

El estado estacionario de la concentración de un contaminante  $\phi$  en un río se puede analizar de forma aproximada mediante un modelo unidimensional según la ecuación diferencial (1), ecuación que representa el transporte por convección y difusión en un medio fluido.

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx}(\rho \gamma \frac{d\phi}{dx}) \quad (1)$$

donde  $\rho$ ,  $u$  y  $\gamma$  son la densidad, velocidad y el coeficiente de difusividad respectivamente, que se supondrán constantes en todo el dominio.

Para analizar el problema se plantea calcular de forma aproximada el valor de la concentración de dicha propiedad  $\phi$  en un conjunto de  $n+2$  puntos distribuidos uniformemente y de forma equiespaciada a lo largo del dominio de estudio  $L$  tal y como se muestra en la figura 1.



Figura 1: Distribución de puntos de análisis en el dominio.

La solución numérica de (1), con condiciones de contorno  $\phi_0 = 1$  y  $\phi_{n+1} = 0$ , se puede plantear en forma adimensional mediante la resolución del sistema de ecuaciones lineal (2).

$$\begin{bmatrix} A & C & & & \\ B & A & C & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & B & A & C \\ & & & B & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -B\phi_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -C\phi_{n+1} \end{bmatrix} \quad (2)$$

donde los coeficientes de la matriz son:

$$A = 1 \quad B = -\frac{Pe_L}{4(n+1)} - \frac{1}{2} \quad C = \frac{Pe_L}{4(n+1)} - \frac{1}{2} \quad (3)$$

donde  $Pe_L$  es el número de Péclet: un número adimensional que se define como  $Pe_L = uL/\gamma$  y que relaciona la magnitud de los efectos convectivos con respecto a los difusivos. Se pide:

1. Desarrollar un programa que permita resolver sistemas de ecuaciones lineales como los propuestos y:

- Calcular numéricamente la concentración  $\phi$  en todo el dominio  $L$  para un número de Péclet  $Pe_L \leq 1$  y un número de puntos intermedios  $n \leq 5$ . Comparar el resultado con la solución analítica del problema dada por:

$$\frac{\phi_i - \phi_0}{\phi_{n+1} - \phi_0} = \frac{e^{Pe_L \frac{i}{n+1}} - 1}{e^{Pe_L} - 1} \quad i = 1, \dots, n \quad (4)$$

- Calcular numéricamente la concentración  $\phi$  en todo el dominio  $L$  para un número de Péclet  $Pe_L \geq 15$ . Comparar el resultado con la solución analítica del problema para diferentes grados de discretización:  $n = 5$ ,  $n = 20$  y  $n = 100$ .

## FECHA LÍMITE DE ENTREGA:

- El día 22 de Diciembre de 2015 para cualquiera de las dos oportunidades (Febrero o Julio)

## REQUISITOS DE LOS PROGRAMAS FORTRAN

- a) Los programas tienen que estar diseñados de forma modular, es decir, existirá un programa principal desde el que serán llamadas las distintas subrutinas o funciones.
- b) Cada uno de los módulos que lo componen debe ser validado por separado.
- c) Tanto el programa principal como los módulos tienen que estar convenientemente comentados.
  - c.1) En cada módulo debe incluirse el título del mismo y una breve descripción sobre qué es lo que realiza esa parte del programa y cómo lo hace.
  - c.2) Hay que definir cada una de las variables clave que intervienen en ese módulo. Los nombres de las mismas se deben escoger de forma que reflejen el tipo de información que esas variables están almacenando.
  - c.3) A lo largo del programa deben realizarse abundantes comentarios, añadiendo explicaciones y saltando líneas con el fin de etiquetar, dar claridad y separar los módulos.

## DOCUMENTACIÓN A ENTREGAR

Toda la documentación relativa al trabajo de curso deberá ser entregada en el plazo indicado anteriormente de acuerdo con siguientes indicaciones.

En la **cuenta de ordenador** de cada usuario deberá existir un directorio, denominado *trabajo*, en el que se incluirá, únicamente, el listado de los programas, los ejecutables y aquellos ejemplos y pruebas que se consideren oportunos o se hayan presentado en la memoria. No será necesario incluir la memoria en formato electrónico. Bastará con un ejemplar en soporte papel. El código fuente del programa también se imprimirá en papel y se adjuntará a la memoria.

La **memoria** del trabajo realizado debe contener los siguientes apartados:

- a) Una portada en la que se indique el nombre de los programas, el nombre de los ficheros de resultados y sus contenidos, el nombre del autor y el nombre de la cuenta que le ha sido asignada.
- b) El desarrollo numérico completo de los algoritmos utilizados.
- c) Un apartado en el que se comente cada uno de los programas o subprogramas de ordenador realizados, incluyendo los siguientes puntos:
  - c.1) Documentación externa del programa: características del programa, datos necesarios para ejecutarlo e instrucciones para introducirlos, resultados y limitaciones que presenta cada programa.
  - c.2) Esquema de funcionamiento de cada programa.
- d) Un apartado en el que se presenten, se analicen (física y numéricamente) y se comparen los resultados obtenidos a través de gráficos, comentando aspectos relativos a número de operaciones de cada algoritmo, convergencia, número de iteraciones, etc. Se valorará especialmente la discusión y análisis de los resultados obtenidos en función de los diversos parámetros y constantes del problema. Este estudio se deberá realizar para cada uno de los distintos modelos que se proponen en el enunciado.

Nota: La no inclusión en la memoria del apartado **d)** es motivo de no aceptación del trabajo