



Trabajo Fin de Grado

Grado en Física

Un modelo computacional de simulación de la dispersión de contaminantes en agua

Realizado por:

Jorge Pozuelo Muñoz

Dirigido por:

Pilar García Navarro
Mario Morales Hernández

Área de Mecánica de Fluidos
Universidad Zaragoza

Junio 2016

Índice

1. Introducción y objetivos	1
1.1. Introducción	1
1.2. Objetivos	1
2. Ecuaciones gobernantes y métodos numéricos	2
2.1. Ecuaciones gobernantes	2
2.2. Esquema numérico	3
3. Análisis de sensibilidad en problemas lineales de convección	5
3.1. Discretización en problemas convectivos	5
3.2. Análisis cuantitativo de error	7
4. Análisis de sensibilidad en problemas lineales de convección-difusión	10
4.1. Discretización en problemas con convección-difusión	10
4.2. Influencia de la corrección a la difusión	10
5. Aplicación al transporte en flujo de lámina libre transitorio	13
5.1. Modelos de dispersión	13
5.1.1. Modelo anisotropo estándar	13
5.1.2. Modelo de velocidad de fricción direccional	13
5.2. Casos test	14
5.2.1. Resultados	16
6. Conclusiones	24
Bibliografía	25
A. Tensor de dispersión	27
B. Esquema numérico	32
B.1. Resolución de la ecuación de transporte	33
B.1.1. Esquema de primer orden	33
B.1.2. Esquema de segundo orden	34
C. Resultados del análisis de problemas lineales de convección	36
C.1. Influencia de la Malla	36
C.2. Influencia del orden de simulación	37
D. Resultados del análisis en problemas lineales de convección-difusión	41
D.1. Corrección a la difusión	41
D.2. Influencia de los coeficientes de difusión	45

E. Resultados del análisis del transporte en flujo de lámina libre transitorio	47
E.1. Análisis de resultados para los casos 2, 3 y 4	47
F. Programas informáticos auxiliares	62
F.1. Visualización de los datos: Gnuplot	62
F.2. Visualización de los datos: Paraview	63
G. Ficheros del proceso de simulación	64

1 Introducción y objetivos

1.1 Introducción

Al introducir un soluto en un flujo de agua, se observa que ocurren dos fenómenos a la vez. Se desplaza desde el punto donde es depositado por un proceso denominado advección, y se expande cambiando de forma, lo que denominamos difusión o dispersión.

La difusión está dominada principalmente por dos fenómenos, difusión molecular y turbulenta. La difusión molecular es de carácter constante e isótropo al depender tan solo de las características propias del soluto y el fluido en reposo. Ésta siempre está presente, aunque se ha observado que en procesos donde el fluido está en movimiento apenas es apreciable su contribución, influyendo de forma mucho más notable la denominada difusión turbulenta, caracterizada por la forma en la que el fluido se mueve y haciendo que sus coeficientes generalmente no sean constantes.

Para describir el comportamiento de un soluto en un flujo, hay que resolver la denominada ecuación tridimensional de advección-difusión. Sin embargo, dada la naturaleza aleatoria de la turbulencia, generalmente no es posible resolver la ecuación de forma analítica, por lo que se recurre a métodos numéricos para su resolución. Estos métodos permiten pasar de un problema en derivadas parciales a un problema con ecuaciones en diferencias finitas introduciendo un error intrínseco a la naturaleza discreta del problema.

Cuando el flujo se produce con profundidad baja es frecuente promediar las ecuaciones en la dirección vertical. Esta aproximación, denominada de aguas poco profundas (*Shallow Water Equations*), reduce la dimensionalidad de la ecuación de advección-difusión, sin embargo, debido a la no uniformidad de la velocidad, al tomar el promedio de concentración, aparecen términos adicionales, denominados de dispersión. Estos actúan como una difusión adicional careciendo de significado físico al surgir de la aproximación tomada, por lo que su correcta modelización es clave en la resolución del problema.

En este contexto, el Grupo de Hidráulica Computacional (ghc.unizar.es), perteneciente al Área de Mecánica de Fluidos de la Universidad de Zaragoza ha desarrollado un modelo computacional bajo estas aproximaciones, siendo éste, el objeto de estudio del presente Trabajo de Fin de Grado.

1.2 Objetivos

- **Objetivo principal:** Calibrar un modelo de simulación numérica de dispersión de solutos en flujo transitorio de agua.
- **Objetivos específicos:**
 - Familiarización con el problema de la formulación del transporte de un soluto pasivo en agua.
 - Familiarización con algunas técnicas de simulación de este fenómeno.
 - Análisis de sensibilidad de los resultados al esquema numérico y a la malla de cálculo.
 - Análisis de sensibilidad al modelo de dispersión.

2 Ecuaciones gobernantes y métodos numéricos

2.1 Ecuaciones gobernantes

El estudio del movimiento y dispersión de contaminantes pasivos en corrientes de agua viene determinado por una serie de ecuaciones que dictan la conservación de la masa y momento del flujo y la conservación de la cantidad de soluto introducido. En las circunstancias concretas en las que el calado del flujo no sea elevado, existe la posibilidad de promediar en la profundidad las ecuaciones, reduciendo el problema a dos dimensiones (aproximación de aguas poco profundas [1]). Usando las variables como una cantidad promedio temporal más una cantidad fluctuante (promedio de Reynolds [8]), se expresan las ecuaciones en forma conservativa como:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial q_x}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{q_x^2}{h} + \frac{gh^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{q_x q_y}{h} \right) = gh(S_{ox} - S_{fx}) \quad (2)$$

$$\frac{\partial q_y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{q_x q_y}{h} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{q_y^2}{h} + \frac{gh^2}{2} \right) = gh(S_{oy} - S_{fy}) \quad (3)$$

$$\frac{\partial(h\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(h\phi u)}{\partial x} + \frac{\partial(h\phi v)}{\partial y} = \vec{\nabla}(\mathbf{K}h\vec{\nabla}\phi) \quad (4)$$

Donde (1) representa la conservación de la masa, (2) y (3) la conservación del momento a lo largo del eje x e y respectivamente y (4) el transporte de un soluto en el seno de un fluido. Las variables u y v representan las velocidades promediadas en la vertical en las direcciones x e y respectivamente, ϕ la concentración promedio vertical, y h el calado del fluido .

Generalmente estas ecuaciones se presentan agrupadas de la forma:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{U})}{\partial y} = \mathbf{T}(\mathbf{U}) \quad (5)$$

Donde las variables del problema vienen agrupadas de la siguiente forma:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} h \\ q_x \\ q_y \\ h\phi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} q_x \\ \frac{q_x^2}{h} + \frac{gh^2}{2} \\ \frac{q_x q_y}{h} \\ h\phi u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} q_y \\ \frac{q_x q_y}{h} \\ \frac{q_y^2}{h} + \frac{gh^2}{2} \\ h\phi v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} 0 \\ gh(S_{ox} - S_{fx}) \\ gh(S_{oy} - S_{fy}) \\ \vec{\nabla}(\mathbf{K}h\vec{\nabla}\phi) \end{pmatrix} \quad (6)$$

En (6) \mathbf{U} representa el vector que agrupa las variables conservadas. Se definen los caudales en la dirección x e y como $q_x = hu$ y $q_y = hv$.

Los términos $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ y $\mathbf{G}(\mathbf{U})$ representan los vectores del flujo, tomando g como el valor de la gravedad y siendo $\frac{gh^2}{2}$ la expresión obtenida para la presión hidrostática en la columna a partir de la aproximación de aguas poco profundas [1].

Por último el término $\mathbf{T}(\mathbf{U})$ representa el vector de términos fuente. La primera componente del

vector es nula dado que en el problema que tratamos no tendremos fuentes ni sumideros de masa. Los términos S_{ox} y S_{oy} definen las pendientes del fondo en la dirección x e y respectivamente (7), siendo z la cota del fondo:

$$S_{ox} = -\frac{\partial z}{\partial x}, \quad S_{oy} = -\frac{\partial z}{\partial y}, \quad (7)$$

Debido a la viscosidad del fluido, aparece una fuerza de fricción provocada por el rozamiento del agua. Este rozamiento, aproximando el radio hidráulico con el calado, se puede expresar por medio del gradiente de energía [2], cuyas componentes son:

$$S_{fx} = \frac{n^2 u \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{4/3}}, \quad S_{fy} = \frac{n^2 v \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{4/3}} \quad (8)$$

Esta notación es una formulación habitual para el esfuerzo cortante en flujos turbulentos de lámina libre, donde n es el coeficiente de rugosidad de Manning [3]. Dicho coeficiente se obtiene a partir de medidas experimentales o tablas empíricas.

Por último, $\mathbf{T}(\mathbf{U})$ contiene la difusión que requiere una sección propia (véase apéndice A).

2.2 Esquema numérico

Para resolver las ecuaciones diferenciales que gobiernan el comportamiento del flujo (sistema de ecuaciones 3×3 ((1) (2) (3))) es necesario discretizar el problema. Para ello se divide el dominio de estudio en un conjunto de celdas y se resolverá, en cada una de ellas, el valor que toman las variables conservadas además del paso temporal (Δt), que hace avanzar la solución desde un tiempo inicial ($t=0$ s) hasta el tiempo final de la simulación. El paso de tiempo Δt que no es constante a lo largo de toda la simulación que se recalcula dinámicamente como:

$$\Delta t = \text{CFL} \min_{k,m} \frac{\delta x_k}{\tilde{\lambda}_k^m} \quad 0 \leq \text{CFL} \leq 1 \quad (9)$$

donde

$$\delta x_k = \min(\chi_i, \chi_j) \quad \chi_i = \frac{A_i}{\max_{k=1,NE} l_k} \quad (10)$$

con i y j las celdas que comparten la pared k de longitud l_k , NE número de celdas vecinas y A_i el área de la celda. $\tilde{\lambda}_k^m$ representan los valores propios de las matrices Jacobianas usadas para resolver el problema. El coeficiente CFL es el número de *Courant-Friedrich-Lowy*, una constante cuyo valor está entre 0 y 1 y tiene que ver con la estabilidad del método numérico [11]. El valor asignado al CFL es importante porque valores muy elevados podrían desestabilizar el método dependiendo del tipo de malla que se utilice y valores demasiado pequeños incrementan la lentitud del cálculo. Con todo ello, el esquema numérico avanza tanto en el espacio, evaluando las variables en todas las celdas, como en el tiempo.

Para el transporte del soluto es posible desacoplar la ecuación (4) definiendo un único flujo numérico q^\downarrow , directamente relacionado con la linealización de Roe. Desde este punto de vista,

podemos definir dos métodos numéricos para aproximarlos a la ecuación del transporte: un esquema de primer orden y un esquema de segundo orden. Se detallan en el anexo [B](#).

Para el esquema numérico de primer orden, la ecuación del transporte se escribe como:

$$(h\phi)_i^{n+1} = (h\phi)_i^n - \frac{\Delta t}{A_i} \sum_{k=1}^{N_E} (q\phi)_k^\downarrow l_k \quad (11)$$

donde:

$$\phi_k^\downarrow = \begin{cases} \phi_i & \text{if } q_k^\downarrow > 0 \\ \phi_j & \text{if } q_k^\downarrow < 0 \end{cases} \quad (12)$$

Este método de soluciones finitas se reduce a la discretización *upwind* clásica finitas en 1D.

En el anexo [B](#), se puede consultar un análisis en detalle del esquema numérico en primer y segundo orden.

3 Análisis de sensibilidad en problemas lineales de convección

3.1 Discretización en problemas convectivos

En esta sección del trabajo, se simulará el transporte convectivo de un perfil de concentración de tipo gaussiano con solución exacta. Se trata de un test académico sencillo sobre un flujo uniforme que no necesita ser resuelto. Esta simulación se hará para cuatro mallas de distinta finura usando en primer y segundo orden, con el objetivo final de comprobar la influencia tanto de la malla como del orden de precisión en la solución obtenida.

Para ello, en primer lugar hay que plantear el problema de cómo pasar de ecuaciones en derivadas parciales a un problema numérico cometiendo el mínimo error posible. Lo formulamos solamente en x por simplicidad. Así, partimos de la ecuación de transporte puro para una variable genérica ϕ :

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} + u \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (13)$$

Usando para $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ un primer orden de Euler y un primer orden Upwind para $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ la ecuación, una vez discretizada, quedaría de la siguiente forma:

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_i^n - \phi_{i-1}^n}{\Delta x} \simeq \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_i^n + u \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^n + \epsilon \quad (14)$$

Donde el término ϵ es el error introducido por la discretización del problema.

Si realizamos ahora el desarrollo en serie de Taylor de sus términos, obtenemos:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \Delta t \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_i^n + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right)_i^n + \frac{(\Delta t)^3}{3} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial t^3} \right)_i^n + \dots \quad (15)$$

$$\phi_{i-1}^n = \phi_i^n - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^n + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i^n - \frac{(\Delta x)^3}{3} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i^n + \dots \quad (16)$$

Ahora si introducimos estos resultados en la ecuación 14 obtenemos:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_i^n + u \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^n = -\frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right)_i^n - \frac{(\Delta t)^2}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial t^3} \right)_i^n + u \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i^n - u \frac{(\Delta x)^2}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i^n + O(h^3) \quad (17)$$

Donde $O(h^3)$ denota el error de truncación y todos los términos a la izquierda de la ecuación representan el valor ϵ de (14). En este caso $\epsilon = \epsilon(\Delta t, \Delta x)$, es decir, orden 1 en tiempo y orden 1 en espacio por tratarse de los exponentes menores. La introducción de este error se debe exclusivamente al carácter numérico del problema una vez discretizado. Se observa que se han obtenido términos adicionales que no aparecían en la ecuación del transporte puro. Se espera que este error disminuya de forma potencial al tomar sucesivos términos en la discretización del problema. El orden de precisión del problema viene determinado por el esquema numérico utilizado. Como se ha mencionado nos referimos a primer orden cuando el esquema numérico ha sido Upwind en primer orden. Con esto se espera que al tomar el orden de precisión mayor, el

error de truncación se reduzca más rápidamente al refinar la malla. Esta dependencia se puede expresar como:

$$\text{error} = -cte \cdot \Delta x^m \quad (18)$$

Donde m representa el orden del método.

Finalmente, es posible manipular (17) para expresarla en términos de espacio, obteniendo (19):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = u \frac{\Delta x}{2} (1 - \nu) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + u \frac{(\Delta x)^2}{6} (3\nu - 2\nu^2 - 1) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \quad (19)$$

El coeficiente $\nu = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$ es el mencionado número CFL (Courant-Friedrich-Levy), e impone la existencia de un límite superior para el paso de tiempo en el algoritmo (condición de CFL). Se observa, que ν tiene que ser menor que 1, dado que el factor que acompaña a la segunda derivada en x representa la viscosidad numérica que debe ser mayor que cero para que la simulación permanezca estable:

$$\mu_1 = u \frac{\Delta x}{2} (1 - \nu) \geq 0 \quad (20)$$

Así, podemos expresar (19) como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \mu_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + O(h^3) \quad (21)$$

Siendo $O(h^3)$ el error de truncamiento.

En este trabajo se va a utilizar un método de primer orden en espacio y tiempo y un método de segundo orden en espacio y tiempo (Anexo B). El análisis de la viscosidad numérica del esquema de 2º orden se realizada con $\mu_2 = \frac{1}{2}\mu_1$ [15]. Para ello la simulación realizada consiste en el transporte de una concentración en una malla de 250×250 celdas donde existe una velocidad que forma un ángulo de 45° con los ejes cartesianos. El tiempo que se deja correr la simulación es de 150 segundos, tiempo suficiente para poder observar los efectos de la dispersión de carácter puramente numérico. Para poder realizar el análisis de sensibilidad, el perfil de concentración utilizado es de tipo gaussiano con solución exacta.

Este se define como:

$$\phi(x, y, 0) = \exp\left(\frac{-r^2}{\sigma}\right) \quad \text{con } r = \sqrt{(x - x_o)^2 + (y - y_o)^2} \quad (22)$$

$$\phi(x, y, t) = \exp\left(\frac{-r'^2}{\sigma}\right) \quad \text{con } r' = \sqrt{(x - x_o - ut)^2 + (y - y_o - vt)^2} \quad (23)$$

Donde (22) representa el perfil inicial a $t = 0s$ y (23) el perfil en un instante t . El valor tomado para la semianchura es $\sigma = 30$, $x_o = y_o = 15,0$, las componentes de la velocidad son $u = v = 1,0$ y $t = 150s$. Las simulaciones se han realizado para cuatro mallas un número de celdas $N_{cel} = 25000, 74984, 225014$ y 675025 respectivamente usando el método de primer y segundo orden de simulación. Se incorpora en el anexo C un análisis cualitativo de la influencia de la malla y la influencia del orden de simulación.

3.2 Análisis cuantitativo de error

En esta sección se realiza un análisis cuantitativo del error de los resultados obtenidos en las simulaciones realizadas. Para ello se compararán las soluciones numéricas con la solución analítica para cada malla con el fin de evaluar el grado de exactitud. Se usan las normas L_1 y L_2 que vienen definidas por:

$$\| \text{error} \|_{L_1} = \frac{\sum_i^N |(\text{error})_i \cdot s_i|}{A_t}; \quad \| \text{error} \|_{L_2} = \sqrt{\sum_i^N \frac{|(\text{error})_i^2 \cdot s_i|}{A_t}}; \quad (24)$$

Donde $(\text{error})_i$ es el valor diferencia entre el valor exacto de concentración en cada celda h_e y el valor de la simulación en dicha celda h_N :

$$\text{error}_i = (h_e - h_N)_i \quad (25)$$

Se ha introducido una ponderación del área de cada celda de la malla (s_i) y A_t el área total de la malla. El resultado obtenido para las normas se presenta en la tabla (1) .

Celdas	error_{L_1} (1o)	error_{L_1} (2o)	error_{L_2} (1o)	error_{L_2} (2o)
25000	1.8e-3	6.1e-4	2.1e-2	1.0e-2
74984	1.6e-3	2.7e-4	2.0e-2	5.2e-3
225014	1.2e-3	1.1e-4	1.6e-2	2.3e-3
675025	9.3e-4	5.2e-5	1.3e-2	1.0e-3

Tabla 1: Normas L_1 y L_2

La norma L_1 mide el error global en términos de diferencia entre resultados numéricos y exactos, mientras que la norma L_2 representa el valor cuadrático del error, haciendo media aritmética con el peso del área de cada celda en ambos. Se observa en la tabla 1 que el error disminuye al aumentar la finura de la malla. De igual forma ocurre al aumentar el orden del método de simulación. Así, se puede extraer como primera conclusión la necesidad de realizar la simulación con un segundo orden de precisión y una malla con la máxima finura posible para obtener unos resultados donde el error de carácter exclusivamente numérico sea mínimo, teniendo más influencia en el resultado final el orden del método de simulación que la influencia de la finura de la malla.

Se realiza también un estudio de la convergencia de este error. Para ello, se pretende obtener el valor de la pendiente en un gráfico en el que se represente el logaritmo de cada norma en función del logaritmo del tamaño característico de la malla. Al trabajar en 2D con mallas triangulares no estructuradas hemos representado el refinamiento mediante $\sqrt{N_{cel}}$, siendo N_{cel} el número de celdas, pudiendo obtener así el orden de exactitud real de la simulación. Tomando logaritmos a (18) podemos expresar:

$$\begin{aligned} \text{error} &= -cte \cdot (\sqrt{N_{cel}})^m \Rightarrow \log(\text{error}) = \log(-cte \cdot (\sqrt{N_{cel}})^m) \\ \log(\text{error}) &= cte' - m \cdot \log(\sqrt{N_{cel}}) \end{aligned} \quad (26)$$

Si representamos en el eje de abscisas $\log(\sqrt{N_{cel}})$ y en las ordenadas $\log(\text{error})$ se debe obtener una recta cuya pendiente m nos dará el orden de simulación. Esta debe estar en torno a 1 para primer orden y 2 para segundo orden en problemas 1D. Para visualizar la convergencia del error, en la figura 1 se presentan las rectas en cada tramo en lugar de ajustar todos los datos a una recta genérica para todos los puntos, además de agregar dos triángulos en cada gráfico, uno con pendiente de valor 1 y otro de valor 2, para así poder observar el error cometido en la simulación. Se presenta también la tabla 2, con los valores de las pendientes en cada tramo:

Tramo	Pendiente $L_1(1o)$	Pendiente $L_1(2o)$	Pendiente $L_2(1o)$	Pendiente $L_2(2o)$
25000-74894	0,18	1,46	0,12	1,23
74894-225014	0,50	1,61	0,36	1,50
225014-675025	0,50	1,42	0,39	1,46

Tabla 2: Valor de las pendientes en las normas

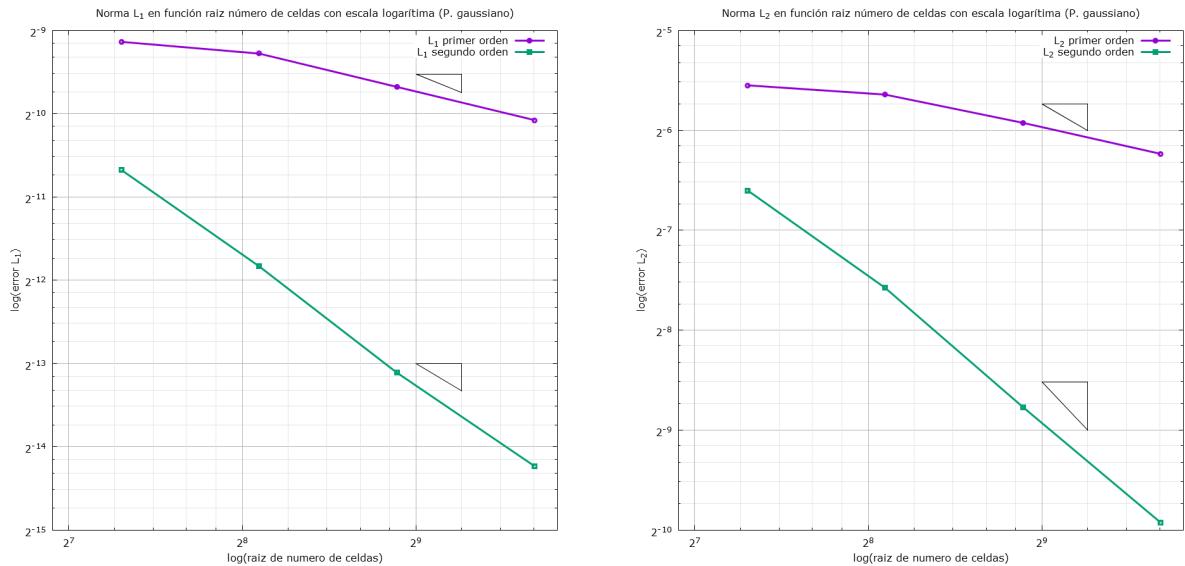


Figura 1: Normas L_1 y L_2 con escala logarítmica

En la figura 1 y en la tabla 2 se aprecia que las pendientes en la representación de L_1 y de L_2 obtenidas tanto en primer como en segundo orden siguen el criterio de convergencia, a pesar de haber obtenido unos valores inferiores a los valores teóricos.

Para primer orden las pendientes en el tramo entre las dos primeras mallas tienen un valor muy lejano al esperado, aunque dicho valor es lógico dado que el grosor en la primera malla es demasiado alto, con lo que error introducido también es elevado. Para el resto de valores, se observa que el orden de convergencia mejora al refinar la malla tal y como se quería comprobar en esta sección. La lejanía respecto al valor teórico de estos valores está dentro de un rango aceptable, pues existen diversos factores entre ellos la forma de las celdas y la estructura de la malla, que no han sido tenidos en cuenta para este análisis. En el problema del transporte puro el error se minimiza cuando tomamos una malla estructurada con celdas cuadriláteras, en las que el flujo se desplaza en la misma dirección en la que se estructuran las celdas [4]. El fin último de este trabajo es analizar un modelo de simulación que obtenga unos valores lo más cercanos posible a un caso test realizado en el laboratorio, para el cual el uso de malla triangular no estructurada es más adecuado que de malla cuadrilátera. De ahí que podamos considerar los resultados obtenidos como dentro de un rango de error de convergencia aceptable.

De igual forma ocurre con el segundo orden de convergencia, donde las pendientes en las rectas mejoran al aumentar el número de celdas. Tan solo podemos observar como en el último tramo de la rectas, la pendiente disminuye respecto al anterior, algo que teóricamente no debería ocurrir, aunque debido a los factores ya comentados, se considera dentro del rango de error esperado para este estudio.

4 Análisis de sensibilidad en problemas lineales de convección-difusión

4.1 Discretización en problemas con convección-difusión

En este capítulo se realizará un análisis de la influencia de la difusión física en nuestro modelo. Así, considerando de nuevo la forma simplificada 1D, la ecuación de convección-difusión se puede expresar como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = K \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (27)$$

Donde K es el coeficiente de difusión física del problema, ϕ es la concentración y v la velocidad en el fluido que consideramos uniforme y constante.

Se pretende realizar de forma separada un estudio en el que no corregiremos de ninguna forma el error introducido, y otro en el que se desea corregir el resultado mediante la introducción de coeficientes de índole artificial para intentar reducir el error en la medida de lo posible.

Para ello partimos de la ecuación del transporte ya discretizada (21) expresada en términos de difusión numérica:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \mu_1 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + O(h^3) \quad (28)$$

Donde μ_1 denota la difusión numérica en primer orden ($\mu_1 = v \frac{\Delta x}{2} (1 - \nu)$) y $O(h^3)$ el error de truncamiento. Al contar con una difusión física real en nuestro problema (27), hay que valorar si se introduce un error de difusión numérica mayor. Para disminuir este error, introducimos el concepto de corrección a la difusión numérica. Para evitar el error adicional lo que se hace es comparar el coeficiente de difusión física con el numérico celda a celda. Para ello en la simulación tomamos como coeficiente de difusión el valor máximo entre 0 y la diferencia del coeficiente de difusión física y el de difusión numérica [5]. Esto se puede expresar como:

$$K = \max(K - \mu_1, 0) \quad (29)$$

Así es posible decir, que esta corrección consiste en la supervisión celda a celda de la malla para no añadir un valor en exceso de difusión al problema, tanto en el esquema de primer orden (μ_1) como en el de segundo orden (μ_2).

4.2 Influencia de la corrección a la difusión

El siguiente paso a tratar, es el análisis de la presencia de difusión física en nuestro modelo a través de distintas simulaciones. Para ello se ha usado un problema con solución analítica conocida. Dicho problema consiste en la liberación de una concentración de forma instantánea y puntual (en una sola celda de la malla), con una velocidad que forma un ángulo de 45° con los ejes cartesianos, dejándolo evolucionar durante 150 segundos. Al considerar la liberación del soluto en un punto de la malla, el perfil de concentración inicial corresponde a una función delta de Dirac, por lo que la solución exacta se presenta para tiempos mayores que cero. Esta corresponde a una gaussiana bidimensional:

$$\phi(x, y, t) = \frac{M}{2\pi\sqrt{4t^2k}} \exp \left[-\frac{(x - \mu_x)^2}{4tk/K_{yy}} - \frac{(y - \mu_y)^2}{4tk/K_{xx}} + \frac{(x - \mu_x)(y - \mu_y)}{2tk/K_{xy}} \right] \quad (30)$$

con:

$$k = K_{xx} \cdot K_{yy} - K_{xy}^2 \quad ; \quad \mu_x = x_o + u \cdot t \quad ; \quad \mu_y = y_o + v \cdot t \quad (31)$$

Los parámetros usados para obtener el valor exacto de la solución y así poder comparar con los resultados de las simulaciones son:

$$\begin{aligned} M &= 100 \cdot \pi \quad ; \quad t = 150s \quad ; \quad \vec{V} = (u, v) = (1,0; 1,0) \\ \mu_x &= 165,0 \quad ; \quad \mu_y = 165,0 \quad ; \quad (x_o, y_o) = (15, 15) \\ K_{xx} &= K_{yy} = 1,5 \quad ; \quad K_{xy} = K_{yx} = 0,0 \quad ; \quad k = 1,5 \cdot 1,5 - 0,0 \end{aligned} \quad (32)$$

Se realizarán simulaciones en primer y segundo orden con cuatro mallas de distinta finura tal y como se estudió en el capítulo (3). La liberación de soluto se ha realizado de forma instantánea y con una masa constante. Al ser esta de carácter constante, la concentración inicial en cada una de las distintas mallas es diferente al ser liberada en una única celda, siendo de un área muy distinta según la malla usada (Véase figura 25, anexo D.1).

Para estas simulaciones se ha usado una difusión física de carácter isótropo, es decir el mismo valor tanto para la difusión longitudinal como transversal, concretamente $K_L = K_T = 1,5$. El resultado de estas simulaciones se puede consultar en el anexo D.1, donde se presentan la solución exacta y los resultados de cada malla para primer y segundo orden del método de simulación (Figuras: 26 , 27, 28 y 29) y los perfiles de concentración en el instante final (Figura 30).

Al contar con solución analítica es posible cuantificar el error mediante el cálculo de $errorL_1$ y $errorL_2$. Los valores obtenidos se presentan en la tabla (3), donde se observa la disminución del error al refinar la malla y en mayor medida con el orden del método de simulación:

Celdas	$errorL_1$ (1o)	$errorL_1$ (2o)	$errorL_2$ (1o)	$errorL_2$ (2o)
25000	1.23e-3	1.82e-4	3.62e-3	5.67e-4
74984	8.07e-4	1.40e-4	2.44e-3	4.37e-4
225014	5.15e-4	1.01e-4	1.59e-3	3.21e-4
675025	3.35e-4	8.13e-5	1.05e-3	2.57e-4

Tabla 3: Normas L_1 y L_2 sin corrección

Ahora pasamos a realizar estas mismas simulaciones usando el método de corrección a la difusión numérica. De igual forma que en el estudio sin corrección a la difusión numérica ,el análisis cualitativo realizado para este método se puede consultar en el anexo D.1, donde se presentan los resultados de la solución exacta y de las simulaciones (Figuras: 31 32, 33 y 34), además de los perfiles de concentración final en el instante final (Figura: 35). En éstas se puede observar que los resultados se acercan más a la solución exacta que en el caso de realizar la simulación sin corrección a la difusión (Figuras: 26, 27, 28 y 29 de dicho anexo). Esta mejora se detalla en la tabla 4, donde se presentan los valores del error cometido para cada simulación:

Celdas	$errorL_1$ (1o)	$errorL_1$ (2o)	$errorL_2$ (1o)	$errorL_2$ (2o)
25000	2.52e-4	1.70e-4	7.95e-4	5.33e-4
74984	1.50e-5	1.103e-4	4.70e-4	3.20e-4
225014	1.05e-4	6.36e-5	3.32e-4	1.95e-4
675025	8.09e-5	5.32e-5	2.55e-4	1.67e-4

Tabla 4: Normas L_1 y L_2 con corrección

Es notable la mejora en el resultado para la simulación en primer orden respecto a la simulación sin corrección de este mismo orden. Esto es debido al hecho de tomar como coeficiente de difusión numérica el valor máximo entre la diferencia de difusiones física y numérica y cero, dado que en el caso de primer orden, el error numérico introducido es mucho mayor que en el caso de segundo orden, de ahí que al ponderar el error físico con el numérico, estemos disminuyendo tanto el error cometido, haciéndose así mucho más evidente esta corrección en primer orden que en segundo orden. Esto se puede observar comparando el valor de las normas obtenido (calculadas como en [3.2](#)) en la simulación con corrección a la difusión ([tabla 4](#)) con el valor de las normas sin corrección ([tabla 3](#)).

Es posible extraer como conclusión de esta sección que, en el análisis de problemas en los que existe una presencia de difusión física real, el hecho de usar una corrección a la difusión numérica mediante la compensación con la difusión física, los resultados finales de la simulación se acercan mucho más a los exactos que en el caso de no tomar dicha corrección.

Por último, en el anexo [D.2](#) se puede consultar los resultados de un análisis cualitativo de la influencia de distintos valores de los coeficientes de difusión sobre la simulación.

5 Aplicación al transporte en flujo de lámina libre transitorio

5.1 Modelos de dispersión

No hay una única forma de formular la dispersión en problemas realistas de transporte 2D. En esta sección del trabajo, se realizará un análisis de sensibilidad para dos modelos de dispersión, modelo anisótropo estándar y modelo de velocidad de fricción direccional. La diferencia está en la forma en la que tomamos la matriz \mathbf{K} de dispersión:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} D_{t_L} + D_{v_L} & 0 \\ 0 & D_{t_T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_L & 0 \\ 0 & K_T \end{pmatrix} \quad (33)$$

Donde $K_L = D_{t_L} + D_{v_L}$ y $K_T = D_{t_T}$.

5.1.1 Modelo anisótropo estándar

En este modelo usamos una matriz de dispersión de la forma:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_L & 0 \\ 0 & K_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_L h u^* & 0 \\ 0 & \epsilon_T h u^* \end{pmatrix} \quad (34)$$

Donde u^* representa la velocidad de fricción, calculada con (65 Anexo A). Se ha denotado $\epsilon_L = D_{t_L} + D_{v_L}$ y $\epsilon_T = D_{t_T}$. Serán estos coeficientes los que le pasaremos al programa de simulación y para los que se hará un análisis de sensibilidad a través de un barrido de medio orden de magnitud tomando como referencia los valores más comúnmente usados en la bibliografía [1]:

$$\epsilon_L = 5,93 \quad \epsilon_T = 0,15 \quad (35)$$

5.1.2 Modelo de velocidad de fricción direccional

En este modelo se empleará un único coeficiente $\bar{\epsilon}$ calculado como combinación lineal de D_{t_L} , D_{v_L} y D_{t_T} , de forma que la diferencia entre dispersión longitudinal y transversal vendrá determinada al calcular la velocidad de fricción, diferente para cada dirección del movimiento [7]:

$$\begin{aligned} u^* &= n \sqrt{g \frac{|u| \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}}} \\ v^* &= n \sqrt{g \frac{|v| \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}}} \end{aligned} \quad (36)$$

Donde u^* y v^* han calculado con (66 y 67 Anexo A). Así, la matriz de dispersión en este caso se determina de la forma:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_L & 0 \\ 0 & K_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\epsilon} h u^* & 0 \\ 0 & \bar{\epsilon} h v^* \end{pmatrix} \quad (37)$$

5.2 Casos test

El experimento se realizó usando un canal con sección rectangular con 6 m de longitud y 0.24 m de ancho. El realizar la aproximación de aguas poco profundas se tomó un calado de 0.015 m. El flujo es de agua limpia sin soluto, y éste se controla por medio de un medidor electromagnético de caudal. El soluto usado fue fluoresceína y estaba contenido en una cubeta de 0.24×0.25 m situada a 1.3 m de la sección de medida. La compuerta con la que se libera el soluto se abre mediante un cilindro controlado electrónicamente con un tiempo deertura de 0.1 segundos (Figura 2):

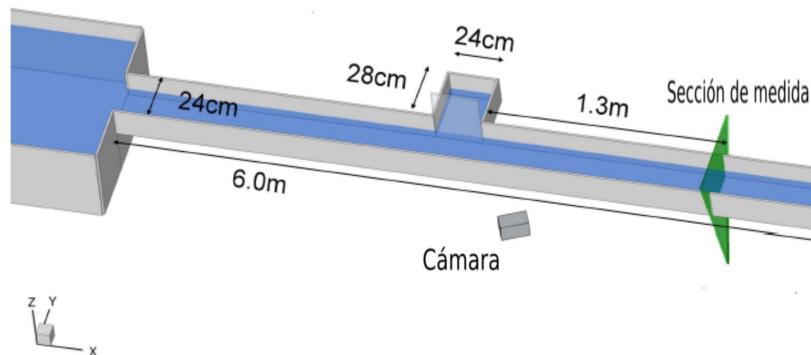


Figura 2: Vista general del experimento.

La sección de medida se iluminó con un láser de Ar^+ , cuyas líneas de emisión ultravioleta hacen que la fluoresceína emita radiación con una intensidad proporcional a su concentración. Se usó una cámara CCD que toma 30 imágenes por segundo. Por tanto los datos obtenidos muestran la evolución temporal de la concentración en la sección de medida. Al realizar la simulación usando las ecuaciones de aguas poco profundas promediadas en la vertical, los datos experimentales también se promediarán en esta dirección para poder compararlos. Se realizaron cuatro experimentos diferentes introduciendo obstáculos en el canal.

Caso 1.

Para este experimento se tomó el canal libre de obstáculos y la cubeta que contenía el soluto con un calado la mitad que el calado del canal (Figura 3):



Figura 3: Canal para el experimento 1.

Caso 2.

El segundo experimento, al igual que el primero, se realizó con el canal libre de obstáculos, pero con un calado en la cubeta del doble que en el canal (Figura 3).

Caso 3.

Para esta prueba, se usó una pieza adherida a la pared colocada frente a la compuerta, provocando un estrechamiento del flujo en la zona de liberación del soluto. La sección del círculo tiene un radio de 0.207 m, con un corte a 0.073 metros del borde en dirección perpendicular a la radial. El calado de la cubeta es el doble del calado del canal (Figura 4):

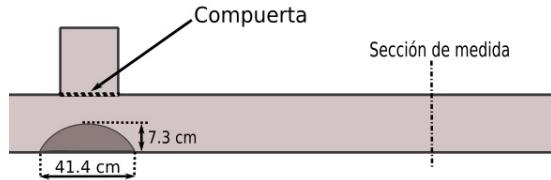


Figura 4: Canal para el experimento 3.

Caso 4.

Para este experimento además de la pieza del caso 3, se añadió otra sección circular en el fondo a 0.062 metros de la cubeta, haciendo que el calado del flujo cambie hasta 7 cm. Cuando el flujo supera este obstáculo, el flujo pasa a ser supercrítico. El calado de la cubeta sigue siendo el doble que el calado del canal (Figura 5):

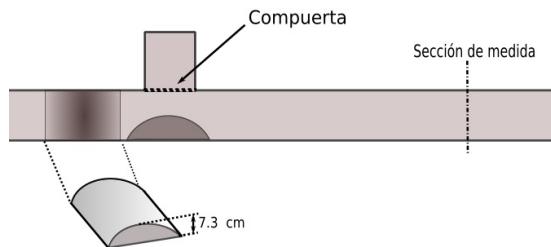


Figura 5: Canal para el experimento 4.

Para cada uno de los casos se han realizado distintas simulaciones utilizando los dos modelos de dispersión, con la intención de realizar un análisis de sensibilidad detallado de los coeficientes de dispersión en cada modelo. Las simulaciones se han realizado usando el método de segundo orden de simulación, utilizando mallas con 594269 celdas, donde se ha aplicado un refinamiento en la zona en la que el soluto es liberado. Se han simulado 50 segundos en cada caso, con un coste de tiempo de cálculo de aproximadamente 4000 segundos para cada simulación.

En el caso del modelo de dispersión anisótropo estándar se han realizado 49 simulaciones para cada experimento, en las que se ha hecho un barrido de medio orden de magnitud de los valores de ϵ_L y ϵ_T . Se espera, que el resultado de las simulaciones se acerque a lo obtenido en el experimento, al usar valores cercanos de ϵ_L y ϵ_T a los proporcionados en la bibliografía ($\epsilon_L = 5,93$ y $\epsilon_T = 0,15$). Para el modelo de velocidad de fricción, se han realizado 11 simulaciones de cada experimento. Dado que no existen valores proporcionados por la bibliografía para este modelo, se ha estimado que su valor tendrá un orden similar a la dispersión longitudinal, así, se han usado valores para $\bar{\epsilon}$ desde 1.0 hasta 11.0. El análisis de error se realiza computando la diferencia entre el valor de la concentración del experimento con el de la simulación en la sección de medida.

Los resultados obtenidos se presentan en dos tablas para cada experimento, donde se muestra el error cometido en cada simulación para cada uno de los modelos de dispersión utilizados. Estas tablas también se presentan en figuras donde se toma escala de colores para el error cometido en función de los coeficientes utilizados.

Se espera que el resultado de las simulaciones sea sensible a los coeficientes de dispersión utilizados. Definimos una nueva variable, ξ , que representa la sensibilidad del error cometido en función de los coeficientes. Esta se calcula mediante la diferencia entre dos parámetros, respecto a su valor medio:

$$\xi = \frac{\frac{e_{i+1} - e_i}{\frac{1}{2}(e_{i+1} + e_i)}}{\frac{\gamma_{i+1} - \gamma_i}{\frac{1}{2}(\gamma_{i+1} + \gamma_i)}} \quad (38)$$

Donde e_i representa el valor del error en la simulación i , y γ_i el valor del coeficiente i usado en esa simulación.

Finalmente, se analizarán los resultados de forma cualitativa, representando el perfil de concentración al pasar por la sección de medida en función del tiempo. Para ello, en el eje de abscisas representamos el tiempo, en el eje de ordenadas la anchura del canal, y con escala de colores la concentración ponderada en la vertical en la sección de medida. Así, se puede entender esta representación como una “película” compuesta por la sucesión de imágenes que muestra la concentración existente en cada tiempo en la sección de medida. Esto permite analizar cómo es el perfil de concentración al pasar por la sección de control en función del tiempo.

5.2.1 Resultados

Caso 1

En la tabla (5) se presenta el error cometido en cada una de las simulaciones respecto a los datos experimentales para el modelo anisótropo estándar en el caso 1 en función de los coeficientes de dispersión, señalando el valor mínimo de los errores:

ϵ_T ϵ_L	0.03	0.07	0.11	0.15	0.19	0.23	0.27
1.01	6.69e-3	6.37e-3	6.14e-3	5.97e-3	5.85e-3	5.77e-3	5.71e-3
2.65	5.10e-3	5.06e-3	5.04e-3	5.04e-3	5.06e-3	5.09e-3	5.12e-3
4.29	4.66e-3	4.70e-3	4.75e-3	4.81e-3	4.88e-3	4.95e-3	5.02e-3
5.93	4.60e-3	4.69e-3	4.79e-3	4.88e-3	4.98e-3	5.08e-3	5.17e-3
7.57	4.77e-3	4.88e-3	5.00e-3	5.12e-3	5.23e-3	5.34e-3	5.45e-3
9.2	5.06e-3	5.19e-3	5.32e-3	5.44e-3	5.56e-3	5.68e-3	5.79e-3
10.85	5.41e-3	5.54e-3	5.67e-3	5.80e-3	5.92e-3	6.03e-3	6.15e-3

Tabla 5: Error del modelo anisótropo estándar experimento 1

Se presentan los errores en la tabla (6) para el modelo de velocidad de fricción direccional:

$\bar{\epsilon}$	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
Error	5.76e-3	4.89e-3	4.95e-3	5.33e-3	5.85e-3	6.40e-3
$\bar{\epsilon}$	7.0	8.0	9.0	10.0	11.0	-
Error	6.93e-3	7.43e-3	7.91e-3	8.35e-3	8.76e-3	-

Tabla 6: Error del modelo de velocidad de fricción direccional.

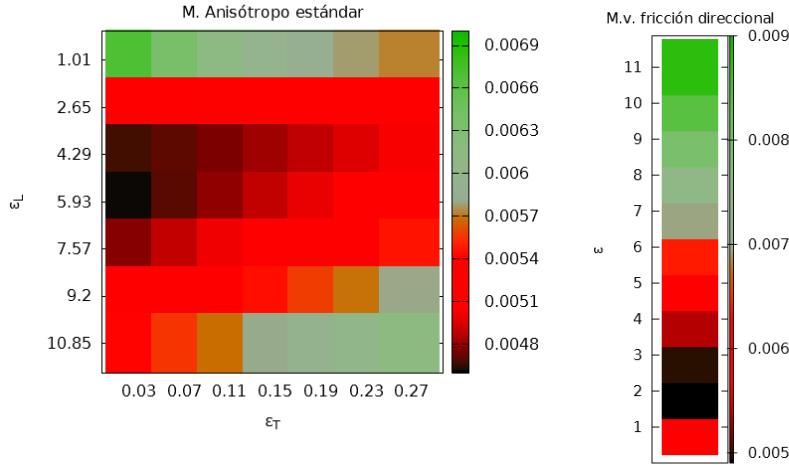


Figura 6: Error en las simulaciones del caso 1.

Para hacer más visual el error cometido en las simulaciones, en la figura 6 se representan las tablas (5) y (6) aplicando escala de colores al valor del error. Observando el valor de los errores representado en las tablas (5) (6) y en la figura (6), se pueden extraer distintas conclusiones. Para el modelo anisótropo estándar, vemos que el error mínimo se da para los coeficientes $\epsilon_L = 5,93$ y $\epsilon_T = 0,03$. En la dispersión longitudinal, tal y como se esperaba, se observa que el error disminuye al acercarse al valor dado en la bibliografía ($\epsilon_L = 5,93$), siendo mínimo justo para este valor. Esto nos indica, que los valores dados en [1] para la dispersión longitudinal se ajustan de forma adecuada a este experimento. Sin embargo, para la dispersión transversal se observa que el error mínimo lo aporta $\epsilon_T = 0,03$, cuando el valor aportado por la bibliografía es de $\epsilon_T = 0,15$. Así, se entiende que para este experimento se ha sobreestimado el valor de la dispersión transversal. Esto se debe a que los valores aportados en la bibliografía, han sido estimados para flujos en ríos, mientras que en este trabajo se ha usado un canal en laboratorio, cuyas condiciones son muy diferentes.

En el modelo de velocidad de fricción direccional, el error mínimo lo aporta el valor $\bar{\epsilon} = 2,0$. A pesar de no contar con valores en la bibliografía para este modelo, podemos observar como la estimación realizada para el coeficiente está dentro del rango esperado, obteniendo errores del mismo orden que en caso del modelo anisótropo estándar. Sin embargo, la principal diferencia con éste, recae en la variación del error cometido entre los distintos valores de $\bar{\epsilon}$, siendo la dife-

rencia entre el máximo error y el mínimo, mayor que en el modelo anisótropo estándar.

Estas variaciones pueden ser estudiadas mediante el análisis de sensibilidad, definido en (38). Para el modelo anisótropo estándar se ha realizado este análisis para el grupo de coeficientes ϵ_T y ϵ_L , al que pertenece el valor donde el error es mínimo. Así, para el estudio de la influencia del coeficiente de dispersión transversal, se ha fijado el coeficiente longitudinal donde el error es mínimo (para el caso 1 $\epsilon_L = 5,93$). De igual forma se hace para el análisis sobre el coeficiente de dispersión longitudinal, fijando el valor del coeficiente de dispersión transversal (en el caso 1 $\epsilon_T = 0,03$). Los valores obtenidos se presentan en la tabla (7):

ξ_T	0.024	0.044	0.064	0.084	0.102	0.119
ξ_L	-0.300	-0.193	-0.038	0.144	0.301	0.409

Tabla 7: Caso1. Sensibilidad a los coeficientes en el modelo anisótropo estándar.

Donde ξ_T representa la sensibilidad del error al coeficiente transversal y ξ_L este mismo análisis para el coeficiente de dispersión longitudinal.

De igual forma se realizó el análisis de sensibilidad para el modelo de velocidad de fricción direccional, siendo ξ_ϵ la sensibilidad del error al coeficiente de dispersión $\bar{\epsilon}$. Los resultados se presentan en la tabla (8):

ξ_ϵ	-0.247	0.033	0.260	0.416	0.492	0.518	0.527	0.526	0.518	0.508
----------------	--------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

Tabla 8: Caso1. Sensibilidad a los coeficientes en el modelo velocidad de fricción direccional.

Para el modelo anisótropo estándar, se puede observar como el valor de la sensibilidad se hace mínimo al acercarse a valor donde el error es más pequeño. Esto indica que al acercarse al valor mínimo de error, la sensibilidad de los coeficientes es mayor, mientras que al alejarse de este valor la sensibilidad de los coeficientes disminuye. De la misma forma ocurre para el modelo de fricción direccional, donde la influencia del coeficiente $\bar{\epsilon}$ disminuye al alejarse del valor donde el error es mínimo. Tal y como se ha comentado, para este modelo, la variación del error entre simulaciones es mayor, algo que se refleja perfectamente en el análisis de sensibilidad, donde se observa como ξ_ϵ tiende a ser constante cuando nos alejamos lo suficiente del valor de $\bar{\epsilon}$ donde el error es mínimo.

Finalmente, se ha realizado un análisis de error de forma cualitativa. Tal y como se ha comentado, este se realiza representando en un gráfico, el perfil de concentración promediado en la vertical al pasar por la sección de medida usando escala de colores, representando en los ejes x e y el tiempo y la anchura del canal respectivamente. Así, en la figura (7) se representan el perfil de concentración para los datos experimentales y para las simulaciones de cada modelo donde el error obtenido ha sido mínimo, observando como la concentración máxima llega a la sección de medida en torno $t = 11s$, pasando después por la sección, los picos de menor concentración:

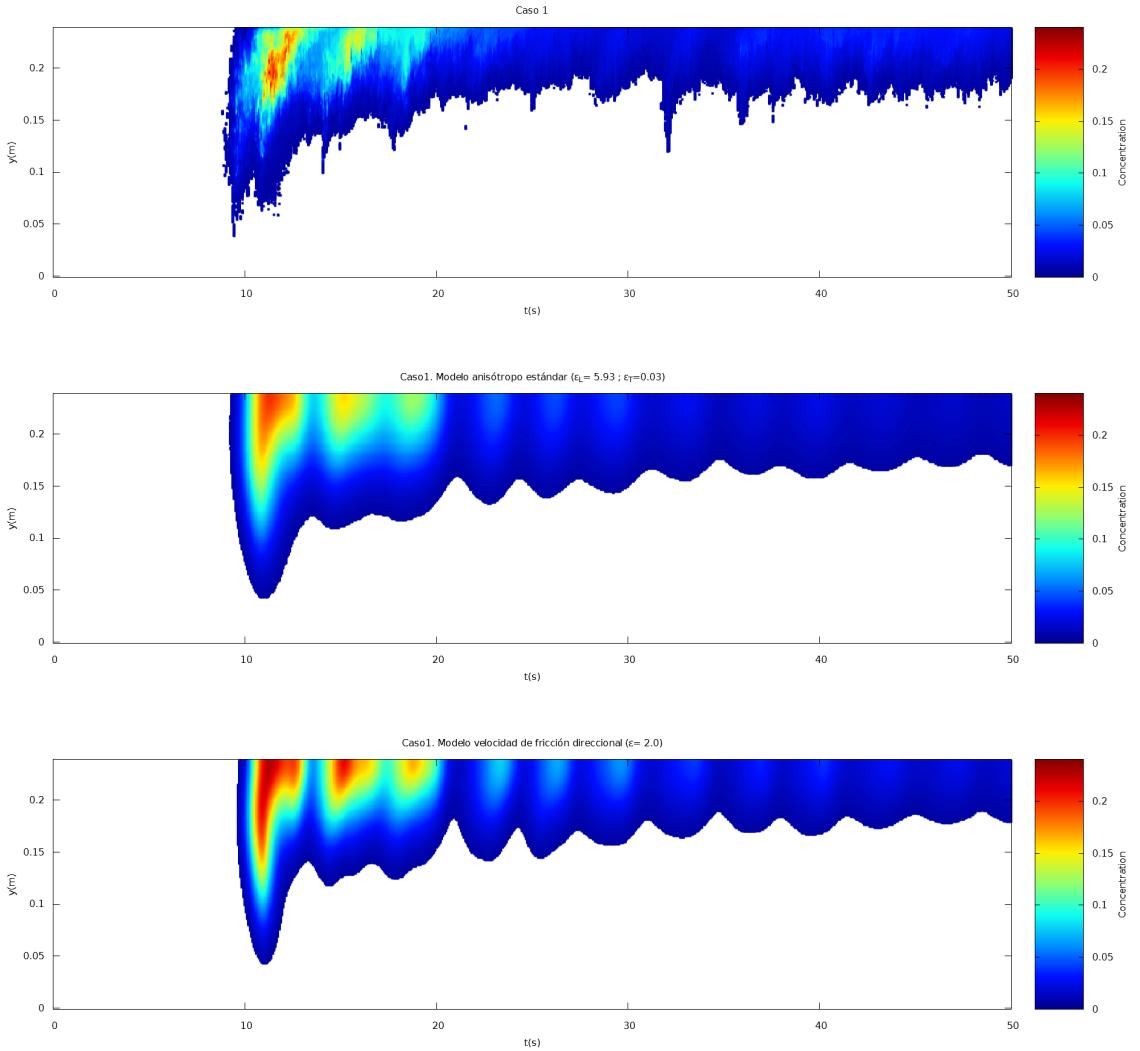


Figura 7: Experimento 1. Evolución temporal de la distribución de la concentración, promediada en la vertical, en la sección de medida. Datos experimentales (arriba), modelo anisótropo estándar (centro) y velocidad de fricción direccional (abajo)

Al comparar los resultados experimentales con los resultados obtenidos en las simulaciones, se observa como el resultado de las simulaciones es muy similar al obtenido experimentalmente. Concretamente, para el modelo anisótropo estándar, donde el error mínimo ha sido aportado al usar $\epsilon_L = 5,93$ y $\epsilon_T = 0,03$ en la simulación, reproduce más fielmente los resultados experimentales que el modelo de velocidad de fricción direccional.

En el análisis cualitativo del error, también se incluye la figura (8), donde se representan los datos obtenidos en los casos donde el error ha sido mayor para cada modelo de dispersión. Se representan los casos donde este error es mayor debido a tomar un valor de los coeficientes demasiado bajo, y también demasiado alto. Para el modelo anisótropo estándar estos valores son $\epsilon_L = 1,01; \epsilon_T = 0,03$ y $\epsilon_L = 10,85; \epsilon_T = 0,27$ respectivamente. Para el modelo de velocidad de fricción direccional, los resultados más alejados se han dado para $\bar{\epsilon} = 1,0$ y $\bar{\epsilon} = 11,0$:

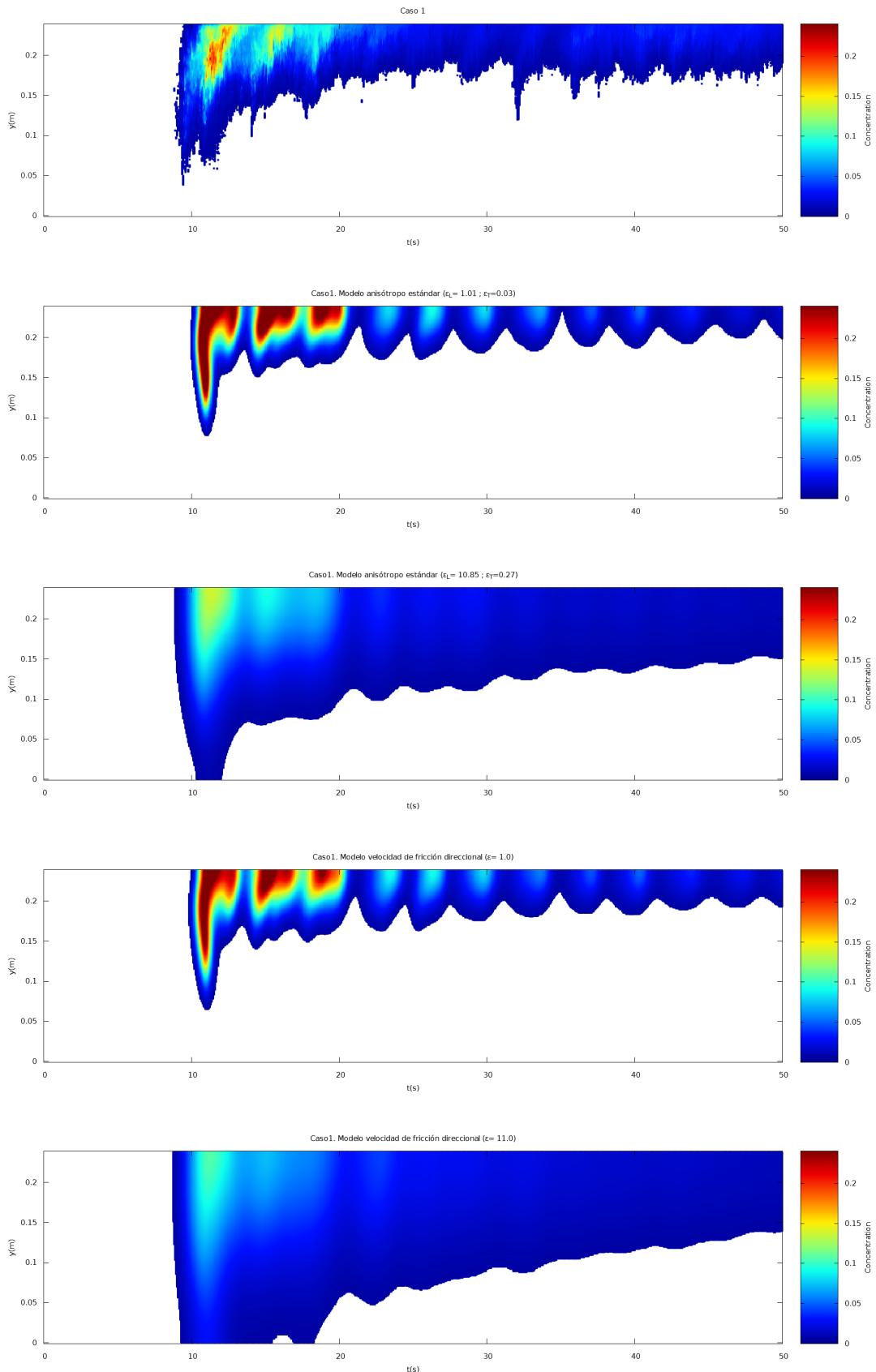


Figura 8: Experimento 1. Evolución temporal de la distribución de la concentración, promediada en la vertical, en la sección de medida. Datos experimentales y simulaciones con mayor error para cada modelo

Si se comparan los resultados de las simulaciones donde el error ha sido mayor con los datos experimentales, se observa la enorme influencia que tienen los coeficientes de dispersión en el modelo, al ser los resultados totalmente diferentes al caso donde el error es mínimo. En esta figura se observa perfectamente, que al usar coeficientes de dispersión demasiado bajos, la dispersión es excesivamente baja en comparación con los datos experimentales, todo lo contrario a lo que sucede al tomar coeficientes elevados, donde la dispersión del soluto en la simulación es muy alta. Este hecho es observable desde los primeros instantes de la simulación. Esto se puede observar en las figuras 9 y 10, donde se representan para cada modelo de dispersión, el mejor resultado, junto con los dos peores con los coeficientes ya mencionados, para los instantes $t = 1, 2, 3$ y 4 segundos. Se observa, ya en el primer segundo de la simulación las diferencias al usar distintos coeficientes de dispersión las diferencias son notables. También es interesante observar que al abrir la compuerta el flujo del canal penetra en la cubeta donde se encuentra el soluto. Esto se debe a que en el caso 1, el calado de la cubeta es la mitad que el calado en el canal.

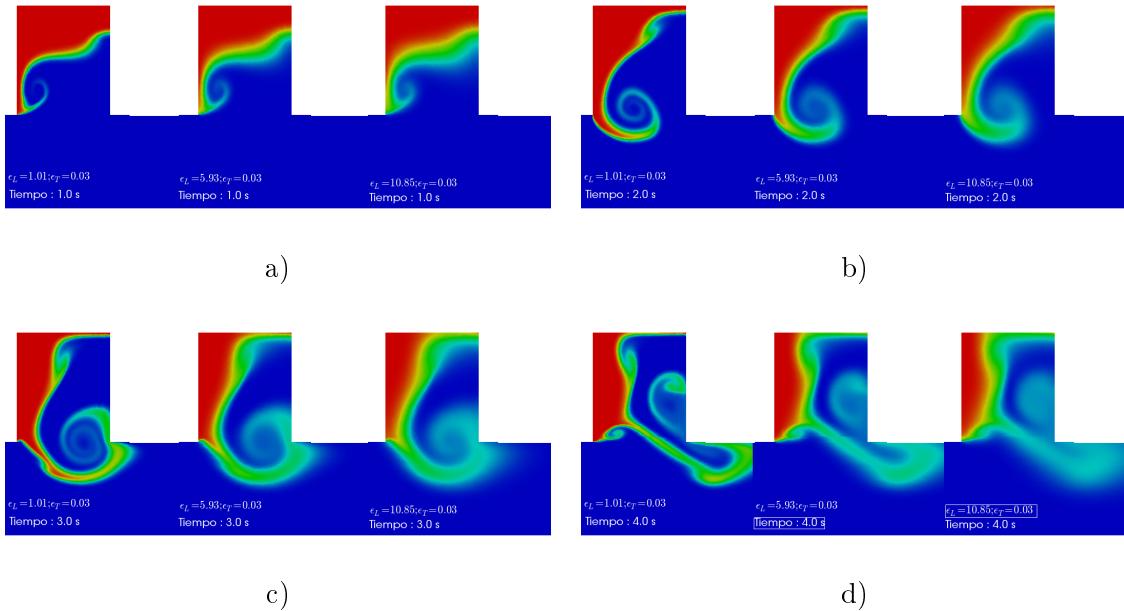


Figura 9: Caso 1. Distribución en el plano (x, y) de la concentración promedio vertical en distintos tiempos y usando distintos coeficientes de dispersión. $t=1s$ (a), $t=2s$ (b), $t=3s$ (c) $t=4s$ (d) y de izquierda a derecha valores ϵ_L y ϵ_T

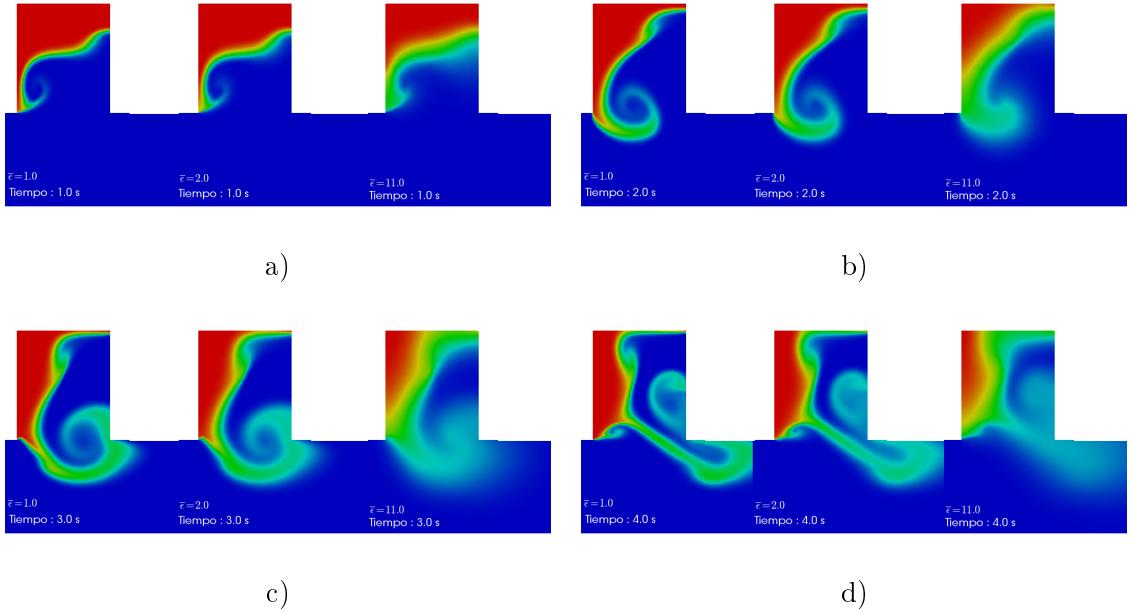


Figura 10: Caso 1. Distribución en el plano (x, y) de la concentración promedio vertical en distintos tiempos y usando distintos coeficientes de dispersión. Modelo de velocidad de fricción direccional. $t=1\text{s}$ (a), $t=2\text{s}$ (b), $t=3\text{s}$ (c) $t=4\text{s}$ (d) y de izquierda a derecha valores $\bar{\epsilon}$

Finalmente, se espera que al dejar pasar un tiempo mayor en las simulaciones, las diferencias acrecentarán. Esto lo podemos observar en la siguiente figura (11), donde se presentan las mismas simulaciones en $t = 10\text{s}$:

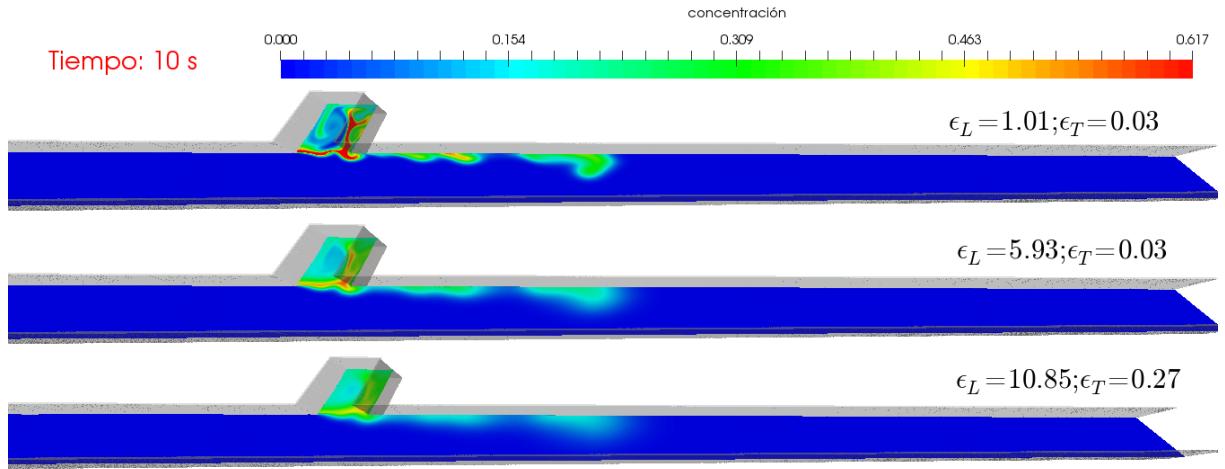


Figura 11: Caso 1. Vista general de la propagación de la concentración promedio vertical. Modelo anisótropo estándar para distintos coeficientes.

Tras realizar este análisis a los modelos de dispersión anisótropo estándar y de velocidad de fricción direccional podemos extraer varias conclusiones. En primer lugar se observa que el modelo anisótropo estándar reproduce más fielmente los datos experimentales que el modelo de velocidad de fricción direccional cuando los coeficientes de dispersión usados son los adecuados. También hay que decir, que se ha sobreestimado la influencia de la dispersión transversal, al ob-

tener los mejores resultados cuando el coeficiente es el mínimo usado. Sin embargo, el coeficiente de dispersión longitudinal dado en la bibliografía concuerda perfectamente con el experimento realizado, obteniendo el error mínimo para $\epsilon_L = 5,93$. Por último, se ha observado la enorme influencia que tienen los valores de los coeficientes ϵ_L y ϵ_T en el modelo anisótropo estándar, como $\bar{\epsilon}$ en el modelo de velocidad de fricción direccional, al empeorar mucho los resultados de las simulaciones cuando los coeficientes usados no son los adecuados.

De igual forma se ha realizado un análisis de sensibilidad de los dos modelos de dispersión para los caso 2, 3 y 4 descritos al principio de esta sección. Se pueden consultar en el anexo E.1.

6 Conclusiones

Tras la realización de este trabajo, se cumplido con los objetivos propuestos. Se han evaluado varios modelos de dispersión para solutos pasivos en flujos transitorios de agua, familiarizándose así con algunas de las técnicas utilizadas en la resolución de este tipo de problemas. En este proceso, se han estudiado por separado los fenómenos más relevantes que tienen cabida en la elaboración de un modelo computacional de simulación que resuelva satisfactoriamente el transporte y dispersión de un soluto en agua.

Atendiendo a dicho análisis, las conclusiones extraídas son:

- En el momento en el que un problema de ecuaciones en derivadas parciales es discretizado, aparece un error intrínseco a esta discretización. En el estudio de este error, denominado numérico, se ha analizado la influencia de la malla y del orden de simulación:
 - En análisis de la malla utilizada ha quedado comprobado, que el resultado de la simulación mejora en la medida que ésta es refinada, con la limitación de un número máximo de celdas por malla impuesto por el coste computacional que ello conlleva.
 - En el estudio del orden de simulación, se ha constatado la enorme influencia que este tiene sobre los resultados de la simulación. Al comprobar las diferencias entre primer y segundo orden de simulación en este trabajo, ha quedado reflejada la necesidad de usar un segundo orden de simulación para minimizar el error numérico introducido.
- Cuando en la simulación se introduce una difusión física, ésta se añade a la ya provocada por el carácter discreto del problema, aumentando de forma considerable el error en los resultados. Para disminuir este error, se ha introducido un corrección al error numérico. Tras aplicar esta corrección se ha comprobado una importante mejora en los resultados.
- Por último, en el análisis a los dos modelos de dispersión, se ha comprobado la enorme influencia que los coeficientes de dispersión tienen sobre los resultados de la simulación.
 - En el caso del modelo anisótropo estándar se ha comprobado que para los casos test utilizados en este trabajo, los valores de los coeficientes de dispersión ϵ_L y ϵ_T usados en las simulaciones están dentro del rango de los valores aportados por la bibliografía. Sin embargo estos no se ajustan perfectamente al estudio realizado en este trabajo. Esto es debido a que dichos coeficientes han sido calculados para flujos en ríos, cuyas condiciones son muy diferentes a los casos test aquí estudiados.
 - Para el modelo de velocidad de fricción direccional, la estimación del coeficiente de dispersión $\bar{\epsilon}$ ha sido acertada, al obtener un error del mismo orden que en el modelo anisótropo estándar. Sin embargo, al no contar con valores en la bibliografía, se obtienen errores de diferente orden para los distintos valores de $\bar{\epsilon}$ de una misma simulación.

Por tanto, podemos concluir que tras realizar este análisis de sensibilidad, el modelo de dispersión anisótropo estándar se ajusta mejor a los casos test utilizados en este trabajo.

Referencias

- [1] J.C. Rutherford. *River mixing*. Wiley, Chichester, England, 1994.
- [2] M.H. Chaudhry. *Open-channel flow*. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1993.
- [3] R.H. French. *Open-channel hydraulics*. McGraw-Hill, 1985.
- [4] João Luiz F. Azevedo, Luís F. Figueira da Silva y Daniel Strauss. *Order of Accuracy Study of Unstructured Grid Finite Volume Upwind Schemes*. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering. 2010.
- [5] J. Murillo, P.García-Navarro. *Improved Riemann solvers for complex transport in two-dimensional unsteady shallow flow*. Journal of Computational Physics. 2011.
- [6] J. L. Martin, S. C. McCutcheon. *Hydrodynamics and Transport for Water Quality Modeling*. 1998.
- [7] W. Rodi. *Turbulence Models and Their Application in Hydraulics – A State of the Art Review*, Special IAHR Publication. 1988
- [8] F.White. *Mecánica de Fluidos*. Ed. McGraw Hill. 2008
- [9] H.B. Fischer, E. G. List, R. C. Y. Koh, J. Imberger. *Mixing in Inland and Coastal Waters*. 1979.
- [10] P. Brufau, M. E. Vazquez-Cendón, y P. García-Navarro. *A numerical model for the flooding and drying of irregular domains*. International Journal for Numerical Methods in Fluids. 2002.
- [11] M. Morales. *Efficient explicit finite volume schemes for the shallow water equations with solute transport*. Tesis doctoral. 2014.
- [12] R. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge. Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press. 2002.
- [13] B. Van Leer. *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second Order Scheme*, Journal of Computational Physics, 1974.
- [14] M. Hubbard y P. García-Navarro. *Flux difference splitting and the balancing of source terms and flux gradients*.Journal of Computational Physics. 2000.
- [15] J. Murillo, B. Latorre y P. García-Navarro. *A Riemann solver for unsteady computation of 2d shallow flows with variable density*. Journal of Computational Physics. 2012.
- [16] P. K. Sweby. *High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws*. SIAM Journal on Numerical Analysis. 1984

Anexos

A Tensor de dispersión

En la ecuación (6) del capítulo 2, \mathbf{K} representa el tensor de dispersión del soluto transportado en el fluido. Este es evaluado considerando difusión molecular, difusión turbulenta y dispersión por gradiente de velocidades:

- **Difusión molecular.**

Cuando se introduce un soluto en un fluido en reposo, éste sufre un proceso de dilución. Dicho proceso se describe con la Ley de Fick [6] en 3D:

$$\mathbf{J}_d = -\mathbf{D}_m \cdot \nabla \phi \quad (39)$$

Donde ϕ es la concentración de soluto, \mathbf{J}_d es el flujo difusivo, y \mathbf{D}_m el tensor de difusión molecular. Es diagonal dado que la difusión molecular es un proceso isótropo:

$$\mathbf{D}_m = \begin{pmatrix} D_m & 0 & 0 \\ 0 & D_m & 0 \\ 0 & 0 & D_m \end{pmatrix} \quad (40)$$

Si el fluido está en movimiento, producirá un transporte por arrastre de la sustancia. Así, denotando \mathbf{J}_a al flujo advectivo y \mathbf{u} al vector velocidad $\bar{\mathbf{u}} = (u, v, w)$, se puede expresar:

$$\mathbf{J}_a = \phi \mathbf{u} \quad (41)$$

Por lo que se puede expresar el flujo másico como:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_d = \phi \mathbf{u} - \mathbf{D}_m \nabla \phi \quad (42)$$

Aplicando la ecuación de conservación de la masa, podemos expresar la ecuación del transporte de una sustancia soluble como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u} \phi) = \nabla(\mathbf{D}_m \nabla \phi) \quad (43)$$

- **Difusión turbulenta.**

La mayoría de flujos existentes son de carácter turbulento. Existe en ese caso una variación aleatoria de las magnitudes características que definen el problema, como pueden ser velocidad y concentración. Reynolds propuso descomponer en esta situación cualquier variable del flujo en su valor medio más la fluctuación [6]. Tomando una variable genérica a :

$$a = \bar{a} + a' \quad (44)$$

Donde a' representa la fluctuación, y \bar{a} la media temporal, definida como:

$$\bar{a} = \frac{1}{T} \int_0^T a dt \quad (45)$$

Donde T es el período de promediado, pequeño en la escala de tiempos del flujo medio pero grande comparado con las fluctuaciones turbulentas. Por definición, la media de la fluctuación es cero, pero no así la media de su cuadrado [6]:

$$\overline{a'} = \frac{1}{T} \int_0^T (a - \bar{a}) dt = \bar{a} - \bar{a} = 0 \quad (46)$$

$$\overline{a'^2} = \frac{1}{T} \int_0^T a'^2 dt \neq 0 \quad (47)$$

Esto implica que tampoco la media del producto entre fluctuaciones de magnitudes correlacionadas sea cero ($\overline{a'b'} \neq 0$), lo que conlleva un transporte neto de momento en las ecuaciones del movimiento (esfuerzos turbulentos) [8]. Si ahora lo aplicamos al vector velocidad y a la concentración:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \\ \phi &= \bar{\phi} + \phi' \end{aligned} \quad (48)$$

Sustituyendo \mathbf{u} y ϕ en (43) obtenemos:

$$\frac{\partial(\bar{\phi} + \phi')}{\partial t} + \nabla((\bar{\phi} + \phi')(\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}')) = \nabla(\mathbf{D}_m \nabla(\bar{\phi} + \phi')) \quad (49)$$

Finalmente, teniendo en cuenta (46) y (47):

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \nabla(\bar{\phi} \bar{\mathbf{u}}) + \nabla(\phi' \bar{\mathbf{u}}') = \nabla(\mathbf{D}_m \nabla \bar{\phi}) \quad (50)$$

Expresando la difusión en flujos turbulentos de la misma forma que la Ley de Fick [6], es posible definir $\overline{\phi' \mathbf{u}'}$ como:

$$\overline{\phi' \mathbf{u}'} = -\mathbf{D}_t \nabla \bar{\phi} \quad (51)$$

Donde \mathbf{D}_t es el tensor de difusión turbulenta.

Por lo tanto, podemos expresar (50) como:

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \nabla(\overline{\phi \mathbf{u}}) = \nabla((\mathbf{D}_m + \mathbf{D}_t) \nabla \bar{\phi}) \quad (52)$$

■ Difusión por gradiente de velocidades.

Considerando un problema en el que la dimensión transversal es menor que la longitudinal, supuesto válido para muchos cauces naturales, al dejar pasar el suficiente tiempo es posible

afirmar que un soluto en suspensión se habrá mezclado completamente en la dirección vertical, por lo que se puede promediar la formulación en la vertical [1].

Así, se aproximan $\bar{\mathbf{u}}$ y $\bar{\phi}$ como la suma de su valor medio en la vertical \mathbf{U} y Φ más la variación sobre ese valor \mathbf{u}'' y ϕ'' :

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{U} + \mathbf{u}'' \quad \bar{\phi} = \Phi + \phi'' \quad (53)$$

Donde se define \mathbf{U} y Φ como:

$$\mathbf{U} = \frac{1}{h} \int_0^h \bar{\mathbf{u}} dz \quad \Phi = \frac{1}{h} \int_0^h \bar{\phi} dz \quad (54)$$

Si introducimos (54) en (52) obtenemos [1]:

$$\frac{\partial(h\Phi)}{\partial t} + \nabla(\Phi h \mathbf{U}) + \nabla \left(\int_0^h \mathbf{u}'' \phi'' dz \right) = \nabla((\mathbf{D}_m + \mathbf{D}_t) \nabla \Phi) \quad (55)$$

Donde el tercer término, representa el efecto del gradiente vertical del campo de velocidades. Este se puede representar como:

$$- \int_0^h \mathbf{u}'' \phi'' dz = h \mathbf{D}_v \nabla \Phi \quad (56)$$

En el que \mathbf{D}_v , denominado dispersión, introduce un efecto similar al de difusión turbulenta. Finalmente, podemos expresar la ecuación del transporte promediada en la vertical sustituyendo en (55), para obtener:

$$\frac{\partial(h\Phi)}{\partial t} + \nabla(\Phi h \mathbf{U}) = \nabla(h(\mathbf{D}_m + \mathbf{D}_t + \mathbf{D}_v) \nabla \Phi) \quad (57)$$

Donde el tensor suma $\mathbf{D}_m + \mathbf{D}_t + \mathbf{D}_v$ es conocido como tensor de dispersión, el cual denotamos por \mathbf{K} .

En el caso del tensor de difusión molecular, los valores que toman sus coeficientes está entre $0,5 \cdot 10^{-9}$ y $2 \cdot 10^{-9} m^2/s$ que, como se verá, son varios órdenes de magnitud inferiores a los aportados por la difusión turbulenta y dispersión por gradiente de velocidades, de ahí que generalmente en problemas en los que existe turbulencia, éstos se desprecien [6]. Para el tensor de difusión turbulenta tenemos que:

$$\mathbf{D}_t = \begin{pmatrix} D_{txx} & D_{txy} \\ D_{tyx} & D_{tyy} \end{pmatrix} \quad (58)$$

Sin embargo, en los casos en los que la dirección del flujo coincide con los ejes, las componentes de fuera de la diagonal se anularán, permitiendo así evaluar el tensor con dos coeficientes:

$$\mathbf{D}_{t_d} = \begin{pmatrix} D_{txx} & 0 \\ 0 & D_{tyy} \end{pmatrix}_{x'y'} \quad (59)$$

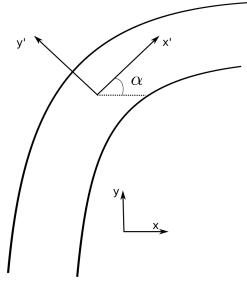


Figura 12: Coordenadas del flujo $x'y'$

Donde $x'y'$ denotan los ejes de coordenadas coincidentes con la dirección del flujo

De esta forma, se puede denotar D_{txx} como término longitudinal (D_{tL}) y D_{tyy} como término transversal (D_{tT}). No obstante, dada la naturaleza anisótropa de la turbulencia, rara vez encontraremos esta situación por lo que, para resolver este problema, se introduce una matriz rotación que hará enfocar la matriz diagonal en cada punto del dominio en la dirección en la que se mueve el flujo:

$$\mathbf{D}_t = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{tL} & 0 \\ 0 & D_{tT} \end{pmatrix}_{x'y'} \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{txx} & D_{txy} \\ D_{tyx} & D_{tyy} \end{pmatrix} \quad (60)$$

Siendo α el ángulo que forma la dirección del flujo con el eje de abscisas en el sistema cartesiano (Figura 12). Así calculamos los coeficientes del tensor dispersión como:

$$\begin{aligned} D_{txx} &= D_{tL} \cos^2(\alpha) + D_{tT} \sin^2(\alpha) \\ D_{txy} &= D_{tyx} = (D_{tL} - D_{tT}) \sin(\alpha) \cos(\alpha) \\ D_{tyy} &= D_{tL} \sin^2(\alpha) + D_{tT} \cos^2(\alpha) \end{aligned} \quad (61)$$

De esta forma se obtiene una matriz de dispersión \mathbf{D}_t cuyos coeficientes se calculan a partir de D_{tL} y D_{tT} :

$$\mathbf{D}_t = \begin{pmatrix} D_{tL} & 0 \\ 0 & D_{tT} \end{pmatrix} \quad (62)$$

Este tensor viene determinado por la fricción del flujo sobre los contornos rígidos, y ha sido formulado en muchos casos con leyes semiempíricas como las dadas en [9] y [1] :

$$D_{tL} = 0,23u^*h \quad D_{tT} = 0,15u^*h \quad (63)$$

Donde u^* representa una nueva magnitud llamada velocidad de fricción por tener estas dimensiones, aunque no es realmente una velocidad de flujo. Se define mediante la denominada Ley de la Pared [8] donde, por análisis dimensional, se relaciona el esfuerzo en la pared (denotados como τ_p) con ρ de la forma:

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_p}{\rho}} \quad (64)$$

En problemas 1D.

La extensión del cálculo a dos dimensiones puede hacerse de distintas formas:

a) Estimación del módulo de la velocidad de fricción

$$|u^*| = \sqrt{\rho g h |S_f|} = n \sqrt{g \frac{u^2 + v^2}{h^{1/3}}} \quad (65)$$

b) Estimación de las componentes de la velocidad de fricción

$$u^* = \sqrt{\rho g h S_{fx}} = n \sqrt{g \frac{u \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}}} \quad (66)$$

$$v^* = \sqrt{\rho g h S_{fy}} = n \sqrt{g \frac{v \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}}} \quad (67)$$

Las velocidades de fricción dadas en (65), (66) y (67) determinan la forma del modelo de dispersión utilizado.

Para obtener el tensor de dispersión por gradiente de velocidades, en primer lugar tomamos las mismas coordenadas definidas para el tensor de turbulencia tras la rotación de los ejes. Así, por definición la única componente no nula del vector velocidad será en la dirección x . Por lo que el tensor quedará de la forma:

$$\mathbf{D}_v = \begin{pmatrix} D_{v_L} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (68)$$

Siendo evaluado de la forma [1]:

$$D_{v_L} = 5,86 u^* h \quad (69)$$

Con un valor mucho más elevado que el coeficiente de difusión turbulenta D_{t_L} . Con esto podemos expresar el tensor de dispersión \mathbf{K} como:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} D_{t_L} + D_{v_L} & 0 \\ 0 & D_{t_T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_L & 0 \\ 0 & K_T \end{pmatrix} \quad (70)$$

Donde $K_L = D_{t_L} + D_{v_L}$ y $K_T = D_{t_T}$.

Así, finalmente es posible expresar la ecuación del transporte (4) de la forma:

$$\frac{\partial(h\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(hu\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(hv\phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_L \frac{h\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_T \frac{h\partial\phi}{\partial y} \right) \quad (71)$$

Donde llamamos coeficiente dispersión longitudinal a K_L y coeficiente de dispersión transversal a K_T .

B Esquema numérico

El sistema 4×4 de ecuaciones en derivadas parciales (ecuación (5) del capítulo 2) puede resolverse de manera conjunta o bien desacoplarse para su resolución numérica en un sistema 3×3 que resuelva el flujo y una ecuación adicional que resuelva el comportamiento del soluto que es transportado y difundido en el agua. Para este trabajo se opta por la segunda opción. Aunque pueda parecer obvio y natural, el desacoplamiento de las ecuaciones se tiene que hacer cuidadosamente para garantizar su correcta resolución.

Como se ha mencionado en el capítulo 2 de este trabajo, las ecuaciones ((1) (2) (3)) de dicho capítulo representan las leyes de conservación escritas como un sistema, y dicho sistema se puede escribir en forma conservativa como

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{U}) = \mathbf{S}(\mathbf{U}) \quad (72)$$

donde $\mathbf{E} = (\mathbf{F}, \mathbf{G})$, donde \mathbf{F} y \mathbf{G} representan las variables de forma agrupada ((6)).

En cada una de las celdas del dominio se resolverá el sistema (72), utilizando el método de volúmenes finitos [10], para calcular el valor de las variables (h , hu y hv) en el centro de la celda. Para ello se integra la ecuación (72) sobre un volumen fijo Ω :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{U}(x, y) d\Omega + \oint_{\partial\Omega} \mathbf{E} \mathbf{n} dl = \int_{\Omega} \mathbf{S} d\Omega \quad (73)$$

donde $\partial\Omega$ y $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ son el contorno y el vector unitario normal al volumen Ω , respectivamente. Asumiendo una representación discreta de las variables conservadas; una formulación descentrada (*upwind*) unificada de los flujos y los términos fuente y una discretización explícita del término temporal, la ecuación (73) se puede escribir como:

$$A_i \frac{(\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n)}{\Delta t} + \sum_{k=1}^{NE} (\mathbf{E} \mathbf{n} - \bar{\mathbf{S}})_k^* l_k = 0 \quad (74)$$

donde NE es el número de celdas vecinas de la celda i ($NE=3$ en mallas triangulares) y A_i representa el área de dicha celda.

A través del uso de matrices Jacobianas aproximadas locales en cada pared de cálculo k (linealización de Roe) y sus valores y vectores propios ($\tilde{\lambda}$ y $\tilde{\mathbf{e}}$, respectivamente) se llega finalmente a la ecuación (75) que se resuelve en cada celda i [11]:

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{A_i} \sum_{k=1}^{NE} \sum_{m=1}^3 \left[(\tilde{\lambda}^{-} \tilde{\gamma} \tilde{\mathbf{e}})_k^m l_k \right]^n \quad (75)$$

donde l_k representa la longitud de la pared k y $\tilde{\gamma}_k$ expresa de manera compacta las contribuciones de flujos y términos fuente en la pared k . El significado de la expresión (75) es simple: las variables conservadas en cada celda i en el instante de tiempo siguiente $n+1$ dependen directamente del valor que tenían en el instante anterior de tiempo, n , y de las contribuciones provenientes de

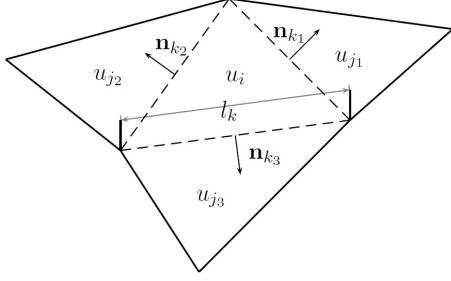


Figura 13: Boceto de aproximación volúmenes finitos 2D

las celdas colindantes a través de los lados, k , de la misma (ver Figura 13).

Por último, el paso de tiempo Δt se calcula de forma dinámica como en (9) del capítulo 2 :

$$\Delta t = \text{CFL} \min_{k,m} \frac{\delta x_k}{\tilde{\lambda}_k^m} \quad 0 \leq \text{CFL} \leq 1 \quad (76)$$

donde

$$\delta x_k = \min(\chi_i, \chi_j) \quad \chi_i = \frac{A_i}{\max_{k=1,NE} l_k} \quad (77)$$

siendo i y j las celdas que comparten la pared k .

En ((9)) se observa que cuanto mayor es el área de la celda, mayor es el paso de tiempo, es decir, el proceso de cálculo es más rápido si las celdas son más grandes. Sin embargo, la generación de celdas de gran tamaño conlleva la pérdida de precisión de la información, ya que, al ser un método de primer orden, en cada celda se calcula un valor para una variable que será constante en toda ella. De modo que una celda con una gran área podría no captar bien la variación de calado, de velocidad o incluso de topografía que podría existir en la misma. Por esta razón la elección del tamaño de celda es de gran importancia a la hora de su generación, siempre buscando un compromiso entre precisión y velocidad de cálculo.

B.1 Resolución de la ecuación de transporte

Como se ha comentado en la sección 2.2 de este trabajo, se desacopla la ecuación del transporte del soluto definiendo un único flujo numérico q^\downarrow , relacionado con la linealización de Roe. Con ésto se definen un esquema numérico de primer y segundo orden.

B.1.1 Esquema de primer orden

Al proyectar el problema en la dirección normal de la pared k que separa las celdas i y j , el flujo numérico q_k^\downarrow se define como:

$$q_k^\downarrow = q_i + \sum_{m=1}^3 \left(\tilde{\lambda}^- \tilde{\gamma} \tilde{e}_1 \right)_k^m \quad (78)$$

donde $q_i = (h\mathbf{u}\mathbf{n})_i$. El esquema numérico para la ecuación de transporte definida en la ecuación 11 del capítulo 2 se escribe como:

$$(h\phi)_i^{n+1} = (h\phi)_i^n - \frac{\Delta t}{A_i} \sum_{k=1}^{N_E} (q\phi)_k^\downarrow l_k \quad (79)$$

donde:

$$\phi_k^\downarrow = \begin{cases} \phi_i & \text{if } q_k^\downarrow > 0 \\ \phi_j & \text{if } q_k^\downarrow < 0 \end{cases} \quad (80)$$

Desde un punto de vista físico, la nueva masa de soluto en la celda se puede ver como el intercambio de volúmenes de agua con cierta concentración a través de las paredes vecinas y la mezcla de ellas (método de volumen finito de Godunov) con la masa existente en el instante previo. Con ésto, las celdas de contorno de salida requieren un tratamiento especial para aplicar esta técnica. Como el concepto de flujo numérico se ha recuperado para la ecuación de transporte de solutos, es necesario definir un flujo numérico también en la pared de contorno de salida con el fin de asegurar la conservación de la masa de soluto. Como se muestra, la formulación se reduce al cálculo de un flujo numérico q^\downarrow utilizando los valores promediados ya calculados en cada pared de la parte hidrodinámica. Además de garantizar una perfecta conservación y una solución acotada y no oscilatoria [15], este discretización disminuye sustancialmente el número de cálculos que serían necesarios para el sistema acoplado completo.

Este método de soluciones finitas se reduce a la discretización *upwind* clásica en diferencias finitas en 1D (capítulo 2).

B.1.2 Esquema de segundo orden

También vamos a utilizar un esquema de segundo orden, basado en la aproximación MUSCL-Hancock (ver Van Leer [13]). A partir de la formulación del esquema de primer orden, se toma un algoritmo de dos pasos para obtener mejor precisión. En primer lugar, la solución en cada celda i está linealmente reconstruida utilizando los vectores gradiente \mathbf{L}_i y la información proporcionada por las tres celdas vecinas j_1 , j_2 y j_3 (véase la figura 13)

$$\mathbf{L}_i = \mathbf{J} \begin{pmatrix} u_{j_2} - u_{j_1} \\ u_{j_3} - u_{j_1} \end{pmatrix} \quad (81)$$

donde

$$\mathbf{J} = \frac{1}{(x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1)} \begin{pmatrix} y_3 - y_1 & -y_2 + y_1 \\ -x_3 + x_1 & x_2 - x_1 \end{pmatrix} \quad (82)$$

y (x_1, y_1) , (x_2, y_2) y (x_3, y_3) son el el centro de coordenadas de las celdas j_1 , j_2 y j_3 respectivamente. Las pendientes limitadas $\bar{\mathbf{L}}_i$ se obtienen mediante el llamado limitador (Φ).

$$\bar{\mathbf{L}}_i = \min_{k=1,2,3} \Phi \mathbf{L}_i \quad (83)$$

En este trabajo, se usa el limitador propuesto por Sweby [16]:

$$\Phi(r) = \max[0, \min(\beta r, 1), \min(r, \beta)] \quad 1 \leq \beta \leq 2 \quad (84)$$

Por lo tanto, es posible obtener los valores en los bordes de acuerdo a la limitación de las pendientes y la posición de los vectores \mathbf{r} desde el punto medio M de la pared de la celda p al centro de la celda i de la siguiente forma:

$$u_{Ip} = u_i + r_{iM} \bar{\mathbf{L}}_i \quad (85)$$

La figura 14 muestra un esquema de las variables y la reconstrucción lineal para la aproximación MUSCL-Hancock.

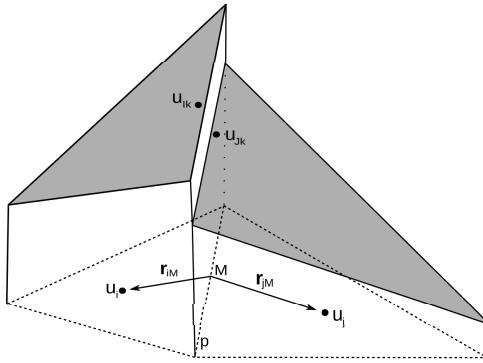


Figura 14: Reconstrucción MUSCL-Hancock

Así, para cada interfaz p entre i y j , las cantidades u_{Ip} y u_{Jp} pueden ser definidas representando una interpolación adecuada para cada borde de las celdas i y j respectivamente. Una vez que los valores son reconstruidos para cada interfaz asegurando que

$$\min(u_i, u_j) \leq u_{Ip}, u_{Jp} \leq \max(u_i, u_j) \quad (86)$$

Se requiere un paso intermedio entre el tiempo t^n y t^{n+1} para lograr un esquema preciso de segundo orden en el espacio y el tiempo en función de las contribuciones de las paredes de cada celda:

$$u_{Ip}^{n+1/2} = u_{Ip}^n - \frac{\Delta t}{2A_i} \sum_{k=1}^{N_E} (\delta \mathbf{qn})_{Ik,i}^n l_k \quad (87)$$

donde

$$\delta(\mathbf{qn})_{Ik,i} = (\mathbf{qn})_{Ik} - (\mathbf{qn})_i \quad (88)$$

Un segundo paso se calcula entonces, en relación con el flujo numérico ya mencionado q_k^\downarrow

$$(h\phi)_i^{n+1} = (h\phi)_i^n - \frac{\Delta t}{A_i} \sum_{k=1}^{N_E} (q\phi)_{IJ}^\downarrow l_k \quad (89)$$

C Resultados del análisis de problemas lineales de convección

Se presenta en este anexo, un análisis cualitativo de la influencia de la malla y el orden del método de simulación en problemas lineales de convección, estudiado en el capítulo 3 de este trabajo.

C.1 Influencia de la Malla

Para mostrar la influencia de la malla se presenta la concentración inicial para las cuatro mallas, incluyendo también forma y tamaño de las celdas en la figura Figura 15.

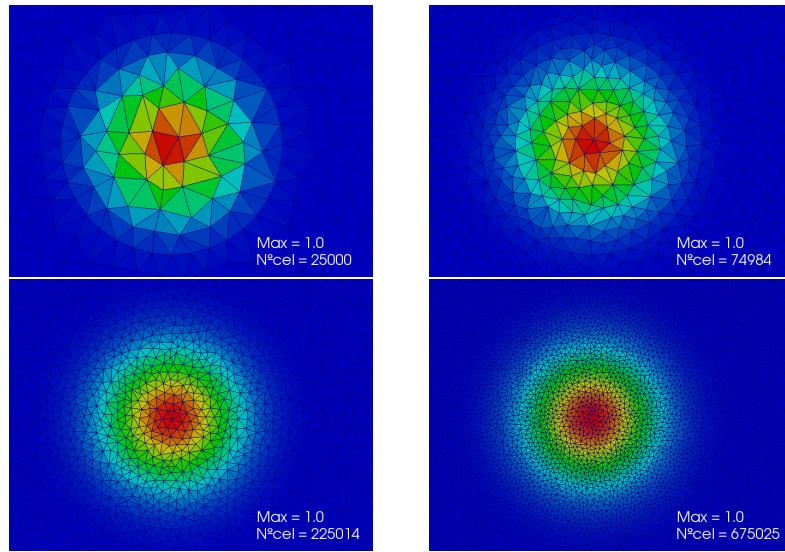


Figura 15: Número de celdas y concentración en $t=0s$

Los resultados obtenidos en la posición final para el primer orden se muestran en la figura 16 :

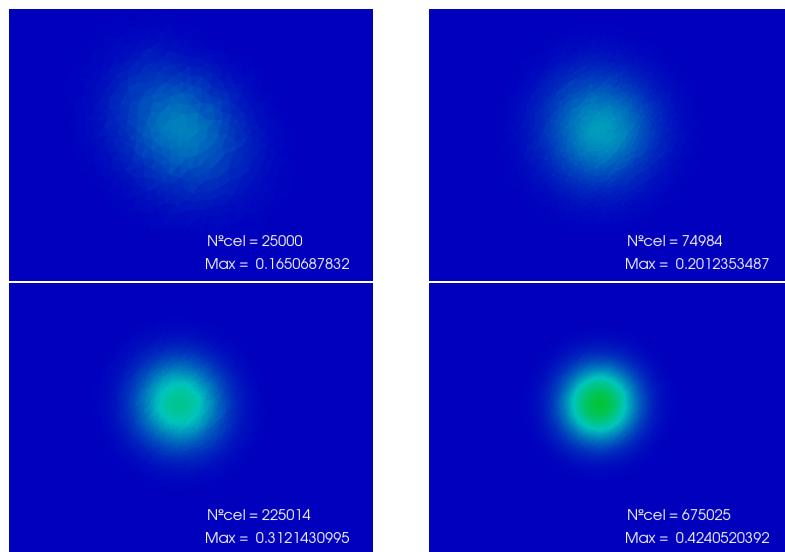


Figura 16: Perfil gaussiano en primer orden($t=150s$).

Se observa como al aumentar el número de celdas el resultado final se acerca más a la solución exacta, con lo que nos hace extraer como conclusión la necesidad de usar una malla lo suficientemente fina para evitar el error numérico, valorando la limitación de un número máximo de celdas para evitar que el tiempo de simulación aumente en exceso en comparación con la mejora introducida.

C.2 Influencia del orden de simulación

Para el análisis de la influencia del orden del método de simulación se muestran en las figuras (17) (18) (19) (20) los perfiles de concentración en el instante final en primer y segundo orden junto con la solución exacta:

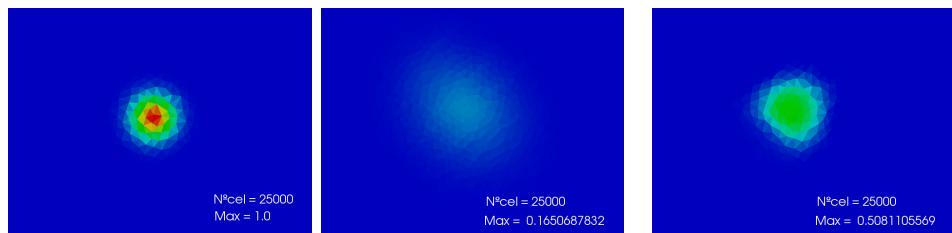


Figura 17: Malla 25000. Solución exacta, primer y segundo orden en $t=150s$.

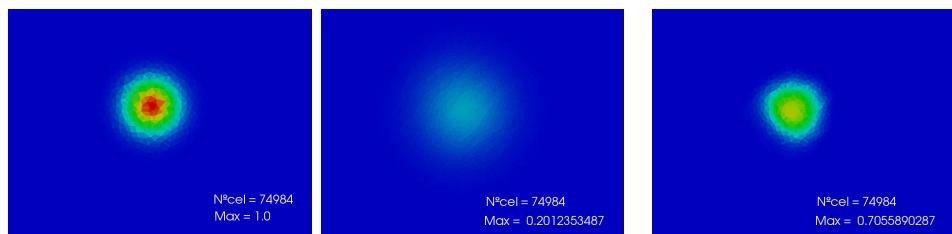


Figura 18: Malla 74984. Solución exacta, primer y segundo orden en $t=150s$.

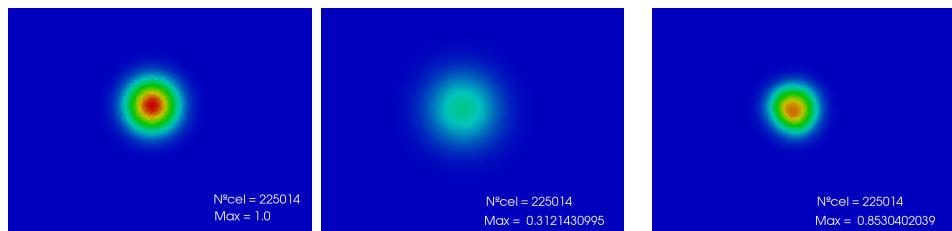


Figura 19: Malla 225014. Solución exacta, primer y segundo orden en $t=150s$.

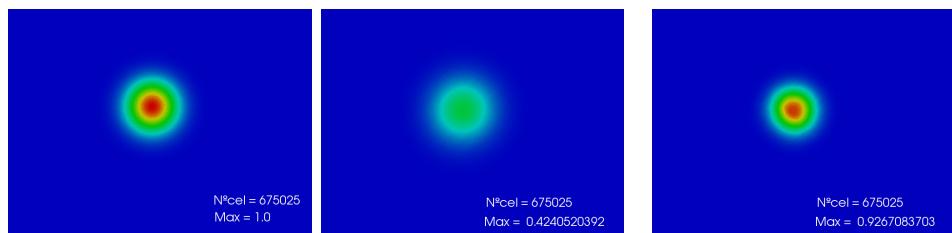


Figura 20: Malla 675025. Solución exacta, primer y segundo orden en $t=150s$.

A partir de las figuras 17 , 18 , 19 y 20 se observa como al usar un modelo de segundo orden en la simulación, los resultados se acercan mucho más a la solución exacta, por lo que usando este modelo la dispersión numérica introducida es mucho menor.

Por último se incorporan los gráficos con la forma del perfil en el instante final para cada una de las mallas en primer y segundo orden junto con la solución exacta (Figuras:21, 22, 23 y 24), donde se observa tal vez con más claridad la influencia del orden de precisión y el tamaño de la malla:

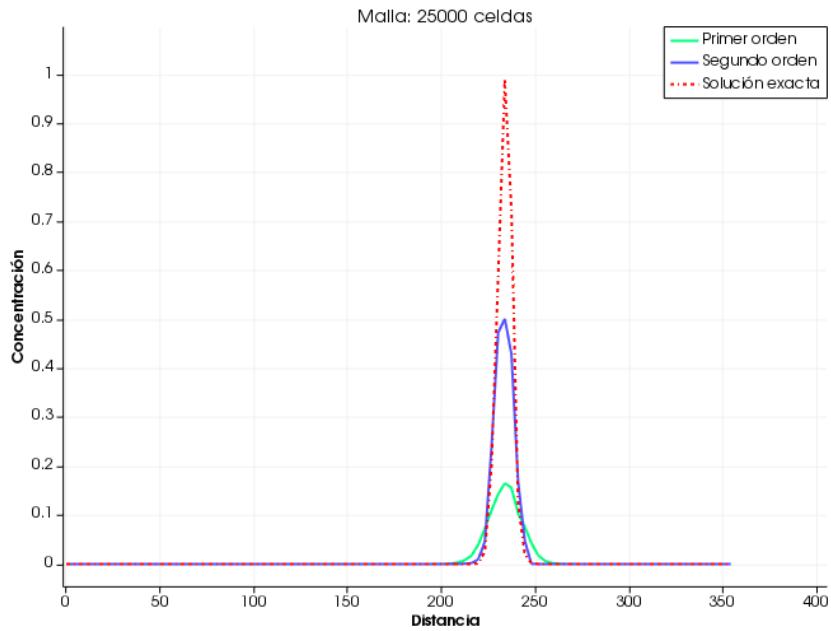


Figura 21: Perfil en $t=150s$ en primer y segundo orden malla 25000.

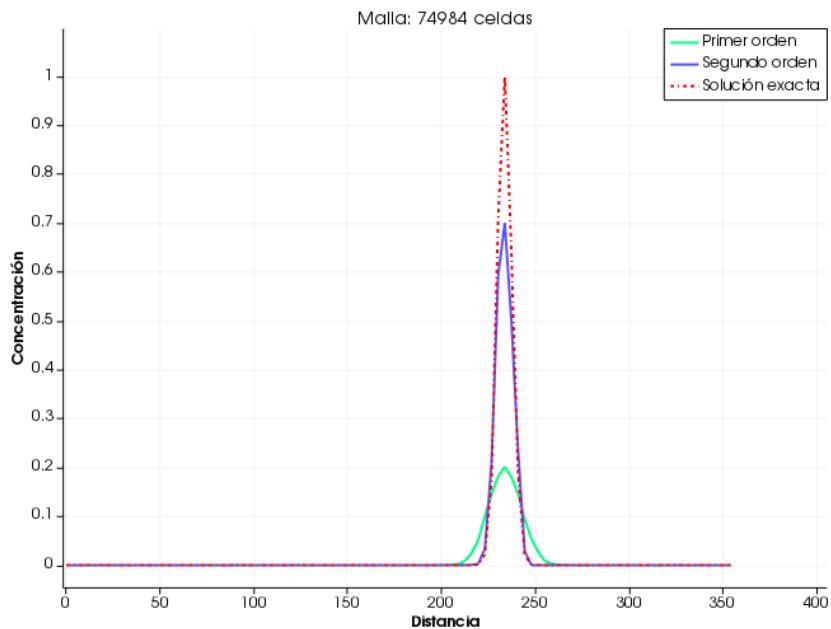


Figura 22: Perfil en $t=150s$ en primer y segundo orden malla 74984.

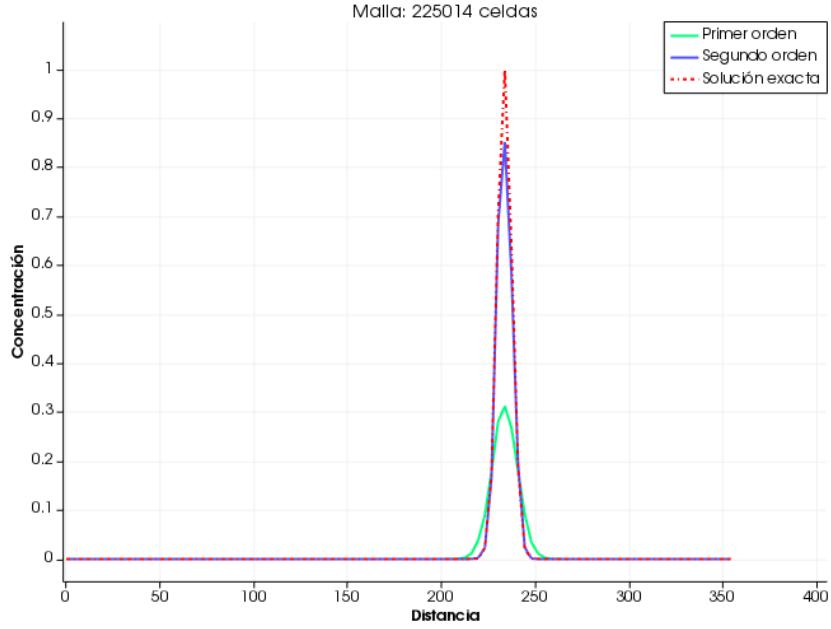


Figura 23: Perfil en $t=150s$ en primer y segundo orden malla 225014.

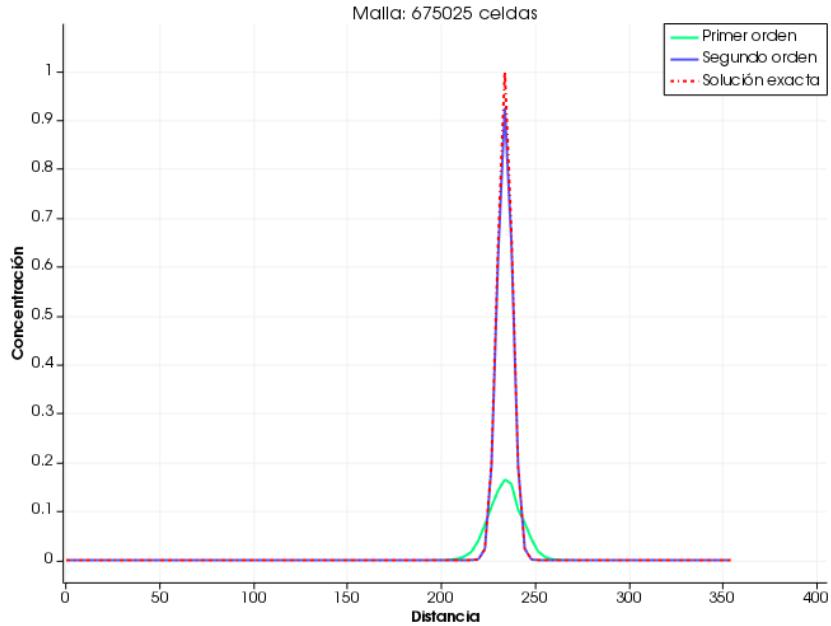


Figura 24: Perfil en $t=150s$ en primer y segundo orden malla 675025.

En (21), (22), (23) y (24) se puede observar como la elección del orden de precisión es aún más influyente que la finura de la malla en el resultado final. Por ejemplo en la malla con 675025 celdas en segundo orden la mejora introducida es pequeña respecto a la malla con 225014 celdas, por lo que cabe esperar que un aumento de celdas aún mayor no tendrá la eficiencia requerida en la mejora de la solución respecto al tiempo empleado en realizarla.

Se incorporan en la tabla 9 los valores de concentración máxima para cada una de las simula-

ciones, donde se observa con claridad la mejora de los resultados al aumentar la finura de la malla y, de forma aún más apreciable, al aumentar el orden de precisión, dado que la concentración máxima es 1.0 para la solución exacta.

Celdas	Máximo(1ºorden)	Máximo(2ºorden)	Solución exacta
25000	0.165	0.508	1.0
74984	0.201	0.706	1.0
225014	0.312	0.853	1.0
675025	0.424	0.927	1.0

Tabla 9: Concentraciones máximas en t=150 s

En definitiva, como se ha comentado en el capítulo 3 de este trabajo, existe la necesidad de usar una malla con la mayor finura posible y un segundo orden en el método de simulación para minimizar el error numérico introducido.

D Resultados del análisis en problemas lineales de convección-difusión

En este anexo se puede consultar el análisis cualitativo realizado para problemas lineales de convección-difusión correspondiente al capítulo 4 de este trabajo.

D.1 Corrección a la difusión

El perfil de concentración inicial para este análisis corresponde a una función delta de Dirac. Al liberar una cantidad de masa constante en una sola celda, la concentración inicial para cada malla es completamente diferente. Ésto se observa en la figura 25:

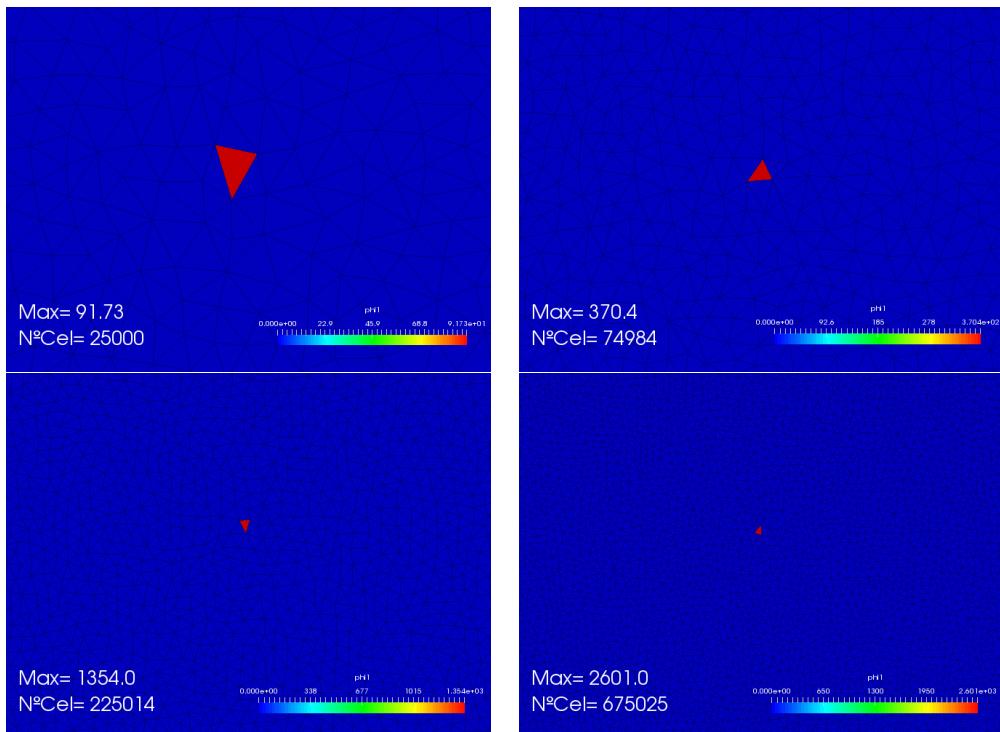


Figura 25: Concentración inicial con diferentes escalas para cada malla

Los resultados del análisis sin corrección a la difusión numérica se presentan en las [26](#), [27](#), [28](#), y [29](#):

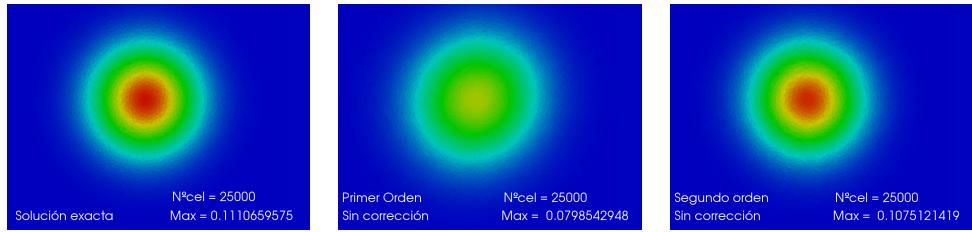


Figura 26: Malla 25000. Sol.exact. (izquierda), 1^{er} orden (centro) y 2º orden (derecha) en t=150s sin corrección.

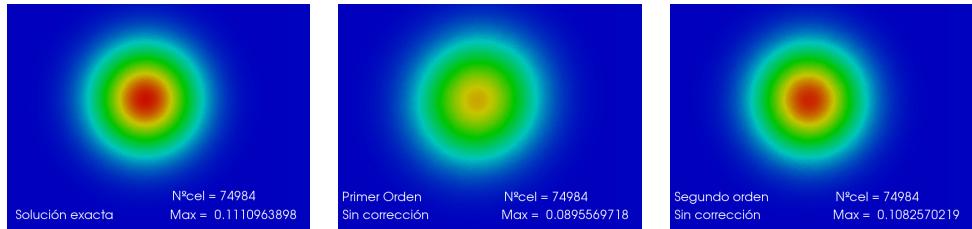


Figura 27: Malla 74984. Sol.exact. (izquierda), 1^{er} orden (centro) y 2º orden (derecha) en t=150s sin corrección.



Figura 28: Malla 225014. Sol.exact. (izquierda), 1^{er} orden (centro) y 2º orden (derecha) en t=150s sin corrección.

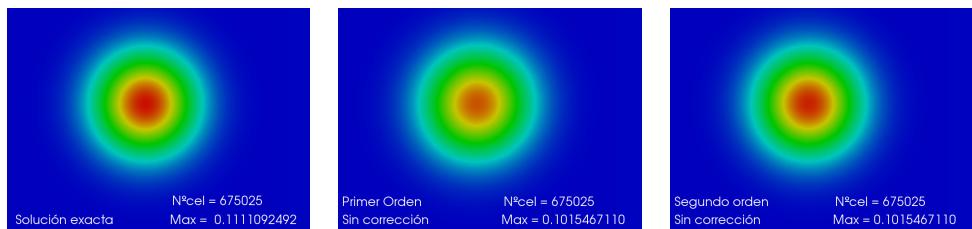


Figura 29: Malla 675025. Sol.exact. (izquierda), 1^{er} orden (centro) y 2º orden (derecha) en t=150s sin corrección.

Como se puede observar, el resultado para segundo orden es más cercano a la solución exacta que en el caso de primer orden, algo que se ha probado en este trabajo (Capítulo 3), algo que también se observa si se compara el resultado del perfil de concentración de la solución exacta con el de las simulaciones realizadas en primer y segundo orden en cada malla en el instante final (Figura:30):

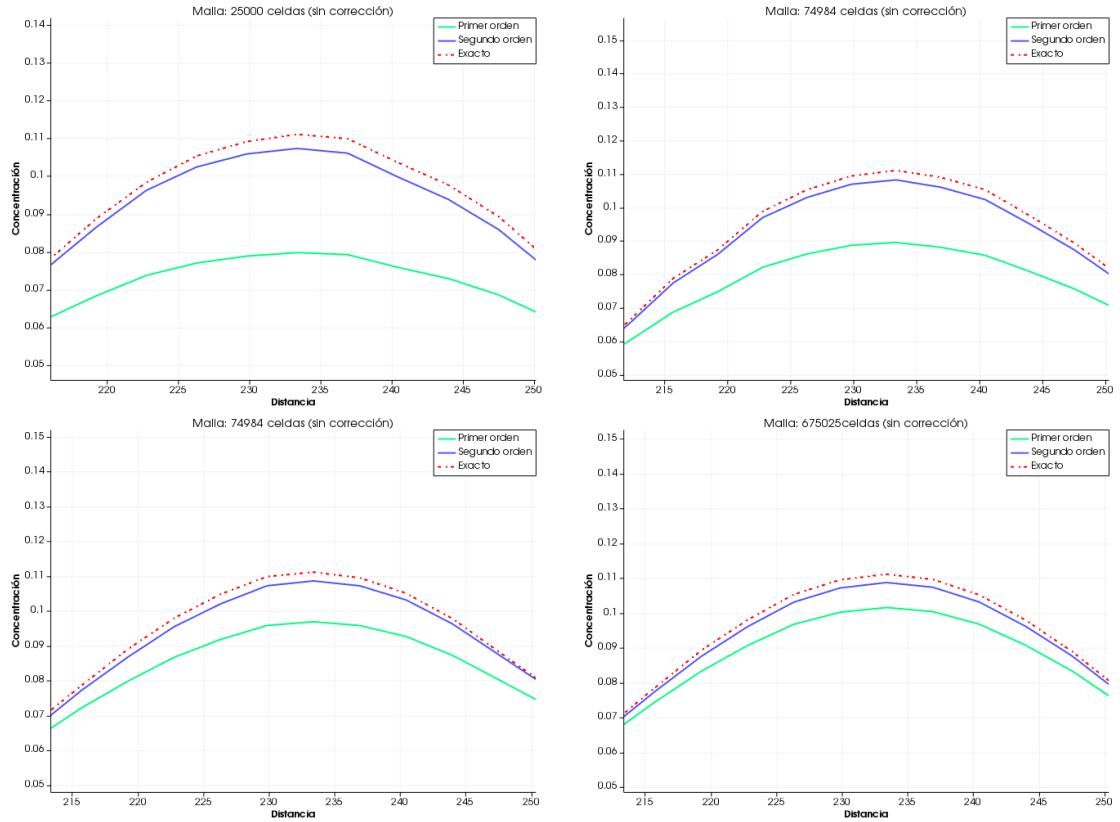


Figura 30: Perfil en $t=150s$ en primer y segundo orden para cada malla sin corrección.

De igual forma y usando la misma escala de concentración, se ha realizado el análisis para las cuatro mallas introduciendo el análisis a la corrección a la difusión numérica. Los resultados obtenidos se presentan en las figuras 31, 32, 33, 34 y 35:

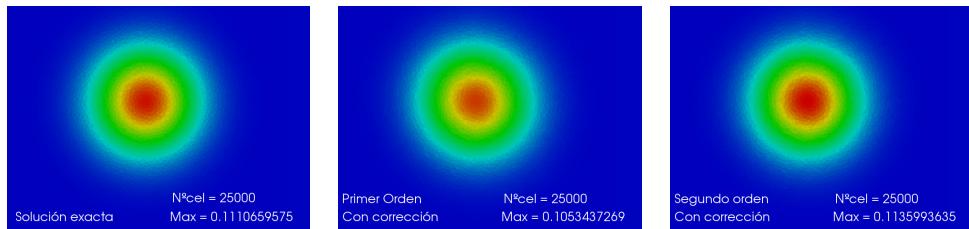


Figura 31: Malla 25000. Sol.exact. (izquierda), 1^{er} orden (centro) y 2º orden (derecha) $t=150s$ con corrección.

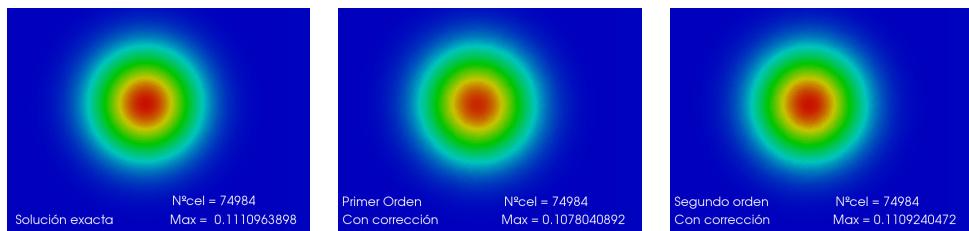


Figura 32: Malla 74984. Sol.exact. (izquierda), 1^{er} orden (centro) y 2º orden (derecha) en $t=150s$ con corrección.

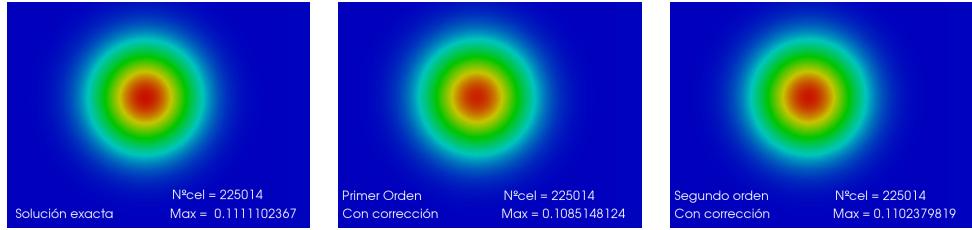


Figura 33: Malla 225014. Sol.exact. (izquierda), 1^{er} orden (centro) y 2º orden (derecha) en t=150s con corrección.

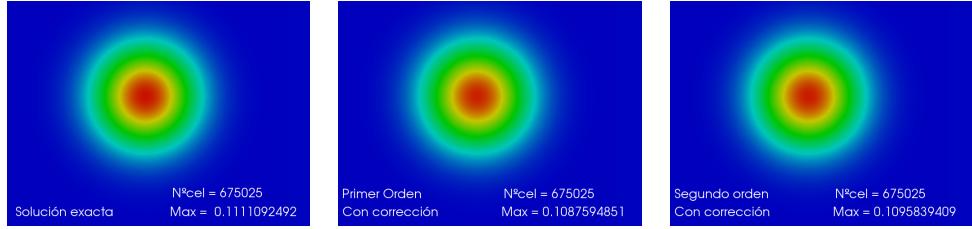


Figura 34: Malla 675025. Sol.exact.(izquierda), 1^{er} orden (centro) y 2º orden (derecha) en t=150s con corrección.

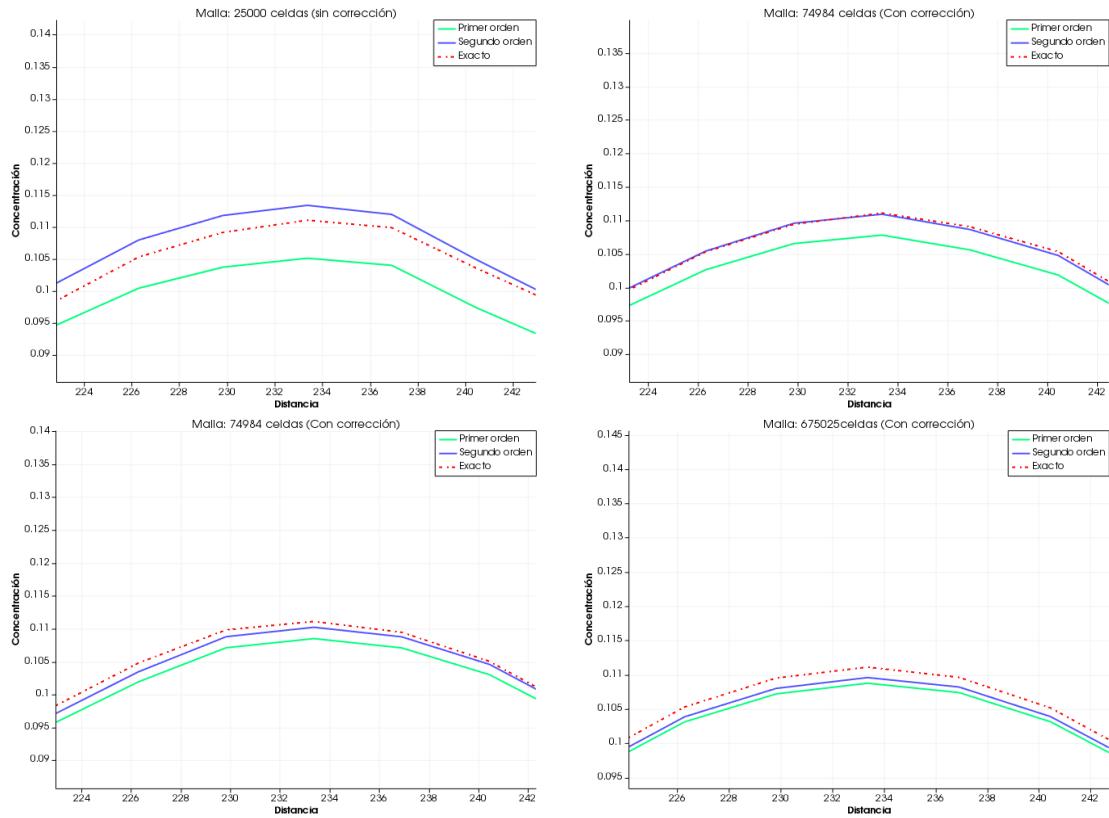


Figura 35: Perfil en t=150s en primer y segundo orden para cada malla con corrección.

Como se ha comentado en la sección 4.2 de este trabajo, el hecho de usar el método de la corrección a la difusión numérica, introduce una mejora considerable en los resultados, siendo ésta más notable en las simulaciones en primer orden de simulación, donde el error numérico es mayor.

D.2 Influencia de los coeficientes de difusión

En primer lugar se ha usado una matriz de difusión física de carácter diagonal isótropa ($K_L = K_T$) con distintos valores, con la intención de observar la influencia de la magnitud de ésta sobre la simulación.

Para ello se ha usado la malla que presenta mayor finura (675025 celdas), y usando un segundo orden en el método de simulación. Los resultados obtenidos se presentan en la figura (36):

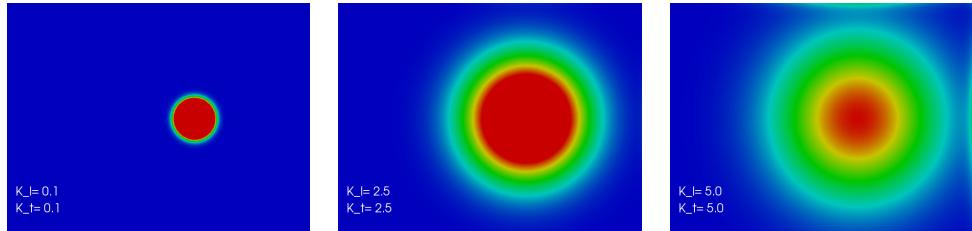


Figura 36: Difusión isótropa para distintos valores de K_L y K_T en $t=150s$.

En el primer caso de (36) se han usado $K_L = K_T = 0,1$, para observar como en el caso en el que apenas existe difusión física, el resultado obtenido se asemeja a los casos en los que solo tenemos dispersión de carácter numérico. Al aumentar la presencia de difusión física, se aprecia como la dispersión en el resultado aumenta de forma considerable.

Cuando difusión física no es isótropa, existe una diferencia entre la dispersión longitudinal y transversal. La realización de estas simulaciones tiene la intención de visualizar como influye este hecho en el resultado obtenido.

En primer lugar se han realizado tres simulaciones en las que existe una dispersión mayor en la dirección en la que se desplaza la concentración que en la dirección transversal. Los resultados se presentan en la figura (37):

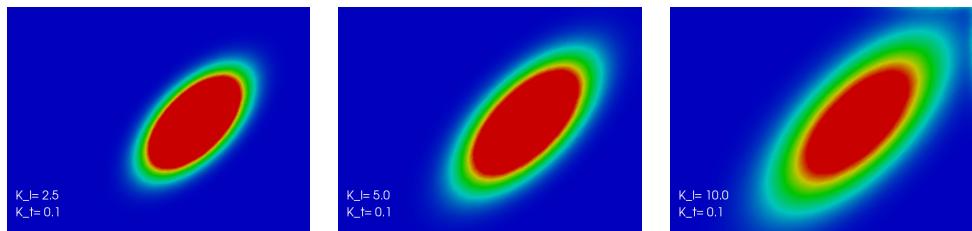


Figura 37: Difusión anisótropa con mayor dispersión longitudinal en $t=150s$.

Los valores usados han sido $(K_L = 2,5; K_T = 0,1)$, $(K_L = 5,0; K_T = 0,1)$ y $(K_L = 10,0; K_T = 0,1)$ respectivamente.

Por último, se han realizado estas mismas simulaciones intercambiando K_L y K_T , es decir, usando unos valores para la dispersión transversal mayores que en la dispersión longitudinal. Los resultados de las simulaciones se pueden observar la figura (38):

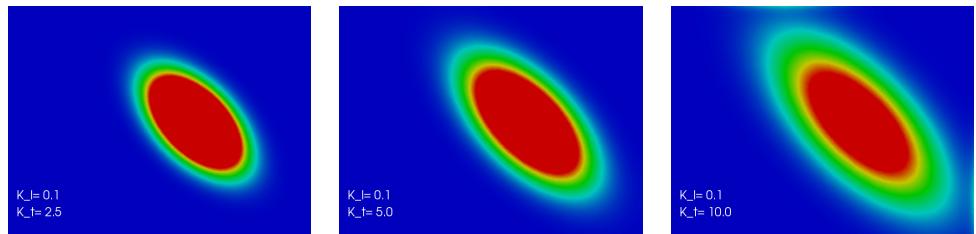


Figura 38: Difusión anisótropa con mayor dispersión transversal en $t=150s$.

Tanto con la figura (37) como en (38) se observa la gran influencia que tiene en la simulación el hecho de tomar una dispersión física de carácter anisótropo. Estas diferencias tienen gran importancia en la realización de modelos de dispersión de contaminantes en agua, pues son pocos los casos reales en los que existe una dispersión física de carácter isótropo.

E Resultados del análisis del transporte en flujo de lámina libre transitorio

E.1 Análisis de resultados para los casos 2, 3 y 4

Caso 2

Para el caso 2 los resultados del error en las simulaciones para el modelo anisótropo estándar y velocidad de fricción direccional se presentan en las tablas (10) y (11) respectivamente:

$\epsilon_L \backslash \epsilon_T$	0.03	0.07	0.11	0.15	0.19	0.23	0.27
1.01	4.361e-2	4.231e-2	4.123e-2	4.031e-2	3.952e-2	3.884e-2	3.825e-2
2.65	3.697e-2	3.632e-2	3.578e-2	3.534e-2	3.497e-2	3.465e-2	3.437e-2
4.29	3.408e-2	3.373e-2	3.343e-2	3.318e-2	3.297e-2	3.278e-2	3.262e-2
5.93	3.247e-2	3.226e-2	3.209e-2	3.195e-2	3.184e-2	3.176e-2	3.169e-2
7.57	3.152e-2	3.143e-2	3.137e-2	3.134e-2	3.132e-2	3.132e-2	3.135e-2
9.2	3.110e-2	3.112e-2	3.115e-2	3.120e-2	3.127e-2	3.134e-2	3.143e-2
10.85	3.111e-2	3.121e-2	3.131e-2	3.142e-2	3.154e-2	3.166e-2	3.178e-2

Tabla 10: Error del modelo anisótropo estándar experimento 2

$\bar{\epsilon}$	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
Error	3.85e-2	3.35e-2	3.18e-2	3.15e-2	3.19e-2	3.25e-2
$\bar{\epsilon}$	7.0	8.0	9.0	10.0	11.0	-
Error	3.33e-2	3.41e-2	3.49e-2	3.58e-2	3.67e-2	-

Tabla 11: Error del modelo de velocidad de fricción direccional 2.

En (39) se representa el error de las simulaciones usando escala de colores:

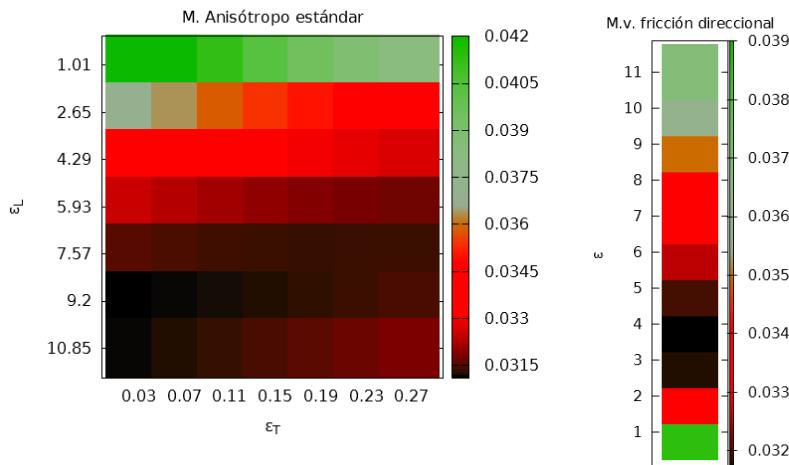


Figura 39: Error en las simulaciones del caso 2.

Observamos que para el modelo anisótropo estándar, la simulación donde el error ha sido mínimo se da para los valores $\epsilon_L = 9,2$ y $\epsilon_T = 0,03$.

Esto nos indica que la dispersión transversal ha sido sobreestimada, tal y como ha ocurrido en el caso 1. Sin embargo para la longitudinal en este caso, también se ha obtenido un valor más elevado que el de la bibliografía. Esto nos indica, que los valores estimados para la dispersión longitudinal dados en ([1]) no se ajustan completamente a este experimento. Ello puede ser debido a la forma en la que el soluto se introduce en el canal, ya que para este experimento, el calado de la cubeta es el doble que el calado en el canal lo que hace que en este caso, el flujo no penetre inicialmente en la cubeta, y sea el soluto quien invade el canal en los primeros instantes.

Para el modelo de fricción direccional el error mínimo se ha obtenido para $\bar{\epsilon} = 4,0$. El error obtenido de nuevo está en el mismo orden que el cometido con el modelo anisótropo estándar, lo que nos indica que la estimación de $\bar{\epsilon}$ ha sido adecuada. Aún así, de nuevo se obtienen valores de los errores muy diferentes según el coeficiente de dispersión.

Siguiendo el mismo procedimiento que el caso 1, se ha realizado un análisis de sensibilidad a los valores del error respecto a los coeficientes usando (38).

En este caso, en el modelo anisótropo estándar, para realizar el análisis coeficiente de dispersión transversal ϵ_T , se ha fijado el coeficiente de dispersión longitudinal en $\epsilon_L = 9,2$. De la misma forma pero fijando $\epsilon_T = 0,3$, se ha realizado el análisis sobre ϵ_L . Los resultados se presentan en la tabla (12):

ξ_T	0.0005	0.0025	0.0054	0.0088	0.0126	0.0169
ξ_L	-0.184	-0.172	-0.151	-0.122	-0.068	0.002

Tabla 12: Caso2. Sensibilidad a los coeficientes en el modelo anisótropo estándar.

Para el modelo de velocidad de fricción direccional obtenemos los valores de la tabla (13):

ξ_ϵ	-0.210	-0.132	-0.0264	0.052	0.107	0.147	0.182	0.213	0.240	0.261
----------------	--------	--------	---------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

Tabla 13: Caso2. Sensibilidad a los coeficientes en el modelo velocidad de fricción direccional.

En uno y otro caso, observamos la misma tendencia que en el caso 1. El error es más sensible a los cambios de los coeficientes de dispersión a medida que nos acercamos al valor donde el error es mínimo.

Para el caso 2, en el análisis cualitativo del error cometido, se presentan el perfil de concentración a su paso por la zona de medida para los dos modelos de dispersión, en la simulación donde el error ha sido mínimo:

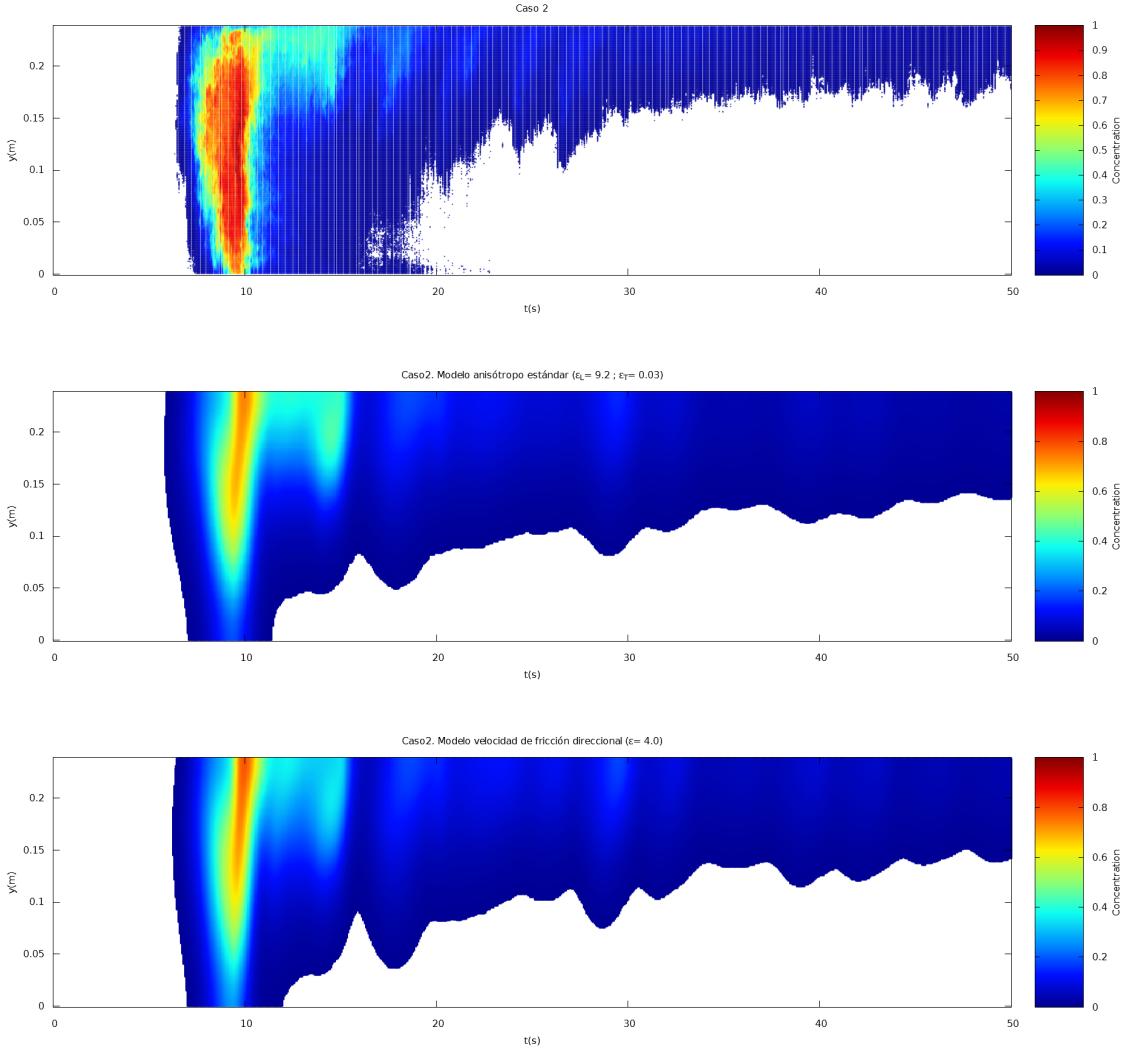


Figura 40: Experimento 2. Evolución temporal de la distribución de la concentración, promediada en la vertical, en la sección de medida. Datos experimentales (arriba), modelo anisótropo estándar (centro) y velocidad de fricción direccional (abajo)

En la figura (40) se observa como los resultados de las simulaciones se acercan a los valores experimentales, aunque no de forma tan precisa como sucedía en el caso 1. También se puede observar, como para las simulaciones se ha tomado la dispersión transversal demasiado elevada, ya que en el experimento, el perfil de concentración al llegar a la sección de media es mayor que en el caso de las simulaciones para los dos modelos.

Aún así, si se representan los resultados en las simulaciones donde el error es mayor por tomar valores de coeficientes tanto demasiado bajos como demasiado altos, se observa que el error cometido está dentro del rango esperado. Para el modelo anisótropo estándar los valores donde el error ha sido mayor se ha dado para $\epsilon_L = 1,01; \epsilon_T = 0,03$ y $\epsilon_L = 10,85; \epsilon_T = 0,27$, mientras que en el modelo de velocidad de fricción direccional se ha dado para $\bar{\epsilon} = 1,0$ y $\bar{\epsilon} = 11,0$. Esto lo podemos observar en la figura (41):

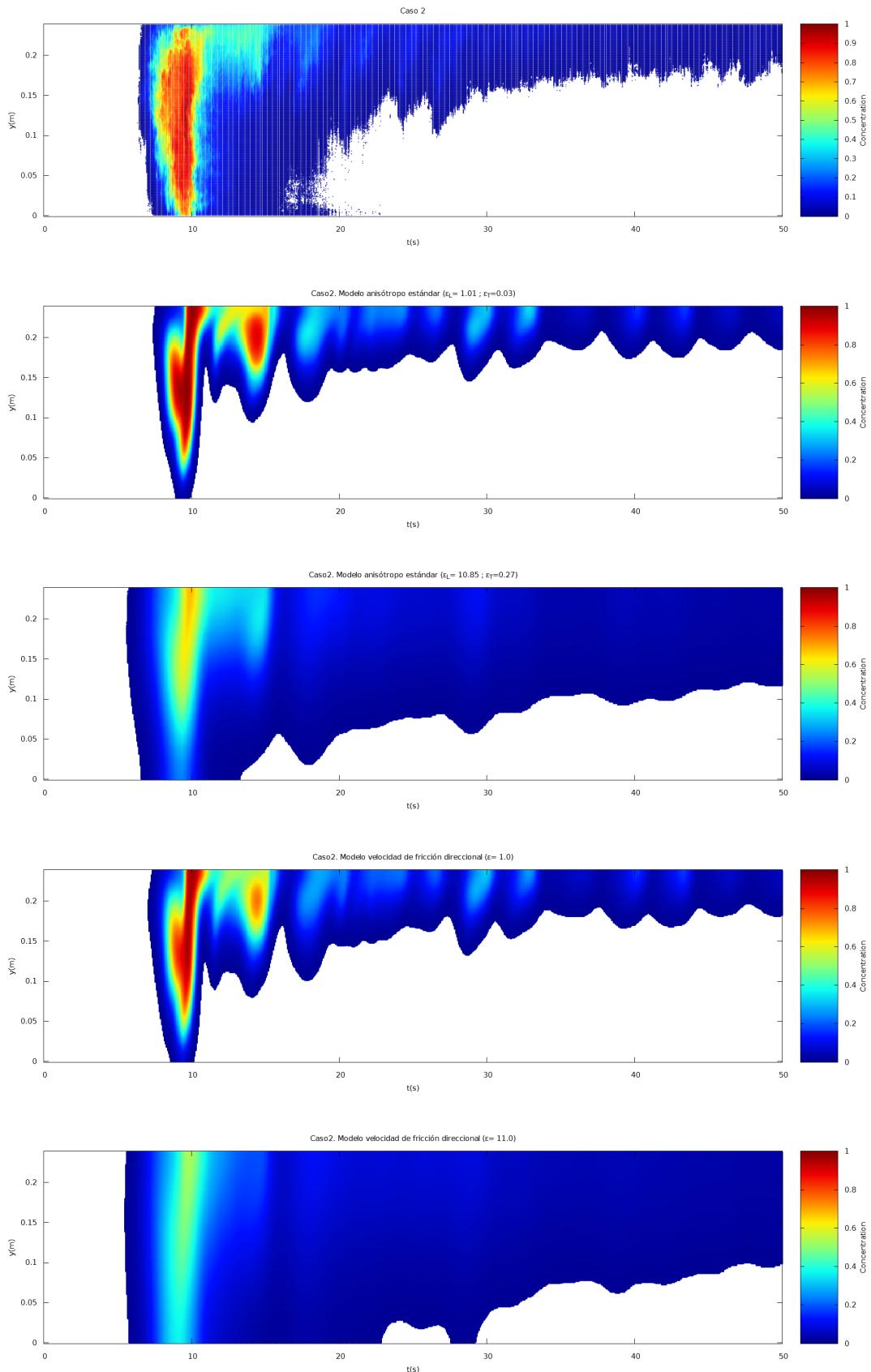


Figura 41: Experimento 2. Evolución temporal de la distribución de la concentración, promediada en la vertical, en la sección de medida. Datos experimentales y simulaciones con mayor error para cada modelo

Por último se adjunta la figura 42 donde se observa la simulación con el modelo anisótropo estándar en los instantes $t = 1, 2, 3$ y 4 segundos, en el caso donde el error ha sido mínimo y a su vez, donde ha sido máximo:

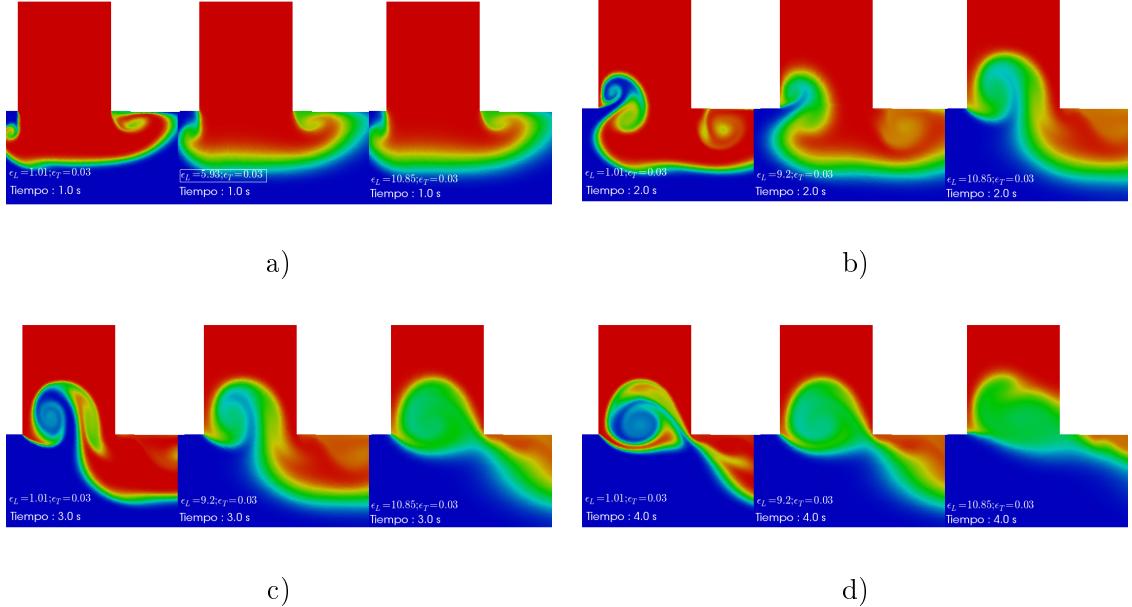


Figura 42: Caso 2. Distribución en el plano (x, y) de la concentración promedio vertical en distintos tiempos y usando distintos coeficientes de dispersión. Modelo anisótropo estándar. $t=1s$ (a), $t=2s$ (b), $t=3s$ (c) $t=4s$ (d) y de izquierda a derecha valores ϵ_L y ϵ_T

En esta figura, a diferencia de lo sucedido en el caso 1, se observa como el soluto contenido en la cubeta invade el canal, al ser inicialmente el calado de la cubeta el doble que el calado del canal. También se observa el efecto de los distintos valores de los coeficientes de dispersión desde los instantes iniciales de la simulación.

Caso 3

Para el caso 3, se presentan los resultados de errores en las tablas (14) y (15) para cada modelo de dispersión respectivamente:

$\epsilon_L \backslash \epsilon_T$	0.03	0.07	0.11	0.15	0.19	0.23	0.27
1.01	4.405e-2	4.210e-2	4.046e-2	3.905e-2	3.783e-2	3.679e-2	3.588e-2
2.65	3.474e-2	3.366e-2	3.279e-2	3.210e-2	3.154e-2	3.110e-2	3.075e-2
4.29	3.066e-2	3.018e-2	2.985e-2	2.961e-2	2.947e-2	2.939e-2	2.937e-2
5.93	2.910e-2	2.900e-2	2.900e-2	2.906e-2	2.917e-2	2.931e-2	2.948e-2
7.57	2.893e-2	2.908e-2	2.927e-2	2.949e-2	2.972e-2	2.997e-2	3.023e-2
9.2	2.951e-2	2.977e-2	3.005e-2	3.035e-2	3.065e-2	3.096e-2	3.128e-2
10.85	3.045e-2	3.077e-2	3.111e-2	3.145e-2	3.180e-2	3.215e-2	3.249e-2

Tabla 14: Error del modelo anisótropo estándar experimento 3

$\bar{\epsilon}$	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
Error	3.51e-2	2.93e-2	2.98e-2	3.21e-2	3.49e-2	3.75e-2
$\bar{\epsilon}$	7.0	8.0	9.0	10.0	11.0	-
Error	3.99e-2	4.21e-2	4.40e-2	4.56e-2	4.71e-2	-

Tabla 15: Error del modelo de velocidad de fricción direccional 3.

Para el modelo anisótropo estándar el error mínimo se ha dado en la simulación donde los coeficientes de dispersión han sido $\epsilon_L = 7,57$ y $\epsilon_T = 0,03$. Como se esperaba, tras observar los resultados anteriores, la dispersión transversal ha sido sobreestimada, mientras que la dispersión longitudinal en este caso se acerca al valor dado en la bibliografía.

Para el modelo de velocidad de fricción, la simulación con menor error viene dada al usar $\bar{\epsilon} = 2,0$. De nuevo el error está dentro del rango esperado, siendo similar al cometido por el modelo anisótropo estándar.

Al igual que en el resto de casos, podemos observar estos errores en la figura (43):

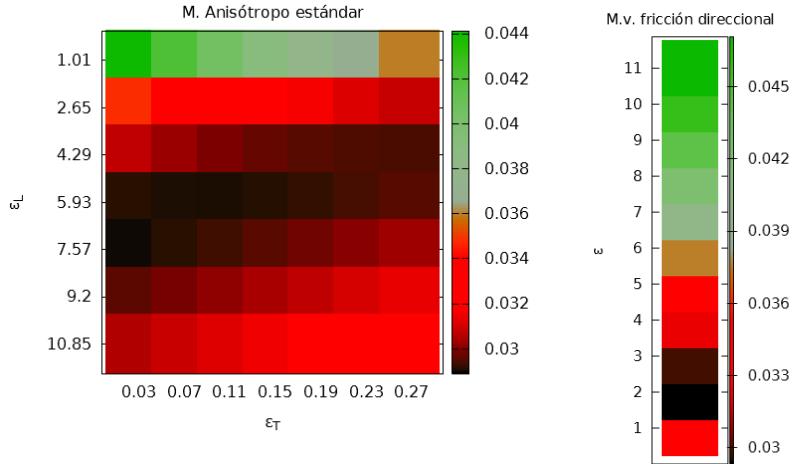


Figura 43: Error en las simulaciones del caso 3.

Para el análisis de sensibilidad, siguiendo (38), en el modelo anisótropo estándar se ha fijado $\epsilon_L = 7,57$ para estudiar la sensibilidad del error respecto de ϵ_T , y de igual forma se fija $\epsilon_T = 0,03$ para analizar la influencia de ϵ_L . Los resultados se dan en la tabla (16):

ξ_T	0.0064	0.0146	0.0239	0.0336	0.0436	0.0537
ξ_L	-0.264	-0.264	-0.163	-0.023	0.101	0.191

Tabla 16: Caso3. Sensibilidad a los coeficientes en el modelo anisótropo estándar.

Para el modelo de velocidad de fricción direccional se obtiene la sensibilidad de la tabla (17):

ξ_ϵ	-0.272	0.038	0.267	0.367	0.403	0.406	0.396	0.375	0.350	0.323
----------------	--------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

Tabla 17: Caso3. Sensibilidad a los coeficientes en el modelo velocidad de fricción direccional.

Observando las tablas (16) y (17) se tiene que la tendencia es la misma que en los casos anteriores, donde el error es más sensible a los coeficientes al acercarnos a los valores donde el error de la simulación es mínimo.

En el análisis cualitativo del error para el caso 3, se presenta la figura (44), donde se observan los datos experimentales y la simulación con menor error para cada modelo de dispersión:

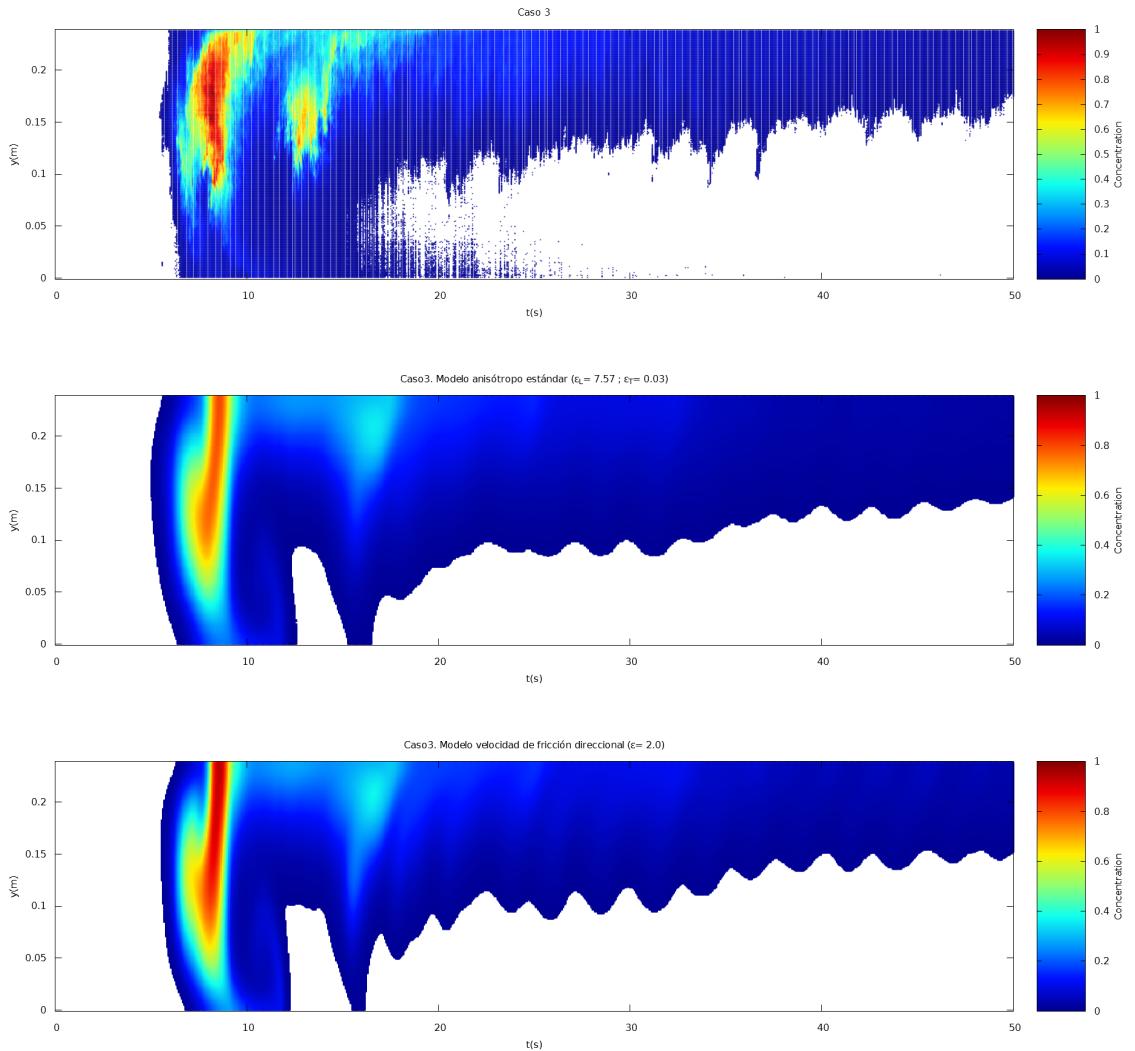


Figura 44: Experimento 3. Evolución temporal de la distribución de la concentración, promediada en la vertical, en la sección de medida. Datos experimentales (arriba), modelo anisótropo estándar (centro) y velocidad de fricción direccional (abajo)

Vemos que en este caso, el modelo anisótropo estándar se acerca más a los resultados experimentales que el modelo de velocidad de fricción direccional. También se observa, además del pico de contracción que llega inicialmente a la sección de medida, un segundo pico de concentración unos segundos después. Este pico es debido a la presencia del obstáculo colocado frente a la cubeta que contiene la concentración de soluto.

Se incorporan también los gráficos donde el error cometido ha sido mayor. En este caso con el modelo anisótropo estándar se ha dado para $\epsilon_L = 1,01; \epsilon_T = 0,03$ y $\epsilon_L = 10,85; \epsilon_T = 0,27$. Para el modelo de velocidad de fricción direccional, los peores resultados se han dado con $\bar{\epsilon} = 1,0$ y $\bar{\epsilon} = 11,0$. Estos resultados se presentan en la figura (45):

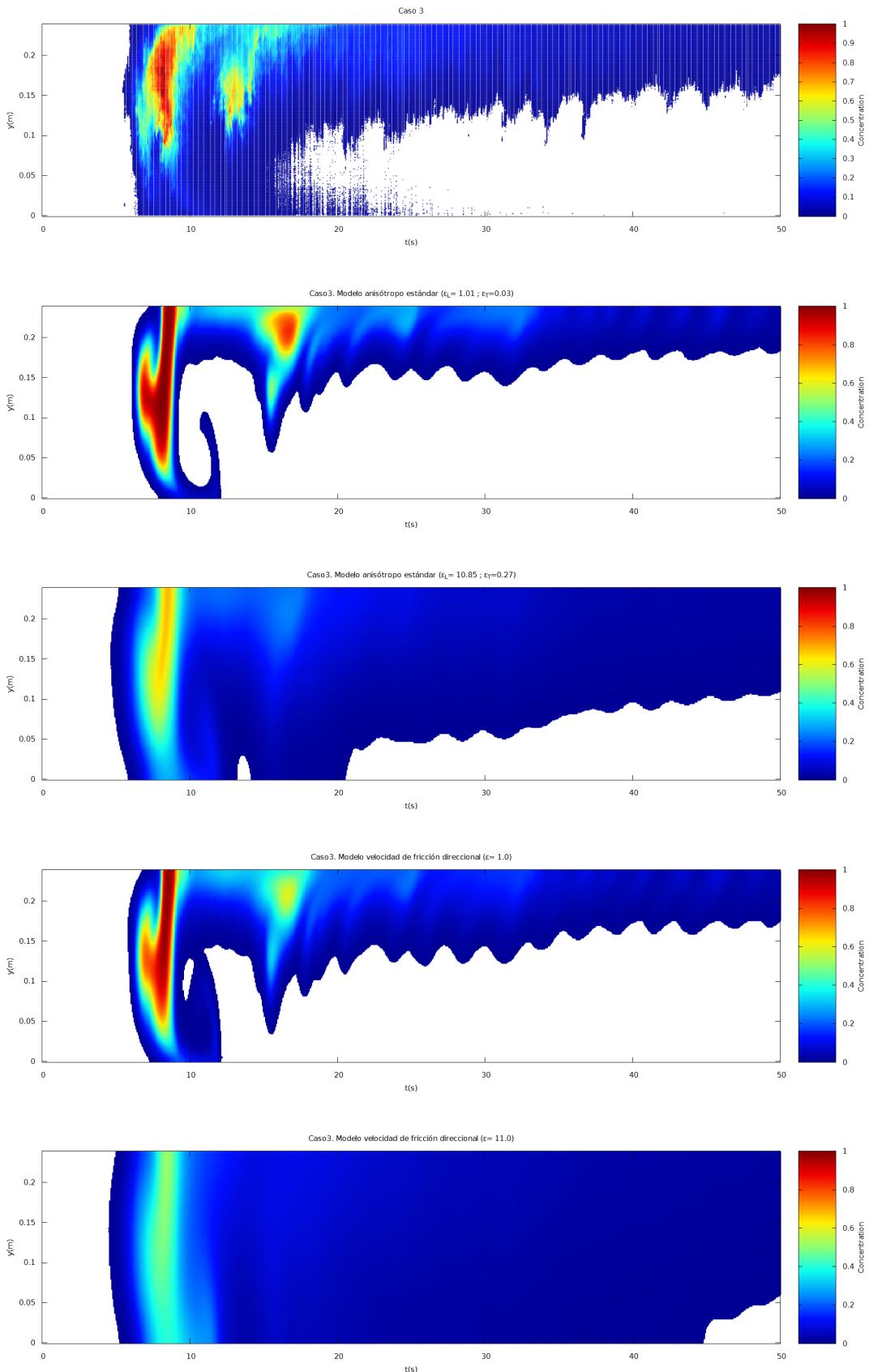


Figura 45: Experimento 3. Evolución temporal de la distribución de la concentración, promediada en la vertical, en la sección de medida. Datos experimentales y simulaciones con mayor error para cada modelo

Finalmente, se incorporan la figura (46) donde se observan los primeros instantes ($t = 1, 2, 3$ y 4 segundos) de la simulaciones donde el error ha sido mínimo y máximo para el modelo anisótropo estándar:

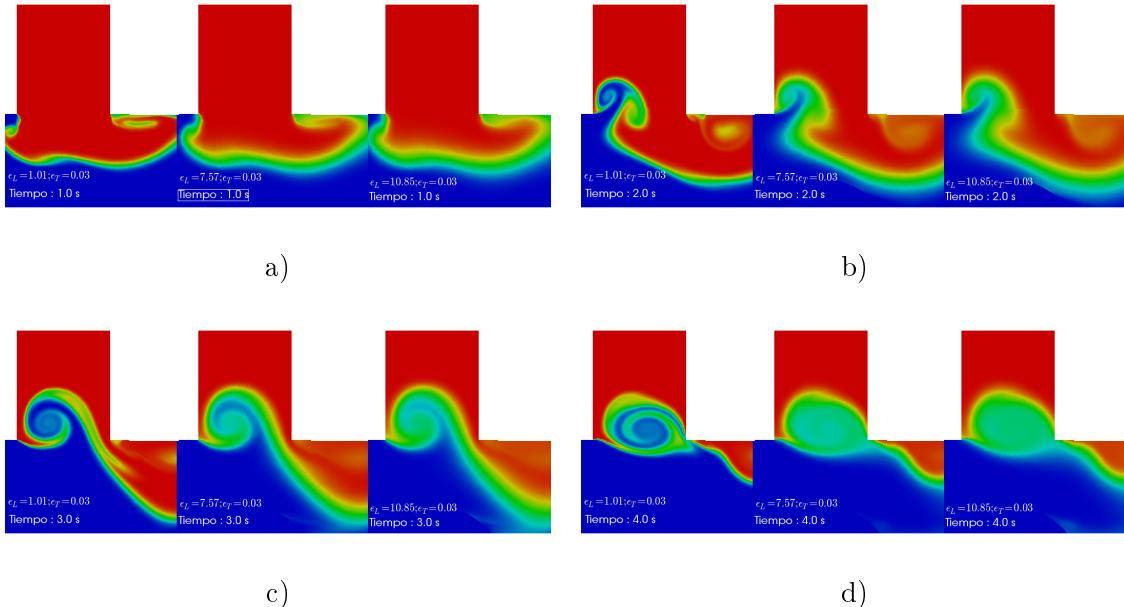


Figura 46: Caso 3. Distribución en el plano (x, y) de la concentración promedio vertical en distintos tiempos y usando distintos coeficientes de dispersión. Modelo anisótropo estándar. $t=1s$ (a), $t=2s$ (b), $t=3s$ (c) $t=4s$ (d) y de izquierda a derecha valores ϵ_L y ϵ_T

Caso 4

Finalmente se incorporan los resultados obtenidos para el caso 4:

$\epsilon_L \backslash \epsilon_T$	0.03	0.07	0.11	0.15	0.19	0.23	0.27
1.01	4.824e-2	4.676e-2	4.549e-2	4.439e-2	4.343e-2	4.258e-2	4.182e-2
2.65	4.065e-2	3.976e-2	3.900e-2	3.835e-2	3.779e-2	3.730e-2	3.688e-2
4.29	3.661e-2	3.609e-2	3.565e-2	3.529e-2	3.498e-2	3.472e-2	3.451e-2
5.93	3.425e-2	3.397e-2	3.375e-2	3.358e-2	3.345e-2	3.335e-2	3.328e-2
7.57	3.288e-2	3.276e-2	3.269e-2	3.265e-2	3.263e-2	3.263e-2	3.265e-2
9.2	3.210e-2	3.210e-2	3.213e-2	3.217e-2	3.223e-2	3.230e-2	3.238e-2
10.85	3.171e-2	3.179e-2	3.189e-2	3.200e-2	3.211e-2	3.223e-2	3.235e-2

Tabla 18: Error del modelo anisótropo estándar experimento 4

$\bar{\epsilon}$	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
Error	4.13e-2	3.54e-2	3.37e-2	3.35e-2	3.41e-2	3.49e-2
$\bar{\epsilon}$	7.0	8.0	9.0	10.0	11.0	-
Error	3.58e-2	3.68e-2	3.78e-2	3.87e-2	3.96e-2	-

Tabla 19: Error del modelo de velocidad de fricción direccional 4.

Usando el modelo anisótropo estándar, la simulación con menor error se ha dado con $\epsilon_L = 10,85$ y $\epsilon_T = 0,03$.

En este caso, al contar con un obstáculo frente a la cubeta que contiene al soluto, y otro previo a llegar a ésta colocado en el fondo, la aceleración del flujo en la zona de la compuerta aumenta, haciendo que el flujo sea supercrítico. Esto provoca, que el coeficiente de dispersión longitudinal con el que el error de la simulación es mínimo, es el mayor usado en las simulaciones. Esto valor está alejado del valor aportado por la bibliografía, lo cual se debe a que dichos coeficientes están estimados para flujos en ríos, donde no se considera la presencia de obstáculos que puedan hacer cambiar el flujo de forma tan brusca. Para la dispersión transversal ocurre lo mismo que en los casos anteriores, en la que se ha sobreestimado.

Para el modelo de velocidad de fricción direccional, el error mínimo lo aporta $\bar{\epsilon} = 4,0$, siendo el error del mismo orden que en el modelo anisótropo estándar.

Estos valores también se pueden observar en la siguiente figura:

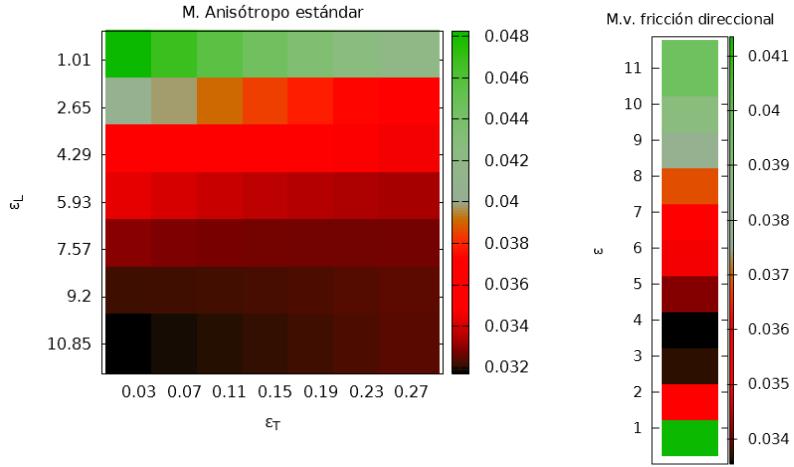


Figura 47: Error en las simulaciones del caso 4.

Para el análisis de sensibilidad en el modelo anisótropo estándar, se han fijado los valores en $\epsilon_L = 10,85$ y $\epsilon_T = 0,03$, para analizar la influencia de los coeficientes transversal y longitudinal respectivamente:

ξ_T	0.0032	0.0069	0.0109	0.0152	0.0197	0.0240
ξ_L	-0.191	-0.221	-0.207	-0.168	-0.122	-0.075

Tabla 20: Caso4. Sensibilidad a los coeficientes en el modelo anisótropo estándar.

La sensibilidad para el modelo de velocidad de fricción direccional se ha obtenido:

ξ_ϵ	-0.233	-0.125	-0.012	0.071	0.127	0.173	0.206	0.225	0.232
----------------	--------	--------	--------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

Tabla 21: Caso4. Sensibilidad a los coeficientes en el modelo velocidad de fricción direccional.

Se observa la misma tendencia que en los casos anteriores.

Por último, se incorpora la figura (48) donde se representa la concentración de soluto a su paso por la sección de medida, para los datos experimentales y para los resultados de la simulación donde el error obtenido ha sido menor:

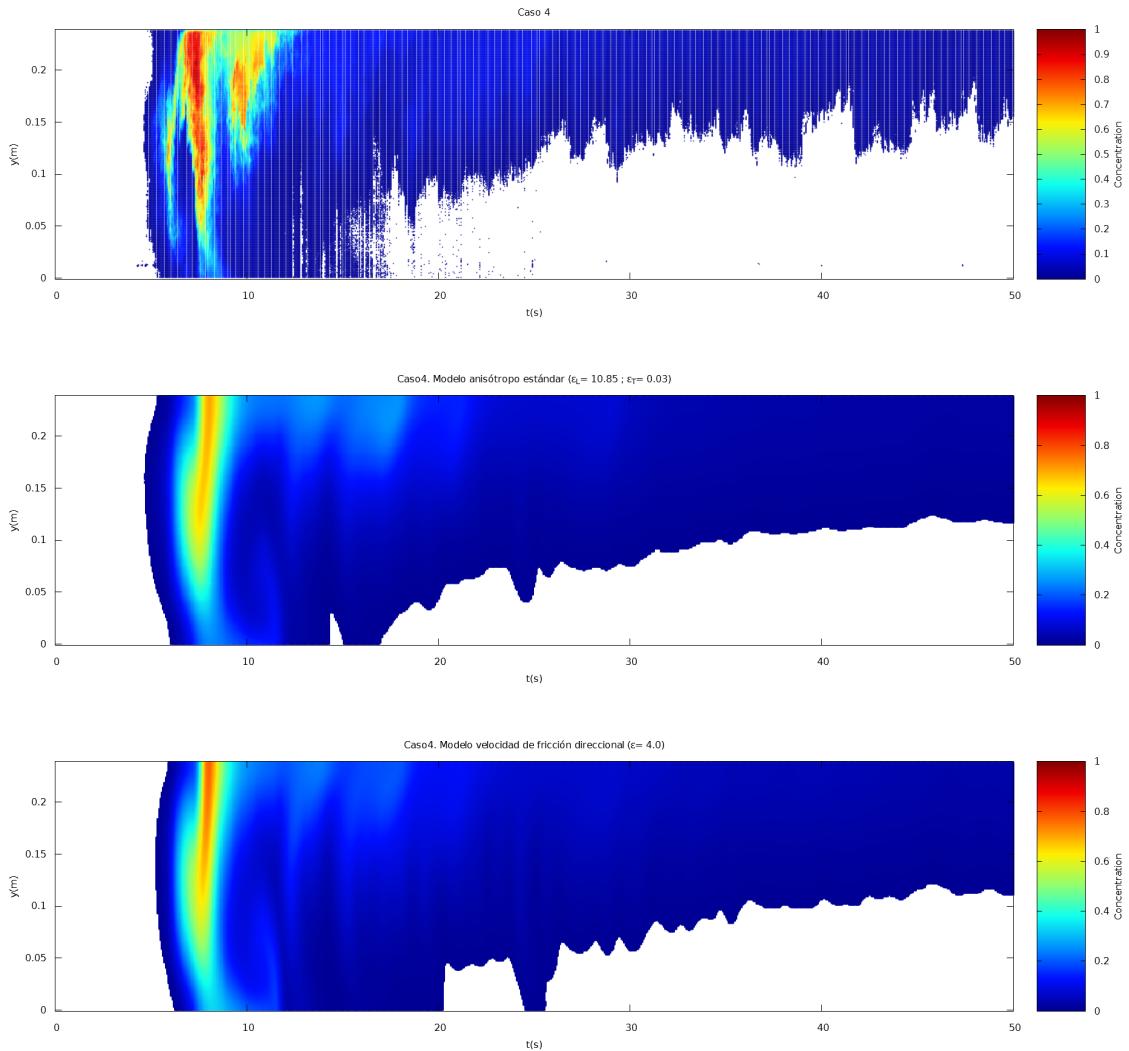


Figura 48: Experimento 4. Evolución temporal de la distribución de la concentración, promediada en la vertical, en la sección de medida. Datos experimentales (arriba), modelo anisótropo estándar (centro) y velocidad de fricción direccional (abajo)

Para los dos modelos de dispersión, el primer pico de concentración en pasar por la sección de medida es similar al obtenido en los datos experimentales. Sin embargo, en el experimento se observa un segundo pico de concentración que no queda reflejado de forma nítida en las simulaciones. Esto es debido a que para este caso se ha subestimado el peso de la dispersión longitudinal en la simulación, al contar con un flujo de carácter supercrítico en la zona de la compuerta donde el soluto es liberado.

Al igual que en los casos anteriores, se incorporan los resultados donde el error de la simulación ha sido mayor para cada uno de los modelos, $\epsilon_L = 1,01; \epsilon_T = 0,03$ y $\epsilon_L = 9,2; \epsilon_T = 0,27$ para el modelo anisótropo estándar, y $\bar{\epsilon} = 1,0$ y $\bar{\epsilon} = 11,0$ para el de velocidad de fricción direccional, en comparación con los resultados experimentales. Esto lo podemos observar en la figura (49):

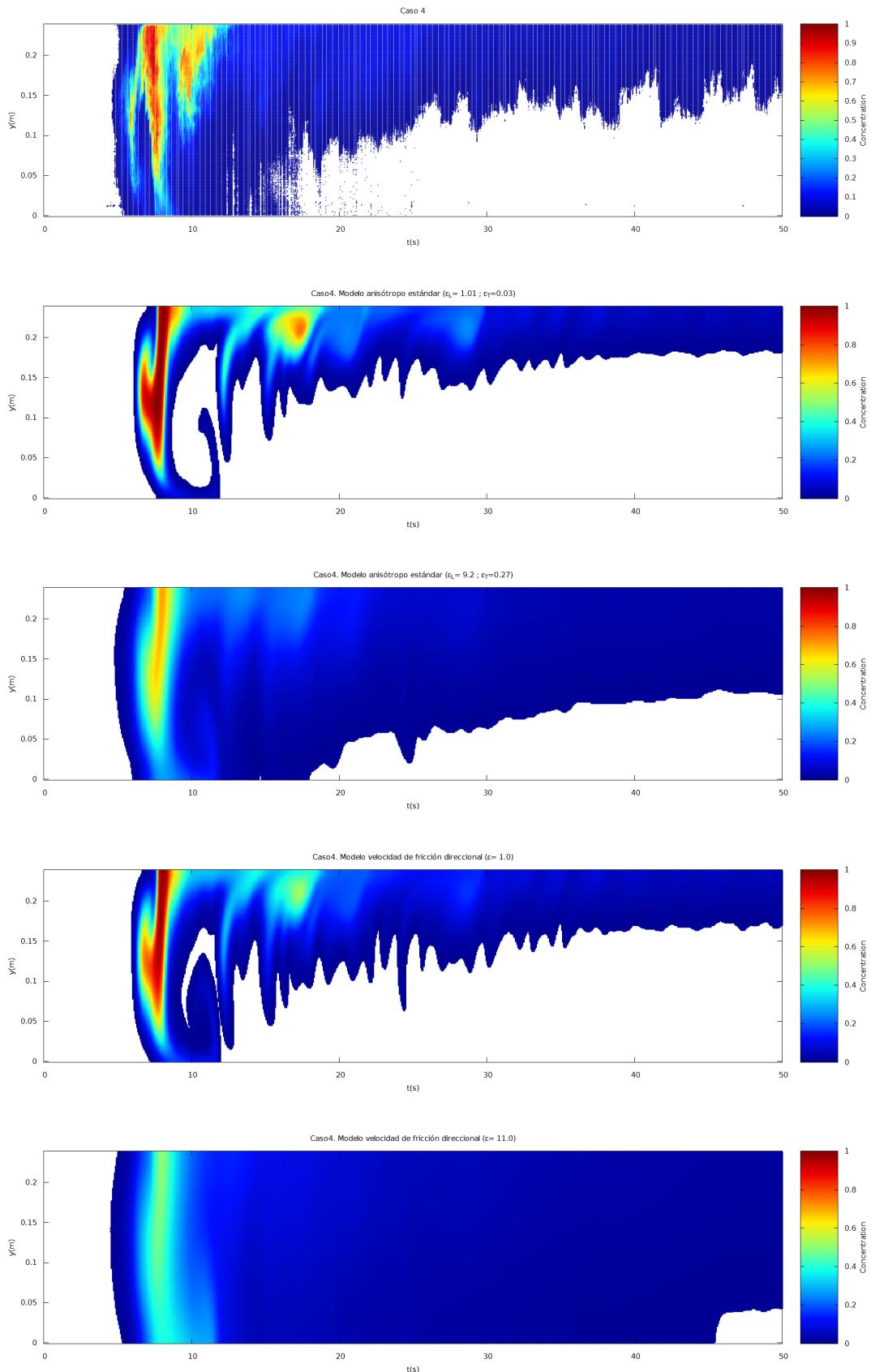


Figura 49: Experimento 4. Evolución temporal de la distribución de la concentración, promediada en la vertical, en la sección de medida. Datos experimentales y simulaciones con mayor error para cada modelo

Por último se incorporan en la figura (50) los instantes $t = 1, 2, 3$ y 4 segundos de las simulaciones para el modelo anisótropo estándar, donde se ha obtenido el mejor y el peor resultado:

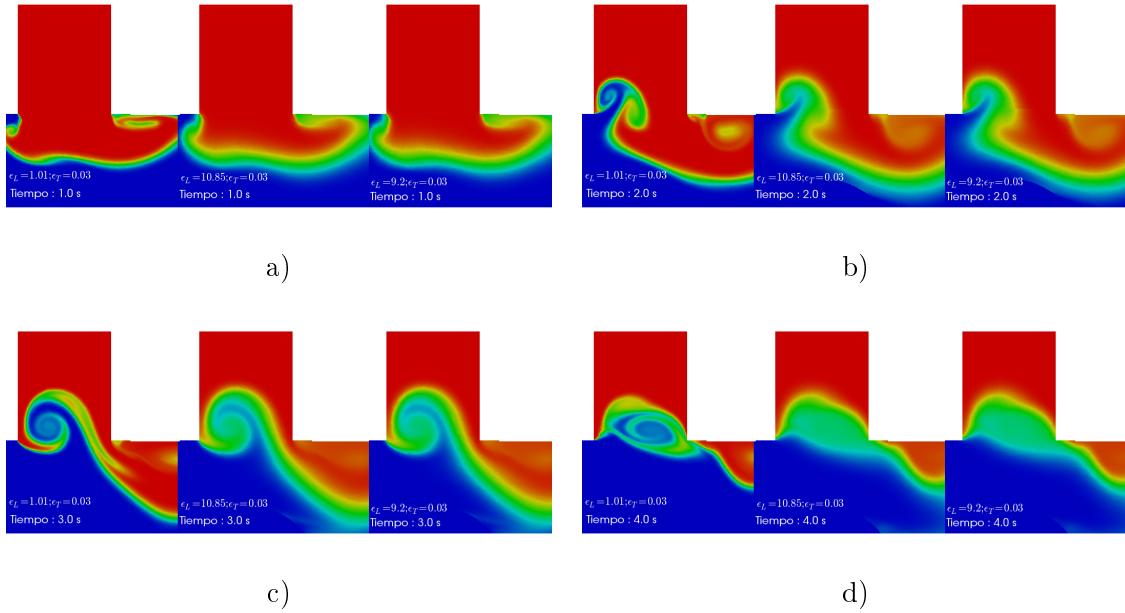


Figura 50: Caso 4. Distribución en el plano (x, y) de la concentración promedio vertical en distintos tiempos y usando distintos coeficientes de dispersión. $t=1s$ (a), $t=2s$ (b), $t=3s$ (c) $t=4s$ (d) y de izquierda a derecha valores ϵ_L y ϵ_T

F Programas informáticos auxiliares

F.1 Visualización de los datos: Gnuplot

Para generar los gráficos se ha usado el programa de software libre *Gnuplot*. Éste programa de código abierto y multiplataforma (<http://www.gnuplot.info/>) permite generar todo tipo de gráficos a partir de datos y funciones. La gran versatilidad que presenta a la hora de generar gráficos, hace de este programa uno de los más usados para esta tarea.

Las gráficas se pueden ser generadas directamente por pantalla, o en el formato de imagen deseado. Para ello es posible trabajar de forma interactiva o en modo por lotes (modo batch), mediante el uso de scripts. Esta segunda opción permite agilizar el proceso enormemente, principalmente cuando el trabajo a realizar consiste en la generación de un mismo tipo de gráficos para distintos datos.

En este trabajo se ha usado esta segunda opción dado el elevado número de gráficos a generar. Para ello se han elaborado varios scripts. Por ejemplo, en el capítulo 5 del trabajo se ha realizado un script, en el que se ha usado un bucle iterativo para generar una imagen de la concentración a su paso por la sección de medida en cada una de las simulaciones realizadas. El uso de este método en este trabajo ha permitido la agilización del proceso, además de la obtención de gráficos donde la visualización sea exactamente la misma.

Además de generar gráficos en 2D, este programa permite la visualización de datos y funciones en forma tridimensional. En este trabajo no ha sido necesario el uso de estas funciones.

La figura 51 es un ejemplo de gráfico realizado con *gnuplot* en este trabajo.

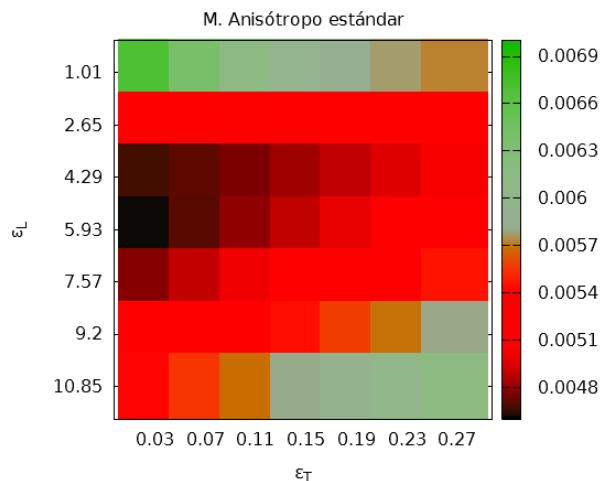


Figura 51: Ejemplo de gráfico realizado con *gnuplot* usado en este trabajo.

F.2 Visualización de los datos: Paraview

Para la mejor interpretación de los datos obtenidos en la simulaciones, se ha usado un programa de forma auxiliar llamado *Paraview* (<http://www.paraview.org/>). Este programa de software libre, creado por la compañía *Kitware, Inc.* ha sido diseñado para la visualización de todo tipo de datos. La sencillez de su interfaz permite de forma intuitiva usar la diversas funciones que el programa ofrece. En este trabajo se ha usado para visualizar las mallas utilizadas y el valor de todas las variables en ella. En la figura 52 puede observarse los resultados de tres de la simulaciones realizadas, donde vemos la evolución de la concentración de soluto a lo largo del canal en un tiempo determinado:

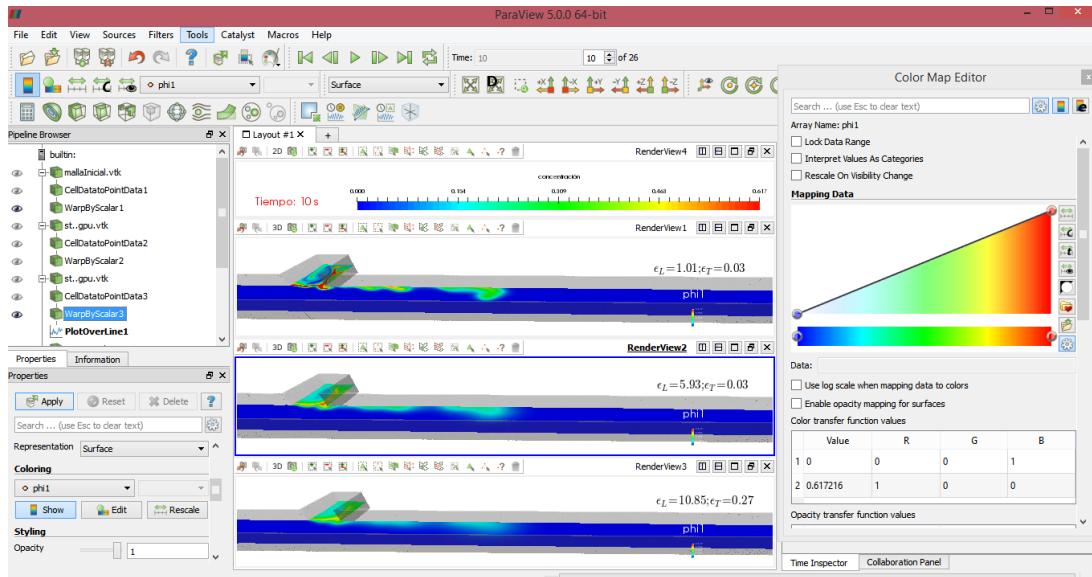


Figura 52: Visualización con *Paraview*.

La visualización de los datos con *Paraview*, se realiza a través de archivos tipo *.vtk*. Estos ficheros son volcados por el programa de simulación junto con los datos obtenidos de la simulación.

Así, con el uso del programa se han realizado principalmente las siguientes operaciones:

- Visualización de las celdas de la malla y valor de las variables del problema en cualquiera de ellas.
- Visualización de las variables usando escala de colores. Esta función permite además modificar la escala según la necesidad del problema.
- Visualización tridimensional de la simulación escalando la variable deseada.
- Obtención de imágenes y animaciones de la simulación en cualquier instante de la simulación.

El uso de *Paraview* en este Trabajo, ha permitido una mejor comprensión de los resultados obtenidos para las distintas simulaciones.

G Ficheros del proceso de simulación

Condiciones de la simulación

El programa de simulación necesita ficheros de entrada en los que se especifican los parámetros de la simulación. En este trabajo, se ha trabajado principalmente con dos de estos ficheros:

- **Fichero *.cond***

En este fichero se definen los principales parámetros de la simulación:

- Tiempo inicial de la simulación: La simulación puede iniciarse desde el instante que sea necesario. Este parámetro indica el instante en el que se inicia la simulación.
 - Tiempo final de la simulación: Este parámetro le indica al programa de simulación el instante en el que finalizar la simulación. El valor se tiene que pasar en segundos y tiene que ser mayor que el instante inicial.
 - CFL: Es un parámetro de carácter adimensional de gran relevancia en la simulación. Los cambios en este influyen en la estabilidad del proceso de simulación y en el paso de tiempo.
 - Volcado de pantalla: Este parámetro indica el número de pasos de tiempo. Así, es posible conocer el estado de la simulación volcando la información según el valor de este parámetro.
 - Volcado de datos: Este parámetro, medido en segundos, indica la frecuencia con la que se desea que el programa capture y descargue en un fichero el valor de las variables del problema. Por ejemplo al simular 100 segundos, es posible extraer los datos cada 10 segundos, si a este parámetro le pasamos el valor 10. De esta forma el programa permite realizar análisis con mayor o menor sensibilidad según desee el usuario. El formato de los ficheros es *.vtk*. Con estos se podrán visualizar los resultados de la simulación.
 - Volcado de medidas: El programa de simulación permite introducir sondas de medida en la simulación. Este parámetro, también indicado en segundos, indica la frecuencia con la que se quiere obtener la información de las sondas. El formato de salida de los ficheros obtenidos es *.out*, en los cuales se presentan los datos agrupados en columnas. Serán estos los ficheros que se utilizarán para el procesamiento de datos posterior a la simulación.
 - Coeficiente n de Manning. Este parámetro aporta la información de las propiedades de la fricción en la que se realiza la simulación.
 - Calado mínimo: Este parámetro indica el nivel mínimo de elevación superficial de agua a partir del cual se considera que el flujo permanece estático.
- **Fichero *.solute*** En este fichero se especifican los parámetros correspondientes a las características del soluto:

- Número de solutos: Este parámetro, es el número entero que indica el número de solutos introducidos en la simulación.
- Nombre del soluto: Existe la posibilidad de dar nombre a cada soluto mediante este parámetro.
- Tipo de soluto: Este parámetro indica el tipo de soluto introducido en la simulación. En este trabajo con un soluto pasivo, para el cual se ha prefijado el valor 1.
- Coeficientes de difusión: Estos parámetros, indican el valor de los coeficientes usados en cada simulación. En este caso se le pasan al programa dos valores de coeficientes, definidos como *double*, los cuales indican el coeficiente de difusión longitudinal y transversal utilizados. En el caso de usar modelos de difusión isótropos, habría que pasar dos veces el mismo valor.

Sondas introducidas

Como se ha comentado existe la posibilidad de introducir sondas de medida en la simulación. En este trabajo esta función ha sido de gran utilidad. Al contar con datos experimentales tomados en una sección concreta de un canal de flujo de agua, ha sido posible introducir una serie de sondas en la simulación en la misma zona donde se encontraba la sección de medida. De esta forma es posible realizar un análisis de error cuantitativo comparando los resultados el valor de las variables en las sondas. El fichero que se aporta al programa, con las posiciones de las sondas tiene el formato *.probes*, y en él se incluye la siguiente información:

- Número de sondas: Este parámetro, especificado en el fichero como, *NPROBES*, indica el número de sondas que se introducen en el dominio de la simulación.
- Coordenadas de las sondas: Este parámetro indica la posición dentro de la malla de cada una de las sondas introducidas. Así, este fichero contará con tantas líneas como número de sondas se introduzcan en el dominio.