Proyecto Interno Año 2003

Instituto de Geofísica UNAM
Guillermo de Jesús Hernández García
Técnico Académico Titular B

Métodos de Descomposición de Dominios y su Aplicación a Modelos de Transporte con Difusión

1. Introducción

El desarrollo en el ámbito internacional de la modelación computacional en su avance continuo ha tenido progresos importantes, que en particular en nuestro país ha tenido el desarrollo de métodos de descomposición de dominios. La teoría unificada de descomposición de dominios ha tenido en los métodos Trefftz-Herrera otra forma de discretizar y de permitir el procesamiento en paralelo. Los modelos ya desarrollados y actualmente en uso, como MODFLOW y otros, no han incorporado estos avances, motivo por el cual este trabajo se enfocó en el desarrollo de programas con capacidad para muchas de las nuevas opciones. Con base en la formulación del algoritmo de descomposición de dominios, se obtuvo el código de simulación numérica que conduce a restricciones a subdominios donde la condición de interfaz es dato prescrito. Se abordó el problema de flujo estacionario, y se puso a prueba para diferentes tamaños de elemento para verificar el error.

2. Metodología aplicada.

Formulación Trefftz-Herrera para métodos de descomposición de dominios, basada en una especial clase de fórmulas de Green aplicables a funciones discontinuas, así como el uso de funciones de peso las cuales producen información acerca de la solución buscada, en la frontera interna de la descomposición de dominios.

A partir del modelo físico del fenómeno tanto de flujo como de transporte, se obtienen los campos de interés, como son velocidad y presión. Para esto se determinan los parámetros y principios físicos que gobiernan el fenómeno. Se hace también una delimitación del sistema, en este caso el acuífero, y se determina la extensión del sistema, dando lugar a las condiciones de frontera. Se definen las condiciones iniciales y los controles o acciones del sistema vía datos de rontera.

3. Ecuaciones Elípticas.

El modelo tridimensional de flujo de densidad constante en un medio poroso, anisotrópico y heterogéneo, es expresado por:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_X \frac{\partial h}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_Y \frac{\partial h}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_Z \frac{\partial h}{\partial z}\right)=S_s \frac{\partial h}{\partial t}-R$$

donde KX , KY y KZ son componentes del tensor de conductividad hidráulica en las direcciones de los ejes de coordenadas, Ss es el almacenamiento específico; R es un término general de fuentes o sumideros y define los de entrada o salida al sistema en unidades de volumen por unidades de tiempo. Es recomendable alinear estos ejes con los ejes principales de la conductividad. Para simular salidas de flujo se considera R = - W. Este tipo de aproximación es la que adopta el programa de modelación de flujo tridimensional, MODFLOW, del United States Geological Survey, USGS, de Mac Donald y Harabaugh, versión de de 1994 1988, y 1996.

4. Métodos de Descomposición de Dominios y su Aplicación a Modelos de Flujo en Hidrología Subterránea

La ecuación diferencial parcial que inicialmente se aborda para varias dimensiones es la expresada por el siguiente operador:

$$\mathcal{L}h \equiv -\nabla \cdot \left(\mathbf{K} \cdot \nabla h\right) = f_{\Omega}$$

sujeto a las condiciones de frontera

$$h = h_{\partial} \quad \text{en } \partial\Omega_1,$$

$$\frac{\partial \ h}{\partial \ n} = g_N \quad \text{en } \partial\Omega_2$$

y con las condiciones de salto

$$\left[u\right] = \left[u_{\Sigma}\right] \equiv j_{\Sigma}^{0} = 0 \quad y \quad \left[\underline{\underline{a}} \cdot \nabla u\right] \cdot \underline{n} = \left[\underline{\underline{a}} \cdot \nabla u_{\Sigma}\right] . \underline{n} \equiv j_{\Sigma}^{1} = 0 \quad \text{en } \Sigma$$

Se desarrollaron códigos en Fortran 90 para métodos de descomposición de dominios para modelos de flujo y transporte en una dimensión y en dos dimensiones. Y se abordaron diferentes ejemplor para distintoas cantidades de nodos por dimensión, *E*, y se evaluó el correspondiente error.

Example 1

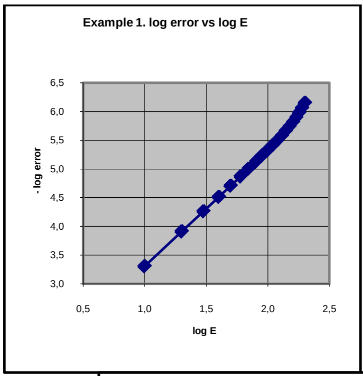
$$a_{11} = a_{22} = 1$$
$$a_{12} = a_{21} = 0$$
$$b_1 = b_2 = 0$$
$$c = 1$$
$$f = \left(1 - x^2 - y^2\right) e^{xy}$$
$$u = e^{xy}$$

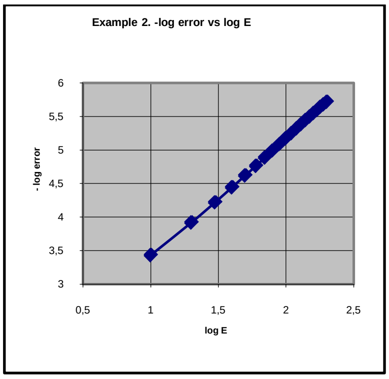
Example 2

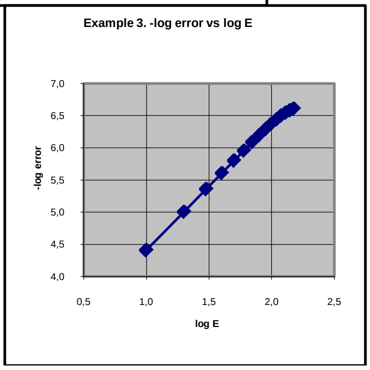
$$a_{11} = a_{22} = xy$$
$$a_{12} = a_{21} = 0$$
$$b_1 = b_2 = 0$$
$$c = 0$$
$$f = 0$$
$$u = x^2 - y^2$$

Example 3

$$a_{11} = 1 + x^2$$
$$a_{22} = 1 + y^2$$
$$a_{12} = a_{21} = 0$$
$$b_1 = b_2 = 0$$
$$c = 0$$
$$f = 6\left(y^2 - x^2\right)$$
$$u = x^2 - y^2$$







PROYECTO INTERNO AÑO 2004

Métodos de Descomposición de Dominios y su Aplicación a Modelos de Transporte con Difusión

El proyecto continúa con base en la propuesta del año 2003 y entra a un segundo año. Las erogaciones y el presupuesto son las mismas y se solicitan para el año 2004.

Referencias bibliográficas

[1] International Scientific Committee for Domain Decomposition “Proceedings of 13 conferences on Domain Decomposition Methods”. www.ddm.org, 1988- 2000.

[2] Quarteroni, A. and A. Valli (1999), “Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations”, Numerical Mathematics and Scientific Computation, Clarendon Press-Oxford.

[3] Herrera, I. (2000), “Trefftz Method: A General Theory”. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 16 (6) pp. 561-580.

[4] Herrera, I. Yates R., (2001), “General Theory of Domain Decomposition: Beyond Schwarz Methods”. Numerical Methods for Partial Differential Equations, .17(5) pp.495-517.

[5] Herrera, I. (1999), Díaz, M. “Indirect Methods of Collocation: Trefftz-Herrera Collocation”. Numerical Methods for Partial Differential Equations. 15(6) pp. 709-738.

[6] Herrera, I. (1985), “Unified approach to numerical methods. Part 1. Green’s formulas for operators in discontinuous fields”, Numerical Methods for Partial Differential Equations, 1(3), pp. 12-37.

[7] Oden T. J. (1972), “Finite Elements of Non-linear Continua”, McGraw-Hill, New York.

[8] Herrera, I. (1984), “Boundary Methods: An Algebraic Theory”, Pitman Advance Publishing Program, Boston, London, Melbourne.

[9] Herrera, I. “Some Unifying Concepts in Applied Mathematics”. The Merging of Disciplines: New Directions in Pure, Applied, and Computational Mathematics. Edited by R.E. Ewing, K.I. Gross and C.F. Martin. Springer Verlag, New York, pp. 79-88, 1986.

[10] Herrera, I., Chargoy, L. y Alduncin, G. (1985), “Unified Approach to Numerical Methods. Part 3. Finite Differences and Ordinary Differential Equations”. Journal of Numerical Methods for Partial Differrential Equations, 1, 241-258.

[11] Herrera, I. (1987), “The Algebraic Theory Approach for Ordinary Differential Equations: Highly Accurate Finite Differences”. Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations, 3(3), pp. 199-218.
[12] Herrera, I., R.E. Ewing, M. A. Celia and T. Russell. (1993), “Eulerian-Lagrangian localized adjoint method: the theoretical framework”, Numerical Methods for Partial Differential Equations, 9(4), pp. 431-457.
[13] Herrera, I. (1995), “Trefftz-Herrera Domain Decomposition”, Special Volume on Trefftz Method: 70 Years Anniversary; Advances in Engineering Software, 24, pp. 43-56.
[14] Berlanga, R.; Herrera, I., (2000), “The Gauss Theorem for Domain Decompositions in Sobolev Spaces”. Applicable Analysis: An International Journal”. Vol. 76 (1-2), p.p. 67-81.
[15] Celia, M.A., Russell, T.F., Herrera, I. y Ewing, R.E. (1990), "An Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for the Advection-Diffusion Equation". Advances in Water Resources, 13(4), pp.187-206.
[16] Celia, M. A. (1994), “Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for contaminant transport simulations”. Computational Methods in Water Resources X. 1: 207-216.
[17] Herrera, I; Herrera, G. y Garfias, J. (2000),“ELLAM First Decade: A Review”. Computation Methods in Water Vol. 2, Computational Methods, Surface Water Systems and Hidrology; Eds. Bentley L.R. et al., Balkema, Rotterdam. pp. 591-595.

Atentamente.

Cd. Universitaria a 28 de noviembre de 2003.

M. en C. Guillermo Hernández García,
Técnico Académico Titular B.