífico. Además hay que definir la molécula de volátiles, los coeficientes estequiométricos de su reacción con el oxígeno y los calores de reacción del resto de las reacciones homogéneas y heterogéneas.

Condiciones de contorno. Se distinguen condiciones de contorno para la fase gaseosa y para el comportamiento de las partículas sólidas al llegar a una frontera. Las de la fase gaseosa se pueden determinar dando un valor constante o un perfil radial. Para las partículas debemos definir si rebotan, quedan atrapadas o salen, en cada una de las fronteras del dominio.

Algoritmo. Se determinará el algoritmo que vamos a utilizar dando el número de iteraciones y el paso de tiempo globales para la fase gaseosa, así como las iteraciones y

el paso de tiempo locales para cada una de las ecuaciones en derivadas parciales del modelo. Además, se puede elegir la frecuencia con la que se resuelven algunas de estas ecuaciones. De igual modo, también se elige la frecuencia con la que se resuelve la fase sólida, así como el número máximo de pasos de tiempo por partícula calculada.

Métodos numéricos. Para cada una de las ecuaciones en derivadas parciales del modelo de fase gaseosa se piden los siguientes datos:

- Elegir entre los métodos de LG, MLG o SL.
- Seleccionar, para cada término de las ecuaciones, la fórmula de cuadratura para la integración numérica o, si se puede, la posibilidad de hacer la integración exacta.
- Seleccionar el esquema para aproximar la curva característica.

Resolución. Los datos necesarios son los parámetros de relajación, el test de parada para cada ecuación y la frecuencia con la que queremos hacer una copia de seguridad de los resultados. Además, se pide un parámetro de impresión, de forma que se mostrarán más datos por pantalla cuanto más alto sea su valor. Para inicializar la solución se puede empezar de cero, dando unos valores para cada variable que pueden venir dados por funciones de las variables independientes x y t , o bien a partir de soluciones anteriores. En este último caso se puede dar un archivo de solución procedente de un cálculo anterior, o interpolar una solución obtenida con el código comercial FLUENT, la cual puede corresponder a otra malla.

Postproceso. Antes de iniciar la simulación es necesario definir qué tipo de resultados vamos a querer extraer para las partículas y la frecuencia con la que queremos almacenar los resultados generales.

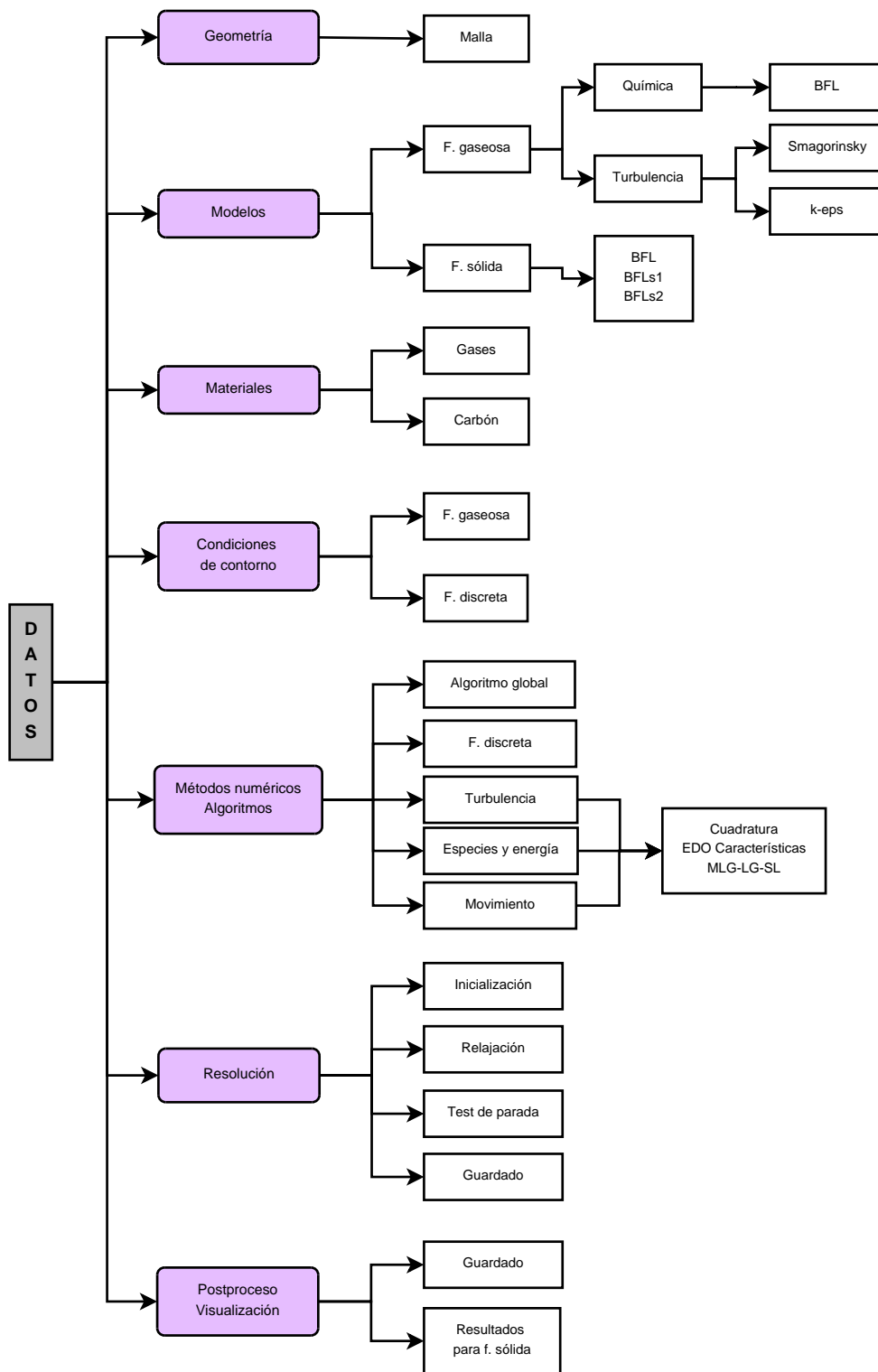


Figura B.2: Esquema de los datos para el programa

B.2. Resolución

Una vez definidos todos los datos del problema podemos iniciar su resolución. La programación del código para la simulación es un híbrido entre programación secuencial y orientada a objeto. La programación secuencial se mantiene principalmente por ser el código una herencia de otro existente (en Fortran 77), pero también por ciertas limitaciones del lenguaje de programación. Así, el programa principal es secuencial y realiza la llamada a los diferentes objetos dentro de un bucle en tiempo. Por esto, son necesarios los diagramas de flujo del Capítulo 5 o el de la Figura B.1.

Para entender mejor la organización e implementación del programa vamos a mostrar dos diagramas de clases, cada uno relativo a una de las dos fases, en los que veremos las clases principales y sus asociaciones. En primer lugar, en la Figura B.3 podemos ver el diagrama de clases para la fase gaseosa.

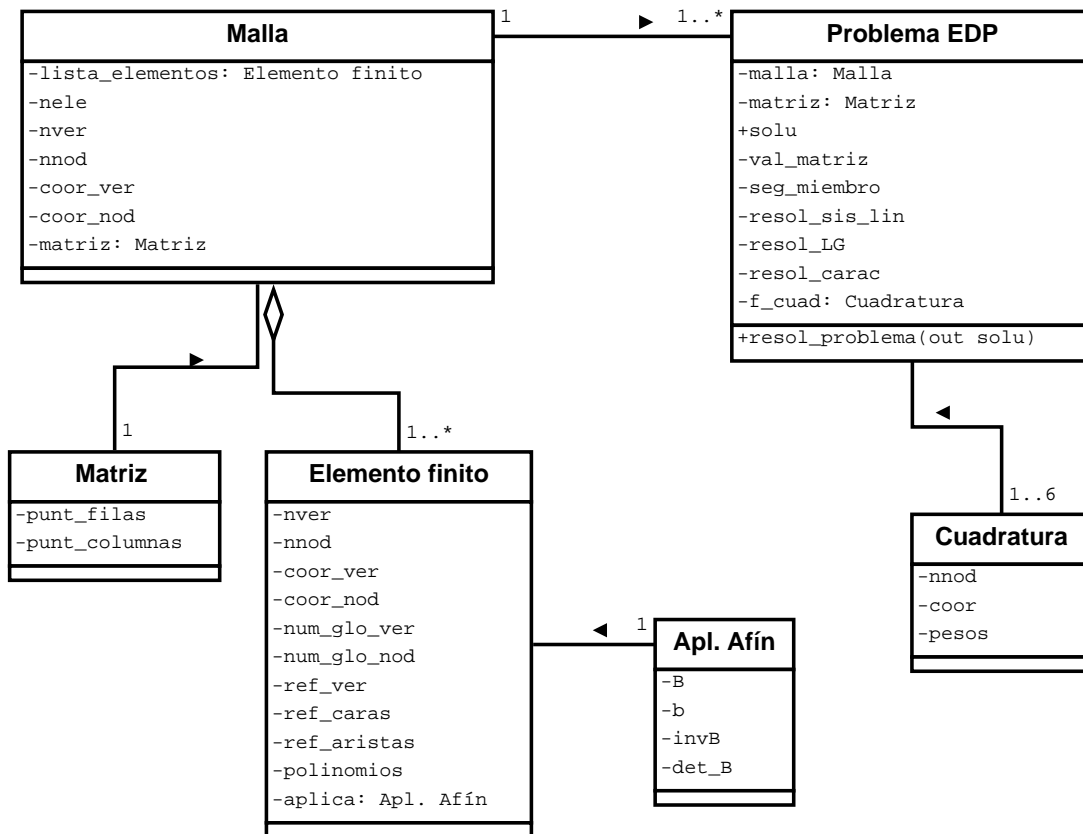


Figura B.3: Diagrama de clases para la fase gaseosa

En este diagrama aparecen las siguientes clases:

Elemento finito: cada uno de los objetos de esta clase va a definir un elemento finito de la malla; así, tienen los siguientes atributos privados (es decir, solo accesibles por ellos):

- `nver`, `coor_ver`, `num_glo_ver` y `ref_ver`: el número, las coordenadas, la numeración global y el número de la referencia de los vértices, respectivamente. Llamamos

número de referencia al número natural, distinto de cero, que asociamos a cada una de las fronteras del dominio. Si el vértice está en el interior del dominio su número de referencia será el 0.

- `nnod`, `coor_nod` y `num_glo_nod`: el número, las coordenadas y la numeración global de los grados de libertad, respectivamente.
- `ref_caras` y `ref_aristas`: estos atributos asignan un número de referencia a cada una de las caras, respectivamente aristas, del elemento.
- `polinomios`: hace referencia a los polinomios de base de cada elemento finito. Así, la implementación solo permite la utilización de elementos de tipo Lagrange.
- `aplica`: es un objeto de la clase **Aplicación Afín** que definimos a continuación.

Aplicación afín: esta clase definirá los objetos relativos a las aplicaciones afines entre los tetraedros de la malla y el elemento de referencia. Así, sus atributos serán:

- `B`, `invB` y `detB`: la matriz de la aplicación, su inversa y su determinante, respectivamente.
- `b`: la constante de la aplicación.

La inclusión de la inversa y el determinante de la matriz se hace para ahorrar el tiempo que supondría calcularlos cada vez que se utilizan. La asociación entre las clases **Aplicación afín** y **Elemento finito** es inmediata; así, cada elemento conoce la aplicación afín de la que es imagen. Debido a las limitaciones del lenguaje, las relaciones entre clases no pueden ser bidireccionales. Por lo tanto, una aplicación afín no sabe a qué elemento finito está asociada, algo que no es estrictamente necesario.

Malla: a esta clase pertenecerán las distintas mallas del problema. En principio, consideramos la misma malla del dominio para todas las ecuaciones pero la implementación realizada podría permitirnos utilizar una malla distinta para cada uno de los problemas que resolvemos. Esta clase está asociada a la clase **Elemento finito** mediante una asociación de tipo agregación. Esto quiere decir que la malla está formada por una lista de objetos de la clase **Elemento finito**. Debido a la relación de esta última con la clase **Aplicación Afín** cada elemento de la lista estará relacionado con un objeto de **Aplicación Afín**. La clase **Malla** tiene los siguientes atributos:

- `lista_elementos`: es el array de objetos de la clase **Elemento finito** que forman la malla del dominio.
- `nele`: es el número de elementos que forman la malla (es decir, la dimensión de `lista_elementos`).
- `nver` y `coor_ver`: el número global de vértices y sus coordenadas.
- `nnod` y `coor_nod`: el número global de nodos de la malla y sus coordenadas.

Matriz: los objetos de esta clase tienen que ver con el almacenamiento, que veremos más adelante, para las matrices de los sistemas lineales que se obtienen en la resolución de una ecuación en derivadas parciales, utilizando un método de elementos finitos. Todos los elementos de esta clase tendrán los atributos privados:

- **punt_filas**: array de enteros que indica la posición en el vector de valores del primer elemento no nulo de cada fila de la matriz a la que hace referencia el objeto.
- **punt_columnas**: array de enteros que determina la columna en la que se encuentra un elemento no nulo de la matriz.

Como podemos ver en el diagrama, las clases **Malla** y **Matriz** están relacionadas, pues las posiciones de los elementos no nulos en las matriz de un problema están determinadas por la malla del mismo. Así, si utilizamos la misma malla para todos los problemas, todas las matrices tendrán la misma estructura. Esta relación debería ser bidireccional pero, por las limitaciones de Fortran, se limitará a que la malla conozca la matriz a la que está asociada.

Cuadratura: cada objeto de esta clase definirá una fórmula de cuadratura que será utilizada para integrar alguno de los elementos de la ecuación variacional del problema discreto que vamos a resolver. Así, estos objetos quedarán determinados por los atributos:

- **nnod**: número de nodos de la fórmula.
- **coor**: coordenadas baricéntricas de los nodos de cuadratura en el tetraedro de referencia.
- **pesos**: pesos asociados a cada uno de los nodos de cuadratura.

Problema EDP: los objetos de esta clase serán cada uno de los problemas asociados a una ecuación en derivadas parciales de los modelos que vamos a resolver. Así, esta clase está asociada a la clase **Malla**, de forma que cada problema tiene una única malla aunque una malla puede estar asociada a varios problemas. Aunque en principio esta relación debería ser bidireccional, sólo nos va a interesar que cada objeto de **Problema** conozca el elemento de **Malla** sobre el que va a ser resuelto. Como existe una asociación entre **Malla** y **Matriz**, un objeto de **Problema** estará asociado a un elemento de cada una de estas clases. Además cada objeto de **Problema** tendrá asociados de 1 a 6 objetos de la clase **Cuadratura**. Esto se debe a que se puede integrar utilizando una fórmula de cuadratura distinta (o de forma exacta si se puede) cada uno de los términos de la ecuación.

Los atributos de esta clase son los siguientes:

- **malla**: será la malla sobre la que se resuelve el problema.
- **matriz**: punteros de almacenamiento de la matriz asociados a la malla.
- **val_matriz**: es un array que contendrá todos los valores no nulos de la matriz del sistema lineal del problema.
- **solu**: es el único atributo público y será un array con los valores de la solución del problema en los grados de libertad de la malla.
- **seg_miembro**: este atributo almacenará los valores del segundo miembro del problema.
- **resol_sis_lin**: con este atributo se determina la forma en la que se va a resolver el sistema lineal. Las distintas posibilidades se pueden ver en B.2.1.

- `resol_LG`: este atributo determinará el tipo de método numérico elegido para la resolución del problema. Así, como vimos a lo largo de esta memoria, esta elección determinará el cálculo de las integrales de los términos de la ecuación del problema que incluyen las curvas características.
- `resol_carac`: determinará el método numérico para resolver la ecuación diferencial que verifican las curvas características.
- `f_cuad`: array con las fórmulas de cuadratura para cada término de la ecuación.

El método público `resol_problema` se llama desde el programa principal para cada una de las ecuaciones en derivadas parciales del modelo. Esta subrutina proporciona la solución del problema y para ello utilizará otros métodos privados de la clase que, por simplicidad, no hemos escrito en el diagrama, por ejemplo el constructor de la matriz o del segundo miembro. En el programa principal, la llamada al método `resol_problema` de cada objeto de la clase `Problema EDP` se hará de forma secuencial, tal y como se indicaba en el diagrama de flujo de la Figura 5.8 del Capítulo 5.

Observación B.2.1. Como se puede ver, algunos atributos de las diferentes clases tienen el mismo nombre, sin que esto dé lugar a incompatibilidades. Esta característica se conoce en OOP como *polimorfismo*.

En la Figura B.4 podemos ver el diagrama de clases relativo a la resolución de la fase sólida.

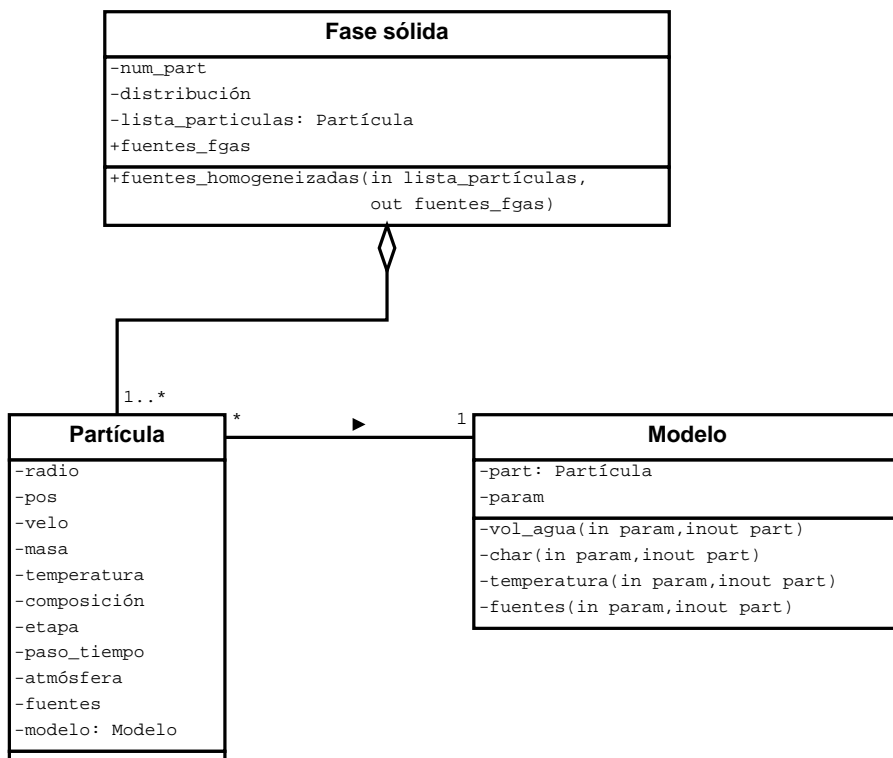


Figura B.4: Diagrama de clases para la fase sólida

En este diagrama se incluyen las siguientes clases:

Partícula: Los objetos de esta clase representarán a cada una de las partículas para las que se calcula su trayectoria. Cada objeto de la clase tendrá como atributos privados todas las variables que se asocian a una partícula:

- **radio:** es el radio de la partícula.
- **pos:** la posición que ocupa la partícula en cada instante. Además, incluye la información sobre el tetraedro de la malla en el que se encuentra.
- **velo:** la velocidad de la partícula.
- **masa:** define la masa total de la partícula así como la masa de cada una de las especies que la componen.
- **temperatura:** temperatura de la partícula.
- **composición:** son las densidades de volátiles, agua, cenizas y carbono fijo.
- **etapa:** indica la etapa de la combustión en la que se encuentra la partícula. Si está en la segunda etapa se indica la posición, en relación a la partícula, de la llama de difusión de las reacciones en fase gaseosa.
- **paso_tiempo:** es el paso de integración para las ecuaciones del modelo de la fase sólida con el que está asociado el objeto.
- **atmósfera:** valores locales de la composición, temperatura y velocidad del gas.
- **fuentes:** fuentes de masa y energía de la partícula a la fase gaseosa.
- **modelo:** este atributo proviene de la asociación entre las clases **Partícula** y **Modelo**.

Modelo: los ejemplares de esta clase van a tener un conjunto de métodos que modificarán la partícula a la que están asociados. Cada objeto de esta clase tendrá como atributos:

- **part:** el objeto de la clase **Partícula** al que está asociado.
- **param:** una serie de parámetros que definen el modelo como, por ejemplo, la temperatura crítica T_c para el modelo de gasificación.

Todos los objetos de **Modelo** deben incluir los métodos:

- **vol_agua:** calcula las velocidades de las reacciones de liberación de volátiles y humedad y las densidades de volátiles y agua de la partícula.
- **char:** devuelve las velocidades de gasificación, la densidad del carbono fijo y el radio de la partícula.
- **temperatura:** donde se calculará la temperatura de la partícula asociada.
- **fuentes:** proporciona la contribución de la partícula a las fuentes de masa y energía.

La asociación entre la clase **Partícula** y la clase **Modelo** es bidireccional. De nuevo, el lenguaje de programación no lo permite pero, a diferencia de otras asociaciones vistas, en este caso sí es necesaria. Para solventar este problema, en la clase **Partícula** definimos el atributo **modelo** como un número entero en lugar de un objeto de **Modelo**. Así, este número se corresponderá con el único objeto de **Modelo** con el que puede estar asociado un objeto de **Partícula**.

Aunque en nuestro código solo existen 3 objetos de esta clase correspondientes a cada uno de los modelos para la fase sólida, la implementación realizada permitirá la incorporación de más objetos de esta clase que podrán ir asociados a los objetos de *Partícula*.

Fase sólida: esta clase, de la que solo deberá existir un objeto, es una agregación de objetos de *Partícula*. Los atributos que definirán este objeto son:

- **lista_partículas:** es un array con todos los objetos de *Partícula*.
- **distribución:** tiene los datos de la distribución de masa de las partículas de carbón que están representadas por cada objeto de *Partícula*.
- **fuentes_fgas:** es una matriz con los valores en los vértices de la malla de las distintas fuentes para la fase gaseosa. Este atributo es público para que pueda ser accesible desde el programa principal que los usará como argumentos de entrada para los objetos de *Problema EDP*.

El método público de esta clase **fuentes_homogeneizadas** controlará todos los objetos de *Partícula* creados para tener en cuenta su contribución a las fuentes de masa y energía homogeneizadas para la fase gaseosa. Como el método de esta clase es público, puede ser llamado desde el programa principal que implementa el algoritmo general del programa. La subrutina **fuentes_homogeneizadas** está programada de forma secuencial, realizando un bucle en partículas, de forma que cada objeto de *Partícula* esperará a que acabe el anterior para iniciar sus cálculos. Si tenemos en cuenta que lo que ocurre en una partícula de carbón no influye en las demás, lo que se traduce en que no hay una asociación entre dos elementos de la clase *Partícula*, el método **fuentes_homogeneizadas** será fácilmente paralelizable.

B.2.1. Sistemas lineales y tiempos de cálculo

Una de las partes más problemáticas, en cuanto al tiempo de cálculo, es la resolución de los sistemas lineales. También el movimiento de los nodos de cuadratura de la malla puede consumir un tiempo similar, si éste se hace con un método de varios pasos (como, por ejemplo, el algoritmo de paso adaptativo) y si la fórmula de cuadratura tiene muchos puntos. Sin embargo, este problema ha sido solventado, al menos para la mayoría de casos, con la introducción de los métodos de Lagrange-Galerkin modificados. Así, el cuello de botella de nuestro código de elementos finitos es la resolución de los sistemas lineales. Si resolvemos un flujo con todos los modelos disponibles tendremos que resolver 10 sistemas lineales en cada iteración del algoritmo global, por lo que es muy importante utilizar un método eficiente; de hecho, ésta es la única parte paralelizada del código. Para resolver los sistemas lineales utilizamos las librerías MKL (“Math Kernel Library”) de Intel¹ y, en concreto, la subrutina PARDISO para matrices dispersas almacenadas en un formato que es una variación del “Compressed Sparse Row” (ver [35]). La elección de estas librerías se debe a que en la actualidad estamos ejecutando el código en el nodo de un clúster equipado con

¹La utilización de estas librerías impide que la totalidad del código desarrollado sea libre.

dos procesadores Intel Xeon X5570, con lo que esta subrutina está especialmente diseñada para aprovechar esa arquitectura.

La subrutina de Intel nos da la posibilidad de utilizar un método directo que utiliza una factorización LU para matrices no simétricas o estructuralmente simétricas, LDL^T para matrices simétricas, o de Cholesky LL^T para matrices simétricas definidas positivas. Por otro lado, nos permite utilizar un método directo/iterativo para matrices generales. Este método consiste en realizar, en primer lugar, una factorización LU y resolver el sistema de forma directa para, posteriormente, utilizar un método iterativo que usa como preconditionador la factorización calculada anteriormente. Si en algún momento el método iterativo no converge o supera el número máximo de iteraciones, se realiza una nueva factorización de la matriz. Si tenemos en cuenta que las matrices que tenemos cambian en cada paso debido a que lo hacen los coeficientes (que suelen ser la densidad, la fuente de masa y la difusión), nos damos cuenta de que este método es el más adecuado para nuestro caso porque, a medida que la solución converge, la matriz será muy parecida y el método iterativo converge en muy pocas iteraciones. Una ventaja del modelo desarrollado para la fase gaseosa y del método que hemos implementado para su resolución, es que la matriz que se obtiene para todas las combinaciones de Shvab-Zeldovich es la misma, de forma que en realidad factorizaremos 5 matrices.

En lo que respecta al tiempo de cálculo conviene mencionar que el tiempo de resolución del modelo de fase sólida es similar al empleado en FLUENT, a pesar de su mayor complejidad.

B.3. Postproceso

Una de las ventajas del diseño de un código propio es la posibilidad de personalizar el tipo de resultados que se pueden mostrar. Es por esto que en nuestro código se ofrece una amplia gama de opciones, que no siempre se encuentran en los códigos comerciales, sobre todo en lo relativo a las partículas de carbón.

Como resultados alfanuméricos de la fase gaseosa podemos calcular:

- Los balances de masa y energía dados por

$$\int_{\Gamma} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA = \int_{\Omega} f^m, \quad (\text{B.1})$$

$$\int_{\Gamma} \rho h_T \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA = \int_{\Omega} f^e. \quad (\text{B.2})$$

- Las fuerzas y coeficientes de arrastre y sustentación sobre una superficie, de las dos formas que vimos en el Capítulo 4 para el test del flujo alrededor de un cilindro.
- La integral de volumen de una variable cualquiera.
- El flujo másico a través de una superficie de una variable φ :

$$\int_{\Gamma} \varphi \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (\text{B.3})$$

- La integral de una variable en una superficie de la frontera:

$$\int_{\Gamma} \varphi dA. \quad (\text{B.4})$$

- El valor medio de una variable en una frontera dividido por el área:

$$\frac{1}{A} \int_{\Gamma} \varphi dA. \quad (\text{B.5})$$

- El valor medio de una variable en el dominio dividido por el volumen:

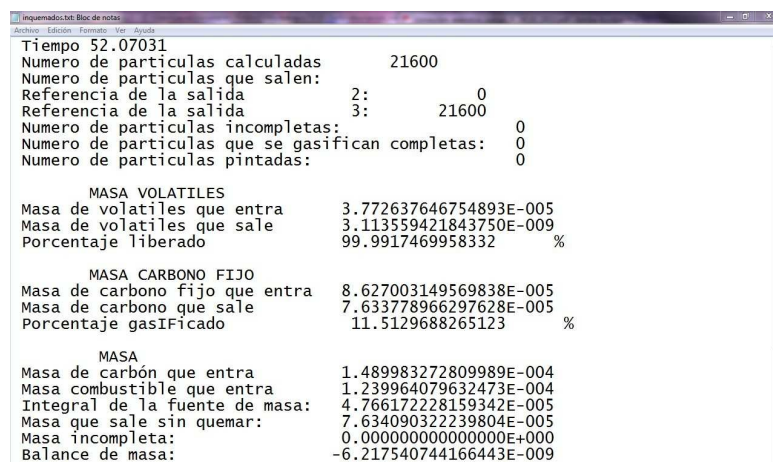
$$\frac{1}{\text{vol}(\Omega)} \int_{\Omega} \varphi dx. \quad (\text{B.6})$$

- El volumen del dominio y el área de su frontera.
- Se pueden calcular perfiles axiales y radiales a determinadas alturas.

Para la visualización de resultados, el software que vamos a utilizar es Enight. Por lo tanto, usaremos un convertor de nuestros resultados en el formato adecuado para este visualizador. En los datos sobre el postproceso habremos elegido la frecuencia con la que guardamos los archivos de resultados; así, tendremos un número de ficheros que podremos reproducir como un video visualizando cualquier variable por vértices o por tetraedro.

En cuanto a resultados referentes a partículas tenemos las siguientes posibilidades:

- Resultados alfanuméricos: cada vez que se hace una iteración de fase sólida se escriben una serie de resultados como los que podemos ver en la Figura B.5. En primer lugar, se muestra el número de partículas que se han calculado y el tiempo de cálculo empleado (en segundos) y, en segundo lugar, se pueden ver los porcentajes de volátiles liberados y de carbono fijo gasificado y un balance de masa de carbón, en el que se muestra la integral de la fuente de masa.



```

Tiempo 52.07031
Numero de partículas calculadas 21600
Numero de partículas que salen:
Referencia de la salida 2: 0
Referencia de la salida 3: 21600
Numero de partículas incompletas: 0
Numero de partículas que se gasifican completas: 0
Numero de partículas pintadas: 0

MASA VOLATILES
Masa de volátiles que entra 3.772637646754893E-005
Masa de volátiles que sale 3.113559421843750E-009
Porcentaje liberado 99.9917469958332 %

MASA CARBONO FIJO
Masa de carbono fijo que entra 8.627003149569838E-005
Masa de carbono que sale 7.633778966297628E-005
Porcentaje gasificado 11.5129688265123 %

MASA
Masa de carbón que entra 1.489983272809989E-004
Masa combustible que entra 1.239964079632473E-004
Integral de la fuente de masa: 4.766172228159342E-005
Masa que sale sin quemar: 7.634090322239804E-005
Masa incompleta: 0.000000000000000E+000
Balance de masa: -6.217540744166443E-009

```

Figura B.5: Ejemplo de un fichero de partículas

Por otro lado, se calculan las distribuciones de tamaños, el diámetro medio y la temperatura media de las partículas que pasan por cada elemento de la malla. De esta forma, se podrán conocer estos mismos valores en regiones más amplias del dominio, con los que obtener, por ejemplo, perfiles radiales o axiales si estamos resolviendo un problema con simetría axial.

- Resultados gráficos: se dibujan las trayectorias de las partículas coloreadas por cualquiera de sus variables asociadas (T_p , \mathbf{v}_p , etc.). Se pueden elegir todas o algunas partículas de una determinada celda de una entrada, o todas las de un tamaño concreto. Además, hay la posibilidad de escribir todas las variables asociadas a una partícula concreta en función del tiempo.

Nomenclatura

A continuación daremos una lista de las notaciones utilizadas en esta memoria para las principales variables, con el fin de facilitar la lectura de la misma.

1. Notaciones relativas a la mezcla de gases:

Notación	Descripción	Unidades
\mathbf{v}	velocidad	m/s
ρ	densidad	kg/m ³
θ	temperatura	K
π	presión	Pa
h_T	entalpía térmica	J/kg
h	entalpía específica	J/kg
c_π	calor específico de la mezcla de gases a presión constante	J/kgK
c_v	calor específico de la mezcla de gases a volumen constante	J/kgK
\mathcal{D}	coeficiente de difusión de la mezcla de gases	m ² /s
μ	viscosidad molecular	kg/ms
ν	viscosidad cinemática	m ² /s
\mathcal{M}	masa molecular	g/mol
f^e	fuelle de energía homogeneizada en la fase gaseosa	J/m ³ s
f^m	fuelle de masa homogeneizada procedente de las partículas	kg/m ³ s
k_T	conductividad térmica	W/mK
h_w	coeficiente de transferencia de calor a las paredes	W/m ² K
\mathcal{R}	constante universal de los gases	J/molK
k	energía cinética turbulenta	m ² /s ²
ϵ	tasa de disipación turbulenta	m ² /s ³
μ_t	viscosidad turbulenta	kg/ms
P_k	producción de la energía cinética turbulenta	kg/ms ³
\mathbf{g}	gravedad	m/s ²
Ω_F	región del flujo sin oxígeno	-
Ω_O	región del flujo con oxígeno	-
Γ_F	llama de difusión que separa las regiones con y sin oxígeno	-
$Z_n, n = 1, \dots, 4$	combinaciones de Shvab-Zeldovich para las especies	-
H	combinación de Shvab-Zeldovich para la entalpía térmica	J/kg

Y_i	fracción másica de la especie i -ésima	-
X_i	fracción molar de la especie i -ésima	-
h_i^0	entalpía específica de formación de la especie i -ésima	J/kg
ΔH_i^0	entalpía molar de formación de la especie i -ésima	J/kg
f_i^m	fuerza de masa de la especie i -ésima homogeneizada procedente de las partículas	kg/m ³ s

2. Notaciones para la reacción química l -ésima:

Notación	Descripción	Unidades
B_l	factor de frecuencia de la reacción l	1/s
\mathcal{E}_l	energía de activación de la reacción l	J/mol
q_l	calor de la reacción l	J/kg
λ_l	velocidad de reacción adimensional para la reacción l -ésima	-
γ_l	velocidad de reacción	kmol/m ³ s
w_l	masa de combustible gasificada por unidad de volumen y de tiempo	kg/m ³ s
\dot{m}_l	masa gasificada por unidad de tiempo	kg/s
Da_l	número de Damköhler	-

3. Símbolos relativos a las partículas:

Notación	Descripción	Unidades
v_p	velocidad	m/s
x_p	posición ocupada por la partícula	-
c_p	calor específico	J/kgK
ρ_p	densidad	kg/m ³
m_p	masa	kg
m_V	masa de volátiles en la partícula	kg
m_{H_2O}	masa de agua en la partícula	kg
m_C	masa de carbono fijo en la partícula	kg
m_{cen}	masa de cenizas en la partícula	kg
ρ_V	densidad de volátiles en la partícula	kg/m ³
ρ_{H_2O}	densidad de agua en la partícula	kg/m ³
ρ_C	densidad de carbono fijo en la partícula	kg/m ³
ρ_{cen}	densidad de cenizas en la partícula	kg/m ³
r_p	radio	m
a	radio inicial	m
T_p	temperatura	K
ε_p	coeficiente de emisividad	-
q_p''	flujo de calor que llega a la partícula por conducción	J/m ² s
q_r''	flujo de calor que llega a la partículas por radiación	J/m ² s

\mathcal{D}_e	coeficiente de difusión efectiva a través de los poros de la partícula	kg/ms
r_c	radio del núcleo de carbono fijo de la partícula “shrinking core”	m
r_f	radio de la llama de difusión relativa a la partícula	m
T_c	temperatura de cambio de la partícula	K
F^e	fuelle de energía aportada por la partícula a la fase gaseosa	J/m ³ s
F_i^m	fuelle de masa de especie E_i aportada por la partícula	kg/m ³ s

4. Notaciones para los métodos Lagrange-Galerkin:

Notación	Descripción
\mathcal{X}	curva característica
$\tilde{\mathcal{X}}$	curva característica modificada
T_j	elemento de la malla
\hat{T}	elemento de referencia
N_e	número de elementos de la triangulación o malla
N_n	número de nodos o grados de libertad de cada elemento
N_{ng}	número de nodos o grados de libertad globales
N_{vg}	número de vértices globales de la malla
α_i^j	vértices de cada símplex j
$\hat{\alpha}_i$	vértices del elemento de referencia \hat{T}
α_i	vértices de la malla
d_i^j	nodos de cada símplex j
\hat{d}_i	nodos del elemento de referencia
β_i	grados de libertad globales
\hat{p}_i	polinomios de base del espacio $P(\hat{T})$
p_i^j	funciones de base de $P(T_j)$
F_j	aplicación afín de \hat{T} en T_j
h	tamaño característico de la malla
Δt	paso de tiempo
I_h^m	interpolador de Lagrange de grado m
R_h	operador interpolación elíptica
$[\phi]$	sucesión de funciones $\{\phi^n\}_{n=0}^N$

Bibliografía

- [1] E. Akin. *Object-oriented programming via Fortran 90/95*. Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [2] A. Allievi and R. Bermejo. A generalized particle search-locate algorithm for arbitrary grids. *J. Comput. Phys.*, 132(2):157–166, 1997.
- [3] A. Allievi and R. Bermejo. Finite element modified method of characteristics for the Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Meth. Fluid.*, 32:439–464, 2000.
- [4] K. Annamalai and W. Ryan. Interactive processes in gasification and combustion–II. Isolated carbon, coal and porous char particles. *Progr. Energy Combust. Sci.*, 19(5):383 – 446, 1993.
- [5] G. M. Barbany. *Aerothermochemistry*. E. T. S. Ingenieros Aeronáuticos. Edición conmemorativa 50 aniversario de la publicación original de 1958 publicada por el INTA, 2009.
- [6] R. S. Barlow, G. J. Fiechtner, C. D. Carter, and J. Y. Chen. Experiments on the scalar structure of turbulent $CO/H_2/N_2$ jet flames. *Combust. Flame*, 120:549–569, 2000.
- [7] R. S. Barlow, G. J. Fiechtner, C. D. Carter, and M. Flury. Sandia/ETH-Zurich $CO/H_2/N_2$ flame data - release 1.1. www.ca.sandia.gov/TNF, Sandia National Laboratories, 2002.
- [8] G. K. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 1967.
- [9] M. Bause and P. Knabner. Uniform error analysis for Lagrange-Galerkin approximations of convection-dominated problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39(6):1954–1984, 2002.
- [10] J. P. Benqué, G. Labadie, and J. Ronat. A finite element method for the Navier-Stokes equations. In *Proceedings of the third International Symposium on finite elements in flow problems*, pages 10–13, Banff, Alberta, Canadá, 1980.
- [11] R. Bermejo. Analysis of a class of quasi-monotone and conservative semi-Lagrangian advection schemes. *Numer. Math.*, 87(4):597–623, 2001.

-
- [12] R. Bermejo and J. Carpio. An adaptive finite element semi-Lagrangian implicit-explicit Runge-Kutta-Chebyshev method for convection dominated reaction-diffusion problems. *Appl. Numer. Math.*, 58(1):16–39, 2008.
- [13] R. Bermejo and J. Carpio. A space-time adaptive finite element algorithm based on dual weighted residual methodology for parabolic equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 31(5):3324–3355, 2009.
- [14] R. Bermejo and J. Carpio. A semi-lagrangian-galerkin projection scheme for convection equations. *IMA J. Numer. Anal.*, 30(3):799–831, 2010.
- [15] R. Bermejo, P. Galán, and L. Saavedra. A second order in time Modified Lagrange-Galerkin-finite element method for the incompressible Navier-Stokes equations. *Submitted to SIAM J. Numer. Anal.*, 2011.
- [16] R. Bermejo and L. Saavedra. Modified Lagrange-Galerkin methods of first and second order in time for convection-diffusion problems. *Numer. Math.*, 2011. Doi: 10.1007/s00211-011-0418-8.
- [17] R. Bermejo and A. Staniforth. The conversion of semi-Lagrangian advection schemes to quasi-monotone schemes. *Mon. Weather Rev.*, 120(11):2622–2632, 1992.
- [18] A. Bermúdez. *Continuum thermomechanics*. Birkhäuser Verlag, 2005.
- [19] A. Bermúdez, J. L. Ferrín, and A. Liñán. The modelling of the generation of volatiles, H_2 and CO, and their simultaneous diffusion controlled oxidation in pulverised coal furnaces. *Combust. Theor. Model.*, 11(6):949–976, 2006.
- [20] A. Bermúdez, J. L. Ferrín, A. Liñán, and L. Saavedra. Mathematical modelling of coal particles combustion in pulverised coal furnaces. In *Progress in industrial mathematics at ECMI 2006*, volume 12 of *Math. Ind.*, pages 277–283. Springer, Berlin, 2008.
- [21] A. Bermúdez, J. L. Ferrín, A. Liñán, and L. Saavedra. Numerical simulation of group combustion of pulverized coal. *Combust. Flame*, 158(9):1852 – 1865, 2011.
- [22] A. Bermúdez, M. R. Nogueiras, and C. Vázquez. Numerical analysis of convection-diffusion-reaction problems with higher order characteristics/finite elements. I. Time discretization. *SIAM J. Numer. Anal.*, 44(5):1829–1853, 2006.
- [23] A. Bermúdez, M. R. Nogueiras, and C. Vázquez. Numerical analysis of convection-diffusion-reaction problems with higher order characteristics/finite elements. II. Fully discretized scheme and quadrature formulas. *SIAM J. Numer. Anal.*, 44(5):1854–1876, 2006.
- [24] P. Bochev and R. B. Lehoucq. On the finite element solution of the pure Neumann problem. *SIAM Rev.*, 47(1):50–66, 2005.
- [25] K. Boukir, Y. Maday, and B. Métivet. A high order characteristics method for the incompressible navier–stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 116(1-4):211 – 218, 1994.

-
- [26] M. Braack and R. Rannacher. Adaptive finite element methods for low-Mach-number flows with chemical reactions. In *of 30th Computational Fluid Dynamics, von Karman Institute*, pages 1–93, 1999.
- [27] H. Brézis. *Análisis funcional, teoría y aplicaciones*. Alianza, 1984.
- [28] S. P. Burke and T. E. W. Schumann. Diffusion flames. *Indust. Eng. Chem.*, 20:998 – 1004, 1928.
- [29] S. J. Chapman. *Fortran 90/95 for scientists and engineers*. WCB/McGraw-Hill, Boston, 2004.
- [30] K. Y. Chien. Predictions of channel and boundary-layer flows with a low-Reynolds-number turbulence model. *AIAA Journal*, 20:33–38, 1982.
- [31] A. J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Sokes equations. *Math. Comput.*, 22 (104):745–762, 1968.
- [32] P. G. Ciarlet. *The finite element method for elliptic problems*. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1978. Studies in Mathematics and its Applications, Vol. 4.
- [33] P. G. Ciarlet and P.-A. Raviart. Interpolation theory over curved elements, with applications to finite element methods. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 1:217–249, 1972.
- [34] R. Codina and O. Soto. Finite element implementation of two-equation and algebraic stress turbulence models for steady incompressible flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluid.*, 30:309–333, 1999.
- [35] Intel Corporation. *Intel® Math Kernel Library. Reference manual*. Intel Corporation, Hewlett-Packard Development Company, 2006.
- [36] Energy Information Administration (EIA). DOE/EIA-0484(2010). International energy outlook 2010. Technical report, U. S. Department of Energy, July 2010.
- [37] J. Douglas and T. F. Russell. Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite difference procedures. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19:871–885, 1982.
- [38] A. M. Eaton, L. D. Smoot, S. C. Hill, and C.Ñ. Eatough. Components, formulations, solutions, evaluation, and application of comprehensive combustion models. *Progr. Energy Combust. Sci.*, 25(4):387 – 436, 1999.
- [39] P. Edge, S. R. Gubba, L. Ma, R. Porter, M. Pourkashanian, and A. Williams. LES modelling of air and oxy-fuel pulverised coal combustion impact on flame properties. *Proc. Combust. Inst.*, 33:2709–2716, 2011.
- [40] A. Ern and J.-L. Guermond. *Theory and practice of finite elements*, volume 159 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 2004.

-
- [41] L. C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, second edition, 2010.
- [42] R. E. Ewing and T. F. Russel. Multistep Galerkin methods along characteristics for convection-diffusion problems. In *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations IV*, volume 35, pages 28 – 36. IMACS Publications, 1981.
- [43] M. Falcone and R. Ferreti. Convergence analysis for a class of high-order semi-Lagrangian advection scheme. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(3):909 – 940, 1998.
- [44] J. L. Ferrín. *Algunas contribuciones a la modelización matemática de procesos de combustión de carbón*. Tesis doctoral, Universidad de Santiago de Compostela, Departamento de Matemática Aplicada, 1999.
- [45] J. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, third edition, 2002.
- [46] S. Fujima and M. Tabata. Robustness of a characteristic finite element scheme of second order in time increment. In Clinton Groth and David W. Zingg, editors, *Third International conference on Computational Fluid Dynamics 2004*, pages 177–182. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [47] P. Galán. *Estudio Numérico del Atractor en Ecuaciones de Navier-Stokes Aplicadas a Modelos de Circulación del Océano*. Tesis doctoral, Universidad Complutense de Madrid, Departamento de Matemática Aplicada, 2004.
- [48] V. Girault and P.-A. Raviart. *Finite element approximation of the Navier-Stokes equations*, volume 749 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1979.
- [49] V. Girault and P.-A. Raviart. *Finite element methods for Navier-Stokes equations*, volume 5 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1986. Theory and algorithms.
- [50] A. D. Gosman and E. Ioannides. Aspects of computer simulation of liquid-fueled combustors. *AIAA J. Energy*, 7(6):482–490, 1983.
- [51] M. D. Gunzburger. *Finite element methods for viscous incompressible flows: a guide to theory, practice, and algorithms*. Academic Press, 1989.
- [52] M. E. Gurtin. *A introduction to continuum mechanics*. Academic Press, 1985.
- [53] X. Han, T. Ye, M. Zhu, and Y. Chen. A new compressibility modification $k - \epsilon$ turbulence model with shock unsteadiness effect. *Chinese Science Bulletin*, 53:3798–3807, 2008.
- [54] E. A. Hennick and M. F. Lightstone. A comparison of stochastic separated flow models for particle dispersion in turbulent flows. *Energy & Fuels*, 14:95–103, 2000.
- [55] S. Hwang, R. Kurose, F. Akamatsu, H. Tsuji, H. Makino, and M. Katsuki. Application of optical diagnostics techniques to a laboratory-scale turbulent pulverized coal flame. *Energ. Fuel.*, 19:382–392, 2005.

- [56] S. Hwang, R. Kurose, F. Akamatsu, H. Tsuji, H. Makino, and M. Katsuki. Observation of detailed structure of turbulent pulverised-coal flame by optical measurement, (part 1, time-averaged measurement of behavior of pulverised-coal particles and flame structure). *JSME Int. J. Ser. B*, 49(4):1316–1327, 2006.
- [57] S. Hwang, R. Kurose, F. Akamatsu, H. Tsuji, H. Makino, and M. Katsuki. Observation of detailed structure of turbulent pulverised-coal flame by optical measurement, (part 2, instantaneous two-dimensional measurement of combustion reaction zone and pulverised coal particles). *JSME Int. J. Ser. B*, 49(4):1328–1335, 2006.
- [58] S. Hwang, R. Kurose, F. Akamatsu, H. Tsuji, H. Makino, and M. Katsuki. Mortar finite element discretization of a model coupling darcy and stokes equations. *Math. Model. Numer. Anal.*, 42:375–410, 2008.
- [59] V. John. Higher order finite element methods and multigrid solvers in a benchmark problem for the 3d navier-stokes equations. *Int. J. Numer. Meth. Fluid.*, 40:775–798, 2002.
- [60] M. R. Kaazempur-Mofrad, P. D. Mineev, and C. R. Ethier. A characteristic/finite element algorithm for time-dependent 3-D advection-dominated transport using unstructured grids. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 192(11-12):1281–1298, 2003.
- [61] P. Keast. Moderate-degree tetrahedral quadrature formulas. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 55(3):339–348, 1986.
- [62] P. K. Kundu and I. M. Cohen. *Fluid Mechanics*. Academic Press, second edition, 2002.
- [63] K. K. Kuo. *Principles of Combustion*. Wiley-Interscience, Nueva York, 1986.
- [64] R. Kurose, H. Makino, and A. Suzuki. Numerical analysis of pulverized coal combustion characteristics using advanced low- NO_x burner. *Fuel*, 83:693–703, 2004.
- [65] D. Kuzmin, O. Mierka, and S. Turek. On the implementation of the k-epsilon turbulence model in incompressible flow solvers based on a finite element discretization. *Int. J. Comput. Sci. Math.*, 2/3/4:193–206, 2007.
- [66] A. J. Lew, G. C. Buscaglia, and P. M. Carrica. A note on the numerical treatment of the k-epsilon turbulence model. *Int. J. Comput. Fluid Dynam.*, 14(3):201–209, 2001.
- [67] A. Liñán. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronáutica*, 1(7-8):1007 – 1039, 1974.
- [68] P. Libby and F. A. Williams. *Turbulent reacting flows*. Academic Press, San Diego CA, 1994.
- [69] P. A. Libby and T. R. Blake. Burning carbon particles in the presence of water vapor. *Combust. Flame*, 41:123 – 147, 1981.
- [70] J. M. Macinnes and F. V. Bracco. Stochastic particle dispersion modeling and the tracer-particle limit. *Phys. Fluids*, 12:2809–2824, 1992.

- [71] A. Majda and K. Lamb. Simplified equations for low Mach number combustion with strong heat release. In *Proceedings of the workshop held in Minneapolis, Minnesota, November 1989. Dynamical issues in combustion theory*, volume 35 of *The IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, pages 167–212, New York, 1991. Springer-Verlag.
- [72] C. C. Manica, M. Neda, M. Olshanskii, and L. G. Rebholz. Enabling numerical accuracy of Navier-Stokes- α through deconvolution and enhanced stability. *Math. Model. Numer. Anal.*, DOI: 10.1051/m2an/2010042, 2010.
- [73] M. Metcalf, J. Reid, and M. Cohen. *Fortran 95/2003 explained*. Oxford University Press, Oxford, 2008.
- [74] B. Mohammadi and O. Pironneau. *Analysis of the $k - \epsilon$ turbulence model*. Wiley/Masson, 1994.
- [75] K. W. Morton, A. Priestley, and E. Süli. Stability of the Lagrange-Galerkin method with nonexact integration. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 22(4):625–653, 1988.
- [76] B. Naud. *PDF modeling of turbulent sprays and flames using a particle stochastic approach*. Phd thesis, Technische Universiteit Delft, 2003.
- [77] M. Nogueiras. *Numerical Analysis of second order Lagrange-Galerkin schemes. Application to option pricing problems*. Tesis doctoral, Universidade de Santiago de Compostela, 2005.
- [78] H. Notsu and M. Tabata. A single-step characteristic-curve finite element scheme of second order in time for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Sci. Comput.*, 38(1):1–14, 2009.
- [79] C. Parés. *Estudio de diversos tipos de condiciones de contorno para las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles*. Tesis doctoral, Universidad de Málaga, 1989.
- [80] A. A. F. Peters and R. Weber. Mathematical modeling of a 2.4 MW swirling pulverized coal flame. *Combust. Sci. Tech.*, 122:131 – 182, 1997.
- [81] O. Pironneau. On the transport-diffusion algorithm and its applications to the Navier-Stokes equations. *Numer. Math.*, 38:309–332, 1982.
- [82] O. Pironneau. *Finite element methods for fluids*. Wiley, 1989.
- [83] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, second edition, 2005.
- [84] A. Quarteroni and A. Valli. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*, volume 23 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [85] R. Rannacher. Finite element methods for the incompressible Navier-Stokes equations. In *Fundamental Directions in Mathematical Fluid Mechanics (P. Galdi, J. Heywood, and R. Rannacher, eds.)*, pages 191–293. Birkhäuser, Basel, 2000.

-
- [86] H. T. Rathod, B. Venkatesudu, and K. V. Nagaraja. Gauss Legendre quadrature formulas over a tetrahedron. *Numer. Meth. Part. Differ. Equat.*, 22(1):197–219, 2006.
- [87] H. Rui and M. Tabata. A second order characteristic finite element scheme for convection-diffusion problems. *Numer. Math.*, 92:161–177, 2002.
- [88] L. Saavedra. *Simulación numérica de la combustión de partículas carbón y simulación numérica en mecánica de fluidos*. Trabajo de investigación tutelado, Universidad de Santiago de Compostela, Departamento de Matemática Aplicada, 2006.
- [89] J. Shen. On error estimates of the penalty method for unsteady Navier-Stokes equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32(2):386–403, 1995.
- [90] E. Süli. Convergence and nonlinear stability of the Lagrange-Galerkin method for the Navier-Stokes equations. *Numer. Math.*, 53:459–483, 1988.
- [91] L. D. Smoot and D. T. Pratt. *Pulverized-Coal Combustion and Gasification. Theory and applications for continuous flow processes*. Plenum Press, New York, 1979.
- [92] A. Staniforth and J. Côté. Semi-Lagrangian integration schemes for atmospheric models. A review. *Mon. Weather Rev.*, 119:2206 – 2223, 1991.
- [93] L. Tartar. *An introduction to Navier-Stokes equation and Oceanography*. Springer-Verlag, 2006.
- [94] A. Williams, R. Backreedy, R. Habib, J. M. Jones, and M. Pourkashanian. Modelling coal combustion: the current position. *Fuel*, 81:605 – 618, 2002.
- [95] F. A. Williams. *Combustion theory*. Combustion, science and engineering series. Benjamin Cummins, Menlo Park CA, 1985.
- [96] D. X. Xiu and G. E. Karniadakis. A semi-Lagrangian high order method for Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 172:658–684, 2001.
- [97] S. T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys.*, 31(3):335–362, 1979.
- [98] Q. Zhou and M. A. Leschziner. A time-correlated stochastic model for particle dispersion in anisotropic turbulence. *8th Turbulent Shear Flows Symposium, Munich*, 1991.
- [99] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The finite element method. Vol. 1: The basis*. Butterworth-Heinemann, Oxford, fifth edition, 2000.
- [100] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The finite element method. Vol. 3: Fluid dynamics*. Butterworth-Heinemann, Oxford, fifth edition, 2000.