

# Métodos de discretización para ecuaciones fluctuantes

J. A. de la Torre<sup>1\*</sup>, P. Español<sup>1</sup> y D. Duque<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Dept. Física Fundamental UNED. Senda del Rey 9, 28040 Madrid

<sup>2</sup> Dept. Enseñanzas Básicas de la Ing. Naval UPM. Avda. Arco de la Victoria, 28040 Madrid

La simulación de procesos hidrodinámicos multiescala es a menudo abordada con mallados arbitrarios que permiten resolver con precisión aquellas regiones en la que los campos cambian más fuertemente en ciertas regiones de interés. Cuando estas regiones tienen tamaños mesoscópicos, empiezan a ser importantes las fluctuaciones térmicas.

En este trabajo<sup>1</sup> proponemos la elaboración de algoritmos de simulación en mallados arbitrarios que incluyan fluctuaciones térmicas de manera consistente. A partir de la definición formal de unos ciertos operadores de continuación y discretización (que verifican propiedades de *localidad* y *consistencia lineal*), elaboramos según el esquema de residuos pesados un algoritmo de elementos finitos basados en la teselación de Delaunay.

Tomando como ejemplo paradigmático una ecuación de difusión no lineal,

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \mu(c(\mathbf{r}, t)) \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c(\mathbf{r}, t)} [c(\mathbf{r}, t)] + \nabla \tilde{J}, \quad (1)$$

consideramos dos ejemplos para el funcional de energía libre  $\mathcal{F}[c(\mathbf{r}, t)]$ : un modelo gaussiano cuadrático en la concentraciones y un modelo correspondiente a la energía

libre de Cahn-Hilliard<sup>2</sup>. En ambas situaciones comprobamos que la parte determinista de la ecuación de difusión discreta respeta los dos ingredientes fundamentales de dicha ecuación: conservación del número de partículas y existencia de un teorema H. Que el algoritmo discreto respete este último requisito es fundamental para la formulación termodinámicamente consistente de las fluctuaciones térmicas. Éstas se formulan de tal manera que se satisface el teorema de fluctuación-disipación. Se observa que, mientras que las variables hidrodinámicas están definidas en los nodos de la malla arbitraria, los ruidos térmicos están definidos en los simplex de la red (triángulos en 2D, tetraedros en 3D). Estos resultados generalizan a mallados arbitrarios frente a resultados previos para la discretización de la ecuación de difusión en mallados regulares<sup>3</sup>.

---

\* jatorre@bec.uned.es

<sup>1</sup> J. A. de la Torre, D. Duque, P. Español, *en preparación* (2012)

<sup>2</sup> J. W. Cahn, J. E. Hilliard, *J. Chem. Phys.* **28**, 258 (1958)

<sup>3</sup> J. A. de la Torre, P. Español, *J. Chem. Phys.* **135**, 114103 (2011)