



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA

INSTITUTO DE INGENIERÍA

MODELACIÓN NUMÉRICA DE CONVECCIÓN Y ADVECCIÓN

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRO EN INGENIERÍA

INGENIERÍA CIVIL – HIDRÁULICA

P R E S E N T A :

JERSAIN GÓMEZ NÚÑEZ

TUTOR:

DR. MOISÉS BEREZOWSKY VERDUZCO



Ciudad Universitaria, México DF. Abril de 2010

JURADO ASIGNADO:

Presidente: DR. CARLOS ESCALANTE SANDOVAL
Secretario: DR. HERMILO RAMÍREZ LEÓN
Vocal: DR. MOISÉS BEREZOWSKY VERDUZCO
1^{er}. Suplente: DR. ALEJANDRO RODRÍGUEZ VALDÉS
2^{do}. Suplente: DR. ABEL JIMÉNEZ CASTAÑEDA AMADO

Lugar donde se realizó la tesis:

INSTITUTO DE INGENIERÍA, UNAM.

TUTOR DE TESIS:

DR. MOISÉS BEREZOWSKY VERDUZCO

AGRADECIMIENTOS

A la UNAM por todos los recursos que puso a mi alcance.

Al CONACYT por el apoyo económico y fomento al posgrado.

Al Instituto de Ingeniería de la UNAM por abrirme sus puertas y darme un espacio de trabajo.

A mi tutor el Dr Moisés Berezowsky Verduzco por todos sus conocimientos que recibí en sus materias, por la dirección de esta tesis, por su apoyo incondicional y por su amistad.

Al Dr Hermilo Ramírez León y sus estudiantes M en C Ricardo López y Dr Carlos Couder por revisar y corregir de manera paciente cada párrafo de la tesis.

A Margarita López Herranz por las correcciones de estilo, en la redacción de la presente.

A mis padres Concepción Núñez e Ing Juan Apolonio Gómez por todo el amor y la guía de cómo ser mejor.

A mi hermano Emmanuel a quien siempre trato de dar buen ejemplo.

A Deyanira Bautista por todo el cariño, paciencia y apoyo.

A mis compañeros y amigos de la maestría con quien siempre existió la enseñanza-aprendizaje.

Al Dr Gabriel Soto, al Ing Darío Goicochea, al M en C Oscar Olvera, al M en C Jorge Aguilar y al Quím Rubén Lecona por su ejemplo en la docencia e investigación, y que de una u otra forma me estimularon para realizar la maestría.

NOMENCLATURA	2
1. Introducción	4
2. Ecuaciones fundamentales	6
3. Métodos de solución	9
3.1 Dinámica de Fluidos Computacional	9
3.2 Diferencias Finitas	9
3.3 Volumen Finito	13
3.4 Espectral	15
4. Definiciones necesarias	16
4.1 Error por truncamiento	16
4.2 Consistencia y precisión	16
4.3 Estabilidad	17
4.4 Convergencia	18
4.5 Acotamiento	18
4.6 Notación	22
5. Esquemas de solución	24
5.1 Lineales	24
5.2 Tipo Lax-Wendroff	28
5.3 Híbridos	32
5.4 No lineales de Leonard	35
5.5 ULTIMATE	47
5.6 Espectrales	49
6. Pruebas	54
6.1 Lineales	59
6.2 Tipo Lax-Wendroff	65
6.3 Híbridos	71
6.4 No Lineales de Leonard	73
6.5 ULTIMATE	83
6.6 Espectrales	89
7. Discusión y conclusiones	96
Apéndice A. Variable normalizada de Leonard (VN)	98
Apéndice B. Variación total suavizada	98

NOMENCLATURA

α	Coefficiente de difusión
α^+	Factor de peso en SMART
β	Selector del esquema híbrido de tres esquemas
C	Número de <i>Courant</i>
CBC	Criterio de Acotamiento de la Convección (<i>Convection Boundedness Criterion</i>)
$CCCT$	Curvatura Compensada para el Transporte Convectivo (<i>Curvature-Compensated Convective Transport</i>)
DFC	Dinámica de fluidos computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
δ^n	Diferencias centradas de orden n
$div ()$	Divergencia de la cantidad ()
DEL	Denominador de la VN
DF	Diferencias finitas
D_N	Derivada espectral de
\mathcal{D}^n	Diferencias centradas de orden n
ρ	Densidad (kg/m^3)
Δt	Ancho de paso en el tiempo t
Δx	Ancho de paso en el espacio x
EA	Relación exponencial hacia atrás
ϵ	Selector del esquema híbrido de dos esquemas
f	Flujo
f_x	Flujo en x
γ	Factor de peso en el esquema seudoespectral
$grad ()$	Gradiente de ()
ϕ	Variable, que puede ser una concentración, temperatura, etc.
$\bar{\phi}$	Valor medio de la variable

$\hat{\phi}$	Variable normalizada
$\phi_j^{\overline{n+1}}$	Predictor
M	Esquema de MacCormack
μ	Viscosidad (m^2/s)
O	Orden del error de truncamiento
p	Presión
Q	Punto en (0.5,0.75) del plano NVD , donde hay precisión de tercer orden
S_M	Término fuente
\bar{S}^*	Término fuente neto efectivo
TAO	Términos de alto orden
U	Esquema predictor-corrector hacia atrás
u	Velocidad media (m/s)
VF	Volumen finito
VN	Variable normalizada de Leonard

1. INTRODUCCIÓN

El diccionario de la Real Academia Española define convección: que proviene del latín *convectio* y significa “transporte en un fluido de una magnitud física, como masa, electricidad o calor, por desplazamiento de sus moléculas debido a diferencias de densidad”; este gradiente de densidad de forma exclusiva puede generarse por temperatura, salinidad o un cambio de concentración del material sólido; debe quedar claro que todo lo anterior se refiera al fluido en sí. Por otro lado, la advección viene del latín *advectio* que significa “acción y efecto de llevar o arrastrar algo”. Este fenómeno puede ser el transporte de una propiedad del fluido a causa de fuerzas inerciales, sin importar el origen de las mismas. Ambos fenómenos aparecen en las ecuaciones de la dinámica de fluidos, desde los modelos más sencillos hasta los más detallados; por tanto es imprescindible obtener una adecuada solución de ellos. La literatura es confusa en cuanto a manejar uno u otro término, sobre todo porque los métodos de solución son similares. La presente tesis centra su atención en la advección y bajo ciertos ajustes puede aplicarse a convección.

Las soluciones analíticas son comunes en problemas didácticos, con fronteras geométricas sencillas. Frecuentemente el sistema en estudio es complejo y no lineal, y las soluciones analíticas no son posibles, así que se recurre a los modelos computacionales. Con una solución de este tipo, experimentos numéricos son posibles con solo cambiar los parámetros del sistema y obtener resultados de bajo costo económico y de tiempo. Un modelo computacional es un modelo matemático para estudiar el comportamiento de un sistema físico complejo, por medio de la simulación por computadora. Las teorías de la operación del modelo se pueden deducir con experimentos computacionales, sin olvidar que la confiabilidad del modelo depende de qué tan bien está sustentado, calibrado y/o verificado.

En los modelos computacionales se pretende resolver las ecuaciones por diferentes métodos; la presente tesis se concentra en el de diferencias finitas, volumen finito y espectral. El modelado numérico de la advección es un problema ya tratado durante varias décadas, pero continúa constituyendo un reto de estudio y perfeccionamiento. En un esquema óptimo de solución, se busca simultáneamente exactitud, estabilidad, acotamiento y simplicidad algorítmica; el conflicto principal radica en la conciliación de estas características, porque mejorar alguna implica la disminución de otra.

La advección tiene problemas ante la presencia de altos gradientes; esto requiere emplear esquemas de aproximación de alta precisión. Como la advección es representada con una derivada de primer orden, la verificación de los resultados (como argumento matemático) forja la discusión sobre qué orden de esquema debe emplearse.

Es común encontrar a la advección acompañada de la difusión. Cuando los términos de difusión son fuertes, no existe tanto problema con la solución; por el contrario, si la advección es el término dominante, su correcta resolución es fundamental para llegar a un buen resultado. El refinamiento de la malla puede aliviar los inconvenientes de cualquier esquema, pero en la mayoría de las ocasiones obtener el grado necesario de refinamiento es totalmente impráctico para propósitos ingenieriles, ya que se incrementan el tiempo de cómputo y la memoria requerida, situación que no se desea, especialmente para modelos formales, de gran tamaño e importancia.

El **objetivo general** de esta tesis es elegir un esquema de solución que combine alta precisión, estabilidad, economía computacional y simplicidad algebraica y de programación. Los **objetivos particulares** consisten en hacer una revisión detallada del estado de arte referente al tema; crear una clasificación de los esquemas; programar los algoritmos de solución; y por último, obtener los errores de los esquema aplicados a problemas tipo con el fin de compararlos de manera cuantitativa.

En el siguiente capítulo se detallan las ecuaciones que describen el fenómeno de advección. En el capítulo tercero se plantean algunos de los métodos de solución. Posteriormente, con ayuda de una exhaustiva revisión bibliográfica, se exponen y clasifican los principales esquemas reportados en la literatura científica. En el capítulo siguiente se incluyen pruebas de los esquemas resolviendo problemas típicos en el tema. Todo lo anterior, permitirá conocer los pros y contras en la elección de un esquema para construir un modelo en hidráulica.

2. ECUACIONES FUNDAMENTALES

Las ecuaciones de la mecánica de fluidos se pueden encontrar definidas de varias formas que resultan equivalentes; al resolverlas, se debe respetar la conservación de masa, momento y energía, haciendo posible describir un sistema físico por completo. Además, es necesario conocer las propiedades de la naturaleza del fluido (compresibilidad, viscosidad, densidad, etcétera). El flujo de un fluido se entiende si se conoce su comportamiento en cualquier instante.

El conjunto de ecuaciones llamadas de Navier-Stokes describen el movimiento de un fluido que no cambia sus propiedades. Se presentan en forma de derivadas parciales no lineales y gobiernan de manera general cualquier fenómeno en todo tipo de fluido. Se obtienen de *forma integral* aplicando los principios de conservación a un volumen fluido, y utilizando diferentes teoremas matemáticos se obtiene la respectiva *formulación diferencial* que generalmente es más útil en la resolución de problemas.

No se dispone de una solución general; aunque en libros tradicionales es posible hallar soluciones analíticas para este conjunto de ecuaciones, únicamente son útiles en casos donde las ecuaciones se encuentran simplificadas con ciertos tipos de flujo muy concretos, como flujos con número de Reynolds despreciable o muy grande. Aunado a lo anterior se consideran fronteras de geometría muy simple. Para problemas reales no es posible un análisis y simplificación de las ecuaciones diferenciales que describen el flujo, por lo que se recurre al uso de métodos numéricos para determinar dicha solución.

La forma más común de escribir estas ecuaciones en coordenadas cartesianas para una dimensión es

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \text{div}(\mu \text{ grad } u) + S_M \quad (2.1)$$

donde u componente de la velocidad media

ρ densidad

p presión

μ viscosidad

S_M término fuente.

Con las ecuaciones anteriores es posible construir un sistema conservativo que gobierna en el tiempo el flujo de un fluido newtoniano

$$\text{Masa} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.2)$$

$$\text{Momento} \quad \frac{d\rho u}{dt} + \text{div}(\rho u \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \text{div}(\mu \text{ grad } u) + S_M \quad (2.3)$$

De manera semejante, en forma conservativa para una variable general ϕ , que puede representar una temperatura, la concentración de un contaminante, etcétera, se tiene la ecuación

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\mathbf{u}) = \text{div}(\alpha \text{grad } \phi) + S_\phi \quad (2.4)$$

En palabras, representa



La ec 2.4 se denomina “de transporte” de la propiedad ϕ , y es trascendental en varios procesos de transporte. La parte izquierda se refiere a los términos de tasa de cambio y de advección, mientras en la parte derecha entran los términos de difusión y fuentes. Simplificando para una dimensión y sin fuentes, resulta

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + u \frac{\partial\phi}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} \quad (2.5)$$

donde u velocidad (m/s)

α coeficiente de difusión (m/s^2).

Yanenko (1968) propuso un método para resolver ecuaciones diferenciales lineales, como es el caso de la ec 2.5, llamado de pasos fraccionados. Un primer paso consiste en avanzar la solución únicamente del término de advección, usando un intervalo de tiempo cualquiera

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + u \frac{\partial\phi}{\partial x} = 0 \quad (2.6)$$

Una vez obtenido ϕ (en el proceso de transporte), en un segundo paso se resuelve la difusión

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} \quad (2.7)$$

La solución sucesiva de las ecs 2.6 y 2.7 es la solución de la ec 2.5. La ventaja de este procedimiento es poder emplear el método numérico más apropiado para resolver cada uno de los pasos de manera separada.

La advección en una dimensión (ec 2.6), expresada en términos de la velocidad media, es el problema que se trata en esta tesis. Físicamente es posible representarlo como una concentración que se desplaza de manera uniforme aguas abajo (a velocidad u) y sin deformarse, dado que no existe difusión ($\alpha = 0$); este proceso se denomina “advección pura”. El fenómeno se representa en la fig 2.1.

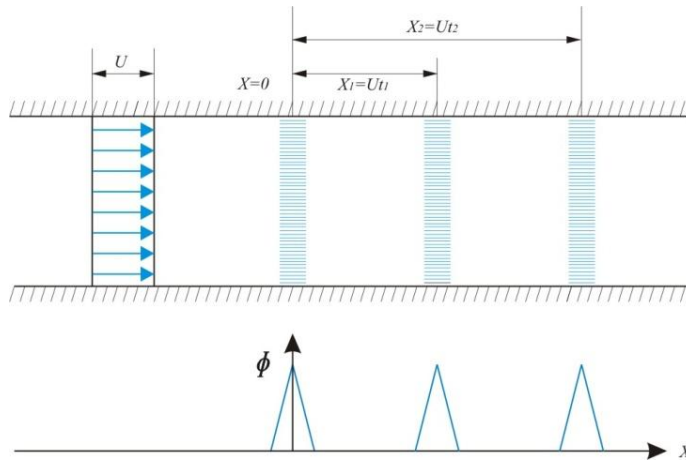


Figura 2.1 Mecanismo de advección pura en una dimensión

El estudio del transporte y dispersión de problemas reales como especies en ríos, lagos, aire y cámaras de oscilación, entre otros, es un problema complejo. Una buena solución unidimensional (como la expuesta en la presente tesis) puede ser la base para resolver de manera más real y tridimensional un problema. Por ejemplo, Berezowsky (1994) presenta la descarga de un contaminante en un río, donde en la cercanía de la descarga el flujo es completamente tridimensional; a corta distancia aguas abajo, conforme la corriente del río va orientando el flujo de la descarga, el material descargado se va mezclando. A una distancia relativamente cercana de la descarga, la concentración se hace uniforme en la profundidad; aguas más abajo tiende a mezclarse en el ancho del río y a partir de este punto la concentración puede representarse en una dimensión a lo largo del río; pero en la mayoría de las ocasiones, debido a las irregularidades propias del cauce, no se logra un mezclado uniforme en el ancho del río.

Por lo anterior, la predicción del fenómeno es difícil. Modelos ambiciosos y detallados que consideran la turbulencia, mejoran los resultados. Dependiendo del detalle que se desea incluir, en modelos más elaborados se emplean funciones cada vez más complejas a costa de introducir más funciones que aumentan el número de operaciones a realizar. Aunque estos modelos de turbulencia (de orden uno, de orden dos, etc.) sean resueltos de manera robusta, si el término de advección está mal resuelto, la advección puede ser tal que la solución general sea incorrecta.

REFERENCIAS

Berezowsky V. M., *Análisis de Flujos Turbulentos a Superficie Libre*, México, Series del Instituto de Ingeniería, UNAM, 1994.

Yanenko N., *Méthode á pas fractionnaires (Résolutions de problèmes polydimensionnels de physique mathématique. Résolutions de problèmes polydimensionnels de physique mathématique*, 1968.

3. MÉTODOS DE SOLUCIÓN

Se ha demostrado que los métodos conocidos en matemáticas aplicadas para resolver ecuaciones diferenciales representan un instrumento importante para la mecánica de fluidos. Las computadoras refuerzan la forma de aproximar las ecuaciones, mediante un modelo matemático del sistema físico que se quiere representar.

3.1 Dinámica de Fluidos Computacional

Estudia y analiza el flujo de fluidos empleando simulación computacional. Es una técnica muy poderosa, con un amplio rango de aplicaciones a nivel ciencia e industria. Entre los diferentes métodos de *CFD* usados para resolver las ecuaciones fundamentales (también utilizados por casi todas las disciplinas de la física e ingeniería) destacan los de elemento finito, volumen finito, de las características, espectrales, diferencias finitas, multimalla, Euleriano-Lagrangeanos y de colocación. Cada método posee ventajas y desventajas, y su empleo es, en muchos casos, cuestión de elección o de la escuela del usuario. Existe una vasta literatura sobre cada uno de estos. En problemas de flujo no permanente en hidráulica se usa de manera frecuente el método de diferencias finitas.

3.2 Diferencias Finitas

Es una expresión matemática de la forma $f(x + \Delta x) - f(x)$; además, si se divide entre (Δx) se obtiene una expresión similar al cociente diferencial, pero con cantidades finitas en lugar de infinitesimales. La aproximación de la derivada por diferencias finitas desempeña un papel central en los métodos numéricos de solución de Ecuaciones Diferenciales Parciales, *EDP*.

3.2.1 Derivadas y diferencias

La solución de una *EDP* para una variable (ϕ) se puede representar como una superficie en un plano compuesto por los ejes x, t , según se muestra en la fig 3.1

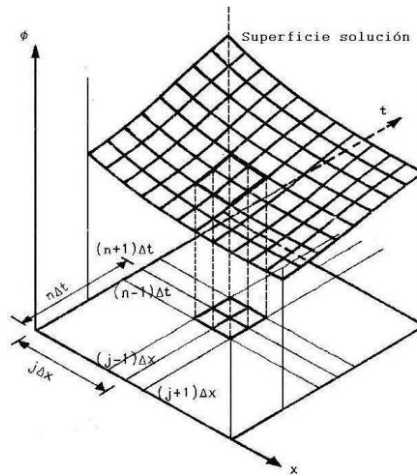


Figura 3.1 Plano de solución para una EDP

En el plano x, t de la fig 3.1 se define una malla de elementos de tamaño Δx y Δt . Se emplean las variables “ j ” para indicar los nodos de la malla en dirección espacial x y “ n ”, en la dirección temporal t , como se ilustra en la fig 3.2. La variable ϕ en el nodo (j, n) se escribe ϕ_j^n ; es común utilizar subíndices para las variables espaciales y superíndices para el tiempo.

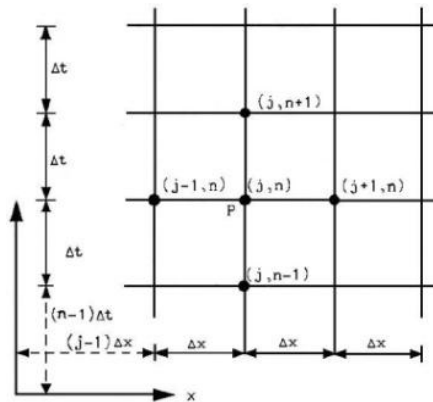


Figura 3.2 Malla de elementos Δx y Δt

La fig 3.3 muestra que las derivadas en cualquier punto P se pueden construir mediante aproximaciones, usando los nodos vecinos (A y B)

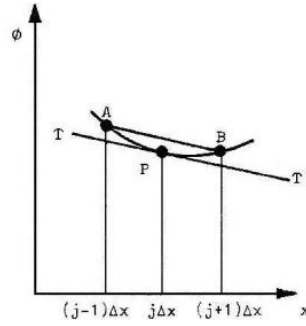


Figura 3.3 Corte de la superficie de solución el espacio para un tiempo dado

Si se recuerda que la derivada de una función representa la pendiente de la misma, esta se puede aproximar con los puntos vecinos a P , fig 3.3; entonces existen tres posibilidades básicas para realizar la aproximación de la derivada, ya sea en el espacio o en el tiempo:

En el espacio

- *Diferencia hacia atrás.* Construida con el punto de interés P y el anterior $A = (P - \Delta x)$,

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_j^n \approx \frac{\phi_j^n - \phi_{j-1}^n}{\Delta x} \quad (3.1)$$

- *Diferencia hacia adelante.* Construida con el punto de interés P y el posterior $B = (P + \Delta x)$,

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_j^n \approx \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_j^n}{\Delta x} \quad (3.2)$$

- *Diferencia centrada.* Construida con el punto anterior A y el posterior B ,

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_j^n \approx \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n}{2\Delta x} \quad (3.3)$$

En las expresiones anteriores, dado que son aproximaciones se emplea el símbolo “ \approx ”. En la fig 3.3 se aprecia que la diferencia centrada es una mejor aproximación a la pendiente en P . Puede demostrarse que la diferencia centrada es el promedio entre la diferencia hacia atrás y hacia adelante. Todo ello se expresa de manera semejante para la derivada en el tiempo:

En el tiempo

- *Diferencia hacia atrás*
$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_j^n \approx \frac{\phi_j^n - \phi_j^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.4)$$

- *Diferencia hacia adelante*
$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_j^n \approx \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} \quad (3.5)$$

- *Diferencia centrada*
$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_j^n \approx \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^{n-1}}{2\Delta t} \quad (3.6)$$

3.2.2 Construcción de esquemas

La ec 2.6 de advección pura representa el fenómeno que describe el viaje de una onda; si $u > 0$, la onda viaja con el sentido positivo del eje x (a la derecha o hacia adelante); si además el valor de u es constante, la onda viaja con movimiento rectilíneo uniforme y sin distorsión. Utilizando diferencias hacia adelante en el tiempo y hacia atrás en el espacio (ecs 3.5 y 3.1), en la ec 2.6, resulta

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_j^n - \phi_{j-1}^n}{\Delta x} \approx 0 \quad (3.7)$$

Para calcular el punto adelante en el tiempo, se despeja de la ecuación anterior

$$\phi_j^{n+1} \approx \phi_j^n - u \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_j^n - \phi_{j-1}^n) \quad (3.8)$$

Sea C una nueva variable definida como

$$C = u \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (3.9)$$

la ec 3.8 se puede escribir

$$\phi_j^{n+1} \approx (1 - C)\phi_j^n + C\phi_{j-1}^n \quad (3.10)$$

Con unidades consistentes, el parámetro C se torna adimensional; de manera general, en casi todos los esquemas de diferencias se puede obtener un parámetro de este tipo y genéricamente se le denomina número de *Courant*. Este parámetro es relevante para definir las propiedades del esquema y relaciona las variables de la ecuación diferencial con los incrementos Δx y Δt .

La aproximación de la ec 3.10 es un ejemplo de esquema en diferencias: permite obtener valores de una función en un instante adelante en el tiempo, a partir de valores en uno o más instantes anteriores. De forma general: si el conjunto de valores $\{\phi_1^n, \phi_2^n, \phi_3^n, \dots, \phi_j^n\}$ son conocidos, es posible conocer los valores $\{\phi_1^{n+1}, \phi_2^{n+1}, \phi_3^{n+1}, \dots, \phi_j^{n+1}\}$ a partir de la ec 3.10. Este es solo uno de muchos esquemas posibles para resolver dicha ecuación.

Al usar el esquema en diferencias, puede surgir la duda de si verdaderamente se está resolviendo la ecuación diferencial original. Si se considera que este tipo de solución genera un error por truncamiento, $\mathcal{O}(\Delta x, \Delta t)$, es posible usar el signo de igualdad “=”

$$\phi_j^{n+1} = (1 - C)\phi_j^n + C\phi_{j-1}^n + \mathcal{O}(\Delta x, \Delta t) \quad (3.11)$$

En la sección 4.1 se discute este tipo de error. En principio, se asume que el error generado es muy pequeño; es decir, lo que plantea el esquema es la solución de la ecuación diferencial de la forma

$$\phi_j^{n+1} = (1 - C)\phi_j^n + C\phi_{j-1}^n \quad \text{con} \quad \mathcal{O}(\Delta x, \Delta t) \rightarrow 0 \quad (3.12)$$

3.3 Volumen Finito

Este método representa y evalúa ecuaciones diferenciales parciales como ecuaciones algebraicas. Ahí, se calculan los valores en celdas discretas dentro de una malla geométrica, de manera similar al método de las diferencias finitas. El Volumen Finito (*VF*) se refiere a la pequeña cantidad que ocupa cada una de las celdas que componen el total de la malla. Estos volúmenes se transforman en integrales de una *EDP* que contiene el término de divergencia, para posteriormente convertirse en integrales de superficie (teorema de la divergencia). En la solución de la advección las variables escalares son evaluadas al centro de cada volumen finito. En caso de usar variables vectoriales el esquema de solución evalúa el flujo en las caras de cada volumen finito, como en el caso de la convección. Estos métodos son conservativos, debido a que el flujo de entrada en un volumen es idéntico al que abandona el volumen adyacente, fig 3.4. Otra ventaja del método es ser de fácil formulación para mallas irregulares no estructuradas.

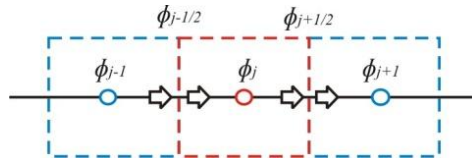


Figura 3.4 Celda de solución para VF

3.3.1 Ecuación base

LeVeque y Randall (2002) plantean el método de *VF* empleando la *EDP* de transporte en una dimensión, de la forma siguiente

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad t \geq 0 \quad (3.13)$$

donde $\phi = \phi(x, t)$ variable transportada por advección

$f = f(\phi(x, t))$ flujo.

Convencionalmente, si f es positivo, el flujo es de izquierda a derecha, y viceversa. Al suponer que la ec 3.13 representa el flujo medio de un campo, es posible subdividir el dominio espacial x en volúmenes finitos con celdas (o nodos) indexados con centros en cada j .

Con el valor medio en el volumen, por unidad de longitud, $\bar{\phi}_j(t) = \phi(x, t)$ en el instante $t = t_1$ y $x \in [x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$, la ec 3.13 se reescribe como

$$\bar{\phi}_j(t_1) = \frac{1}{x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \phi(x, t_1) dx \quad (3.14)$$

para el momento $t = t_2$

$$\bar{\phi}_j(t_2) = \frac{1}{x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \phi(x, t_2) dx \quad (3.15)$$

donde $x_{j-\frac{1}{2}}$ y $x_{j+\frac{1}{2}}$ representan la ubicación de las caras anterior y posterior, respectivamente, para cualquier celda j . Al integrar la ec 3.15 en el tiempo

$$\phi(x, t_2) = \phi(x, t_1) + \int_{t_1}^{t_2} f_x(\phi(x, t)) dt \quad (3.16)$$

con $f_x = \partial f / \partial x$.

Para obtener el valor promedio de $\phi(x, t_2)$, la ec 3.16 se integra en el volumen de la celda y se divide el resultado entre el tamaño de la celda $\Delta x_j = x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}$

$$\bar{\phi}(t_2) = \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \left\{ \phi(x, t_1) + \int_{t_1}^{t_2} f_x(\phi(x, t)) dt \right\} dx \quad (3.17)$$

Se hace la suposición de que f es suave y continua; por ello, es posible invertir el orden de integración. Además, se recuerda que el flujo es normal a las caras de la celda. En una dimensión, $f_x \triangleq \nabla f$, y es posible aplicar el teorema de la divergencia, a fin de sustituir la integral de volumen en los términos de la divergencia, con los valores de $f(x)$ en las caras $x_{j-\frac{1}{2}}$ y $x_{j+\frac{1}{2}}$

$$\bar{\phi}_j(t_2) = \frac{1}{\Delta x_j} \left[\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \phi(x, t_1) dx + \int_{t_1}^{t_2} f_{j+\frac{1}{2}} dt - \int_{t_1}^{t_2} f_{j-\frac{1}{2}} dt \right] dx \quad (3.18)$$

donde $f_{j\pm\frac{1}{2}} dt = f(\phi(x_{j\pm\frac{1}{2}}, t))$.

Por tanto, es posible obtener un sistema numérico *semi-discreto* para cada celda j , con caras $j \pm \frac{1}{2}$, que al diferenciar con respecto al tiempo se convierten en

$$\frac{d\phi}{dt} + \frac{1}{\Delta x_j} \left[f_{j+\frac{1}{2}} - f_{j-\frac{1}{2}} \right] = 0 \quad (3.19)$$

El valor en las caras puede ser construido de manera independiente por interpolación o extrapolación de las celdas vecinas.

3.4 Espectral

Los primeros métodos espectrales para resolver ecuaciones diferenciales parciales se emplearon en la década de 1950, pero se difundieron ampliamente en los años setenta. A partir de esa década, han sido utilizados para resolver sobre todo problemas de flujo permanente con geometrías suaves y regulares (Canuto *et al*, 1990).

Con un método espectral es posible construir la solución espacial y temporal; sin embargo, de igual manera que con los otros métodos, esto es complicado y muy costoso computacionalmente. Por tal razón, en general solo se usan para obtener la solución espacial, mientras que la parte temporal se resuelve por diferencias finitas.

Karhiadakis y Sherwin (1999) muestran que para resolver la derivada temporal es suficiente con manejar un esquema espectral explícito, del tipo de Euler, compuesto por diferencias hacia adelante en el tiempo y la solución espectral, de la forma

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{\Delta t u_j^n}{x_j} (D_N \phi) \quad (3.20)$$

donde el término $D_N \phi$ es la derivada espacial obtenida por el método espectral (detallada en la sección 5.6), el subíndice j corresponde a los nodos en el espacio, y el superíndice n a los intervalos de tiempo. El método espectral, aunque hace al esquema espacialmente de alto orden, tiene fuertes limitaciones de estabilidad.

REFERENCIAS

Canuto C.G., Hussaini M. Y., Quarteroni A. y Zang T. A., *Spectral Methods: Evolution to Complex Geometries and Applications to Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, 1990.

Karhiadakis E. G. y Sherwin J. S., *Spectral/hp Element Methods for CFD*, Oxford University Press, 1999.

LeVeque y Randall, "Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems", *Cambridge University Press*, 2002.

Toro E. F., "Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics", *Springer-Verlag*, 1999.

4. DEFINICIONES NECESARIAS

En el análisis del funcionamiento de un esquema, se debe estudiar la consistencia, la precisión, la estabilidad y la convergencia. Un esquema debe cumplir todos estos requisitos para poder ser empleado con fiabilidad. Estas condiciones se obtienen comparando la solución numérica contra una de referencia. Cuando existe una solución exacta o analítica esta se usa de referencia; pero en problemas prácticos se recurre a mediciones de campo; o bien, a otro modelo ya validado.

4.1 Error por truncamiento

La expansión de la serie de Taylor en diferencias hacia delante de la derivada espacial en ϕ_j para cualquier tiempo n

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_j^n = \underbrace{\frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x}}_{\text{Diferencias finitas}} - \underbrace{\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_j^n \frac{\Delta x}{2} - \left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_j^n \frac{(\Delta x)^2}{6} + \dots}_{\text{Error por truncamiento}} \quad (4.1)$$

En la ec 4.1, el primer término del lado derecho representa la derivada parcial. Los restantes términos del lado derecho constituyen el error de truncamiento. El error por truncamiento expresa cuales términos no se incluyen en el cálculo. En la ec 4.1, el término multiplicado por Δx es el primero no incluido y las diferencias finitas son llamadas de primer orden de precisión. Lo anterior, se expresa formalmente

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_j^n = \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (4.2)$$

$\mathcal{O}(\Delta x)$ es la notación formal del “orden de Δx ”.

4.2 Consistencia y precisión

Para que un esquema sea consistente, debe expresar de manera adecuada las ecuaciones diferenciales de las cuales parte. La comprobación de la consistencia radica en valuar la función ϕ_j^m en la ecuación discretizada y desarrollada en una serie de Taylor centrada en ϕ_j^n , conservando en la sustitución los términos de alto orden. Por ejemplo, para el esquema de diferencias hacia adelante en el tiempo y centrado en el espacio

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} = -\frac{c}{2\Delta x} (\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n) \quad (4.3)$$

Si la función $\phi(x, t)$ es suficientemente suave, la expansión de los términos en una serie de Taylor puede expresarse como

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n + \Delta t \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right)_j^n + \dots \quad (4.4)$$

$$\phi_{j+1}^n = \phi_j^n + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_j^n + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots \quad (4.5)$$

$$\phi_{j-1}^n = \phi_j^n - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_j^n - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots \quad (4.6)$$

Al despejar y sustituir en la ec 4.3

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + \frac{C}{2\Delta x} (\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + C \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_j^n + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right)_j^n + \frac{\Delta x^2}{6} C \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_j^n - \mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^4) \quad (4.7)$$

De acuerdo con lo esperado, la precisión del esquema es de primer orden en el tiempo, y de segundo orden en el espacio; así, el lado derecho de la ecuación anterior desaparece de forma lineal con Δt , y de manera cuadrática para Δx , cuando estos tienden a cero; por tanto, el esquema es consistente. Hirsch (1995) interpreta la consistencia de un esquema como:

“Los valores ϕ_j^n se consideran como la solución de la ecuación discretizada, aunque no satisfaga exactamente la ecuación diferencial (por un error residual o de truncamiento), con el uso de valores finitos de Δt y Δx .”

Los esquemas de alto orden se asocian con un error de truncado que desaparece rápidamente, situación que se busca al momento de construir esquemas consistentes.

4.3 Estabilidad

Es una de las propiedades más críticas de los métodos numéricos. Únicamente en los casos donde la solución es estable, el error de truncado tiende a cero cuando Δt y $\Delta x \rightarrow 0$; pero con lo anterior se afirma que las secuencias de ϕ_j^n tienden a la solución de referencia. Por otro lado, cuando la solución es inestable, mientras más se refina la malla, la solución del esquema empeora cada vez más, independientemente de que el error de truncado tienda a cero. Lo anterior sugiere que se puede definir a la estabilidad en términos de la secuencia de soluciones ϕ_j^n , conforme se refina la malla.

Otra forma de garantizar que un esquema sea estable consiste en no permitir que los errores crezcan indefinidamente, es decir, que sean amplificados sin límite alguno. Dicho de otro modo, la condición de estabilidad puede plantearse como la necesidad de controlar de manera uniforme el error entre la solución numérica y la de referencia, cuando $n \rightarrow \infty$.

O'Brien *et al.* (1950) proponen como definición de la estabilidad el garantizar que no aumente el error por redondeo, y puede escribirse como

$$\varepsilon_j^n = \phi_j^n_{numérica} - \phi_j^n_{referencia} \quad (4.8)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\varepsilon_j^n| \leq K \quad \text{para un } \Delta t \quad (4.9)$$

con K independiente de n .

Otra definición, introducida por Lax y Rychmayer (1956) y desarrollada por Rychmayer y Morton (1967) se basa en medir en el tiempo el comportamiento de la solución, en lugar del comportamiento del error, implicando que ningún componente de la solución inicial se puede amplificar sin límite alguno.

Las diferentes condiciones de estabilidad son únicamente un requisito para los esquemas numéricos y no para la ecuación diferencial.

4.4 Convergencia

En este caso, la solución numérica de ϕ_j^n se compara con una solución de referencia de la ecuación diferencial, en cualquier punto del dominio en el espacio y el tiempo, en especial cuando Δt y $\Delta x \rightarrow 0$; esto es, cuando hay un refinamiento de la malla con un *Courant* constante. Así, la condición de la solución numérica para lograr convergencia a la solución de referencia puede expresarse en términos del error y satisfacer

$$\lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ \Delta x \rightarrow 0 \\ n \rightarrow \infty}} |error_j^n| = 0 \quad \text{con } C \text{ constante.} \quad (4.10)$$

En un esquema con una adecuada condición inicial y de frontera, la estabilidad es un requisito necesario y suficiente para la convergencia (Rychmayer y Morton, 1967).

Por lo anterior, para estudiar un problema se debe:

1. Analizar la condición de consistencia, para determinar el orden de precisión del esquema y el error de truncamiento.
2. Examinar las propiedades de estabilidad, con respecto a la distribución y propagación del error de la solución.

4.5 Acotamiento

Un método puede generar valores que no corresponden a la solución, es decir, oscilaciones espurias y sin sentido físico (*wiggles*), que pueden amplificarse con el avance de la solución en el tiempo. La interpolación de los valores de ϕ con los valores vecinos debería garantizar su acotamiento, pero no siempre sucede, así que se pueden emplear otras formas para lograrlo.

4.5.1 Criterio de acotamiento

Este criterio fue propuesto por Leonard (1979), quien lo denominó *CBC (Convection Boundedness Criterion)*. Existen diversas maneras de acotar los esquemas; una de ellas, bastante popular en la dinámica de gases, es la variación total suavizada *TVD (Total Variation Diminishing)*, detallada en el Apéndice B; pero el *CBC* es utilizado en la presente tesis por su simplicidad de uso, interpretación y programación.

Leonard (1988), en términos de su Variable Normalizada, *VN*, descubrió en qué momento se generaban oscilaciones espurias en la utilización de un esquema, y lo describió como sigue: para la convección en una dimensión, expresada para *VF* centrado en j y usando la *VN*, detallada en el Apéndice A,

$$\hat{\phi}_{j+1/2} - \hat{\phi}_{j-1/2} = \frac{\phi_{j+1/2} - \phi_{j-1/2}}{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}} = \bar{S}^* \quad (4.11)$$

donde \bar{S}^* es el término fuente neto efectivo en la celda $\hat{\phi}_j$.

Las curvas hechas por cualquier esquema en el Diagrama de Variable Normalizada, *NVD (Normal Variable Diagram)*, fig 4.1, y empleando las *VN*, $\hat{\phi}_j$ y $\hat{\phi}_{j-1/2}$, deben atravesar los puntos $(\hat{\phi}_{j-1}, 0)$, $(\hat{\phi}_j, 0.75)$ y $(\hat{\phi}_{j+1}, 1)$.

Con \bar{S}^* positivo, $\hat{\phi}_j$ debe ser mayor que cero, y viceversa. Si $\hat{\phi}_j \approx 0$, el valor en la cara derecha $\hat{\phi}_{j+1/2}$ es mayormente dominado por las condiciones aguas arriba y \bar{S}^* es pequeño; mientras que para $\hat{\phi}_j \approx 1$, las condiciones aguas abajo son las que dominan. En ambas situaciones (altos gradientes), si ocurre un cambio rápido en ϕ es porque existen cambios en regiones de menor tamaño que Δx y la resolución de la malla no es capaz de describir la distribución de ϕ ; por consiguiente, no es posible resolver la advección por ningún método. Para gradientes moderados de ϕ , con $\hat{\phi}_j \approx 0.5$, la fig 4.1 muestra las posibles variaciones de ϕ a través de tres nodos sucesivos de la malla, para diversos problemas.

$$1 < \hat{\phi}_{j+1/2} \leq \hat{\phi}_j, \quad 1 \leq \hat{\phi}_{j-1/2} < \hat{\phi}_{j+1/2} \quad \text{para } \bar{S}^* > 0, \hat{\phi}_j > 1 \quad (4.12 \text{ a})$$

$$0 < \hat{\phi}_{j-1/2} \leq \hat{\phi}_j < \hat{\phi}_{j+1/2} \leq 1 \quad \text{para } \bar{S}^* \geq 0, 0 \leq \hat{\phi}_j < 1 \quad (4.12 \text{ b})$$

$$\hat{\phi}_j \leq \hat{\phi}_{j+1/2} < \hat{\phi}_{j-1/2} < 0 \quad \text{para } \bar{S}^* < 0, \hat{\phi}_j < 0 \quad (4.12 \text{ c})$$

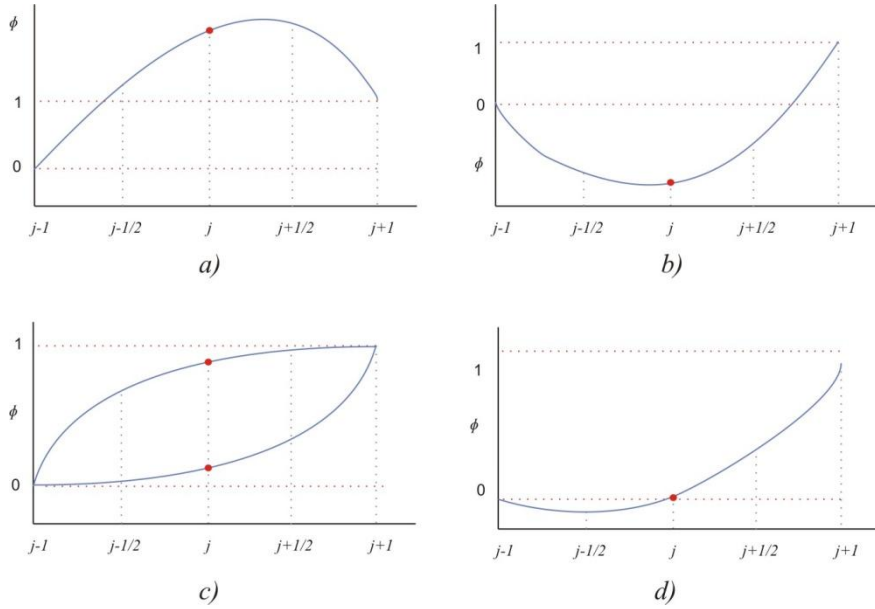


Figura 4.1 Perfiles de $\hat{\phi}$ entre tres nodos sucesivos: a) $\hat{\phi}_j > 1$, desigualdad 4.10 a; b) $\hat{\phi}_j < 0$, desigualdad 4.10 c; c) $\hat{\phi}_j \in [0,1]$, desigualdad 4.10b; d) $\hat{\phi}_j < 0$, $\bar{S}^* > 0$, $\hat{\phi}_{j+1/2} > \hat{\phi}_{j-1/2}$ (caso no real físicamente)

El acotamiento es muy fácil de implementar, lo que permite erradicar oscilaciones espurias en la solución y limitar con respecto a los valores de nodos vecinos. Hay varias maneras de acotar la advección, pero el CBC es más formal y riguroso, convirtiéndose en un método necesario mas no suficiente. El CBC se define a partir de una función f continua y creciente, que describe el modelado de la VN en una de las caras mediante interpolación con solo tres nodos vecinos. Así, la cara derecha del VC, $\hat{\phi}_{j+1/2}$, queda en función del nodo aguas arriba $\hat{\phi}_j$, esto es $\hat{\phi}_{j+1/2} = f(\hat{\phi}_j)$. Este criterio es independiente de la cara que se esté utilizando, solo bastará recorrer los índices.

Una solución estará acotada si (fig 4.2):

- Para $\hat{\phi}_j \in [0,1]$, f es acotado en la parte inferior por la función $\hat{\phi}_{j+1/2} = \hat{\phi}_j$, en la parte superior por la unidad y pasando a través de los puntos (0,0) y (1,1).
- Para $\hat{\phi}_j \notin [0,1]$, f es igual a $\hat{\phi}_j$.

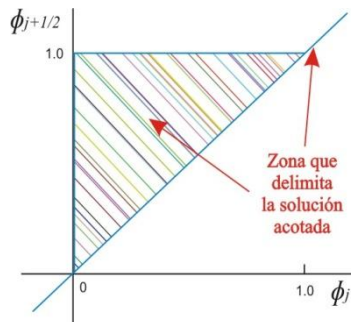


Figura 4.2 NVD con el CBC

El diagrama *CBC* garantiza acotamiento porque:

- $\hat{\phi}_{j+1/2} = \hat{\phi}_j$ en el tercer cuadrante, genera $\overline{S^*} \approx 0$; en cualquier otro caso, la interpolación viola el acotamiento y genera oscilaciones hacia abajo.
- $\hat{\phi}_{j+1/2} = \hat{\phi}_j$ a la derecha de la unidad, genera $\overline{S^*} > 0$; en cualquier otro caso, la interpolación viola el acotamiento y genera oscilaciones hacia arriba o exageración de los máximos.
- El área triangular, con $\overline{S^*} > 0$, es conocida como región monótona.

En la dinámica computacional de fluidos, el acotamiento (*boundedness*) se asocia con las propiedades de la diagonal dominante en el esquema, esto es, la solución obtenida por aproximación numérica se acota para despojarla de oscilaciones (*overshoots* o *undershoots*) que carecen de significado físico.

Esquemas Conocidos Normalizados

Al aplicar la normalización de Leonard (ec A.1) a algunos esquemas conocidos de la sección 5.1, en la cara derecha del VC centrado en j , resultan las siguientes expresiones:

- Primer orden hacia atrás $\hat{\phi}_{j+1/2} = \hat{\phi}_j$ (4.13)

- Segundo orden hacia atrás $\hat{\phi}_{j+1/2} = \frac{3}{2}\hat{\phi}_j$ (4.14)

- Diferencias centradas $\hat{\phi}_{j+1/2} = \frac{1}{2}(\hat{\phi}_j + 1)$ (4.15)

- QUICK $\hat{\phi}_{j+1/2} = \frac{3}{8}(2\hat{\phi}_j + 1)$ (4.16)

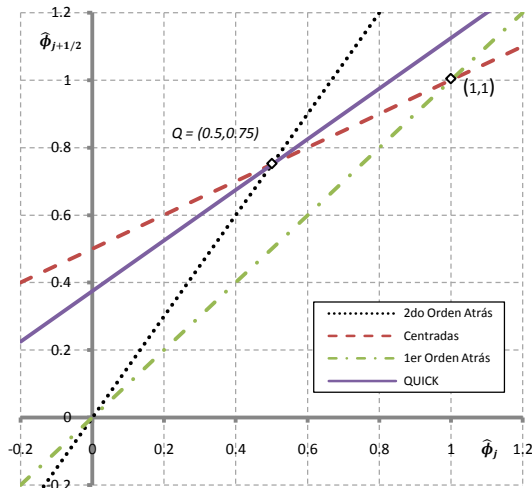


Figura 4.3 Normalización de esquemas para la cara derecha

4.6 Notación

Existe una gran variedad de formas para representar y operar los nodos utilizados en DF o las caras en VF . La preferencia por manejar alguna notación depende casi siempre de la escuela del usuario y de que se sienta cómodo y familiarizado con la misma. El cambio de una expresión de una notación a otra es sencillo, e incluso es posible mezclar usando una notación para las caras y otra para los nodos. Las notaciones expresadas a continuación corresponden a un flujo de izquierda a derecha.

La primera notación consiste en subíndices respecto a direcciones. La referencia para cada nodo es: atrás o aguas arriba “ U ” (*Upstream*), nodo central “ C ” (*Central*), adelante o aguas abajo “ D ” (*Down*), y para el flujo en las caras del VC : cara izquierda “ b ” (*backward*) y derecha “ f ” (*forward*).

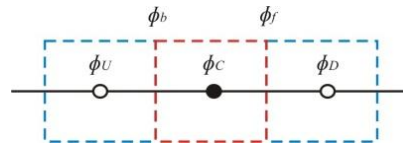


Figura 4.4 Notación 1

La siguiente notación emplea los subíndices: izquierda “ L ” (*Left*), central “ C ” (*Central*), derecha “ R ” (*Right*); mientras el flujo en las caras del VC , con letras minúsculas, izquierda “ l ” (*left*) y derecha “ r ” (*right*).

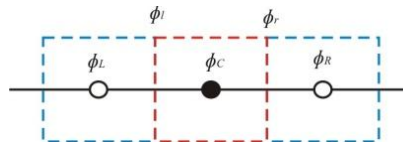


Figura 4.5 Notación 2

El tercer tipo de notación hace referencia a las direcciones geográficas: para dos nodos atrás del central “ WW ”, un nodo atrás “ W ” (*West*), central “ P ” o “ C ” (*Central*), aguas abajo “ E ” (*East*) y dos nodos abajo “ EE ”; por tanto, para las caras del VC , con letras minúsculas: izquierda “ w ” (*west*) y derecha “ e ” (*East*). Esta notación cuenta de manera particular con una extensión para dos dimensiones con “ NN , N , n , S y SS ”, haciendo referencia a norte y sur.

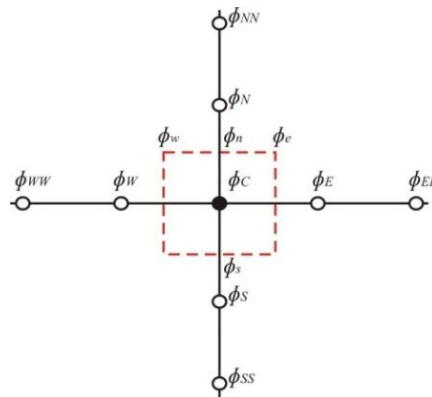


Figura 4.6 Notación 3

El último tipo de notación, aunque es más abstracta o numérica, se relaciona mejor con los índices empleados en la programación y eso simplifica el paso de un esquema a código. La notación se refiere con “ $j-2$ ” para dos nodos aguas arriba, “ $j-1$ ” en el nodo anterior, “ j ” en el centro, “ $j+1$ ” a la derecha y “ $j+2$ ” para dos nodos aguas abajo. El flujo en las caras es representado con “ $j-1/2$ ” en la anterior y “ $j+1/2$ ” en la posterior. Esta notación es la utilizada en la presente tesis.

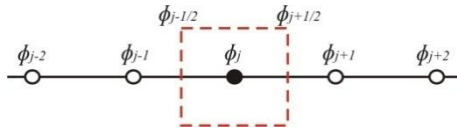


Figura 4.7 Notación 4

En el capítulo siguiente se plantean numerosos esquemas en VF expresados para la cara derecha; no existe una razón especial para la elección de esta cara, y solo basta con recorrer el índice un nodo a la izquierda (de $j+1/2$ a $j-1/2$) para referirse a la cara izquierda, finalmente, la cara izquierda de una celda es la cara derecha de la celda vecina anterior.

REFERENCIAS

Gaskell P. H. y Lau A. K. C., “Curvature-compensated convective transport: Smart, A new boundedness-preserving transport algorithm”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8, 1988, 617-641.

John D. Anderson, “Computational Fluid Dynamics, the basics with applications”, Mc Graw Hill, 1995.

Lax P. D. y Richtmayer R. D., “Survey of the stability of linear finite difference equation”, *Comm. Pure and Applied Mathematics*, 1956, 17, 267-93.

Leonard B. P., “Adjusted quadratic upstream algorithms for transient incompressible convection”, *AIAA Journal*, 1979, 226-233.

Leonard B. P. y Simin Mokhtari, “Beyond First-Order Upwinding: The ULTRA-SHARP Alternative for Non-Oscillatory Steady-State Simulation of Convection”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30, 1990, 729-766.

O’Brien G. G., Hayman M. A. y Kaplan S., “A study of the numerical solution of partial differential equations”, *Journal Mathematics and Physics*, 1950, 29, 223-51.

Shaw C. T., “Using Computational Fluid Dynamics”, Prentice Hall, 1992.

5. ESQUEMAS DE SOLUCIÓN

5.1 Lineales

Esta primera familia recibe su nombre por emplear el mismo esquema de solución para todos los nodos del dominio. Es conocido el orden, estabilidad, precisión y convergencia correspondientes a estos esquemas.

5.1.1 Segundo orden hacia atrás

La idea original de las diferencias de segundo orden hacia atrás, SOU (*Second Order Upwind*) se remonta a la década de 1960 (Price, 1966, y Vanka, 1987). Formalmente se dispone de una precisión de segundo orden, y en trabajos posteriores, como Atias *et al* (1977), se concluye que este esquema tiene mayor precisión que uno de formulación hacia atrás de primer orden, FOU (*First Order Upwind*). Históricamente y de manera paralela, se desarrollaron otros dos esquemas con diferencias de segundo orden hacia atrás, por ejemplo: QUICK (que se verá con detalle más adelante) y otros que también ofrecen una mejor opción con respecto a las diferencias de primer orden.

Para resolver la advección, con el método de diferencias finitas, se puede hacer uso de diferencias centradas, pero esta formulación tiene mucha difusión numérica; por ello, se prefiere la formulación de diferencias hacia atrás, como sigue

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{c}{2}(\phi_j^n - \phi_{j-1}^n) \quad (5.1)$$

Este esquema solo tiene precisión de primer orden, comparado con las diferencias centradas de segundo orden. Al desarrollar las diferencias de segundo orden hacia atrás, disminuye el error de truncamiento, y resulta

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{c}{2}(3\phi_j^n - 4\phi_{j-1}^n + \phi_{j-2}^n) \quad (5.2)$$

Tal esquema, denominado SOU, tiene formalmente un error de truncamiento de $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ y una convergencia cuadrática, comparado con la convergencia lineal de un esquema de primer orden hacia atrás (Vanka, 1987). La fig 5.1 muestra que el esquema emplea tres nodos hacia atrás. Por ser un esquema hacia atrás, se presentan problemas en la frontera aguas arriba, para obtener en cualquier tiempo el segundo nodo del dominio, o sea $\phi_{j=2}^n$, dado que solo existe un nodo aguas arriba; así, es necesario utilizar otro esquema o modificar la ec 5.2 (a diferencias hacia atrás, por ejemplo). El anterior comentario es válido para casi todos los esquemas siguientes.

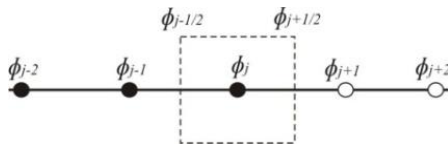


Figura 5.1 Nodos empleados por SOU

5.1.2 Predictor-corrector de segundo orden

La selección entre un esquema centrado y uno hacia atrás tiene ventajas y desventajas. Un problema se simplifica con mantener las fronteras fijas, que no cambien en el tiempo, para que no introduzcan ruido al dominio, y así dedicar la atención a resolver ϕ en la parte interna del dominio. Al discutir SOU, se vio que un esquema hacia atrás necesita información en la frontera aguas arriba para cualquier tiempo $\phi(1, t)$, y que además se presenta una dificultad para calcular el segundo nodo. Por otro lado, en un esquema centrado, hay un problema para calcular el último nodo del dominio; por tanto, en estos esquemas se torna indispensable conocer ambas fronteras para cualquier tiempo, $\phi(1, t)$ y $\phi(j, t)$, o hacer una modificación o hipótesis para aplicar el esquema. Lo mencionado es un arreglo para que funcione el esquema, pero es formalmente incorrecto para esta *EDP*, que por definición solo requiere información en la frontera aguas arriba.

MacCormack

El esquema lleva el nombre de su autor, MacCormack (1969), y plantea el uso de un predictor con diferencias de primer orden hacia atrás

$$\phi_j^{\overline{n+1}} = \phi_j^n - C \nabla \phi_j^n \quad (5.3)$$

Los operadores en diferencias finitas hacia adelante y hacia atrás están definidos por

$$\Delta \phi_j = \phi_{j+1} - \phi_j, \quad \nabla \phi_j = \phi_j - \phi_{j-1} \quad (5.4)$$

Al sustituir el operador de la ec 5.3, resulta

$$\phi_j^{\overline{n+1}} = \phi_j^n - C(\phi_j^n - \phi_{j-1}^n) \quad (5.5)$$

Para la parte correctora se utiliza un operador de diferencias hacia adelante

$$\phi_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\phi_j^n + \phi_j^{\overline{n+1}}) - \frac{C}{2} \Delta \phi_j^{\overline{n+1}} \quad (5.6)$$

Con el uso del predictor y el corrector, se obtiene un esquema de segundo orden con diferencias no centradas. Al expandir las diferencias, sustituir el término predictor y simplificar, se consigue el esquema en *DF*

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{1}{2}C(\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n) + \frac{1}{2}C^2(\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n) \quad (5.7)$$

Este esquema se puede modificar invirtiendo el tipo de diferencias empleadas en el predictor y en el corrector, o sea, con diferencias hacia adelante en el predictor y diferencias hacia atrás en el corrector.

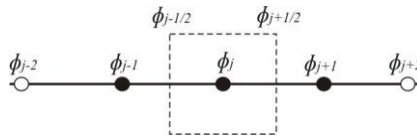


Figura 5.2 Nodos usados por MacCormack

Con corrector hacia atrás

Con el mismo predictor de MacCormack, ec 5.3, y con el objetivo de construir un esquema completamente de segundo orden hacia atrás, Warming (1976) utiliza un corrector hacia atrás

$$\phi_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\phi_j^n + \overline{\phi_j^{n+1}}) - \frac{c}{2}\nabla^2\phi_j^n - \frac{c}{2}\nabla\overline{\phi_j^{n+1}} \quad (5.8)$$

donde ∇^2 es un operador de dos veces diferencias hacia atrás. Al desarrollar las diferencias, sustituir el término predictor y simplificar, se obtiene el esquema en DF

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{1}{2}C(3\phi_j^n - 4\phi_{j-1}^n + \phi_{j-2}^n) + \frac{1}{2}C^2(\phi_j^n - 2\phi_{j-1}^n + \phi_{j-2}^n) \quad (5.9)$$

En este esquema se puede permutar el tipo de diferencias en el predictor y corrector (∇ por Δ , y ∇^2 por $-\Delta^2$).

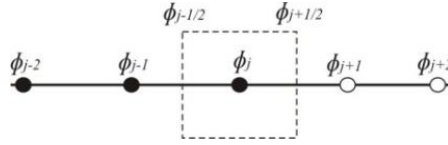


Figura 5.3 Nodos empleados por un predictor-corrector de segundo orden hacia atrás

La manera tradicional de manejar el esquema de MacCormack y el de segundo orden hacia atrás es calculando el predictor y posteriormente el corrector, pero las expresiones 5.7 y 5.9 tienen de forma implícita el predictor y el corrector en una expresión directa que facilita y reduce el número de operaciones.

5.1.3 QUICK

Para aprovechar las ventajas de las diferencias hacia atrás y las centradas, y además evitar las desventajas de cada una, es necesario un esquema de interpolación que proporcione precisión y estabilidad. Al usar una interpolación centrada, aun con tres nodos, se presenta inestabilidad, pero un modo de solucionar esta problemática es el reconocido esquema QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*), propuesto por Leonard (1979), donde se utiliza una interpolación cuadrática hacia atrás, no centrada, con tres nodos (ϕ_{j-1} , ϕ_j , ϕ_{j+1}). De manera detallada, esta propuesta consiste en una interpolación lineal corregida para cada cara de forma proporcional a la curvatura, con mayor peso en el término hacia atrás. Para la cara derecha del VC centrada en j , resulta

$$\phi_{j+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_j + \phi_{j+1}) - \frac{1}{8}(\phi_{j-1} + \phi_{j+1} - 2\phi_j) \quad (5.10)$$

Los nodos del primer grupo se refieren a una diferencia centrada, mientras que el último grupo de nodos proporcionan información con diferencias hacia atrás de la curvatura de la cara en turno. Cada cara requiere tres nodos para su interpolación: dos son hacia atrás y uno hacia adelante. Es sencillo demostrar que este esquema es de tercer orden.

Para pasar la expresión anterior de VF a una expresión de DF , es necesario plantear la interpolación en términos del nodo central ϕ_j . Se requieren cuatro nodos: el nodo central, dos hacia atrás y uno hacia adelante, y se genera un esquema cúbico no conservativo. Para expresar en DF , solo se necesita la sustitución algebraica de las expresiones de ambas caras de la celda tratada. El esquema resulta ser muy largo en primera instancia; sin embargo, al reducir términos algebraicamente se llega al esquema compacto

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{C}{8} (\phi_{j-2}^n - 7\phi_{j-1}^n + 3\phi_j^n + 3\phi_{j+1}^n) \quad (5.11)$$

El esquema es apropiado para resolver flujo permanente o cuasi permanente. El número total de operaciones de QUICK es relativamente bajo.

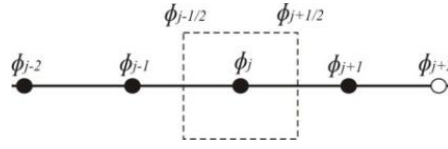


Figura 5.4 Nodos usados por QUICK

QUICK, por sus características, resulta muy conveniente; por ello, es muy utilizado. El esquema y la referencia constituyen todo un pilar en la teoría de solución de la advección, tanto así que son los más citados en la bibliografía del tema.

5.1.4 QUICKEST

En un fenómeno de transporte con dominio de la advección en flujo no permanente, se requiere una mejor interpolación para obtener la solución. La expresión de advección en VF necesita emplear un método para interpolar ϕ en las caras con un barrido de los valores hacia adelante. QUICKEST también fue planteado por Leonard (1979), y es un esquema que adicionalmente incluye términos del gradiente, adjuntos a los términos hacia abajo; se puede decir que QUICKEST modifica a QUICK con una revisión que estima el sentido del flujo (QUICK + *Estimated Streaming Terms*).

La expresión del esquema en VF para la cara derecha centrada en j es

$$\phi_{j+1/2} = \left[\frac{1}{2} (\phi_j + \phi_{j+1}) - \frac{\Delta x}{2} C \text{GRAD}_{j+1/2} + \frac{\Delta x^2}{6} (C^2 - 1) \text{CURV}_{j+1/2} \right] \quad (5.12)$$

El término gradiente se calcula con una diferencia centrada; la curvatura, con una diferencia hacia atrás

$$\text{GRAD}_{j+1/2} = (\phi_{j+1} - \phi_j) / \Delta x \quad (5.13)$$

$$\text{CURV}_{j+1/2} = (\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}) / \Delta x^2 \quad (5.14)$$

El gradiente y la curvatura de ambas caras del VC en la ec 5.12, y sustituidos en la definición de DF , forjan el siguiente esquema equivalente para $C = cte$ y $u = cte$

$$\begin{aligned} \phi_j^{n+1} = \phi_j^n - C \left(\frac{1}{6} \phi_{j-2}^n - \phi_{j-1}^n - \frac{1}{2} \phi_j^n + \frac{1}{3} \phi_{j+1}^n \right) + \frac{C^2}{2} (\phi_{j-1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j+1}^n) \\ + \frac{C^3}{6} (\phi_{j-2}^n - 3\phi_{j-1}^n + 3\phi_j^n - \phi_{j+1}^n) \end{aligned} \quad (5.15)$$

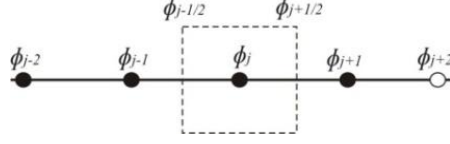


Figura 5.5 Nodos usados por QUICKEST

5.1.5 Cuarto orden centrado

Hasta este punto se han utilizado esquemas de segundo y tercer orden, ya sean centrados o hacia atrás. En este inciso se presenta un esquema de diferencias centradas de cuarto orden, que tiene la finalidad de poder comparar ventajas y desventajas del empleo de esquemas de orden mayor. La construcción de este tipo de esquemas únicamente requiere del desarrollo expuesto en la sección 3.2. Para la cara derecha,

$$\phi_{j+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_{j+1} + \phi_j) - \frac{1}{16}(\phi_{j+2} - \phi_{j+1} - \phi_j + \phi_{j-1}) \quad (5.16)$$

Expresado en DF ,

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - C \left[\frac{1}{2}(\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n) - \frac{1}{16}(\phi_{j+2}^n - 2\phi_{j+1}^n + 2\phi_{j-1}^n - \phi_{j-2}^n) \right] \quad (5.17)$$

Este esquema se aplica desde el nodo 3 hasta el antepenúltimo $jj - 2$.

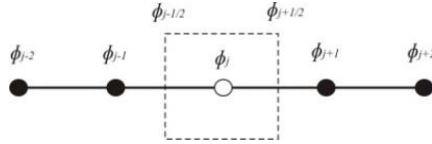


Figura 5.6 Nodos usados por Cuarto Orden Centrado

5.2 Tipo Lax-Wendroff

Históricamente, esta familia de esquemas se considera como la primera forma moderna de resolver *EDP*. Estos esquemas se originan en el esquema de Lax-Friedrichs (Lax, 1957), donde para lograr estabilidad se utiliza una diferencia centrada; a costa de esto, resulta altamente difusivo. En la ecuación de advección escrita para VF , el valor de ϕ en las caras queda determinado por el número de *Courant* y el tipo de interpolación realizada, mientras que la conservación está garantizada por la misma definición. Con esta metodología y de manera centrada, se desarrollan los esquemas de orden par; en tanto que los de orden impar hacia atrás son obtenidos con pequeñas modificaciones.

El punto de partida es la forma más sencilla de definir el valor en la cara derecha de un VF ,

$$\phi_r^{(0)} = \frac{1}{2}(\phi_{j+1} + \phi_j) \quad (5.18)$$

5.2.1 Primer orden

La interpolación lineal en la cara derecha lleva a la primera diferencia centrada representada por

$$\delta_r^1 = \phi_{j+1}^{(0)} - \phi_j^{(0)} \quad (5.19)$$

Para construir un esquema de primer orden hacia atrás (\Leftarrow), en la cara derecha se usa

$$\phi_r^{(1\Leftarrow)} = \phi_r^{(0)} - \frac{\delta_r^1}{2} = \phi_j \quad (5.20)$$

5.2.2 Segundo orden

Los esquemas de segundo orden y subsecuentes, de N -orden centrados y hacia atrás emanan del conocido esquema base de Lax-Wendroff (1960), $L-W$. Este tipo de esquemas se conoce como de interpolación para el modelado de un transitorio, TIM (*Transient Interpolation Modeling*). La interpolación cuadrática y centrada (\Leftrightarrow) para la cara derecha de un volumen de control

$$\phi_r^{(2\Leftarrow)} = \phi_r^{(0)} - \frac{c \delta_r^1}{2} \quad (5.21)$$

Esto es

$$\phi_r^{(2\Leftarrow)} = \frac{1}{2}[(\phi_{j+1} + \phi_j) - C(\phi_{j+1} - \phi_j)] \quad (5.22)$$

Al sustituir y obtener la expresión para diferencias finitas,

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{c}{2}(\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n) + \frac{c^2}{2}(\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n) \quad (5.23)$$

El esquema de segundo orden hacia atrás tiene semejanza con **QUICKEST**, detallado anteriormente. Este esquema, de segundo orden hacia atrás, se convierte en una relación recursiva para esquemas de orden mayor del tipo $L-W$

$$\phi_r^{(2\Leftarrow)} = \phi_r^{(2\Leftarrow)} + \frac{(C-1)}{2!} \left(\mathcal{D}_r^2 - \frac{\delta_r^3}{2} \right) \quad (5.24)$$

$2\mathcal{D}_r^2$ es la suma de diferencias de segundo orden, centradas en $j + 1$ y j ,

$$2\mathcal{D}_r^2 = (\phi_{j+2} - 2\phi_{j+1} + \phi_j) + (\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) = (\phi_{j+2} - \phi_{j+1} - \phi_j + \phi_{j-1}) \quad (5.25)$$

δ_r^3 es un término de tercer orden, centrado también en la cara derecha,

$$\delta_r^3 = \phi_{j+2} - 3\phi_{j+1} + 3\phi_j - \phi_{j-1} \quad (5.26)$$

El desarrollo para VF ,

$$\phi_r^{(2\Leftarrow)} = \frac{1}{2}(3\phi_j - \phi_{j-1}) - \frac{c}{2}(\phi_j - \phi_{j-1}) \quad (5.27)$$

En diferencias finitas,

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^n - \frac{c}{2}(3\phi_j^n - 4\phi_{j-1}^n + \phi_{j-2}^n) + \frac{c}{2}(\phi_j^n - 2\phi_{j-1}^n + \phi_{j-2}^n) \quad (5.28)$$

5.2.3 Tercer orden

Para obtener un esquema de tercer orden hacia atrás, basta con emplear de manera canónica los términos del esquema de segundo orden centrado $\phi_r^{(2\Leftarrow)}$ (ec 5.22), acompañado de un valor adicional

$$\phi_r^{(3\Leftarrow)} = \phi_r^{(2\Leftarrow)} + \frac{(c^2-1^2)}{3!}(\mathcal{D}_r^2 - \frac{\delta_r^2}{2}) \quad (5.29)$$

Con el desarrollo de los términos, la expresión para VF es

$$\phi_r^{(3\Leftarrow)} = \frac{1}{6}(2\phi_{j+1} + 5\phi_j - \phi_{j-1}) - \frac{c}{2!}(\phi_{j+1} - \phi_j) + \frac{c^2}{3!}(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) \quad (5.30)$$

Para diferencias finitas,

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^{n+1} - c \left[\begin{aligned} &\frac{1}{6}(2\phi_{j+1}^n + 3\phi_j^n - 6\phi_{j-1}^n + \phi_{j-2}^n) - \frac{c}{2!}(\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n) \\ &+ \frac{c^2}{3!}(\phi_{j+1}^n - 3\phi_j^n + 3\phi_{j-1}^n - \phi_{j-2}^n) \end{aligned} \right] \quad (5.31)$$

5.2.4 Cuarto orden

En consecuencia, el esquema centrado de cuarto orden proporciona menos peso al término δ_r^3

$$\phi_r^{(4\Leftarrow)} = \phi_r^{(2\Leftarrow)} + \frac{(c^2-1^2)}{3!}(\mathcal{D}_r^2 - \frac{c\delta_r^3}{4}) \quad (5.32)$$

Expresado para la cara derecha en términos de DF ,

$$\begin{aligned} \phi_r^{(4\Leftarrow)} &= \frac{1}{2 \cdot 3!}(-\phi_{j+2} + 7\phi_{j+1} + 7\phi_j - \phi_{j-1}) - \frac{c}{4!}(-\phi_{j+2} + 15\phi_{j+1} - 15\phi_j + \phi_{j-1}) \\ &+ \frac{c^2}{2 \cdot 3!}(\phi_{j+2} - \phi_{j+1} - \phi_j + \phi_{j-1}) - \frac{c^3}{4!}(\phi_{j+2} - 3\phi_{j+1} + 3\phi_j - \phi_{j-1}) \end{aligned} \quad (5.33)$$

Para DF ,

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^{n+1} - c \left[\begin{aligned} &\frac{1}{2 \cdot 3!}(-\phi_{j+2}^n + 8\phi_{j+1}^n - 8\phi_{j-1}^n + \phi_{j-2}^n) \\ &+ \frac{c}{4!}(-\phi_{j+2}^n + 16\phi_{j+1}^n - 30\phi_j^n + 16\phi_{j-1}^n - \phi_{j-2}^n) \\ &+ \frac{c^2}{2 \cdot 3!}(\phi_{j+2}^n - 2\phi_{j+1}^n + 2\phi_{j-1}^n - \phi_{j-2}^n) - \frac{c^3}{4!}(\phi_{j+2}^n - 4\phi_{j+1}^n + 6\phi_j^n - 4\phi_{j-1}^n + \phi_{j-2}^n) \end{aligned} \right] \quad (5.34)$$

5.2.5 Orden N

El esquema de quinto orden hacia atrás tiene una construcción muy similar,

$$\phi_r^{(5\Leftarrow)} = \phi_r^{(4\Leftarrow)} + \frac{(c^2-1^2)(c^2-2^2)}{5!} \left(\mathcal{D}_r^4 - \frac{\delta_r^5}{2} \right) \quad (5.35)$$

donde $2\mathcal{D}_r^4$ es la suma de diferencias de cuarto orden

$$2\mathcal{D}_r^4 = \phi_{j+3} - 3\phi_{j+2} + 2\phi_{j+1} + 2\phi_j - 3\phi_{j-1} + \phi_{j-2} \quad (5.36)$$

δ_r^5 es un término de quinto orden centrado en la cara derecha

$$\delta_r^5 = \phi_{j+3} - 5\phi_{j+2} + 10\phi_{j+1} - 10\phi_j + 5\phi_{j-1} - \phi_{j-2} \quad (5.37)$$

Como consecuencia, a partir del esquema de quinto orden es fácil articular el de sexto orden centrado (proporcionando menos peso a δ_r^5)

$$\phi_r^{(6\Leftarrow)} = \phi_r^{(4\Leftarrow)} + \frac{(c^2-1^2)(c^2-2^2)}{5!} \left(\mathcal{D}_r^4 - \frac{c}{6} \delta_r^5 \right) \quad (5.38)$$

Al continuar con la mecánica de construcción de los esquemas, el de séptimo orden hacia atrás y el de octavo orden centrado resultan

$$\phi_r^{(7\Leftarrow)} = \phi_r^{(6\Leftarrow)} + \frac{(c^2-1^2)(c^2-2^2)(c^2-3^2)}{7!} \left(\mathcal{D}_r^6 - \frac{\delta_r^7}{2} \right) \quad (5.39)$$

$$\phi_r^{(8\Leftarrow)} = \phi_r^{(6\Leftarrow)} + \frac{(c^2-1^2)(c^2-2^2)(c^2-3^2)}{7!} \left(\mathcal{D}_r^6 - \frac{c}{8} \delta_r^7 \right) \quad (5.40)$$

donde $2\mathcal{D}_r^6$ es la suma de diferencias de sexto orden

$$2\mathcal{D}_r^6 = \phi_{j+4} - 5 + 9\phi_{j+2} - 5\phi_{j+1} - 5\phi_j + 9\phi_{j-1} - 5\phi_{j-2} + \phi_{j-3} \quad (5.41)$$

δ_r^7 es un término de quinto orden centrado en la cara derecha

$$\delta_r^7 = \phi_{j+4} - 7\phi_{j+3} + 21\phi_{j+2} - 35\phi_{j+1} + 35\phi_j - 21\phi_{j-1} + 7\phi_{j-2} - \phi_{j-3} \quad (5.42)$$

La interpolación para el modelado de un transitorio, *TIM*, centrados y/o hacia atrás se pueden generar con facilidad, pues siguen un patrón que se representa con fórmulas recursivas. Los coeficientes de los términos $2\mathcal{D}_r^N$ y δ_r^N son binomiales o pueden ser producidos por el triángulo de Pascal.

Los esquemas hacia atrás de orden N (N impar) se plantean como

$$\phi_r^{(N\Leftarrow)} = \phi_r^{(N-1\Leftarrow)} + \frac{\prod_{k=1}^{(N-1)/2} (c^2-k^2)}{N!} \left(\mathcal{D}_r^{N-1} - \frac{\delta_r^N}{2} \right) \quad (5.43)$$

Para los esquemas centrados de orden M (M par),

$$\phi_r^{(M\Leftarrow)} = \phi_r^{(M-2\Leftarrow)} + \frac{\prod_{k=1}^{M/2-1} (c^2-k^2)}{(M-1)!} \left(\mathcal{D}_r^{M-2} - \frac{c}{M} \delta_r^{M-1} \right) \quad (5.44)$$

Se espera que al incrementar el orden del esquema, el orden de la precisión aumente, y se necesita una plantilla de nodos más ancha para la interpolación. Para el método del *VF*, un esquema centrado de orden N y el esquema hacia atrás de orden $N-1$ requieren $N+1$ nodos.

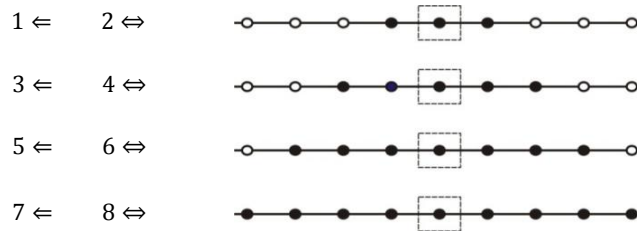


Figura 5.7 Nodos usados por los esquemas *L-W*

5.3 Híbridos

Es notable que cada esquema proporciona ventajas y desventajas, lo cual hace atractiva la idea de utilizar un esquema compuesto por varios esquemas, para emplear las condiciones favorables de uno y de otro. El uso de dos o más esquemas se logra con la implementación de un selector (*switch*), que permite realizar la elección del esquema adecuado. Este tipo de esquemas se les llama híbridos.

Se presentan dos ejemplos significativos de estos esquemas con la finalidad de ilustrar la metodología para poder combinar dos o más. Es posible armonizar casi cualquier esquema de acuerdo con las necesidades y características del problema.

5.3.1 De dos esquemas

En la sección de resultados, se pueden apreciar las propiedades difusivas del esquema de segundo orden hacia atrás (U), que se comporta mejor que el de MacCormack (M) para números de *Courant* pequeños; además, es fácil distinguir oscilaciones espurias generadas atrás de un fuerte gradiente de ϕ de la onda. También, aparece un error de desfase hacia adelante al utilizar M , mientras que con U se forman oscilaciones adelante de zona con $\phi_x \gg 0$ y aparece un error de desfase hacia atrás. Lo anterior sugiere aplicar U a la izquierda de la zona con $\phi_x \gg 0$ y cambiar a M en el resto del dominio.

Warming (1976) muestra que un selector que cambia de esquema de manera brusca puede provocar una velocidad incorrecta o desfase, y esto se puede interpretar como una forma de violar la conservación. Entonces es necesario construir un selector especial. Lo primero que se requiere es un operador conservativo para la transición en el nodo j , donde U se aplica a los puntos vecinos anteriores (izquierda) y M a los puntos posteriores (derecha). De manera similar, se necesitaba un operador para el cambio de M a U . Lo anterior se obtiene escribiendo los esquemas en términos de diferencias finitas acompañados del parámetro ϵ , donde se usa $\epsilon = 0$ para un esquema, y $\epsilon = 1$ para aplicar el otro

esquema. Como ambos esquemas comparten la parte predictora $\phi^{\overline{n+1}}$, se simplifica el empleo del selector. El algoritmo conservativo resulta

$$\begin{aligned} \phi_j^{n+1} = & \frac{1}{2}(\phi_j^n + \phi_j^{\overline{n+1}}) - \frac{1}{2}C[\epsilon_j \phi_j^n - (\epsilon_j + \epsilon_{j-1})\phi_{j-1}^n + \epsilon_{j-1}\phi_{j-2}^n] \\ & - \frac{1}{2}C[-\epsilon_{j-1}\phi_{j-1}^{\overline{n+1}} + (\epsilon_j + \epsilon_{j-1} - 1)\phi_j^{\overline{n+1}} + (1 - \epsilon_j)\phi_{j+1}^{\overline{n+1}}] \end{aligned} \quad (5.45)$$

La aparición de ϵ_j y ϵ_{j-1} genera cuatro posibilidades de algoritmo

$$(\epsilon_{j-1}, \epsilon_j) = \begin{cases} (0,0) \text{ esquema } M \\ (0,1) \text{ transición } M - U \\ (1,1) \text{ esquema } U \\ (1,0) \text{ transición } U - M \end{cases} \quad (5.46)$$

Este algoritmo híbrido es de fácil programación. El selector de transición es único y está gobernado por los esquemas que vincula; sus características de precisión y estabilidad son fijas; además, se puede utilizar en regiones y no solo para puntos de transición. El operador de transición es formalmente un orden de precisión más bajo que los esquemas que conecta (Murman, 1974), es decir, el operador de transición $U-M$ y $M-U$ es de primer orden. Por otra parte, es difícil analizar la estabilidad cuando el operador de transición usa exclusivamente un nodo.

Existen diversas estrategias para tener un indicador del esquema por emplear (valor de ϵ). Uno de esos indicadores, que distingue el cambio en cada uno de los nodos del dominio, es la utilización de los *eigenvalores*. Se construye una matriz con una diagonal mediante el predictor $\phi^{\overline{n+1}}$, y de ésta se obtienen los *eigenvalores*, que proporcionan información del cambio que sufre ϕ , y así usan los operadores. Incluso un operador de transición $M-U$ o $U-M$ pueden ser utilizados en todo el dominio. Aquí solo se presenta aquella combinación que ofrece los mejores resultados:

$$\epsilon_j = 1 \text{ si el } \textit{eigenvalor} \text{ es positivo, y } \epsilon_j = 0 \text{ si el } \textit{eigenvalor} \text{ es negativo.}$$

5.3.2 De tres esquemas

Este esquema pretende ser simple, efectivo y generar pocas oscilaciones espurias. Zhu y Rodi (1991) combinan el esquema de segundo orden hacia atrás, con el de diferencias centradas y con el de primer orden hacia atrás, a través de un selector controlado por el criterio de acotamiento de la convección *CBC*, detallado en el subcapítulo 4.4.

En la discretización de la ecuación de transporte de ϕ , las caras del volumen de control pueden ser interpoladas con factores asociados a un solo esquema (forma lineal), como, por ejemplo, los siguientes esquemas, acompañados por la normalización de Leonard, detallada en el Apéndice A

- Segundo orden hacia atrás *SOU*

$$\phi_{j+1/2} = \frac{1}{2}(3\phi_j - \phi_{j-1}); \quad \hat{\phi}_{j+1/2} = \frac{3}{2}\hat{\phi}_j \quad (5.47)$$

- Diferencias centradas

$$\phi_{j+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_j + \phi_{j+1}); \quad \hat{\phi}_{j+1/2} = \frac{1}{2}\hat{\phi}_j + \frac{1}{2} \quad (5.48)$$

- Primer orden hacia atrás *FOU*

$$\phi_{j+1/2} = \phi_j; \quad \hat{\phi}_{j+1/2} = \hat{\phi}_j \quad (5.49)$$

En el *NVD* de la fig 5.8, se muestra la región donde se garantiza la monotonía, en la zona $0 \leq \hat{\phi}_j \leq 1$, y se encuentra dentro del triángulo limitado por debajo por el esquema de primer orden hacia atrás y por arriba por la unidad; en tanto que, para $\hat{\phi}_j < 0$ y $\hat{\phi}_j > 1$, la monotonía se establece en la línea $\hat{\phi}_{j+1/2} = \hat{\phi}_j$. Únicamente el esquema de primer orden hacia atrás satisface incondicionalmente la zona *CBC*, sin olvidar los inconvenientes de este esquema ya discutidos; mientras que el esquema centrado y el de segundo orden hacia atrás infringen esa condición fuera del rango $0 \leq \hat{\phi}_j \leq 1$. En la mayoría de los casos, emplear un esquema fuera de la zona acotada puede generar oscilaciones espurias en las vecindades de altos gradientes.

Por lo anterior, Zhu y Rodi (1991) proponen un esquema híbrido a partir de los tres esquemas. Basta con indicar que este esquema se encuentra ubicado dentro de la región *CBC*, con lo que se garantiza una solución acotada. Se requerirán únicamente tres valores nodales vecinos para conseguir la *VN*.

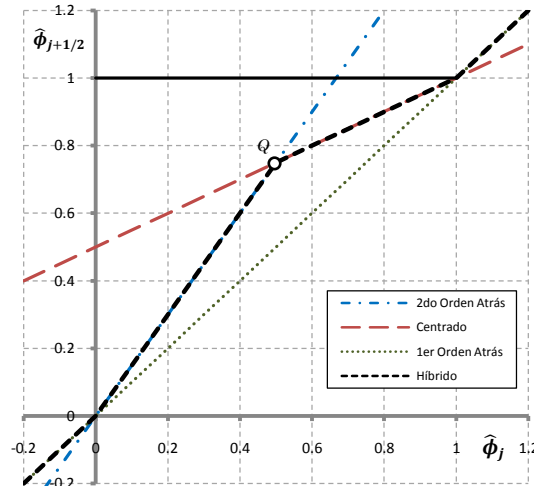


Figura 5.8 Híbrido de tres esquemas

Los esquemas de segundo orden hacia atrás y de diferencias centradas pasan a través de los puntos (0,0) y (1,1), respectivamente, y se intersecan en ($\hat{\phi}_j = 0.5$) un punto (llamado Q) dentro de la región CBC , esto sugiere una combinación de los dos esquemas como forma alternativa de aproximar el valor de $\hat{\phi}_{j+1/2}$ dentro de la región monótona; fuera de esta se utilizan las diferencias hacia atrás de primer orden.

Los selectores para la cara derecha del VC dependen de la VN y del acotamiento del NVD ,

$$\begin{aligned}\beta_{u,j+1/2} &= \begin{cases} 1, & \text{si } \hat{\phi}_j \leq 0 \text{ o } \hat{\phi}_j \geq 1 \\ 0, & \text{de lo contrario} \end{cases} \quad \text{se usan diferencias de primer orden hacia atrás} \\ \beta_{s,j+1/2} &= \begin{cases} 1, & \text{si } 0 \leq \hat{\phi}_j \leq 0.5 \\ 0, & \text{de lo contrario} \end{cases} \quad \text{se emplean diferencias de segundo orden hacia atrás} \\ \beta_{c,j+1/2} &= 1 - \alpha_{u,r} - \alpha_{s,r} \quad \text{se utilizan diferencias centradas.} \end{aligned} \quad (5.50)$$

El primer selector controla el esquema SOU ; el segundo, a FOU , y el último afecta al centrado. El esquema híbrido resultante para la cara derecha del VC formulado con la combinación lineal de los tres esquemas es

$$\phi_{j+1/2} = u \left\{ \beta_{u,j+1/2} \phi_j + \beta_{s,j+1/2} \left[\frac{1}{2} (3\phi_j - \phi_{j-1}) \right] + \beta_{c,j+1/2} \left[\frac{1}{2} (\phi_j + \phi_{j+1}) \right] \right\} \quad (5.51)$$

Agrupando términos por nodos, aparecen $\beta_{j+1/2}^j$, $\beta_{j+1/2}^{j+1}$ y $\beta_{j+1/2}^{j-1}$ en

$$\phi_{j+1/2} = \beta_{j+1/2}^j \phi_j + \beta_{j+1/2}^{j+1} \phi_{j+1} + \beta_{j+1/2}^{j-1} \phi_{j-1} \quad (5.52)$$

donde

$$\beta_{j+1/2}^j = u \left[\beta_{u,j+1/2} + \beta_{s,j+1/2} \left(\frac{3}{2} \right) + \beta_{c,j+1/2} \left(\frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\beta_j^{j-1} = -u\beta_{s,j} \left(\frac{1}{2} \right) \quad \beta_j^{j+1} = 1 - \beta_j^j - \beta_j^{j-1} \quad (5.53)$$

La búsqueda de los selectores $\beta_{u,j+1/2}$, $\beta_{s,j+1/2}$ y $\beta_{c,j+1/2}$ extiende el tiempo de computo de la solución; resulta más sencillo usar la VN y el NVD , porque se simplifica el código, las variables y las operaciones, y, obviamente, se reduce el tiempo de cómputo.

5.4 No lineales de Leonard

Estos esquemas emplean lo que Leonard (1988) llama la Curvatura Compensada para el Transporte por Convección, $CCCT$ (*Curvature-Compensated Convective Transport*), que garantiza estar utilizando un algoritmo acotado. Los algoritmos no acotados en regiones de altos gradientes pueden presentar valores grandes de los componentes de *Fourier*, lo que se traduce en serios disturbios sin significado físico. Aunque los esquemas híbridos muestran la posibilidad de resolver satisfactoriamente altos gradientes, esto es insuficiente para impedir las oscilaciones espurias (*under/over shoots* o *wiggles*).

En las zonas donde el dominio de ϕ es suave, la solución es satisfactoria con el uso de un esquema de alto orden como QUICK, o mejor aún QUICKEST; sin embargo, en presencia de altos gradientes o fuentes importantes, el error de truncamiento es del mismo orden del esquema y, consecuentemente, los errores de la longitud de onda corta se manifiestan con rapidez, situación explicada por el empleo de las aproximaciones polinómicas de un orden más alto que no puede dar solución a este problema. Los esquemas de Leonard se denominan así porque utilizan conceptos y definiciones de este autor.

5.4.1 SMART

Los esquemas lineales poseen un orden de precisión de entre segundo y tercer grado; esto da un indicio de su desempeño, siempre y cuando no exista presencia de altos gradientes que rompen la relación entre el orden del esquema y la precisión obtenida. Considerando la cara derecha del VC centrada en j , la expansión en series de Taylor del nodo en estudio y sus vecinos (izquierdo y derecho) adyacentes,

$$\begin{aligned}\phi_{j+1} &= \phi_{j+1/2} + \frac{\Delta x}{2} \phi'_{j+1/2} + \frac{\Delta x^2}{8} \phi''_{j+1/2} + \frac{\Delta x^3}{48} \phi'''_{j+1/2} + TAO \\ \phi_j &= \phi_{j+1/2} - \frac{\Delta x}{2} \phi'_{j+1/2} + \frac{\Delta x^2}{8} \phi''_{j+1/2} - \frac{\Delta x^3}{48} \phi'''_{j+1/2} + TAO \\ \phi_{j-1} &= \phi_{j+1/2} - \frac{3\Delta x}{2} \phi'_{j+1/2} + \frac{9\Delta x^2}{8} \phi''_{j+1/2} - \frac{9\Delta x^3}{16} \phi'''_{j+1/2} + TAO\end{aligned}\tag{5.54}$$

Para calcular el valor en la cara derecha del VC, $\phi_{j+1/2}$, se toma una combinación de las expresiones anteriores y, además, se ignoran los Términos de Alto Orden, TAO ,

$$\phi_{j+1/2} = \frac{6\phi_j + 3\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{8} - \frac{\Delta x^3}{16} \phi'''_{j+1/2}\tag{5.55}$$

El último término de la ec 5.55 se puede expresar como

$$(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) = \Delta x^2 \phi''_{j+1/2} + \frac{\Delta x^3}{2} \phi'''_{j+1/2}\tag{5.56}$$

Al sustituir 5.56 en 5.55, factorizar y sustituir α^+ ,

$$\begin{aligned}\phi_{j+\frac{1}{2}} &= \left(\frac{3}{4} + 2\alpha^+\right) \phi_j + \left(\frac{3}{8} - \alpha^+\right) \phi_{j+1} - \left(\frac{1}{8} + \alpha^+\right) \phi_{j-1} \\ &+ \left[\alpha^+ \Delta x^2 \phi''_{j+1/2} - \left(\frac{1}{16} - \frac{1}{2}\alpha^+\right) \Delta x^3 \phi'''_{j+1/2} + \dots\right]\end{aligned}\tag{5.57}$$

donde α^+ es un parámetro por determinar (+ hace referencia a la cara derecha del VC). El error de truncamiento es $\mathcal{O}(\alpha^+ \Delta x^2)$. La expresión introduce con eficacia una CCCT de segundo orden de la curvatura para α^+ , con una precisión de tercer orden para la aproximación de $\phi_{j+\frac{1}{2}}$. Ignorando los términos dentro de los corchetes (de error de truncamiento) y obteniendo la VN,

$$\hat{\phi}_{j+1/2} = \left(\frac{3}{4} + 2\alpha^+\right) \hat{\phi}_j + \left(\frac{3}{8} + \alpha^+\right)\tag{5.58}$$

Esta última ecuación pueden ser vista como una aproximación óptima que combina esquemas lineales con un factor de peso α^+ . Este factor es capaz de modificar el esquema principal y transformarlo en casos de esquemas conocidos, como se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 5.1 Factor de peso para esquemas conocidos

Esquema	α
FOU	---
SOU	3/8
Diferencias centradas	-1/8
QUICK	0

Gaskell y Lau (1988), autores de SMART (*Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport*), proponen el uso de $\alpha^+ = 0$ para estar dentro de la región triangular de monotonía; en el punto $(5/6, 1)$ es necesario mantenerse dentro de la región de monotonía, así que se toma $\hat{\phi}_{j+1/2} = 1$ para la región $\hat{\phi}_j \in (\frac{5}{6}, 1)$. El empleo de $\alpha^+ = 0$ en $\hat{\phi}_j \approx 0^+$ (cero por la derecha) genera un valor de $\hat{\phi}_{j+1/2}$ demasiado grande y conlleva problemas de disparos hacia abajo; por tanto, se propone una relación lineal para $\hat{\phi}_j \in (0, \frac{1}{6})$ y así preservar el acotamiento. En $\hat{\phi}_j < 0$ y $\hat{\phi}_j > 1$, basta con utilizar el esquema de primer orden hacia atrás.

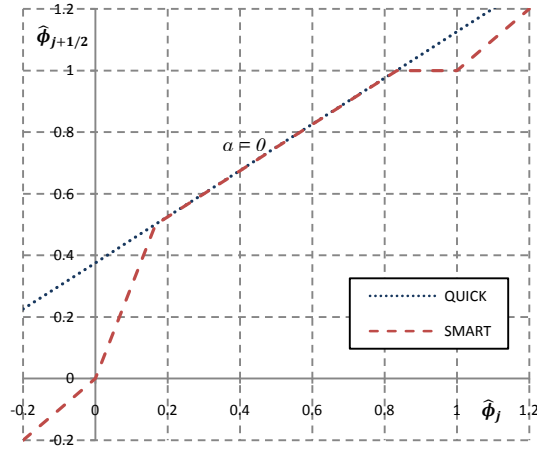


Figura 5.9 SMART en NVD

El análisis anterior, formulado como una función seccionalmente dividida, cumple con continuidad y asegura una solución acotada. El algoritmo usado es fino y monótono para un transporte físicamente realista por convección, SMART. En este esquema α^+ y $\hat{\phi}_{j+1/2}$ quedan determinados de la siguiente manera:

$$\alpha^+ = \left[\frac{\hat{\phi}_{j+1/2} - \frac{3}{8}(2\hat{\phi}_j + 1)}{2\hat{\phi}_j - 1} \right] \quad (5.59)$$

donde

$$\hat{\phi}_{j+1/2} = \begin{cases} \hat{\phi}_j & \alpha^+ \in \left(-\frac{1}{8}, \frac{3}{8}\right) & \text{si } \hat{\phi}_j \notin [0, 1] \\ 3\hat{\phi}_j & \alpha^+ \in \left(0, \frac{3}{8}\right) & \text{si } \hat{\phi}_j \in \left[0, \frac{1}{6}\right] \\ 1 & \alpha^+ \in \left(-\frac{1}{8}, 0\right) & \text{si } \hat{\phi}_j \in \left[\frac{5}{6}, 1\right] \\ \frac{3}{8}(2\hat{\phi}_j + 1) & \alpha^+ = 0 & \text{si } \hat{\phi}_j \in \left[\frac{1}{6}, \frac{5}{6}\right] \end{cases} \quad (5.60)$$

Primero debe conocerse $\hat{\phi}_j$; consecuentemente, $\hat{\phi}_{j+1/2}$ o α^+ ; por último, se verifica que se cumplan las ecs 5.59 y 5.60, según los rasgos específicos; situación que conlleva un proceso implícito iterativo.

Debido a dicho proceso, se extiende el tiempo y costo del proceso de solución computacional; pero SMART puede ser replanteado en la programación sin el uso de α^+ , esto si únicamente se genera $\hat{\phi}_{j+1/2}$ a partir de $\hat{\phi}_j$, obedeciendo *CBC* en el *NVD*.

5.4.2 SHARP

QUICK genera resultados satisfactorios en estado estable pero, para altos gradientes como escalones, produce disparos hacia abajo y pequeñas oscilaciones sin sentido físico. Se puede modificar el esquema de advección con el empleo de la *NV* y el *CBC*. Leonard (1987) pretende que SHARP sea un esquema simple y de alta precisión para el modelado de convección en discontinuidades (*Simple High-Accuracy Resolution Program for Convective Modelling of Discontinuities*).

Una posibilidad de interpolación es utilizar una función exponencial a partir de tres nodos vecinos

$$\phi(\xi) = A + Be^{C\xi} \quad (5.61)$$

donde ξ es la coordenada espacial local ($\xi = \Delta x/2$) normal a la cara del *VC*; A , B y C son parámetros a evaluar en términos de los nodos vecinos

$$\phi(0) = \phi_j = A + B \quad (5.62)$$

$$\phi(-\Delta x) = \phi_{j-1} = A + Be^{-C\Delta x} \quad (5.63)$$

$$\phi(\Delta x) = \phi_{j+1} = A + Be^{C\Delta x} \quad (5.64)$$

se encuentra que

$$A = \frac{\phi_{j+1}\phi_{j-1} - \phi_j^2}{\phi_{j+1} - 2\phi_{j-1} + \phi_j} \quad (5.65)$$

Para la cara derecha del *VC*,

$$\phi(\Delta x/2) = \phi_{j+1/2} = A \pm \sqrt{(\phi_{j+1} - A)(\phi_{j-1} - A)} \quad (5.66)$$

En términos de la VN,

$$\hat{\phi}_{j+1/2} = \frac{\sqrt{\hat{\phi}_j(1-\hat{\phi}_j)^3 - \hat{\phi}_j^2}}{1-2\hat{\phi}_j} \quad (5.67)$$

Esta relación exponencial hacia atrás, EA , se expresa en el NVD y se define solamente en la región monótona $0 \leq \hat{\phi}_j \leq 1$; que, además, tiene una indeterminación en $\hat{\phi}_j = 0.5$; si se usa la regla de L'Hopital, en la discontinuidad

$$\hat{\phi}_j(0.5) = 0.75$$

EA pasa por el punto Q dado por $(0.5, 0.75)$. En la fig 5.10, se aprecia que la relación exponencial hacia atrás es tangente a QUICK en Q , lo que asegura que EA es de tercer orden de precisión en ese punto.

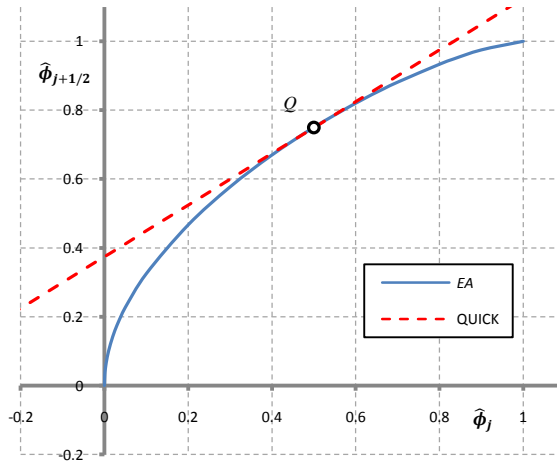


Figura 5.10 EA en NVD

En muchos puntos, EA está cerca de QUICK, especialmente en la discontinuidad $\hat{\phi}_j \approx 0.5$, y sus vecindades; eso permite emplear QUICK en lugar de EA cerca del punto Q :

$$\text{Si } |0.5 - \hat{\phi}_j| \leq \text{constante}, \text{ se utiliza QUICK.} \quad (5.68)$$

La cercanía a QUICK depende de la *constante*; según Leonard, 0.15 es un valor razonable. Multiplicando por dos la ecuación anterior:

$$\text{Si } |1 - 2\hat{\phi}_j| \leq 0.3, \text{ se emplea QUICK.} \quad (5.69)$$

Directamente, en términos de las variables originales (no normalizadas):

$$\text{Si } |\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}| \leq 0.3|\phi_{j+1} - \phi_{j-1}|, \text{ se usa QUICK.} \quad (5.70)$$

La parte izquierda de la ecuación anterior expresa la curvatura de la variable convectiva, lo que implica que para regiones suaves del dominio de flujo se utiliza QUICK. *EA* es más caro computacionalmente; por ello, solo se usa en una pequeña fracción del dominio, y eso genera una buena relación costo-beneficio.

EA únicamente existe en la región monótona; fuera de esta, en $1 < \hat{\phi}_j \leq 1.5$, se emplean diferencias hacia atrás como estrategia sencilla y robusta; para valores mayores, $\hat{\phi}_j > 1.5$, se continúa con QUICK. Para valores negativos, $\hat{\phi}_j < 0$, se aplica $\hat{\phi}_j = \frac{3}{8}\hat{\phi}_j$ hasta unirse con QUICK nuevamente en $\hat{\phi}_j = -1$.

La función seccionalmente dividida de SHARP es:

$$\hat{\phi}_{j+1/2} = \begin{cases} \frac{3}{8}(2\hat{\phi}_j + 1) & \text{si } \hat{\phi}_j < -1, 0.35 \leq \hat{\phi}_j \leq 0.65 \text{ y } \hat{\phi}_j > 1.5 \\ \frac{3}{8}\hat{\phi}_j & \text{si } -1 \leq \hat{\phi}_j \leq 0 \\ \frac{\sqrt{\hat{\phi}_j(1-\hat{\phi}_j)^3 - \hat{\phi}_j^2}}{1-2\hat{\phi}_j} & \text{si } 0 < \hat{\phi}_j < 0.35 \text{ y } 0.65 < \hat{\phi}_j < 1 \\ \hat{\phi}_j & \text{si } 1 \leq \hat{\phi}_j \leq 1.5 \end{cases} \quad (5.71)$$

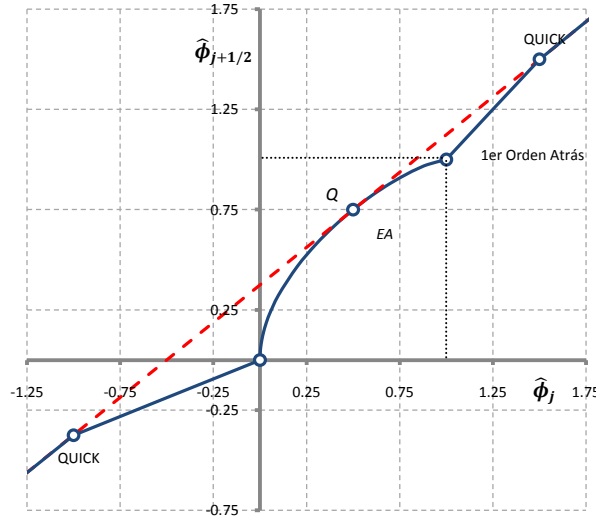


Figura 5.11 SHARP en el NVD

El algoritmo de programación de SHARP y que sirve de base para posteriores esquemas se puede expresar como:

1. Si $[\phi_{j+1} - \phi_{j-1}] < 10^{-5}$ se utiliza QUICK, porque es una región suave; además, no es posible la normalización debido a que el denominador se aproxima a cero.
2. Se revisa si se satisface la desigualdad 5.70.
3. Si no, se realiza la normalización $\hat{\phi}_j = (\phi_j - \phi_{j-1})/(\phi_j - \phi_{j-1})$.
4. Se calcula $\hat{\phi}_{j+1/2}$ con el esquema correspondiente, según las expresiones e intervalos 5.71.
5. Se obtiene el valor en la cara (desnormalizando) $\phi_{j+1/2} = \phi_{j-1} + (\phi_{j+1} - \phi_{j-1})\hat{\phi}_{j+1/2}$.
6. Una vez construidas las dos caras de VC, es posible obtener ϕ_j^{n+1} con la definición de VF.

QUICKEST ofrece mejores resultados que QUICK y es posible reemplazarlo en el primer paso.

5.4.3 BSOU

Este esquema se denomina así por ser acotado y de segundo orden hacia atrás (*Bounded Second Order Upwind*). Papadakis y Bergeles (1995), en la construcción de BSOU, parten de la mezcla de dos esquemas hacia atrás, de primero y segundo orden. Obviamente, la alternancia entre estos esquemas tiene el propósito de evitar regiones de flujo con presencia de oscilaciones espurias. La fig 5.12 muestra que SOU se encuentra acotado únicamente en la región *CBC*; fuera de esta, FOU cumple con la restricción de acotamiento. Lo anterior da una idea del esquema a utilizar en cada región del *NVD* con las siguientes restricciones:

$$\hat{\phi}_{j+1/2} = \begin{cases} \hat{\phi}_j & \text{si } \hat{\phi}_j \notin [0, 1] \\ 1.5\hat{\phi}_j & \text{si } \hat{\phi}_j \in [0, 2/3] \\ 1 & \text{si } \hat{\phi}_j \in [2/3, 1] \end{cases} \quad (5.72)$$

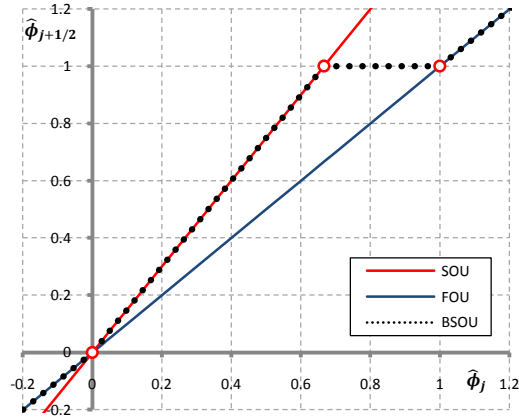


Figura 5.12 BSOU en NVD

5.4.4 HPLA

Zhu (1991), con la intención de simplificar SMART y SHARP a costa de una pequeña pérdida de precisión, propone un esquema híbrido de aproximación entre lineal y parabólico, HPLA (*Hybrid Linear-Parabolic Approximation*).

Este es un esquema de alta resolución, con una precisión de segundo orden. Da solución a flujo permanente e incompresible en términos de *VF*. El esquema combina una aproximación de segundo y primer orden hacia atrás; además, es acotado mediante el *CBC*. Dentro de la zona de monotonía en el *NVD*, se emplea una parábola que pasa muy cerca de la trayectoria de QUICK, e incluso se puede decir que HPLA es su tangente en el punto *Q*, fig 3.13, situación muy similar a la ocurrida con SHARP. La aproximación en la cara derecha del *VC* normalizada y centrada en *j* es

$$\hat{\phi}_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \hat{\phi}_j(2 - \hat{\phi}_j) & \text{para } 0 < \hat{\phi}_j < 1 \\ \hat{\phi}_j & \text{para } \hat{\phi}_j \leq 0 \text{ y } \hat{\phi}_j \geq 1 \end{cases} \quad (5.73)$$

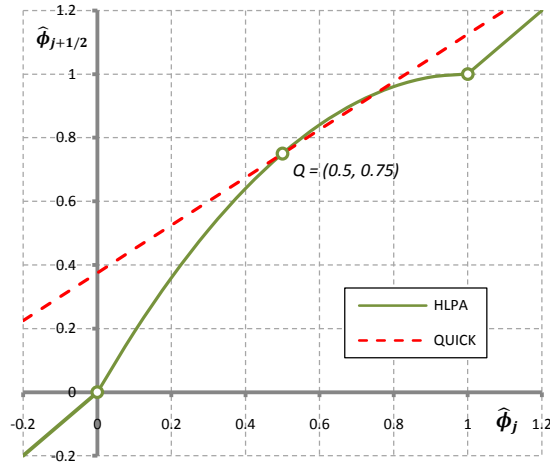


Figura 5.13 HPLA en NVD

5.4.5 CHARM, ISNAS y NOTABLE

Zhou *et al* (1995), Zijlema (1996), y Pascau y Pérez (1993), de manera separada, publicaron estos tres esquemas. El primero es construido con ayuda del *NVD*, el segundo es acotado con *TVD* (detallado en el apéndice B) y requiere una elaboración minuciosa; el tercero introduce un factor de peso hacia abajo *DWF* (*Downwind Weighting Factor*) para resolver el esquema de modo implícito. En sus bases, los tres esquemas son idénticos; por tanto, ofrecen los mismos resultados.

CHARM debe su nombre a que utiliza una interpolación cúbico-parabólica de alta precisión y resolución (*Cubic-parabolic High Accuracy Resolution Method*). ISNAS se propone tener una precisión formal de tercer orden y se basa en un polinomio de interpolación de tercer orden en el *NVD*, recibe ese nombre porque pretende ser un esquema de interpolación sin oscilaciones para la advección escalar (*Interpolation Scheme which is Non-oscillatory for Advected Scalar*). NOTABLE se denomina así por ser en su momento de publicación una nueva opción para el tratamiento de la advección en la capa límite (*New Option for the Treatment of Advection in the Boundary Layer Equations*).

El esquema SHARP dentro de la región monótona usa una función exponencial hacia atrás *EA*, que es tangente a QUICK en *Q*, fig 5.10, pero emplear *EA* resulta más costoso computacionalmente que una función polinomial; por tanto, *EA* se reemplaza por una función polinomial de tercer orden, que también es tangente a QUICK en *Q*; y así se garantiza una precisión de tercer orden. Por otro lado, al cumplir con las restricciones de *CBC*, se ratifica tener un método incondicionalmente acotado.

En los esquemas CHARM, ISNAS y NOTABLE, el valor normalizado en la cara derecha del VC es

$$\hat{\phi}_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \hat{\phi}_j^3 - 2.5\hat{\phi}_j^2 + 2.5\hat{\phi}_j & \text{para } 0 < \hat{\phi}_j < 1 \\ \hat{\phi}_j & \text{para } \hat{\phi}_j \leq 0 \text{ y } \hat{\phi}_j \geq 1 \end{cases} \quad (5.74)$$

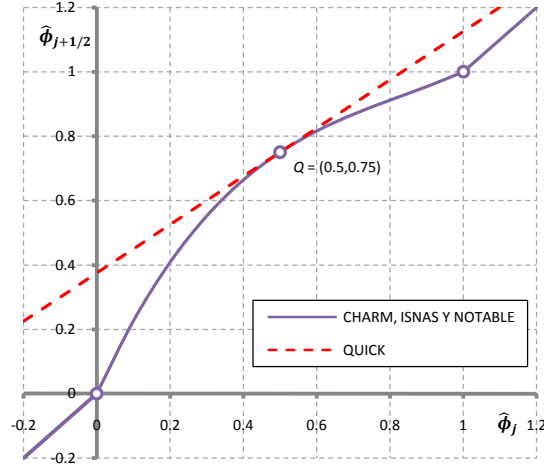


Figura 5.14 CHARM, ISNAS y NOTABLE en NVD

Los esquemas satisfacen el *CBC*. Ante un aumento o disminución en $\hat{\phi}_j$, se genera un mecanismo de regeneración numérica que reduce la aparición de oscilaciones y asegura la convergencia. Se puede ver que el esquema utiliza la formulación de primer orden hacia atrás, con una corrección de tercer orden en la zona de monotonicidad.

5.4.6 UMIST

Este esquema es una interpolación monótona hacia atrás (*Upstream Monotonic Interpolation for Scalar Transport*). Lien y Leschziner (1994) construyen UMIST con diversos esquemas, en diferentes secciones del dominio del *NVD*. Se usan diferencias hacia atrás fuera de la región monótona; dentro de la misma, se aprovecha la relación $\hat{\phi}_{j+1/2} = 2\hat{\phi}_j$; después, de manera lineal se une con el punto Q , para continuar con *QUICK*, y finalmente, en la constante de valor uno

$$\hat{\phi}_{j+1/2} = \begin{cases} \hat{\phi}_j & \text{si } \hat{\phi}_j \leq 0 \text{ y } \hat{\phi}_j \geq 1 \\ 2\hat{\phi}_j & \text{si } 0 < \hat{\phi}_j \leq 1/5 \\ \frac{1}{6}(7\hat{\phi}_j + 1) & \text{si } 1/5 < \hat{\phi}_j \leq 1/2 \\ \frac{3}{8}(2\hat{\phi}_j + 1) & \text{si } 1/2 < \hat{\phi}_j < 5/6 \\ 1 & \text{si } \frac{5}{6} \leq \hat{\phi}_j < 1 \end{cases} \quad (5.75)$$

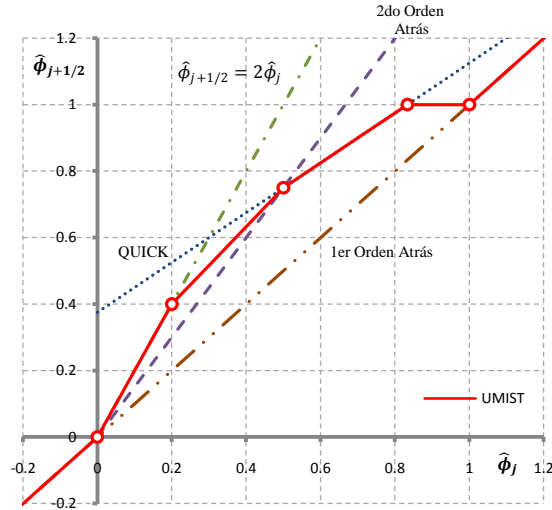


Figura 5.15 UMIST en NVD

Los autores del esquema describen de manera detallada su funcionamiento en términos de la TVD (detallada en el Apéndice B); esto involucra un criterio de tratamiento para esquemas de alta resolución, que combina precisión, monotónia y preservación de la entropía.

5.4.7 VONOS

Su nombre lo adquiere por ser un esquema no oscilatorio de orden variable (*Variable Order Non-Oscillatory Scheme*). El desarrollo de este esquema, por parte de Varonos y Bergeles (1998), se basa en el estudio del comportamiento de esquemas muy conocidos, no oscilatorios de advección pura; está diseñado con la combinación de QUICK y BSOU. Ambos esquemas no cuentan con orden de precisión similar; por tal razón, el orden formal de precisión de VONOS es variable. El esquema es conservativo, acotado y preciso, con un desempeño similar a SMART y NOTABLE.

En la región monótona del NVD se pueden emplear diferentes tipos de esquemas que cumplen con el acotamiento. Es claro que un aumento en el orden formal de la precisión de los esquemas no garantiza resultados de mayor precisión; por tanto, el comportamiento del esquema no es siempre proporcional a su orden formal de precisión.

VONOS considera el hecho de que QUICK tiene problemas de estabilidad incluso en la región acotada (precisamente en $\hat{\phi}_j \in [5/6, 1]$). QUICK y BSOU se cruzan en $\hat{\phi}_j = 0.5$, por tal razón, se utiliza el primero en $\frac{3}{74} \leq \hat{\phi}_j \leq 0.5$; para la región restante derecha dentro de la zona de monotónia se usa BSOU, fig 5.16.

$$\hat{\phi}_{j+1/2} = \begin{cases} \hat{\phi}_j & \text{para } \hat{\phi}_j \notin [0,1] \\ 10\hat{\phi}_j & \text{para } 0 \leq \hat{\phi}_j < \frac{3}{74} \\ \frac{3}{8}(2\hat{\phi}_j + 1) & \text{para } \frac{3}{74} \leq \hat{\phi}_j < 0.5 \\ 1.5\hat{\phi}_j & \text{para } 0.5 \leq \hat{\phi}_j < \frac{2}{3} \\ 1 & \text{para } \frac{2}{3} \leq \hat{\phi}_j < 1 \end{cases} \quad (5.76)$$

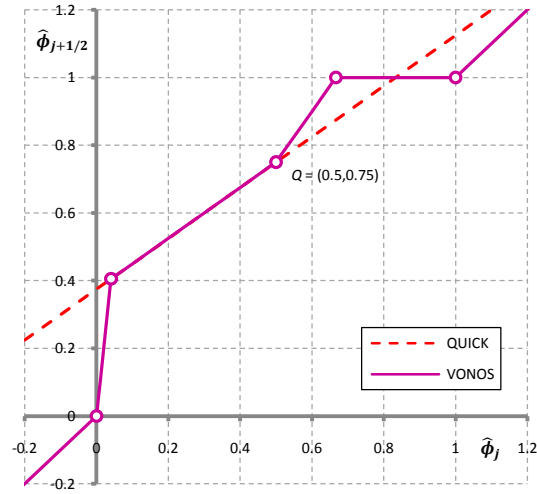


Figura 5.16 VONOS en NVD

5.4.8 WACEB

Song *et al* (2000) emplean un coeficiente de peso promediado que asegura el acotamiento (*Weighted-Average Coefficient Ensuring Boundedness*). El valor de la cara derecha del VC con la normalización de Leonard es calculado con la siguiente expresión

$$\hat{\phi}_{j+1/2} = \begin{cases} \hat{\phi}_j & \text{para } \hat{\phi}_j \notin [0,1] \\ 2\hat{\phi}_j & \text{para } 0 \leq \hat{\phi}_j < 0.3 \\ \frac{3}{8}(2\hat{\phi}_j + 1) & \text{para } 0.3 \leq \hat{\phi}_j < 5/6 \\ 1 & \text{para } 5/6 < \hat{\phi}_j \leq 1 \end{cases} \quad (5.77)$$

En la fig 5.17 se muestra que WACEB restringe el valor de $\hat{\phi}_{j+1/2}$ de manera acorde con CBC

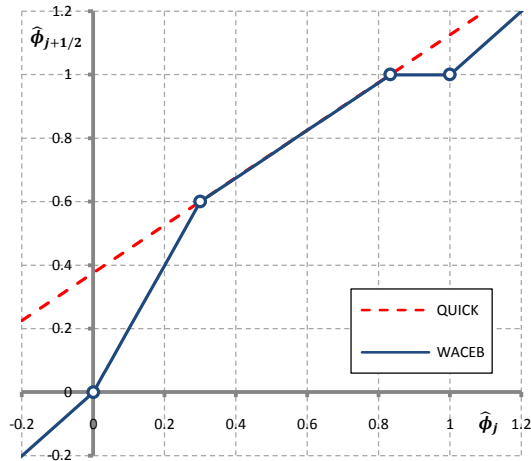


Figura 5.17 WACEB en NVD

5.4.9 ULTRA SHARP

En general, se requiere limitar los valores normalizados de las caras del *VC*; aunque es posible cierta flexibilidad, a fin de también cumplir con la monotonía y continuidad respecto a los nodos vecinos. Esta limitación se puede garantizar al satisfacer el *CBC*, con ayuda del uso de la *VN* en el *NVD*; pero además debe existir una relación proporcional entre las variables normalizadas, $\hat{\phi}_{j+1/2}$ y $\hat{\phi}_j$, de la forma $\frac{\partial \hat{\phi}_{j+1/2}}{\partial \hat{\phi}_j} > 0$.

El esquema de segundo orden centrado y el de hacia atrás cumplen en cierta región con las condiciones de acotamiento (fig 5.18); adicionalmente, ambos transitan por el punto *Q*. Todo lo anterior lo aprovechan Leonard y Mokhtari (1990) para crear un esquema de nombre ULTRA SHARP. Esta propuesta utiliza *SOU* a la izquierda de *Q* y de segundo orden centrado a la derecha del mismo punto; esto, si $\hat{\phi}_{j+1/2}$ se encuentra fuera de la región triangular del *CBC* en el *NVD*.

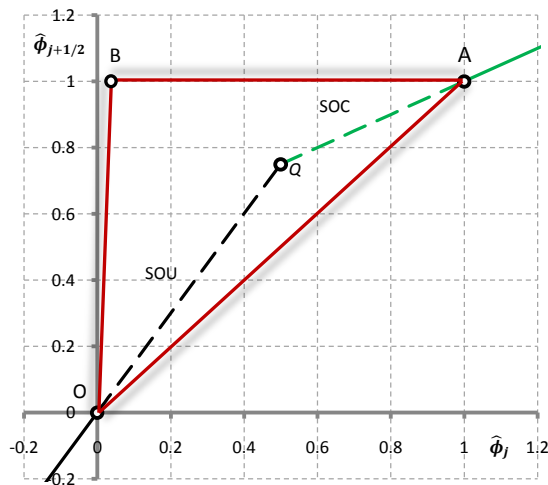


Figura 5.18 ULTRA SHARP en NVD

La línea punteada de la fig 5.18 muestra los esquemas dentro de la región monótona *CBC*. Lo innovador de ULTRA SHARP es que evita la singularidad cerca de $\hat{\phi}_j \rightarrow 0^+$, empleando la línea OB, que es una trayectoria de pendiente finita y positiva. Esto introduce una nueva constante

$$\hat{\phi}_{j+1/2} \leq \text{Constante} * \hat{\phi}_j, \text{ cuando de } \hat{\phi}_j \rightarrow 0^+ \quad (5.78)$$

Donde, por ejemplo, *Constante* = 10.

Para cada una de las caras, el algoritmo de acotamiento se utiliza de la siguiente forma:

1. Con un esquema de alto orden, se calcula un valor tentativo para la cara derecha del VC $\phi_{j+1/2}$.
2. Se determina el valor normalizado de la cara derecha del paso anterior $\hat{\phi}_{j+1/2}$ y del nodo al centro de la celda $\hat{\phi}_j$.
3. Si el punto $(\hat{\phi}_j, \hat{\phi}_{j+1/2})$ se halla dentro de la región triangular de la fig 5.18, simplemente se procede con la siguiente cara del VC.
4. En caso contrario, $\hat{\phi}_{j+1/2}$ toma el valor ajustado por el esquema más cercano (SOU o SOC), mostrado con líneas discontinuas en el diagrama.
5. Se reconstruye el valor en la cara mediante la desnormalización

$$\phi_{j+1/2} = \phi_{j-1} + (\phi_{j+1} - \phi_{j-1})\hat{\phi}_{j+1/2}$$

6. Se realiza el mismo procedimiento para cada cara del dominio.

5.5 ULTIMATE

Es una estrategia propuesta por Leonard (1991), consiste en usar un límite universal (*Universal Limiter*) para la interpolación en el modelado de un transitorio (*Transient Interpolation Modeling*) de la ecuación de transporte por convección (*Advective Transport Equations*). ULTIMATE se combina con cualquier esquema conservativo explícito, sin importar su orden de precisión. En los resultados del subcapítulo 6.1, se puede ver que los métodos basados en un solo esquema son insatisfactorios para la captura de ondas de choque o frentes con altos gradientes. ULTIMATE es un esquema hacia atrás de tercer orden y extremadamente satisfactorio para la mayoría de flujos de importancia práctica. Métodos de más alto orden pueden generar mejores resultados en ciertas regiones, pero a la vez ocasionan oscilaciones espurias en otras zonas, situación que precisamente se pretende evitar.

De manera general, el método funciona proporcionando una resolución de más alto orden en regiones aisladas, donde hay una alta curvatura o un alto gradiente. Los resultados son en extremo precisos, y se obtienen pagando un pequeño costo agregado de esfuerzo computacional (ligeramente superior al de un esquema de tercer orden; Leonard, 1991).

Un esquema con un valor fijo del número de *Courant* genera una única curva en el *NVD*. En general, los esquemas de Leonard pasan a través de los puntos (0,0) y (1,1), a fin de cumplir con el *CBC* y permitir un orden de precisión más alto. Estas restricciones se expresan en términos de la *VN*, por lo que se hace importante trabajar directamente con los valores normalizados.

5.5.1 Criterio para mantener la monotonía

Los valores en las caras normalizadas del VC deben satisfacer ciertas condiciones para estar dentro de la región triangular del *CBC*, y así producir un comportamiento monótono. No debe olvidarse que la cara derecha, $\hat{\phi}_{j+1/2}^n$, para $u > 0$ es construida en función del nodo central, $\hat{\phi}_j^n$. En ULTIMATE, el nuevo valor de $\hat{\phi}_j^{n+1}$ debe estar entre los límites siguientes:

$$\hat{\phi}_{j-1}^{n+1} \leq \hat{\phi}_j^{n+1} \leq \hat{\phi}_{j+1}^{n+1} \quad (5.79)$$

En la advección pura, a velocidad constante, la desigualdad del lado derecho es menos restrictiva que $\hat{\phi}_{j+1/2} \geq \hat{\phi}_j$, pero la desigualdad del lado izquierdo también se puede representar como

$$\hat{\phi}_{j+1/2}^n \leq \hat{\phi}_{j-1/2}^n + \frac{1}{C}(\hat{\phi}_j^n - \hat{\phi}_{j-1}^n) \quad (5.80)$$

Para cumplir la desigualdad, $\hat{\phi}_{j-1/2}^n$ y $\hat{\phi}_j^n/C$ deben ser positivos; así que el peor caso se da cerca de $\hat{\phi}_{j-1/2}^n = 0$ y $\hat{\phi}_{j-1}^n = 0$, que es un nuevo límite para conservar la monotonía, por tanto,

$$\hat{\phi}_{j+1/2}^n \leq \hat{\phi}_j^n/C \quad \text{para } 0 \leq \hat{\phi}_j^n \leq 1 \quad (5.81)$$

Esta condición, adicional al requisito de estar dentro de la zona triangular del *CBC*, implica

$$\hat{\phi}_j^n \leq \hat{\phi}_{j+1/2}^n \leq 1 \quad \text{para } 0 \leq \hat{\phi}_j^n \leq 1 \quad (5.82)$$

Para valores fuera de la región *CBC*, basta con usar diferencias de primer orden hacia atrás

$$\hat{\phi}_{j+1/2}^n = \hat{\phi}_j^n \quad \text{para } \hat{\phi}_j^n < 0 \text{ o } \hat{\phi}_j^n > 1 \quad (5.83)$$

Con lo anterior no se deteriora la precisión del esquema, que es determinada únicamente por el comportamiento en la regiones suaves del dominio que caen cerca de $\hat{\phi}_j^n \rightarrow 0.5$ en el *NVD*. Los límites universales expresados por las ecs 5.81 a 5.83 son mostrados en la fig 5.19; el acotamiento en función del número de *Courant*, ec 5.81, se ilustra con la línea discontinua, pero cambia su pendiente en función del valor de *C*.

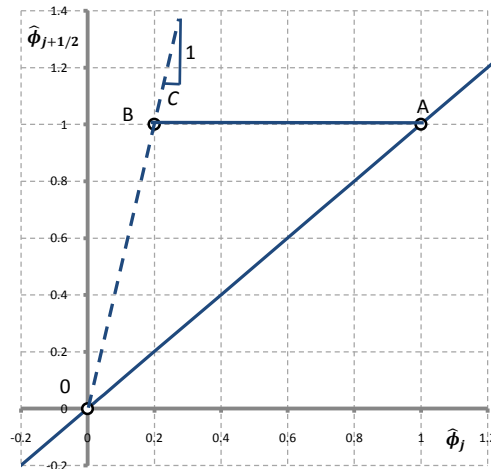


Figura 5.19 Courant como restricción de acotamiento

Cuando $C \rightarrow 0$, el acotamiento se convierte en una línea vertical, mientras que, si $C = 1$, se degenera en $\hat{\phi}_{j+1/2} = \hat{\phi}_j^n$. Esta nueva condición de monotonía, en 0^+ , evita tomar valores entre cero y uno, situación que podría romper la monotonía en esa zona.

La estrategia computacional es:

1. Calcular $DEL = \phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n$; si $|DEL| < 10^{-5}$, hacer $\phi_{j+1/2} = \phi_j^n$, y se procede a la siguiente cara del VC.
2. Si no, determinar la VN $\hat{\phi}_j^n = (\phi_j^n - \phi_{j-1}^n)/DEL$; si es menor de cero o mayor de uno, nuevamente $\phi_{j+1/2} = \phi_j^n$ y se procede a la siguiente cara.
3. Si no, $\phi_{j+1/2}$ se estima mediante cualquier esquema de alto orden.
4. Si $\hat{\phi}_{j+1/2} < \hat{\phi}_j^n$ (límite inferior), se corrige el valor de la cara con $\phi_{j+1/2} = \phi_j^n$; además, si $\hat{\phi}_{j+1/2} > \hat{\phi}_j^n/C$ (límite superior), también se corrige con $\hat{\phi}_{j+1/2} = \hat{\phi}_j^n/C$; pero, si $\hat{\phi}_{j+1/2} > 1$ (límite absoluto), se corrige con $\hat{\phi}_{j+1/2} = 1$.
5. Se reconstruye el nuevo valor de la cara $\phi_{j+1/2} = \hat{\phi}_{j+1/2}DEL + \phi_{j-1}$ (desnormalización), si es que fue necesario corregirlo.

En el tercer paso del algoritmo, se puede combinar *ULTIMATE* con casi cualquier esquema de alto orden. El método asegura que los valores $\hat{\phi}_{j+1/2}$ quedan dentro de la región triangular *CBC*, sin olvidar que ahora también depende del número de *Courant*. Si $\hat{\phi}_{j+1/2}$ está por arriba de la región, se ajusta al límite superior; si se encuentra por debajo, se ajusta al límite inferior.

5.6 Espectrales

Los métodos espectrales se basan en ajustar una serie o un polinomio a una función definida en los puntos de la malla de cálculo. En la presente tesis únicamente se hace la presentación para variables discretas, aunque la mayor parte de la teoría fue desarrollada para variables continuas. Berezowsky (1998) detalla aspectos de gran importancia de estos métodos; aquí solo se explican de manera general y con interés en los resultados.

5.6.1 Transformada de Fourier discreta

Sea la función $\phi(x)$ una variable de una ecuación diferencial con condiciones de frontera periódicas; además, con dominio en el intervalo $[0, 2\pi]$, que se divide en N nodos que definen la malla de cálculo. Las coordenadas de estos nodos, llamados puntos de colocación, están definidas por

$$x_j = \frac{2\pi j}{N} \quad j = 0, 1, \dots, N-1$$

Esta es una malla uniforme (espaciamiento constante), pero son posibles otros tipos de espaciamiento de la malla. Si N es potencia de 2, con el algoritmo de Cooley y Tukey (1965) se puede obtener la transformada rápida de Fourier *FFT* (*Fast Fourier Transform*) que, como su nombre lo dice, simplifica

el costo de la transformada. En caso de emplear un número de nodos que no sea potencia de 2, es posible utilizar diversos algoritmos como la variación de Cooley-Tukey o el de primer factor, ambos de Oppenheim (1989), y el algoritmo de raíz dividida (*split-radix*) de Duhamel y Vetterli (1990), entre otros. Todos funcionan a costa de una disminución en la velocidad de solución.

Para los nodos de colocación, los coeficientes de Fourier discretos son

$$\tilde{\phi} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \phi(x_j) e^{-ikx_j} \quad -\frac{N}{2} \leq k \leq \frac{N}{2} \quad (5.84)$$

Estos valores solo dependen de los valores nodales de ϕ . Para regresar a la variable original, que fue transformada previamente, se usa la antitransformada de Fourier (o transformada inversa)

$$\phi(x_j) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \tilde{\phi}_k e^{ikx_j} \quad j = 0, \dots, N-1 \quad (5.85)$$

Se conoce como transformada de Fourier discreta a la transformación de los N valores (reales o complejos) de $\phi(x_j)$ con $j = 0, \dots, N-1$, en los N números complejos $\tilde{\phi}_k$ en el dominio de la frecuencia con $k = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}-1$. En lugar de hacer las sumatorias indicadas en las ecuaciones, ambas transformadas pueden calcularse de manera muy eficiente empleando la transformada rápida de Fourier.

Derivación

Para calcular la derivada de ϕ , los coeficientes de Fourier discretos obtenidos con la ec 5.84 se multiplican por ik (la unidad imaginaria por el número de onda); así, la derivada es la antitransformada del resultado de

$$(D_N \phi)_l = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} a_k e^{2ikl\pi/N} \quad l = 0, \dots, N-1 \quad (5.86)$$

donde

$$a_k = \frac{ik}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \phi_j e^{-2ikj\pi/N} \quad (5.87)$$

La función $D_N \phi$ se conoce como la derivada de colocación de Fourier.

5.6.2 Explícito

La solución es obtenida únicamente con el método espectral, por lo que presenta poca estabilidad y requiere números de *Courant* pequeños. El algoritmo general de solución es el siguiente:

1. Determinar la *FFT* de ϕ_j^n .
2. Se multiplica la transformada por $ik(-u_j^n \Delta t / \Delta x_j)$, $j = 0, \dots, N-1$.
3. Se obtiene la antitransformada.
4. Se genera ϕ_j^{n+1} , utilizando la ec 3.20.

5.6.3 Implícito

Con la finalidad de evitar la restricción de la estabilidad del esquema explícito, se puede recurrir a un esquema implícito, pero iterativo. La primera estimación es de forma explícita

$$(\phi_j^{n+1})^1 = \phi_j^n - \frac{\Delta t u_j^n}{x_j} (D_N \phi)^n \quad (5.88)$$

Con los valores de $(\phi_j^{n+1})^1$ se calcula espectralmente $(D_N \phi)^{n+1}$; así, la ecuación recursiva para obtener la concentración resulta ser

$$(\phi_j^{n+1})^{m+1} = \phi_j^n - \frac{\Delta t}{2x_j} [u_j^n (D_N \phi)^n + u_j^{n+1} [(D_N \phi)^{n+1}]^m] \quad (5.89)$$

donde m indica el número de iteración. Conviene acentuar que se requiere una transformada y antitransformada por cada iteración. El número de iteraciones depende del problema, pero en general cuatro iteraciones como máximo son suficientes.

5.6.4 Seudoespectrales

Se pueden combinar métodos espectrales y de otra naturaleza, como diferencias finitas o de volumen finito; por tal razón, reciben el nombre de seudoespectrales. Hay que considerar que es más práctico realizar la combinación de esquemas en el espacio real.

Para resolver la parte temporal de la ecuación de transporte, basta con usar diferencias hacia adelante. La solución espacial seudoespectral permite dar una mayor precisión; consiste en construir un predictor con DF o VF , para posteriormente resolver la misma ecuación con el método espectral (a manera de corrector).

Emplear un esquema en DF o VF como predictor ayuda a estabilizar la solución. El corrector espectral puede ser explícito o implícito. El procedimiento seudoespectral predictor-corrector se puede expresar como sigue:

1. Se construye el predictor, $\phi_j^{\overline{n+1}}$, con un esquema en DF o VF .
2. A partir del predictor, se resuelve nuevamente para obtener el corrector, $\phi_j^{\overline{\overline{n+1}}}$, aprovechando el método espectral.
3. Se determina la solución definitiva, ϕ_j^{n+1} , de diversas maneras: tomando únicamente el corrector, promediando el predictor y corrector, utilizando un factor de peso, iterando, etc.

La solución final con el uso de un factor de ponderación, γ , entre el predictor y el espectral como corrector, tiene la forma

$$\phi_j^{n+1} = (1 - \gamma)\phi_j^{\overline{n+1}} + \gamma \phi_j^{\overline{\overline{n+1}}} \quad (5.90)$$

REFERENCIAS

- Atias M., Wolfchtein M. e Israeli M., "Efficiency of Navier-Stokes solver", *AIAA Journal*, 15, 1977, 263-265.
- Berezowsky V., "Métodos espectrales en hidráulica", *Tesis Doctoral*, 1998, UNAM.
- Canuto C.G., Hussaini M. Y., Quarteroni A., Zang T. A., *Spectral Methods: Evolution to Complex Geometries and Applications to Fluid Dynamics*, Springer, 1988.
- Cooley J. W., y Tukey J. W., "An Algorithm for the Machine Computation of the Complex Fourier Series," *Mathematics of Computation*, 19, 1965, 297-301.
- Duhamel, P. y M. Vetterli, "Fast Fourier Transforms: A Tutorial Review and a State of the Art," *Signal Processing*, 19, 1990, 259-299.
- Gaskell P. H. y Lau A. K. C., "Curvature-compensated convective transport: Smart, A new boundedness-preserving transport algorithm", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8, 1988, 617-641.
- Lax P. D., "Hyperbolic systems of conservation laws II", *Comm. Pure and applied mathematics*, 10, 1957, 537-566.
- Lax P. D., "Weak solutions of non linear hyperbolic equations and their numerical computation", *Comm. Pure and applied mathematics*, 7, 1954, 159-93.
- Lax P. D. y Wendroff B., "Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy", *Comm. Pure and applied mathematics*, 17, 1964, 381-398.
- Lax P. D. y Wendroff B., "System of conservation laws", *Comm. Pure and applied mathematics*, 13, 1960, 217-237.
- Leonard B. P. "Sharp Simulation of Discontinuities in Highly Convective Steady Flow", *NASA Technical Memorandum 100240*, ICOMP-87-9, December 1987.
- Leonard B. P., "A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation", *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 19, 1979, 59-98.
- Leonard B. P., "Simple High-Accuracy Resolution Program For Convective Modelling of Discontinuities", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8, 1988, 1291-1318.
- Leonard B. P., "The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection", *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 88, 1991, 17-74.
- Leonard B. P. y Mokhtari S., "Beyond First-Order Upwinding: The ULTRA-SHARP Alternative for Non-Oscillatory Steady-State Simulation of Convection", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30, 1990, 729-766.
- Lien F. S. y Leschziner M. A., "Upstream Monotonic Interpolation For Scalar Transport With Application to Complex Turbulent Flows", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 19, 1994, 527-548.

- MacCormack R. W., "Current status of numerical solutions of Navier-Stokes equations", AIAA Paper 85-0032, AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting.
- MacCormack R. W., "The Effect of viscosity in Hypervelocity Impact Cratering", AIAA Paper 69-354, Cincinnati, Ohio, 1969.
- Murman E. M., "Analysis of Embedded shock waves calculated by relaxation methods", *AIAA Journal*, 12, 1974, 626-633.
- Oppenheim, A. V. y R. W. Schaffer, Discrete-Time Signal Processing, Prentice-Hall, 1989, 611.
- Oppenheim, A. V. y R. W. Schaffer, Discrete-Time Signal Processing, Prentice-Hall, 1989, 619.
- Papadakis G. y Bergeles G., "A locally modified second order upwind scheme for convection terms discretized", *International Journal of Numerical Methods Heat Fluid Flow*, 5, 1995, 49-62.
- Pascau A. y Pérez C. "A well-behaved scheme to model strong convection in a general transport equation", *International Methods Lamina and Turbulent Flows*, 8, 1993, 608-617.
- Price H. S., Varga R. S. y Warren J. E., "Application and of oscillation matrices to diffusion-correction equations", *Journal of Mathematics and Physics*, 45, 1966, 301-311.
- Song B., Liu G. R., Lam K. Y., Amano R. S., "On a Higher-Order Bounded Discretization scheme", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 32, 2000, 881-897
- Vanka S. P., "Second-order upwind differencing in a recirculation flow", *AIAA Journal*, 25, 1987, 1435-1441
- Varonos A., Bergeles G., "Development and Assessment of a Variable Order Non-Oscillatory Scheme for Convection Term Discretization", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 26, 1998, 1-16
- Warming R. F., "Upwind second-order difference schemes and applications in Aerodynamics Flows", *AIAA Journal*, 14, 1976, 1241-1249
- Zhou G., Davidson L., Olsson E., "Transonic Inviscid / Turbulent Airfoil Flow Simulations Using a Pressure Based Method with High Order Schemes". *Lecture notes in Physics*, 453, 1995, 372-377, Springer-Verlag
- Zhu J. "A low-diffusive and oscillation-free convection scheme", *Comm. Appl. Numer. Methods*, 7, 1991, 225-232
- Zhu J. "On the higher-order bounded discretization schemes for finite volume computations of incompressible flows", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 98, 1992, 345-260
- Zhu J., Rodi W., "A low dispersion and bounded convection scheme", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 92, 1991, 87-96
- Zijlema M., "On the Construction Of Third-Order Accurate Monotone Convection Scheme With Application To Turbulent Flows In General Domains", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 22, 1996, 619-641

6. PRUEBAS

Para obtener una comparación cuantitativa de la precisión de cada uno de los resultados numéricos de los esquemas se hace uso de cuatro pruebas, de las cuales, tres se repiten cambiando el número de *Courant* y el número de pasos en que se fracciona el tiempo total. Las pruebas exigen un buen comportamiento de la solución para condiciones extremas.

Para juzgar el funcionamiento de los esquemas de una manera cuantitativa, se hace uso de diferentes criterios para medir el error generado al comparar el resultado numérico y el analítico. La forma de medir los errores es detallada en el apéndice A. La ec para la solución analítica corresponde a la condición inicial desplazada cierta distancia, ut , en dirección aguas abajo.

Posterior a la tabla de errores se muestran comentarios sobre estabilidad, costo computacional, aparición de oscilaciones espurias, existencia de desfase, grado de difusión numérica y una calificación del esquema, obtenida considerando sus ventajas y desventajas.

Primera prueba

Consiste en el problema 1 del Foro de convección-difusión organizado por Baptista *et al* (1988). La velocidad de flujo es constante, $u = 0.5 \text{ m/s}$; con un incremento de tiempo $\Delta t = 96 \text{ s}$; y se avanza la solución hasta $T = 9600 \text{ s}$, (esto es, $100 \Delta t$). La malla consta de 64 nodos espaciados de manera uniforme, $\Delta x = 200 \text{ m}$. El número de *Courant* es $C = 0.24$.

El parámetro inicial ($t = 0 \text{ s}$) de esta primera prueba consiste en una curva de distribución de la concentración tipo Gauss, mostrada en la fig 6.1. Esta función presenta suavidad en los extremos y alta curvatura en el pico.

$$\phi(t = 0, x) = \phi_p e^{\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right)} \quad (6.1)$$

Con una concentración de pico o máximo, $\phi_p = 1.0$ (las unidades pueden ser g/m^3 , K , etcetera). Los parámetros de distribución: centro de masa en $x_c = 2000 \text{ m}$, una dispersión de $\sigma_0 = 264 \text{ m}$. Como $\sigma_0/\Delta x = 1.32$ implica describir la condición inicial con relativamente pocos puntos de la malla, haciendo de esta primera prueba exigente para el método numérico de solución empleado. Se aclara que la función es suave en x , y con gran curvatura cerca del pico. La solución analítica final (en t_f) corresponde a la solución inicial desplazada 4800 m (uT).

La condición en la frontera aguas arriba, $\phi(x = 0, t) = 0$, se impone como cero y representa la concentración que entra al dominio. Algunos esquemas utilizan nodos aguas abajo en su interpolación, y su uso hace necesario definir la frontera aguas abajo, de igual forma igual a cero.

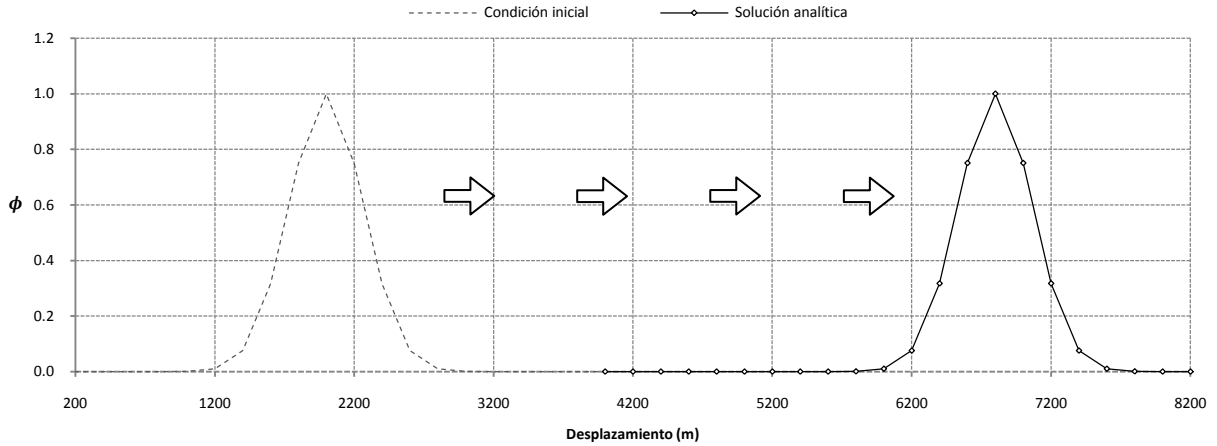


Figura 6.1 Prueba 1

Segunda a cuarta prueba

Sweby (1984) recopiló estas pruebas y posteriormente fueron aprovechadas por diversos autores. Su selección fue por su simplicidad y facilidad de reproducción; además, de que intentan representar las características básicas de problemas extremos que se pueden presentar en la práctica. Las pruebas son aplicadas en la misma corrida con el fin de simular situaciones más prácticas. Entre las pruebas se emplea una distancia, de $(20\Delta x)$, sin importar el valor del incremento de tiempo (Δt) o el número de *Courant*. Por simplicidad, se toman valores fijos de la velocidad, $u = 1 \text{ m/s}$, y espaciamiento $\Delta x = 0.01 \text{ m}$. Para las mismas condiciones iniciales, se emplean dos números de *Courant*: el inciso a) con $C = 0.05$ que ocupa $900\Delta t$ e implica un incremento de tiempo pequeño ($\Delta t = 0.0005 \text{ s}$); el inciso b) usa $C = 0.5$ y requiere de $90\Delta t$, e involucra un incremento de tiempo mayor ($\Delta t = 0.005 \text{ s}$). Con excepción del número de *Courant*, estos parámetros son irrelevantes para el esquema de solución, pues solo son factores de escala en el problema; siempre y cuando no afecte la precisión utilizada en la programación. La solución buscada corresponde a $45\Delta x$, involucrando un número total de pasos N_t .

$$N_t = 45/C \quad (6.2)$$

La segunda prueba es una función rectangular o caja. Esta prueba permite ver cómo el esquema de solución es capaz de regresar a la monotonía después de pasar por dos altos gradientes, esto convirtiéndose en un aspecto fundamental en el modelado de la advección. Una buena simulación después de cruzar un escalón obtiene la monotonía en una pequeña cantidad de nodos; cuanto más reducido sea el ancho ocupado por las oscilaciones generadas por el escalón, mejor será el método utilizado para esta prueba.

Por un lado esta prueba proporciona dos veces más información que usar un escalón simple; pero ofrece la desventaja que para métodos altamente oscilatorios, las oscilaciones excitadas en el ascenso pueden interferir con las del descenso y viceversa; así, provocando un patrón de onda resultante confuso y que no es claro en algunos casos.

La caja rectangular tiene un ancho de la base de $20\Delta x$, con una altura $\phi = 1$, y se encuentra ubicada en el dominio a $10\Delta x$ de la frontera aguas arriba.

La tercera prueba es geoméricamente muy similar a la primera. Es una onda senoidal cuadrática de un ancho $20\Delta x$ de la forma:

$$\phi(t = 0, x) = \sin^2\left(\frac{\pi x}{20\Delta x}\right) \quad \text{en} \quad 0 \leq x \leq 20\Delta x$$

y $\phi(t = 0, x) = 0$ para cualquier otro valor de x (6.3)

Esta función representa un perfil relativamente suave con un gradiente variable, y posee un solo máximo local que introduce un cambio tajante en la curvatura de cualquiera de los lados.

La cuarta prueba fue usada por vez primera por Zalesak (1987) y hace referencia a una semi-elipse con un ancho de $2i_w\Delta x = 20\Delta x$, centrada en i_c con forma (con i como nodo). El inicio y fin de la función son abruptos.

$$\phi(t = 0, x) = \sqrt{1 - (i - i_c)^2 / i_w^2} \quad \text{si} \quad |i - i_c| < i_w$$

y $\phi(t = 0, x) = 0$ para cualquier otro valor (6.4)

Es una prueba rigurosa que posee un cambio tajante inicial en el gradiente, seguido por una región con gradiente continuamente cambiante y finalmente otro cambio brusco del gradiente; estos puede generar en la simulación una oscilación significativa en la zona apenas detrás o apenas delante del paso de la semi-elipse. Las condiciones de frontera aguas arriba y aguas abajo son iguales a las pruebas anteriores, sin olvidar que en esquemas de alto orden es necesario más de un nodo como frontera (pseudo-nodos). La condición inicial de la segunda, tercera y cuarta prueba se muestran en la fig 6.2.

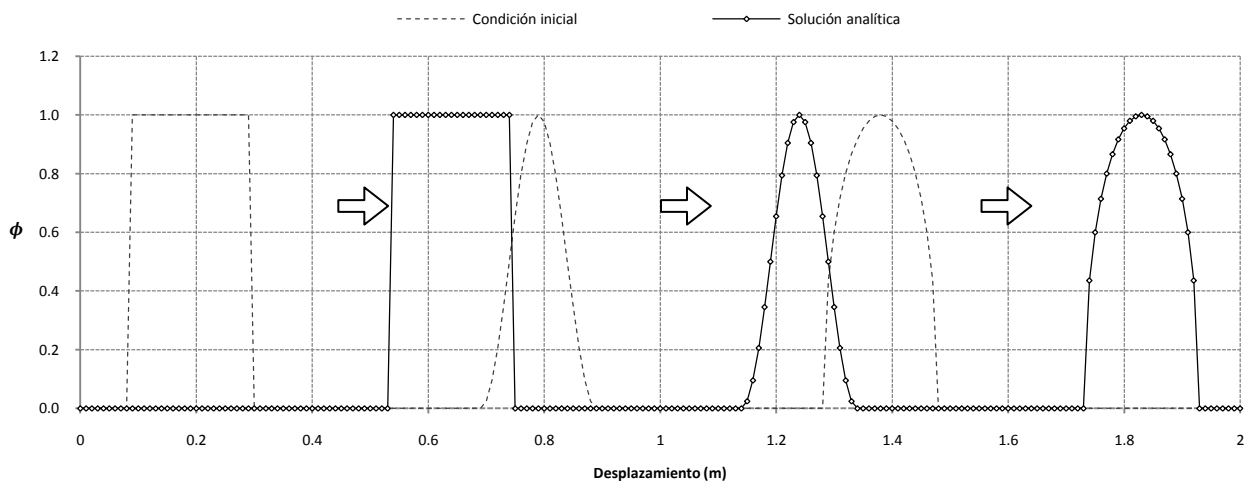


Figura 6.2 Condición inicial prueba 2 a 4

Las siguientes figuras, muestran los resultados de los esquemas e incluyen en la parte superior información de los anchos de paso Δx con dx y Δt con dt , el número de Courant C ; el valor máximo y mínimo, $Máx$ y $Mín$; además el tiempo de cómputo, tc . Cuando algún esquema es inestable no se incluyen su gráfica, con excepción de la fig 6.4.

Los algoritmos fueron programados en MATLAB. El tiempo de cómputo se calcula internamente con el software. Se emplea la misma computadora en todas las pruebas, y por ello, es posible compararlos.

Medidas de Error

Como parte de los resultados se incluyen tablas con diferentes medidas del error también propuestas en el Foro de convección-difusión organizado por Baptista *et al* (1988). Con las siguientes definiciones de variables:

$m(t)$	Masa total; equivalente al área bajo la curva de la distribución y se obtiene mediante integración numérica
$\phi^r(x, t)$	Concentración en el punto x al tiempo t , de la solución de referencia
$\phi^n(x, t)$	Concentración en el punto x al tiempo t , de la solución numérica
Ω	Dominio de integración en x

1. Norma discreta del error L-2. Adimensionalizada con la masa total. Es una medida discreta del error global de la solución numérica; de hecho es la medida más importante de error; debe valer cero ya que suma las diferencias de cada nodo entre la solución numérica y la analítica

$$\phi_D(t) = \frac{1}{m(t)} \{ [\sum_i [\phi_i^n(t) - \phi^r(x_i, t)]^2]^{1/2} \} \quad (6.5)$$

2. Error en la concentración de pico. Es adimensionalizada con la concentración en el pico de la solución analítica. Es una medida del amortiguamiento del método numérico; debe valer cero

$$\varepsilon(t) = \frac{\phi_{max}^r(t) - \phi_{max}^n(t)}{\phi_{max}^r(t)} \quad (6.6)$$

3. Valor absoluto máximo negativo del método numérico. Está adimensionalizado con la concentración en el pico de la solución analítica. Es una medida puntual de las oscilaciones espurias (*wiggles*) negativas de la solución numérica; debe valer cero

$$\psi(t) = \left| \frac{\phi_{max, neg}^n(t)}{\phi_{max}^r(t)} \right| \quad (6.7)$$

4. Error en la posición de la concentración de pico. Es adimensionalizado con la distancia exacta de viaje del pico. Mide puntualmente el desplazamiento o fase de la solución numérica y debe valer cero

$$\xi(t) = \frac{x_{max}^r(t) - x_{max}^n(t)}{Ut} \quad (6.8)$$

5. Momento de orden cero del perfil de concentraciones, adimensionalizado con el valor semi-exacto, es decir, con la masa total. Es una medida integral de la conservación de masa; debe valer uno

$$\mu_0(t) = \frac{1}{m(t)} \int_{\Omega} \phi^n(x, t) dx \quad (6.9)$$

6. El valor esperado, también conocido como primer momento de la distribución en un instante dado

$$E(C, t) = \frac{1}{m(t)} \int_{\Omega} x \phi^n(x, t) dx \quad (6.10)$$

7. El error en este primer momento del perfil de concentraciones, adimensionalizado con la distancia exacta de viaje. Es una medida integral del error de fase de la solución numérica, debe valer cero y esta dado por:

$$\mu_x(t) = \frac{E^r(\phi, t) - E^n(\phi, t)}{Ut} \quad (6.11)$$

8. Segundo momento del perfil de concentraciones, adimensionalizado con el valor de la solución analítica. Es una medida integral de la dispersión de la solución numérica y debe valer uno

$$\mu_{xx}(\phi, t) = \frac{\int_{\Omega} [x - E^n(\phi, t)]^2 \phi^n(\phi, t) dx}{\int_{\Omega} [x - E^a(\phi, t)]^2 \phi^r(\phi, t) dx} \quad (6.12)$$

La última forma de medir el error es tomada de Leonard (1991). Se le conoce como ondulación o variación total del error y debe valer cero.

$$\mathcal{W} = \sum_{j=1}^N |\mathcal{E}_{j+1} - \mathcal{E}_j| \quad (6.13)$$

donde \mathcal{E}_j es el error local de cada nodo dado por la ec 4.8. Este error es graficado en la parte inferior de cada figura.

6.1 Lineales

6.1.1 Segundo orden hacia atrás

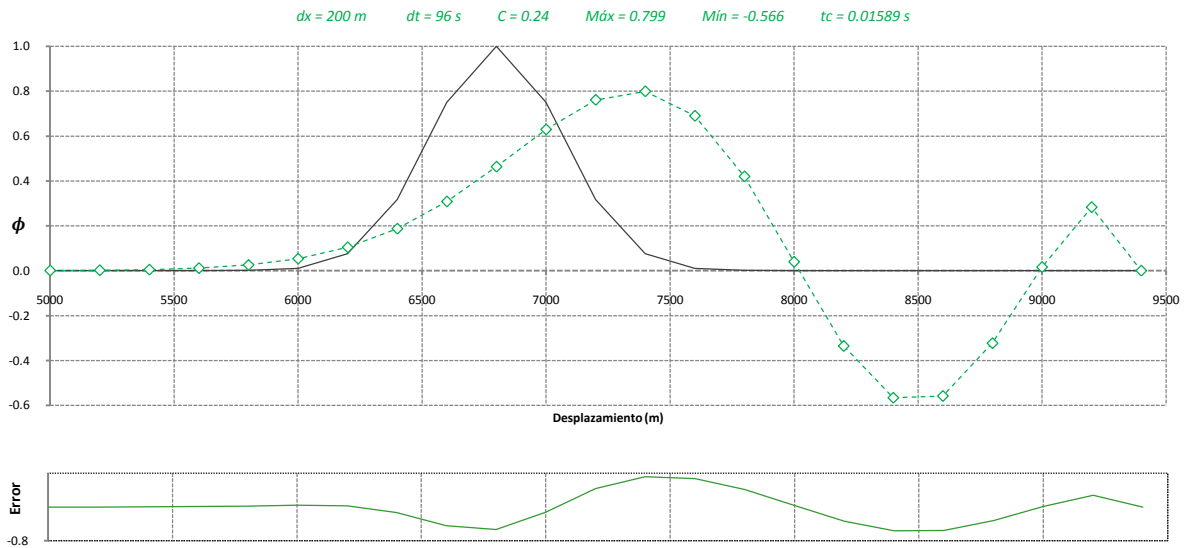


Figura 6.3 Prueba 1, esquema segundo orden hacia atrás

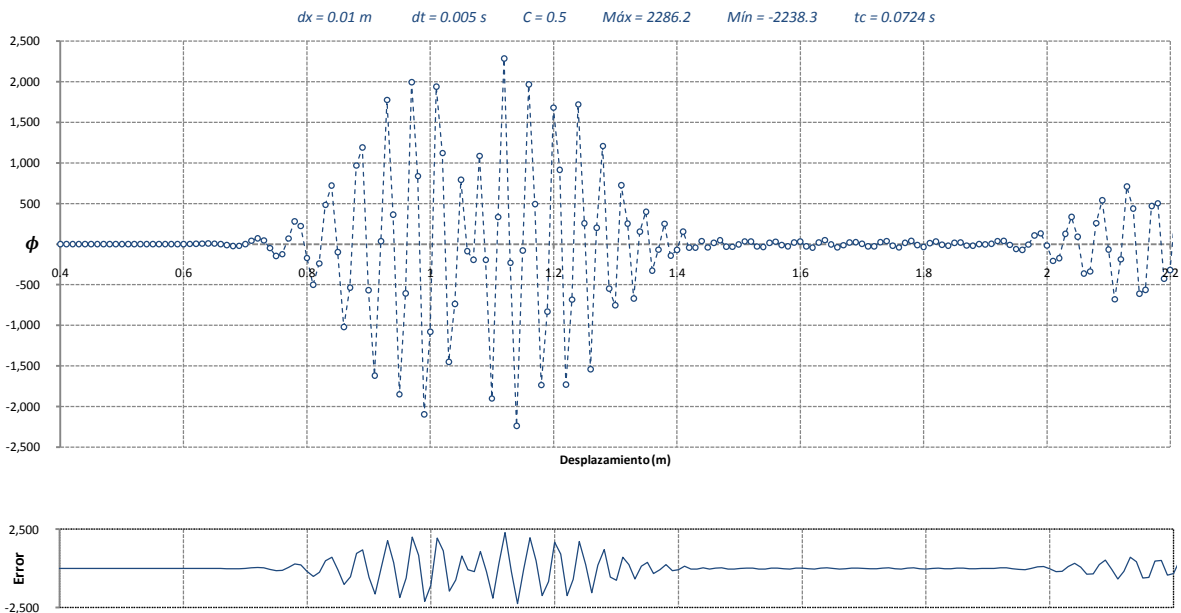


Figura 6.4 Prueba 2a, 3a y 4a, $C = 0.5$, esquema segundo orden hacia atrás

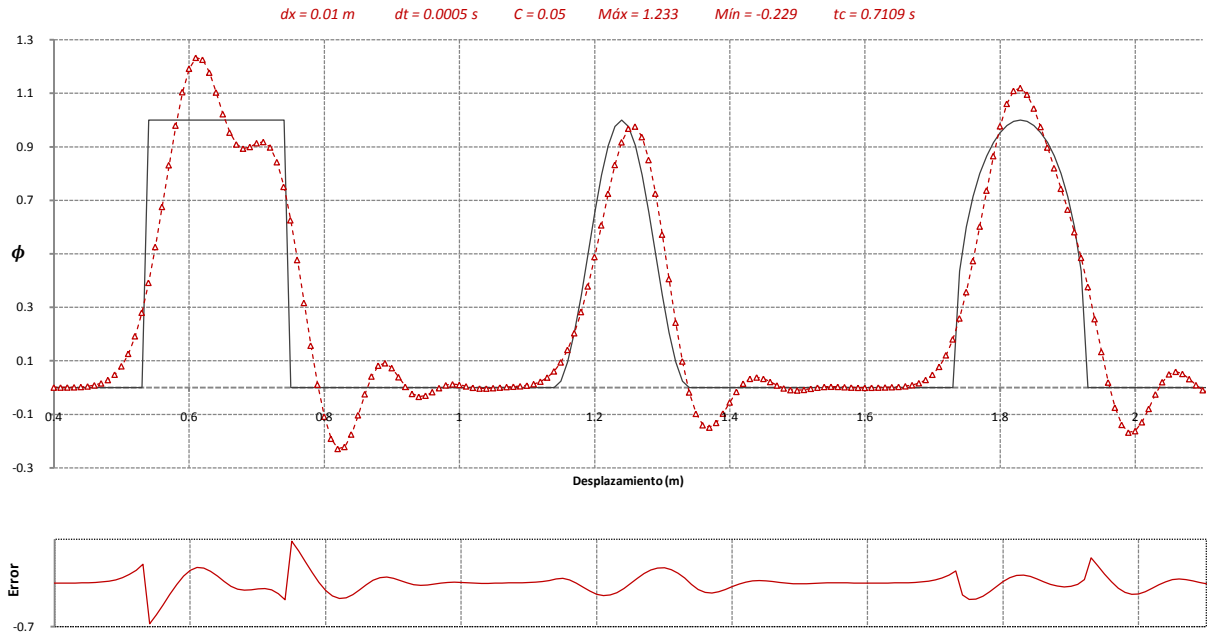


Figura 6.5 Prueba 2b, 3b y 4b, $C = 0.05$, esquema segundo orden hacia atrás

Tabla 6.1 Errores del esquema segundo orden hacia atrás

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0021	0.2014	0.0000	-0.0882	1.3524	-0.0002	1.4953	2.2671
2b	7.365	-0.233	0.229	0.047	1.052	7.160	0.907	3.499
3b	6.894	0.024	0.150	-0.016	0.999	0.260	0.995	1.330
4b	5.155	-0.120	0.168	0.000	0.982	-7.017	1.035	1.876

6.1.2 Predictor-corrector de segundo orden

MacCormack

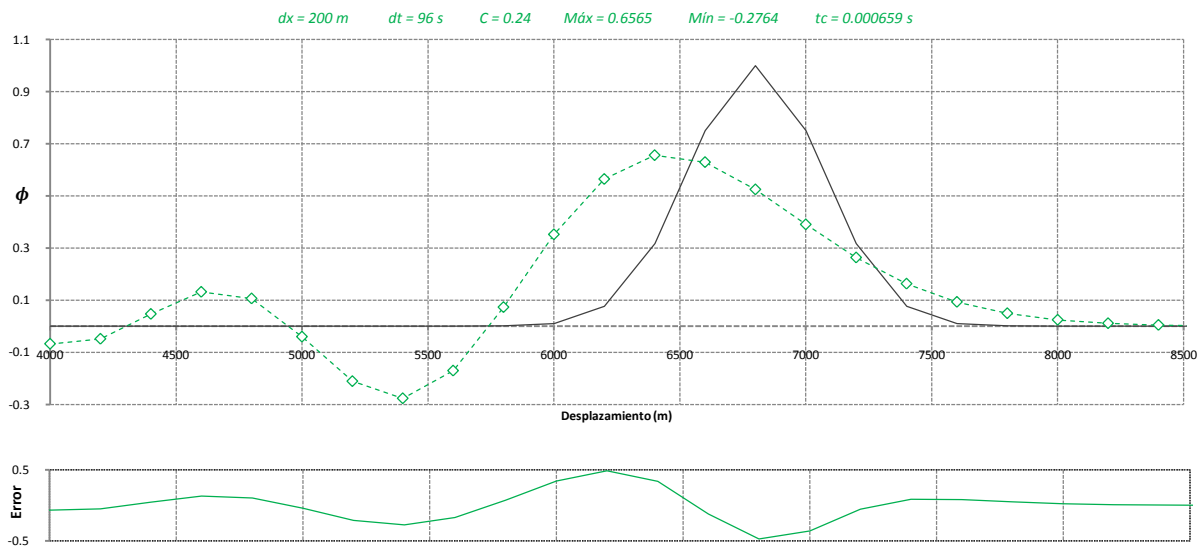


Figura 6.6 Prueba 1, esquema de MacCormack

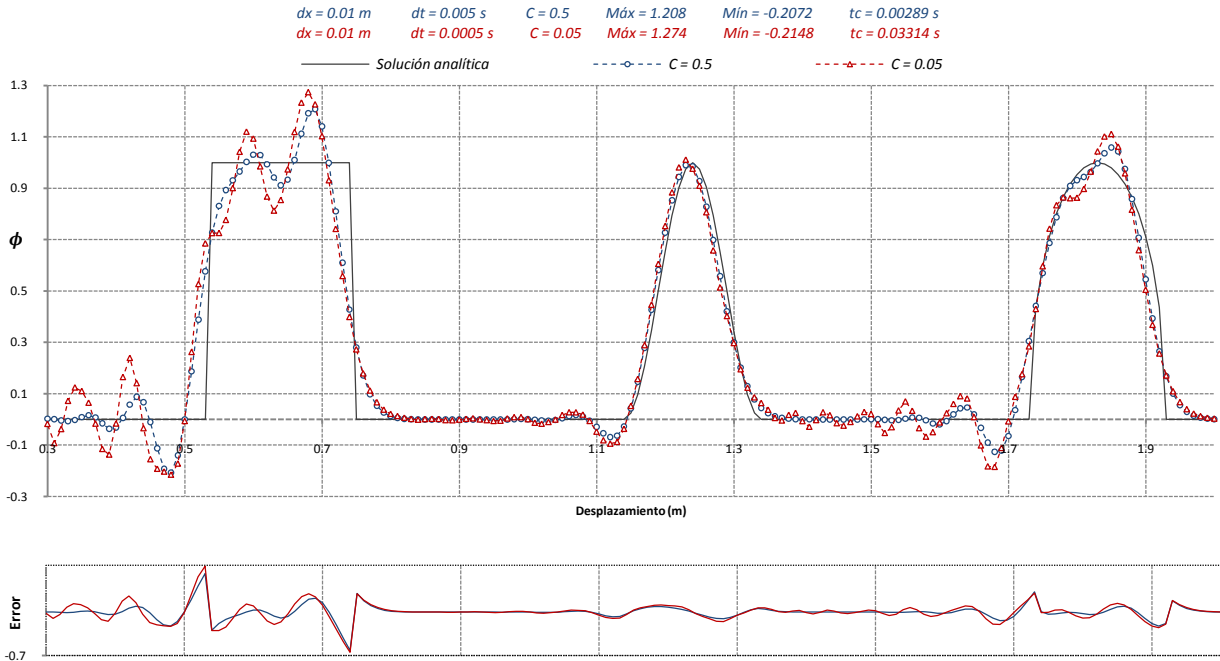


Figura 6.7 Prueba 2, 3 y 4, esquema de MacCormack

Tabla 6.2 Errores del esquema de MacCormack

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0016	0.3435	0.2764	0.0588	0.9901	0.0000	0.9805	2.4314
2a	6.196	-0.208	0.207	-0.078	1.050	7.108	0.907	3.551
3a	2.963	0.010	0.069	0.008	1.000	0.065	0.999	0.565
4a	3.728	-0.059	0.126	-0.011	0.983	-7.157	1.037	1.560
2b	7.775	-0.274	0.215	-0.063	1.054	7.104	0.912	4.601
3b	4.157	-0.011	0.094	0.008	0.996	-0.252	0.999	1.050
4b	4.512	-0.112	0.184	0.000	0.982	-7.945	1.042	2.022

Con corrector hacia atrás

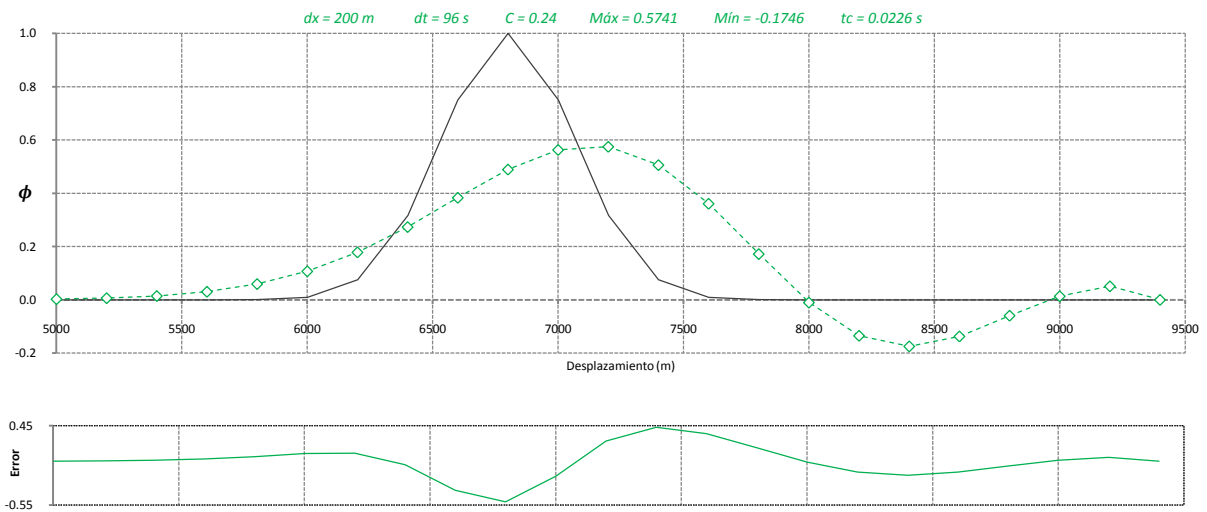


Figura 6.8 Prueba 1, esquema con corrector hacia atrás

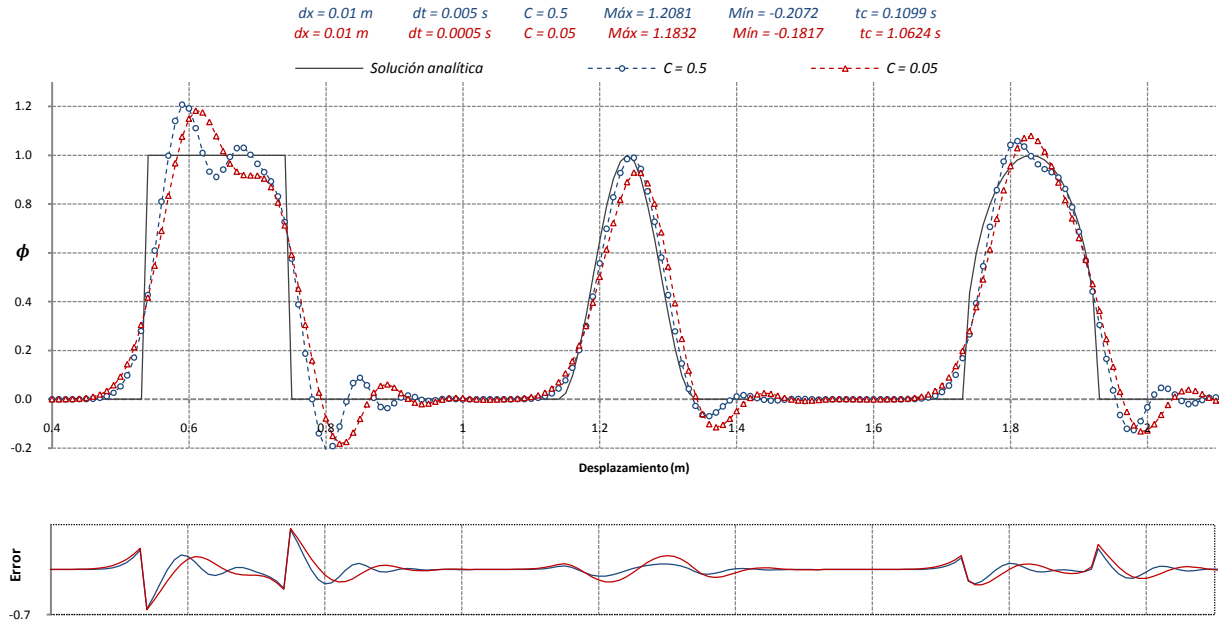


Figura 6.9 Prueba 2, 3 y 4, esquema con corrector hacia atrás

Tabla 6.3 Errores del esquema predictor-corrector segundo orden

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0014	0.4259	0.0000	-0.0588	1.1221	-0.0001	1.1816	1.6120
2a	6.196	-0.208	0.207	-0.063	1.050	7.096	0.907	3.562
3a	2.964	0.010	0.069	-0.008	1.000	0.049	0.999	0.570
4a	3.728	-0.059	0.126	0.011	0.982	-7.119	1.036	1.565
2b	6.957	-0.183	0.182	0.047	1.051	7.136	0.906	3.025
3b	6.168	0.071	0.115	-0.008	0.999	0.145	0.997	1.131
4b	4.732	-0.080	0.131	0.000	0.982	-7.069	1.036	1.741

6.1.3 QUICK

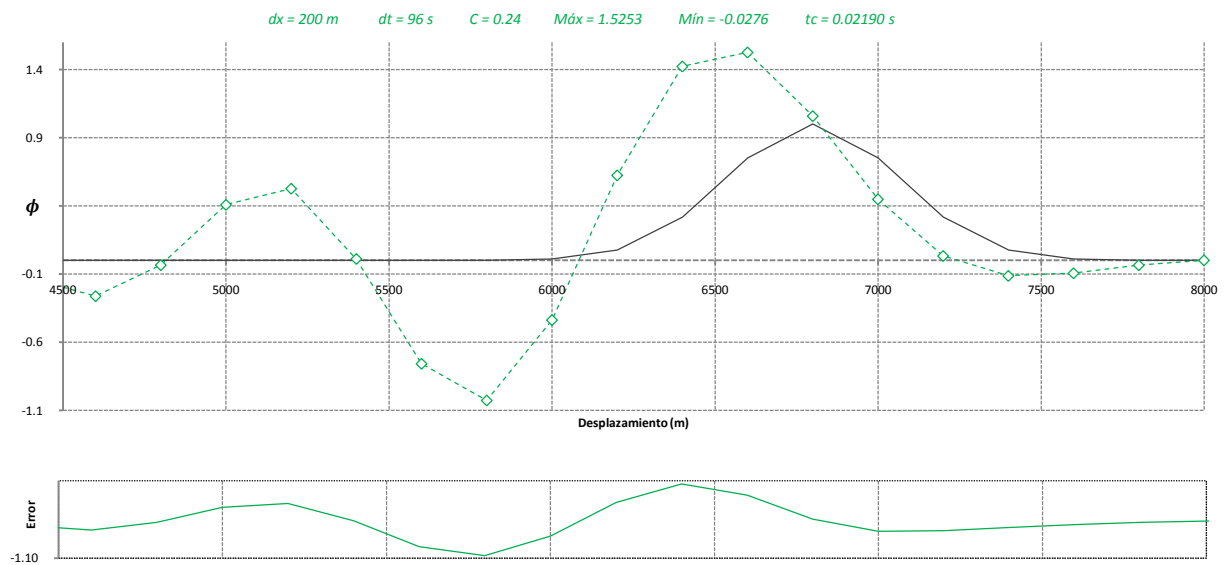


Figura 6.10 Prueba 1, esquema QUICK

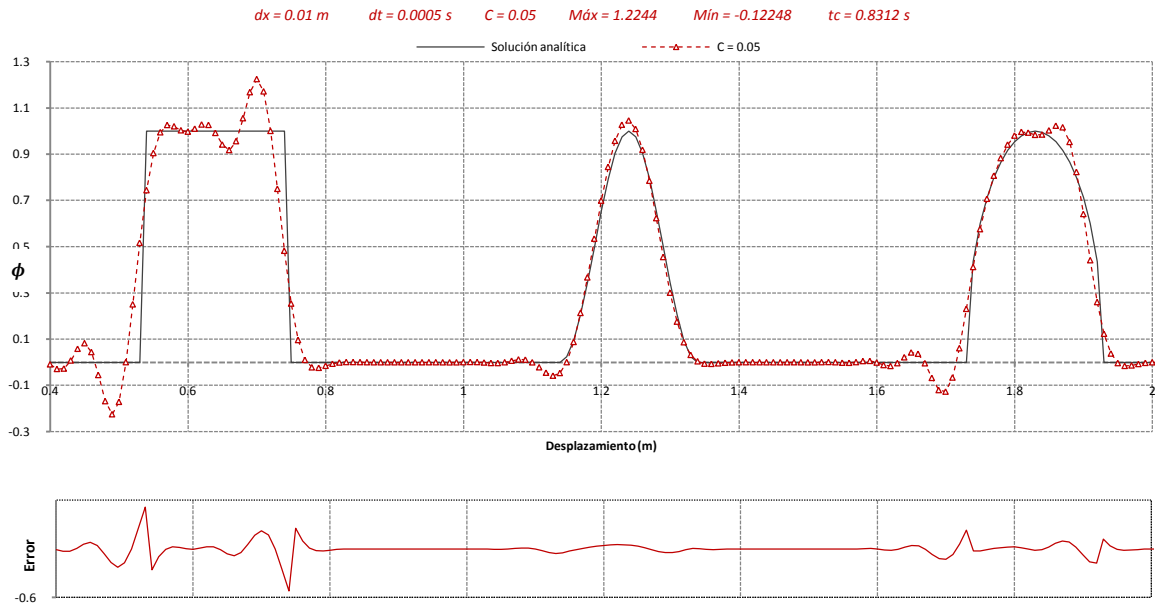


Figura 6.11 Prueba 2, 3 y 4, esquema QUICK

Tabla 6.4 Errores del esquema QUICK

Prueba	L-2	$\epsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0033	-0.5253	1.0276	0.0294	0.9959	0.0000	0.9889	5.4921
2b	5.151	-0.224	0.225	-0.094	1.050	7.123	0.906	3.267
3b	1.743	-0.046	0.058	0.000	1.000	-0.010	1.000	0.322
4b	2.871	-0.023	0.127	-0.016	0.982	-7.121	1.036	1.284

6.1.4 QUICKEST

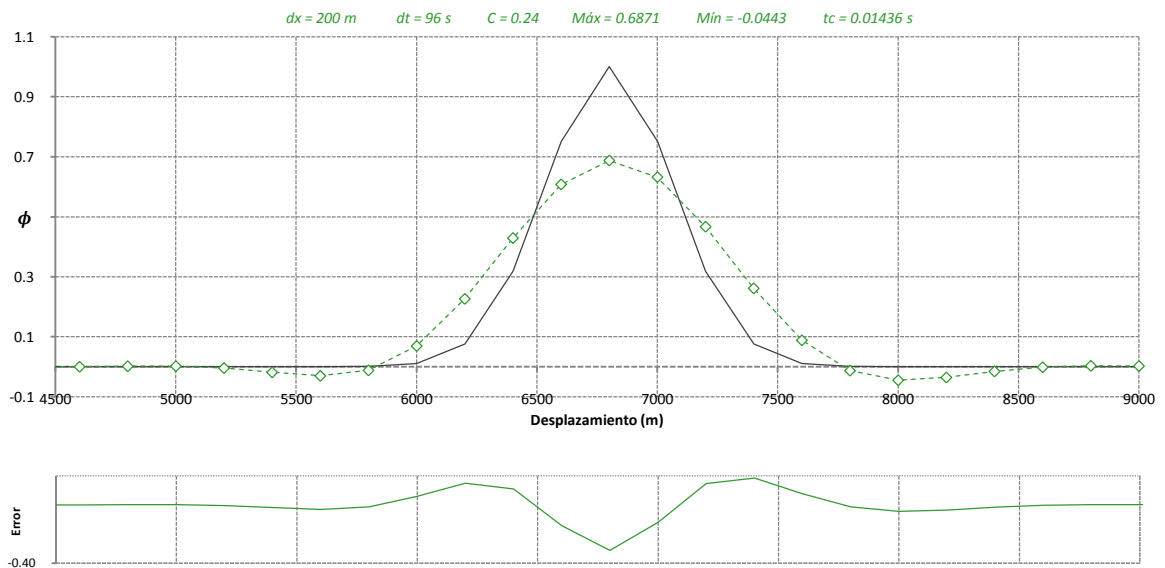


Figura 6.12 Prueba 1, esquema QUICKEST

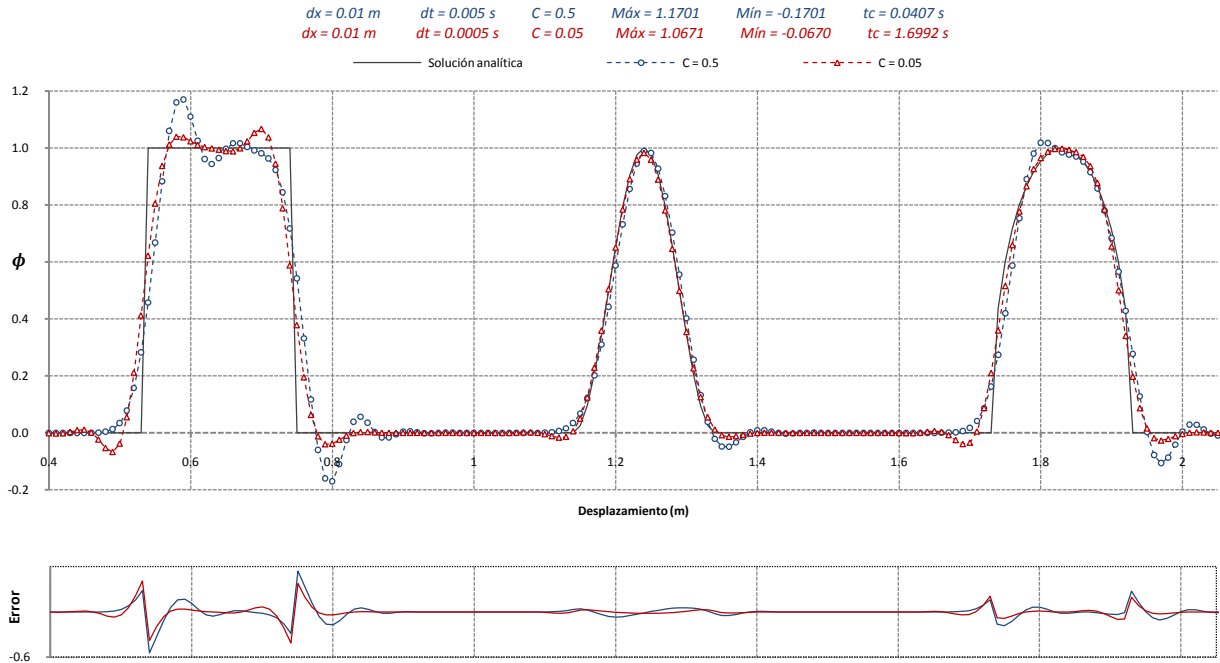


Figura 6.13 Prueba 2a, 3a y 4a, esquema QUICKEST

Tabla 6.5 Errores del esquema QUICKEST

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0007	0.3067	0.0458	0.0000	1.0140	0.0000	1.0262	0.8802
2a	4.195	-0.050	0.050	-0.016	1.050	7.111	0.906	1.762
3a	0.556	0.010	0.011	0.000	1.000	0.000	1.000	0.126
4a	2.127	0.001	0.031	0.000	0.982	-7.140	1.036	0.884
2b	4.562	-0.068	0.068	-0.094	1.050	7.111	0.906	1.929
3b	0.856	0.017	0.017	0.000	1.000	0.000	1.000	0.180
4b	2.401	0.002	0.040	0.000	0.982	-7.139	1.036	0.978

6.1.5 Cuarto orden centrado

En ninguna de las pruebas hay estabilidad.

6.1.6 Errores y tiempo de cómputo

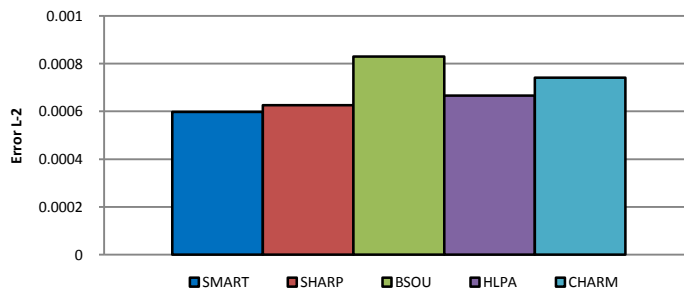


Figura 6.14 Norma del error L-2 de esquemas lineales

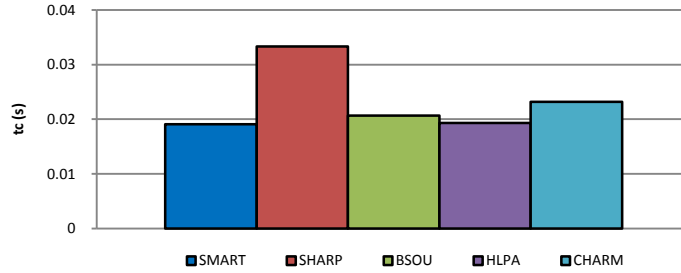


Figura 6.15 Tiempo de cómputo de esquemas lineales

QUICKEST es el esquema que ofrece la mejor relación de desempeño entre el tiempo de cómputo y el error. Además, ofrece pocas oscilaciones espurias, poca difusión numérica, no tiene desfaseamiento y es sencilla su implementación.

6.2 Tipo Lax-Wendroff

6.2.1 Segundo orden centrado

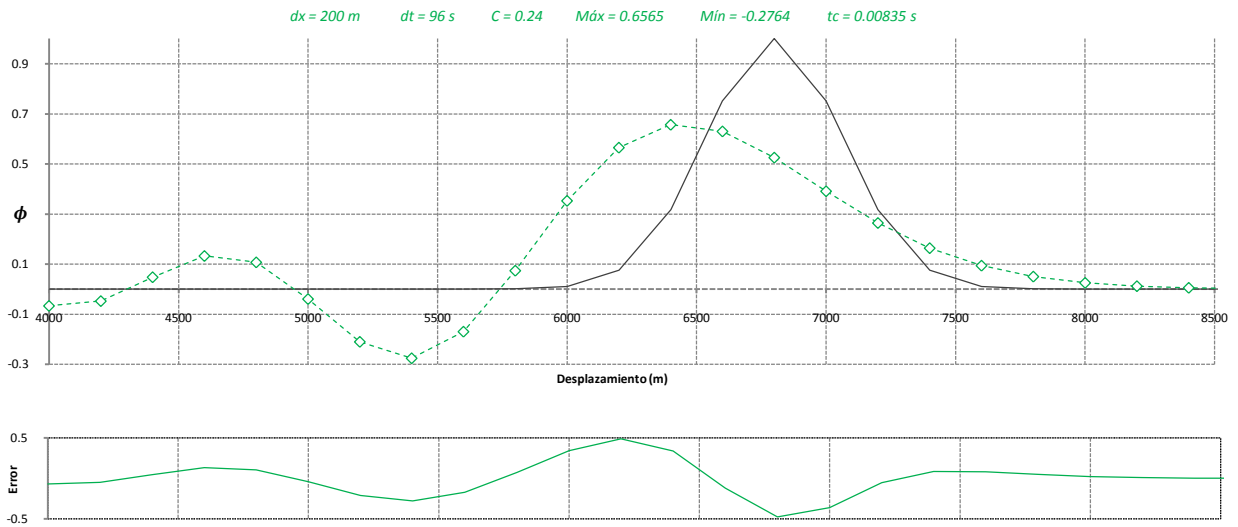


Figura 6.16 Prueba 1, esquema segundo orden centrado

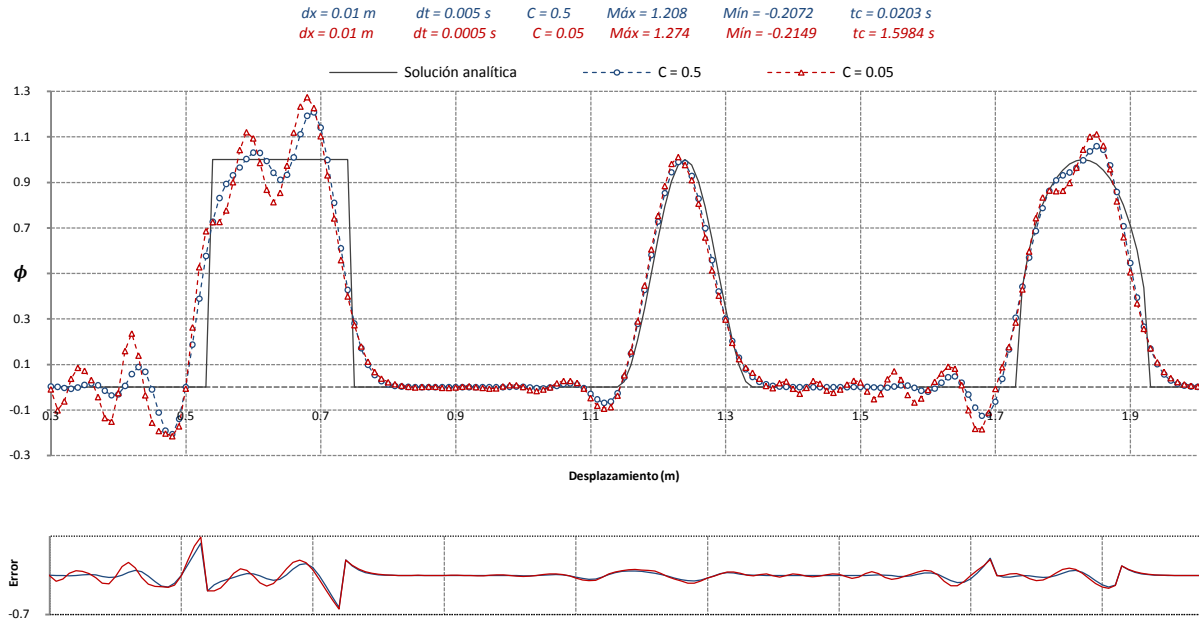


Figura 6.17 Prueba 2, 3 y 4, esquema segundo orden centrado

Tabla 6.6 Errores del esquema segundo orden centrado

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0016	0.3435	0.2764	0.0588	0.9901	0.0000	0.9805	2.4312
2a	6.196	-0.208	0.207	0.078	1.050	7.096	0.907	3.562
3a	2.964	0.010	0.069	-0.008	1.000	0.049	0.999	0.570
4a	3.728	-0.059	0.126	0.011	0.982	-7.119	1.036	1.564
2b	7.771	-0.274	0.215	-0.063	1.047	6.784	0.909	4.530
3b	4.157	-0.011	0.094	0.008	0.996	-0.252	0.999	1.050
4b	4.512	-0.112	0.184	-0.011	0.982	-7.945	1.042	2.022

6.2.2 Segundo orden hacia atrás

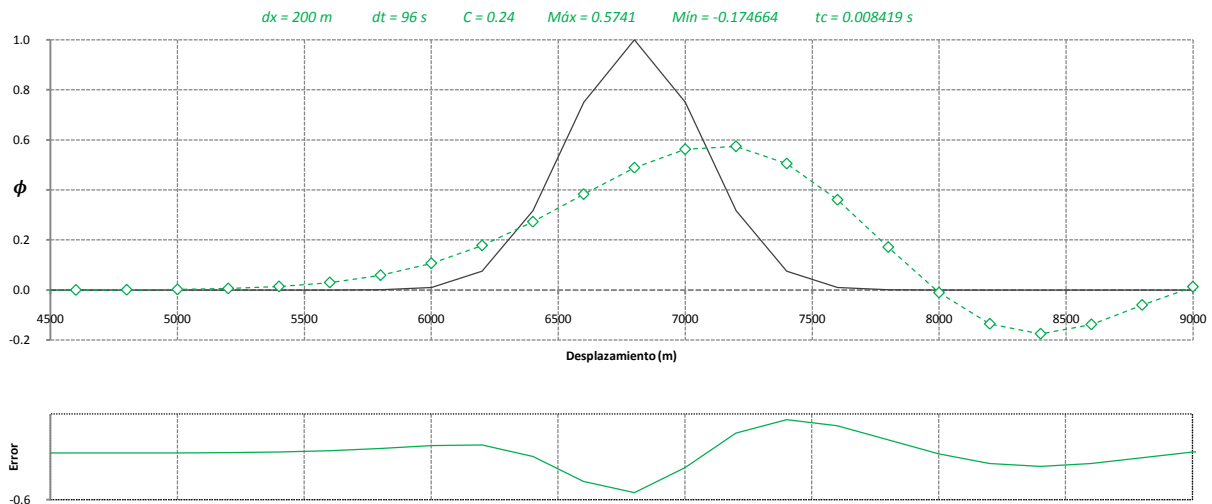


Figura 6.18 Prueba 1, esquema de segundo orden hacia atrás

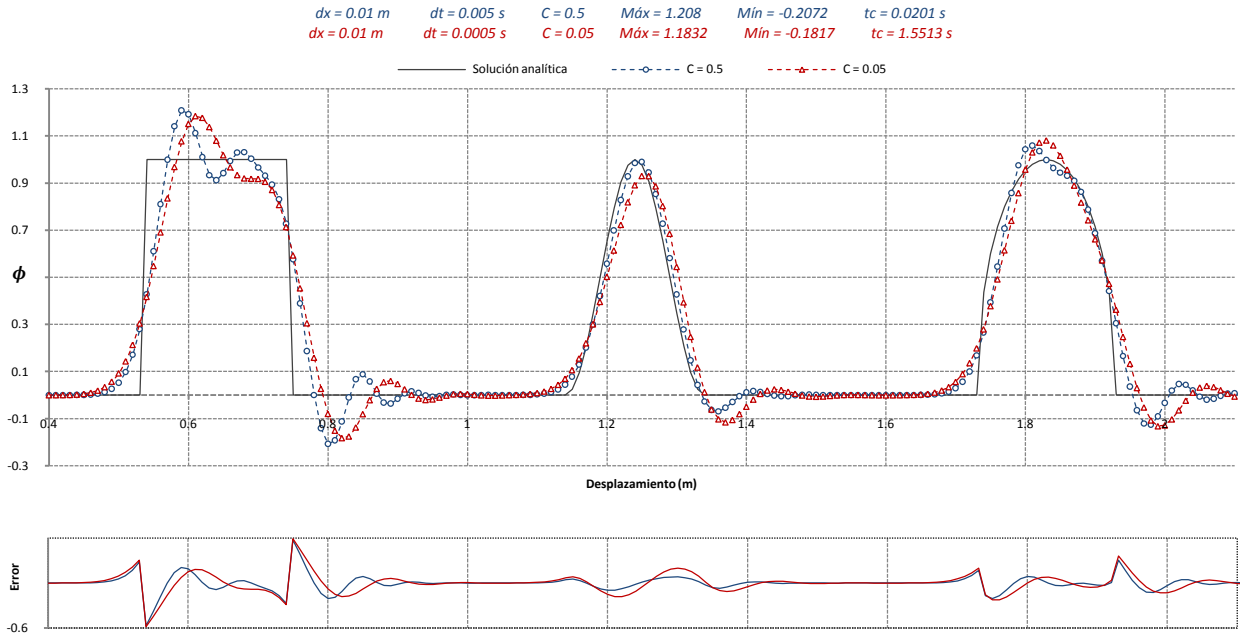


Figura 6.19 Prueba 2, 3 y 4, esquema de segundo orden hacia atrás

Tabla 6.7 Errores del esquema de segundo orden hacia atrás

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0014	0.4259	0.0000	-0.0588	1.1221	-0.0001	1.1816	1.6120
2a	33.307	-0.505	0.499	0.422	0.909	50.055	0.396	5.898
3a	41.204	-0.156	0.168	0.177	1.085	27.018	0.914	5.100
4a	33.646	-0.240	0.300	0.137	0.867	30.636	0.775	4.256
2b	6.957	-0.183	0.182	0.047	1.051	7.136	0.906	3.025
3b	6.168	0.071	0.115	-0.008	0.999	0.145	0.997	1.131
4b	4.732	-0.080	0.131	0.000	0.982	-7.069	1.036	1.739

6.2.3 Tercer orden hacia atrás

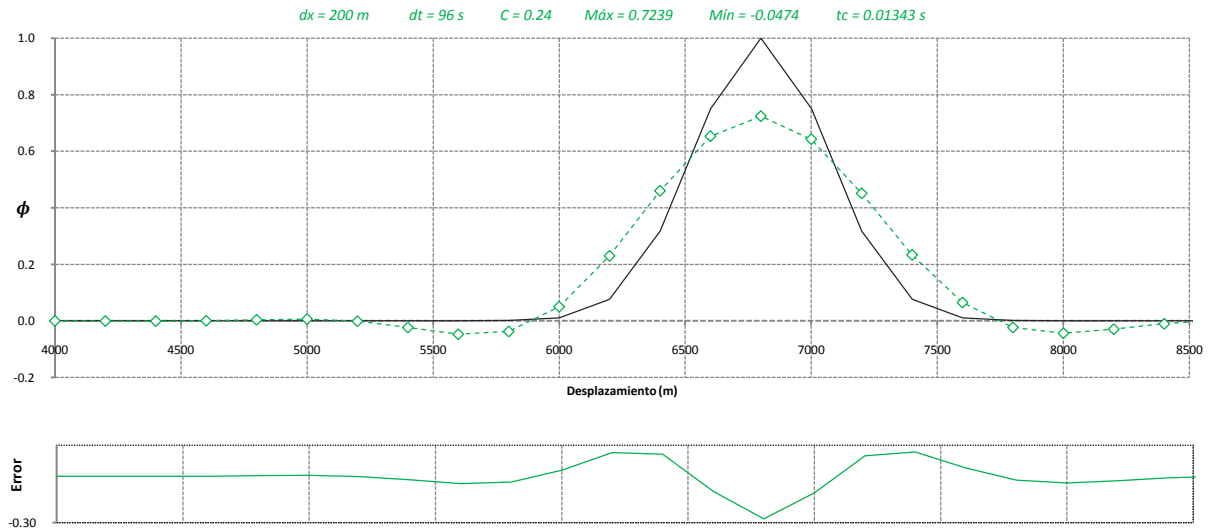


Figura 6.20 Prueba 1, esquema de tercer orden hacia atrás

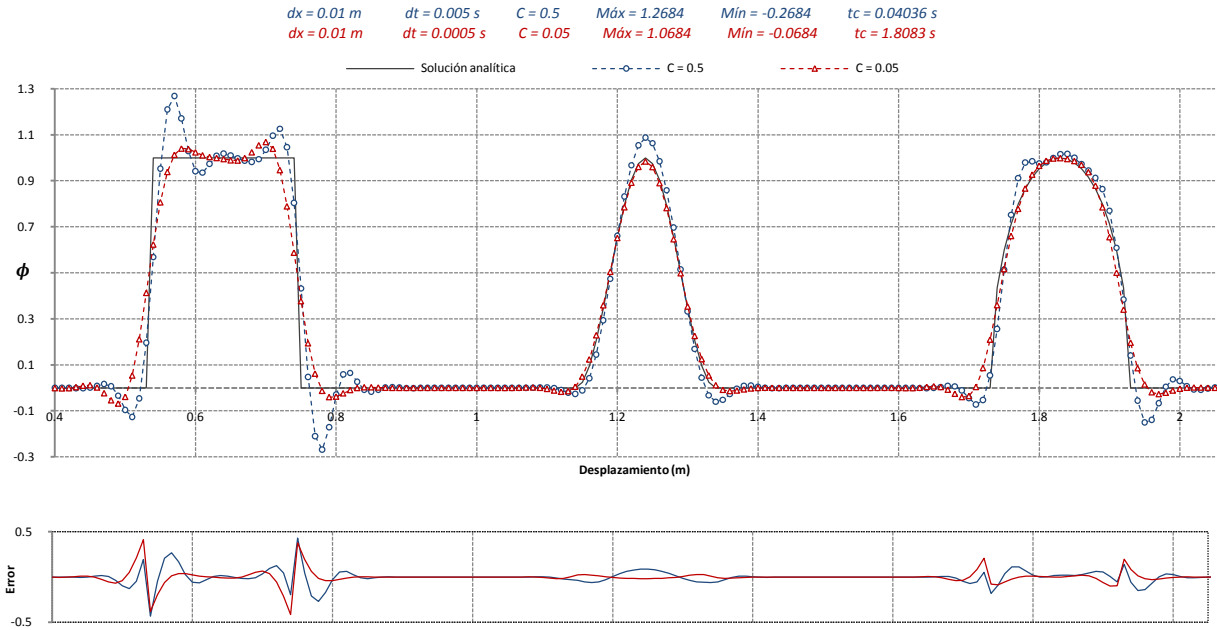


Figura 6.21 Prueba 2, 3 y 4, esquema de tercer orden hacia atrás

Tabla 6.8 Errores del esquema de tercer orden hacia atrás

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0007	0.2761	0.0474	0.0000	1.0167	-0.0001	1.0323	0.7911
2a	4.532	-0.268	0.268	0.109	1.050	7.111	0.906	3.159
3a	2.584	-0.087	0.060	0.000	1.000	0.000	1.000	0.401
4a	2.611	-0.017	0.150	-0.005	0.982	-7.140	1.036	1.209
2b	4.555	-0.068	0.068	-0.094	1.050	7.112	0.906	1.922
3b	0.837	0.016	0.017	0.000	1.000	0.000	1.000	0.177
4b	2.394	0.002	0.040	0.000	0.982	-7.139	1.036	0.978

6.2.4 Cuarto orden centrado

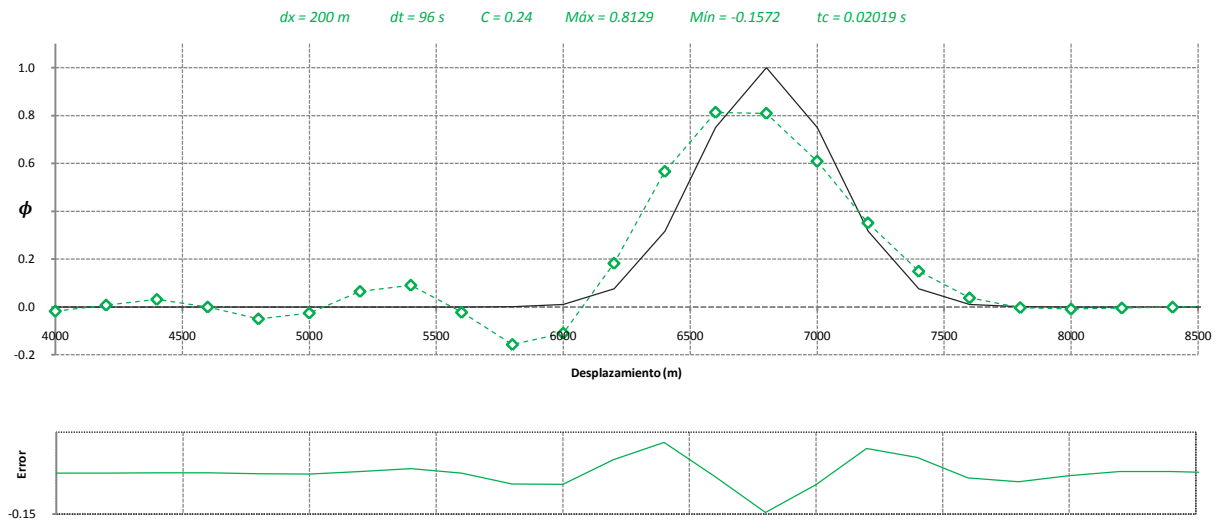


Figura 6.22 Prueba 1, esquema de cuarto orden centrado

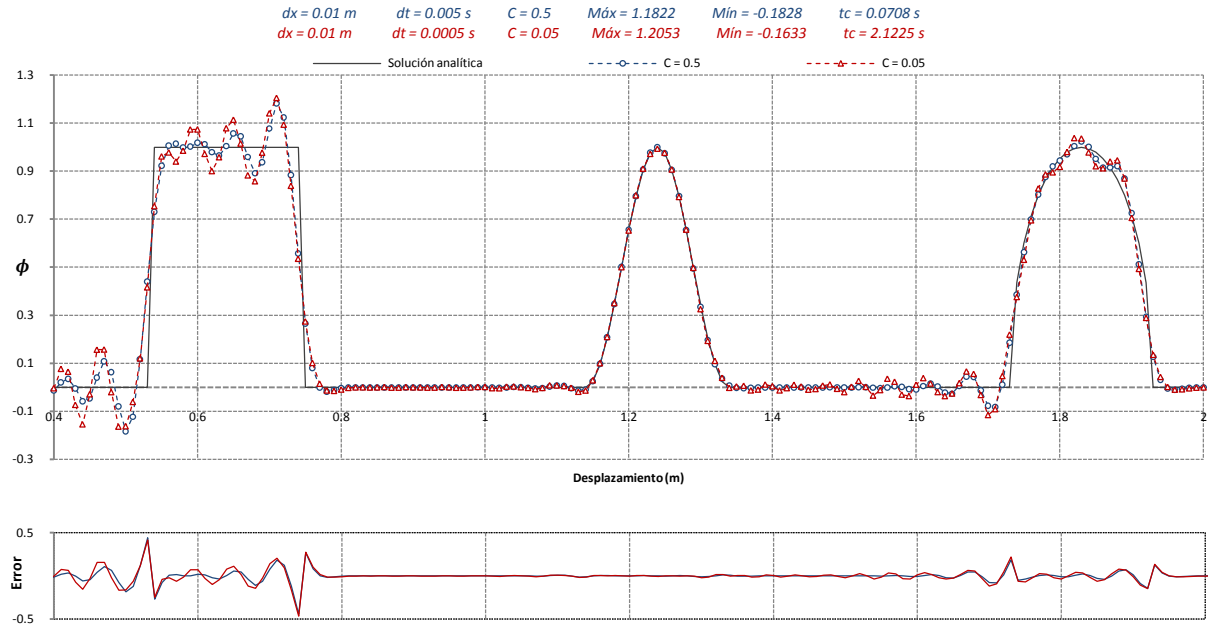


Figura 6.23 Prueba 2a, 3a y 4a, esquema de cuarto orden centrado

Tabla 6.9 Errores del esquema de cuarto orden centrado

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0007	0.1871	0.1572	0.0294	1.0031	0.0000	1.0063	1.2239
2a	4.282	-0.182	0.183	-0.109	1.050	7.132	0.906	2.495
3a	0.304	0.001	0.014	0.000	1.000	0.006	1.000	0.101
4a	2.132	-0.023	0.082	0.000	0.982	-7.105	1.036	1.187
2b	4.707	-0.205	0.163	-0.109	1.053	7.239	0.907	3.593
3b	0.744	0.006	0.034	0.000	1.000	0.565	0.994	0.349
4b	2.646	-0.038	0.115	0.005	0.984	-6.932	1.036	1.429

6.2.5 Quinto orden hacia atrás

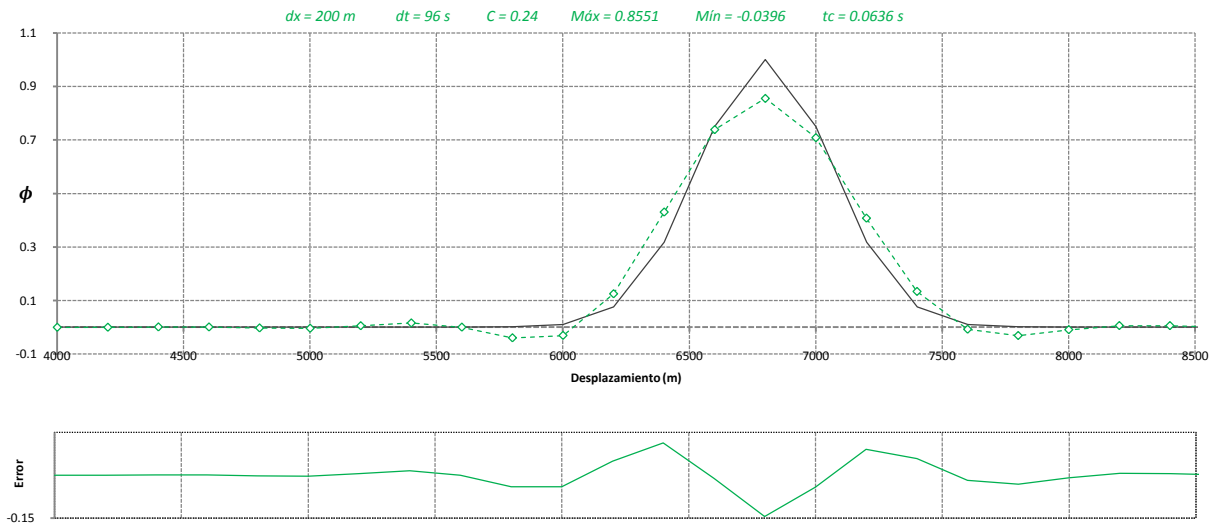


Figura 6.24 Prueba 1, esquema de quinto orden hacia atrás

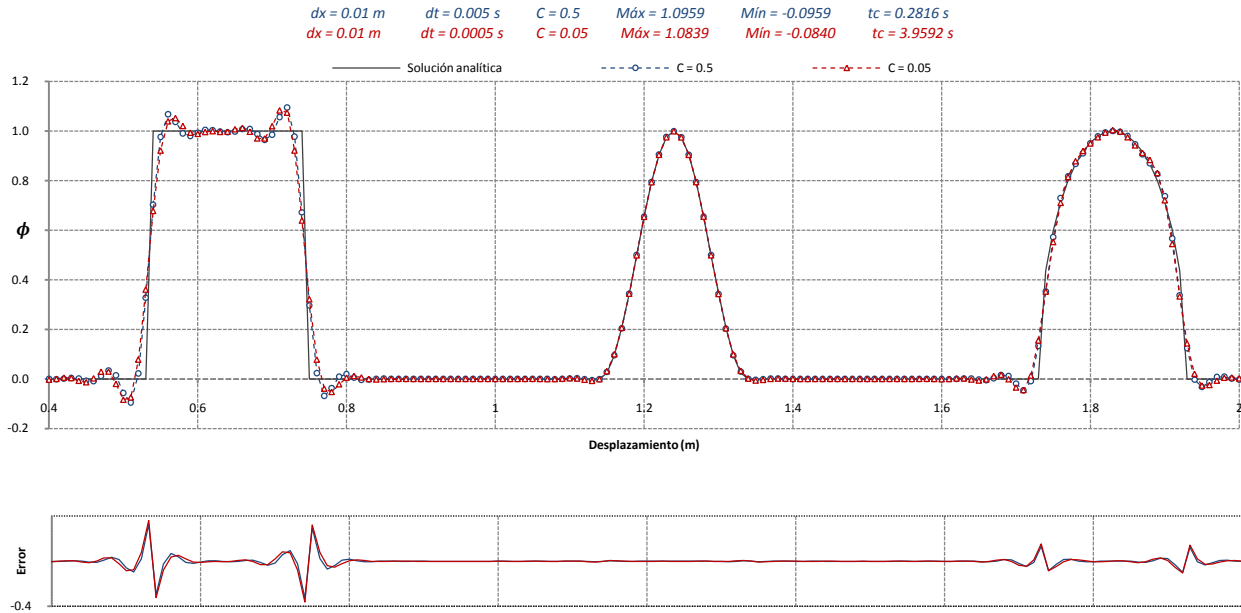


Figura 6.25 Prueba 2, 3 y 4, esquema de quinto orden hacia atrás

Tabla 6.10 Errores del esquema de quinto orden hacia atrás

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0004	0.1449	0.0396	0.0000	0.9979	0.0000	0.9988	0.6396
2a	3.294	-0.096	0.096	-0.125	1.050	7.111	0.906	1.920
3a	0.115	-0.001	0.006	0.000	1.000	0.000	1.000	0.051
4a	1.524	-0.001	0.047	0.000	0.982	-7.140	1.036	0.700
2b	3.294	-0.096	0.096	-0.125	1.050	7.111	0.906	1.920
3b	0.115	-0.001	0.006	0.000	1.000	0.000	1.000	0.051
4b	1.524	-0.001	0.047	0.000	0.982	-7.140	1.036	0.700

A continuación se presentan graficas de los tiempos de cómputo y la norma del error, en función del orden del esquema, con la finalidad de compararlos. Los datos fueron tomados para la primera prueba.

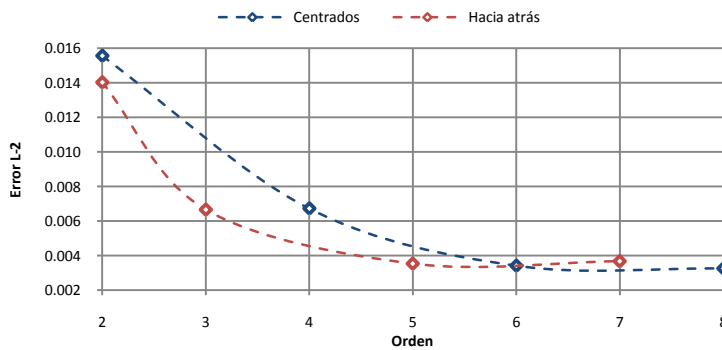


Figura 6.26 Norma del error L-2 de esquemas tipo Lax-Wendroff

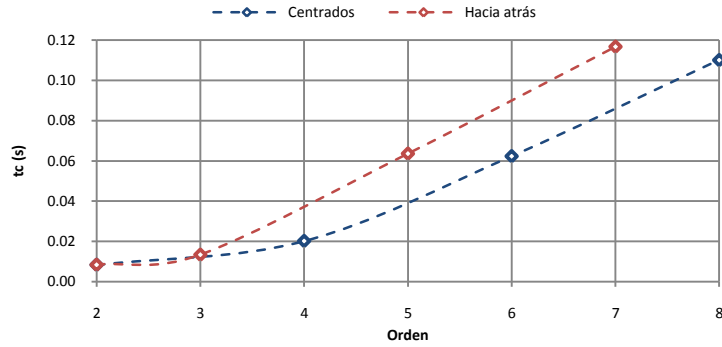


Figura 6.27 Tiempo de cómputo de esquemas tipo Lax-Wendroff

Los esquemas de orden impar hacia atrás emplean ligeramente más tiempo de cómputo, con respecto a los esquemas centrados de orden par inmediatos superiores; así, el de quinto orden es ligeramente más lento al de sexto y así sucesivamente; por otro lado, es de destacar la mejora de los resultados en los esquemas de orden impar, por ejemplo, el de tercer orden tiene un menor error L-2, que el de cuarto orden. En la fig 6.26 se aprecia que a partir del quinto orden, los esquemas carecen de una mejoría significativa en la reducción de la norma del error; sin embargo, sus tiempos de cómputo aumentan de forma potencial.

6.3 Híbridos

6.3.1 De dos esquemas

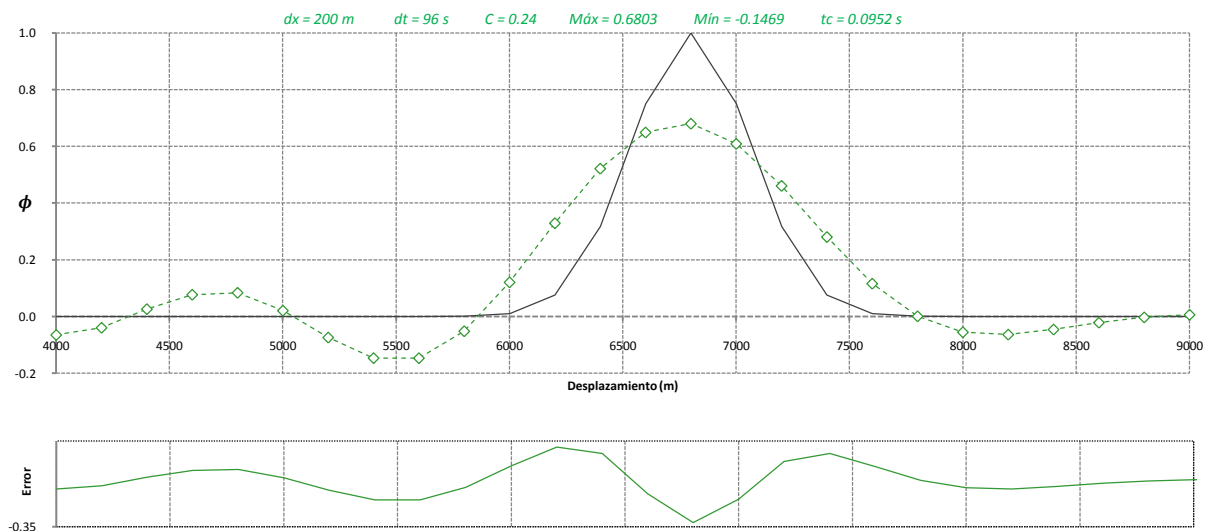


Figura 6.28 Prueba 1, esquema híbrido de dos esquemas

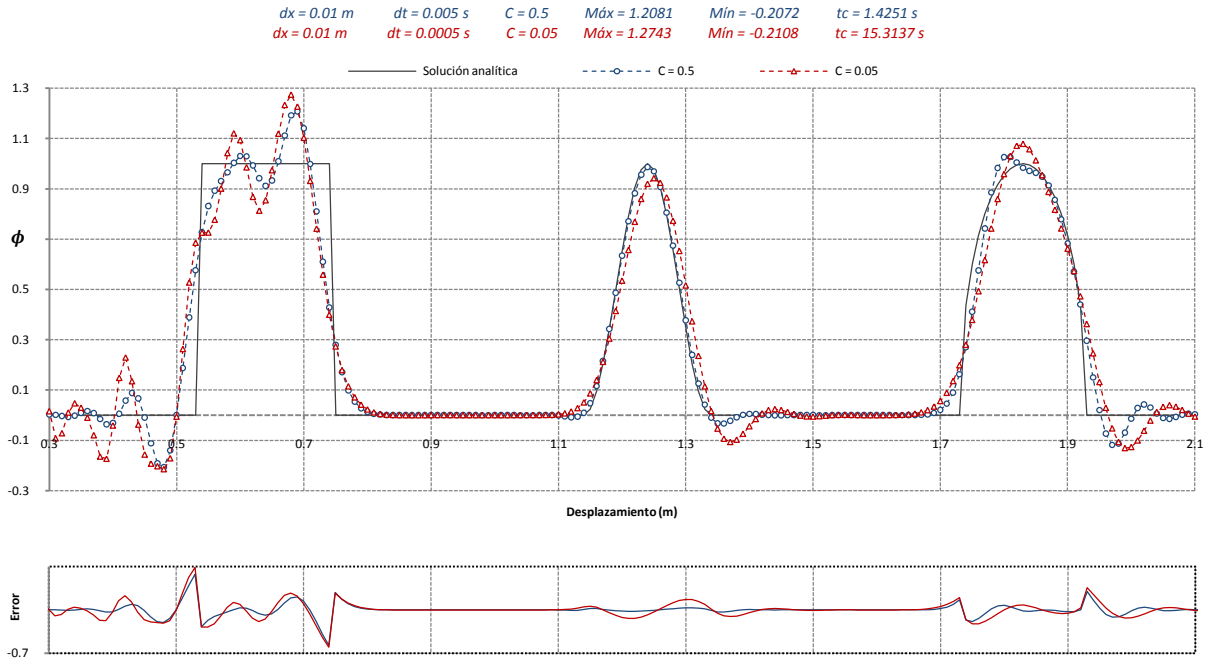


Figura 6.29 Prueba 2, 3 y 4, esquema híbrido de dos esquemas

Tabla 6.11 Errores del esquema híbrido de dos esquemas

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0003	0.1365	0.0342	0.2353	0.9962	0.0000	0.9950	0.5762
2a	3.181	-0.101	0.101	0.125	1.050	7.111	0.906	1.964
3a	0.100	-0.001	0.004	0.000	1.000	0.000	1.000	0.045
4a	1.460	0.001	0.045	0.000	0.982	-7.140	1.036	0.658
2b	3.561	-0.064	0.064	-0.109	1.050	7.112	0.906	1.442
3b	0.166	0.000	0.007	0.000	1.000	0.000	1.000	0.068
4b	1.687	-0.002	0.037	0.000	0.982	-7.140	1.036	0.793

6.3.2 De tres esquemas

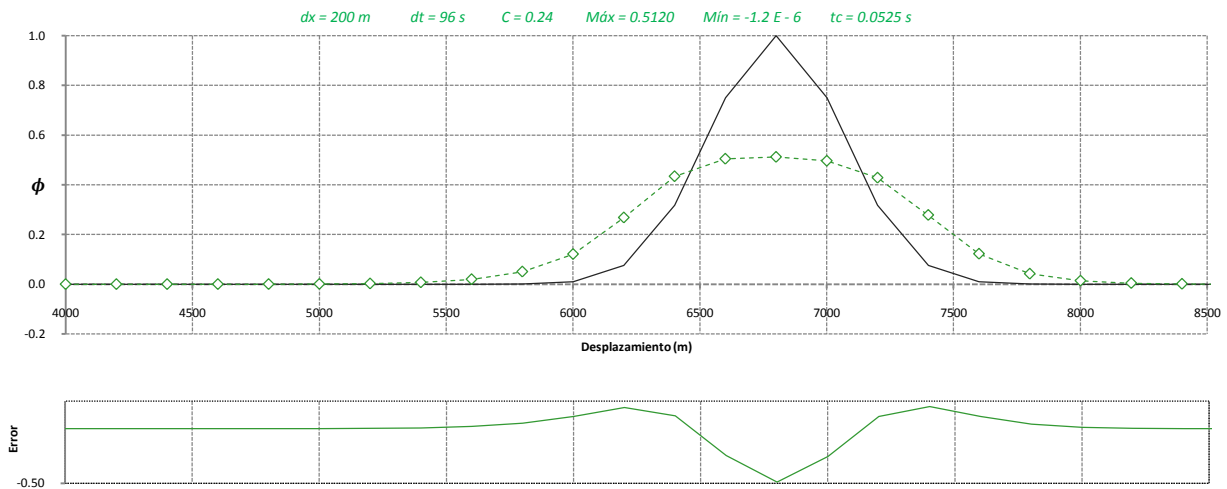


Figura 6.30 Prueba 1, esquema híbrido de tres esquemas

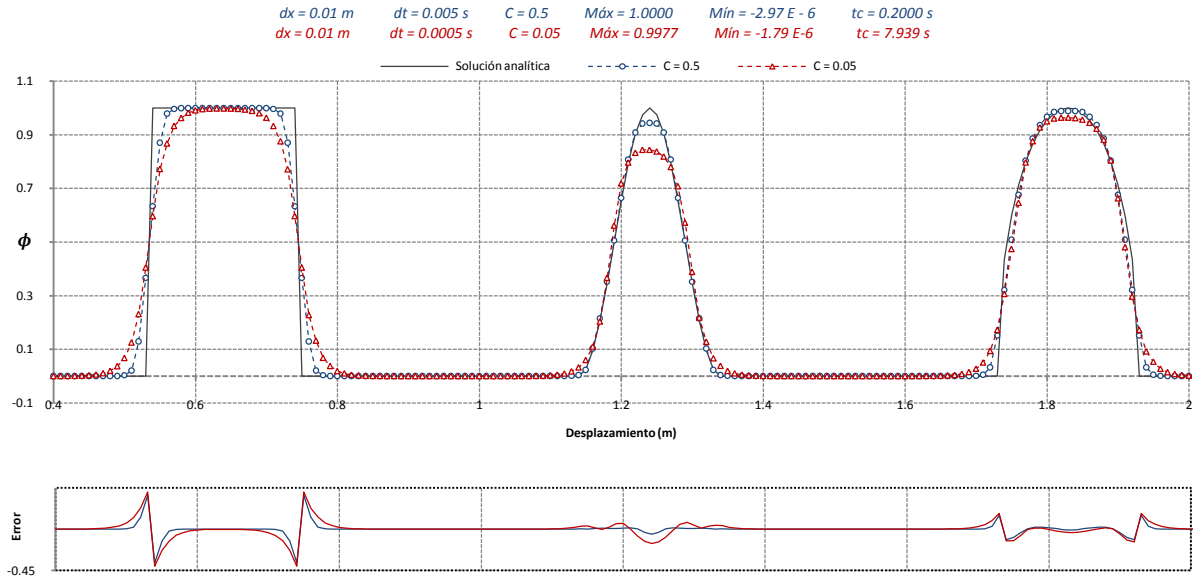


Figura 6.31 Prueba 2, 3 y 4, esquema híbrido de tres esquemas

Tabla 6.12 Errores del esquema híbrido de tres esquemas

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0011	0.4880	0.0000	0.0000	0.9960	0.0000	0.9929	1.2972
2a	3.891	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.466
3a	0.799	0.055	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.170
4a	1.961	0.011	0.000	0.000	0.982	-7.140	1.036	0.674
2b	4.886	0.002	0.000	0.016	1.050	7.109	0.906	1.614
3b	3.159	0.156	0.000	0.000	1.000	-0.099	1.001	0.676
4b	2.555	0.036	0.000	0.000	0.982	-7.152	1.036	0.778

6.4 No Lineales de Leonard

6.4.1 SMART

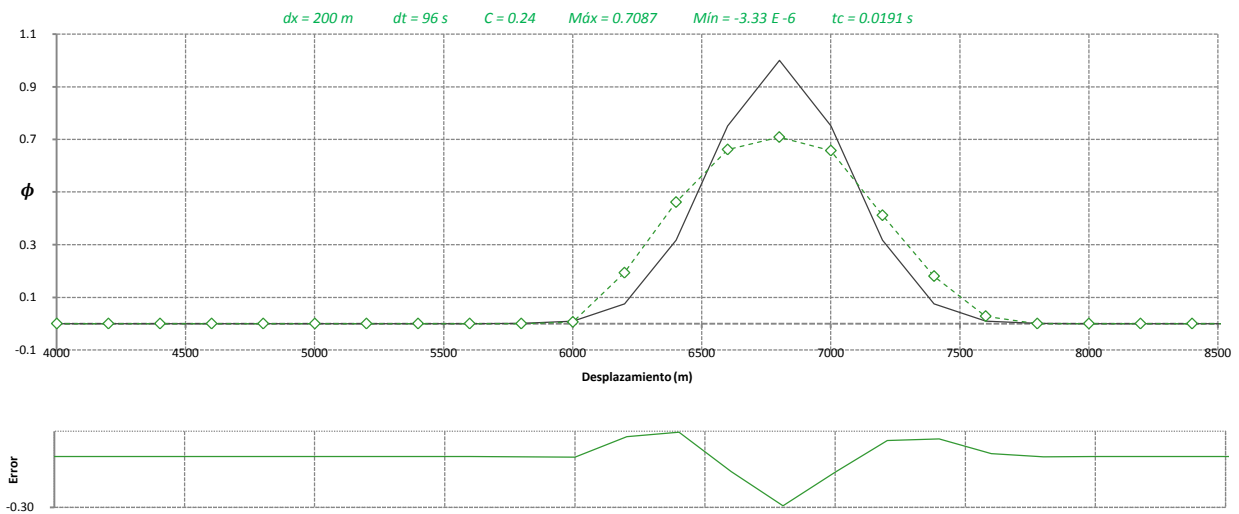


Figura 6.32 Prueba 1, esquema SMART

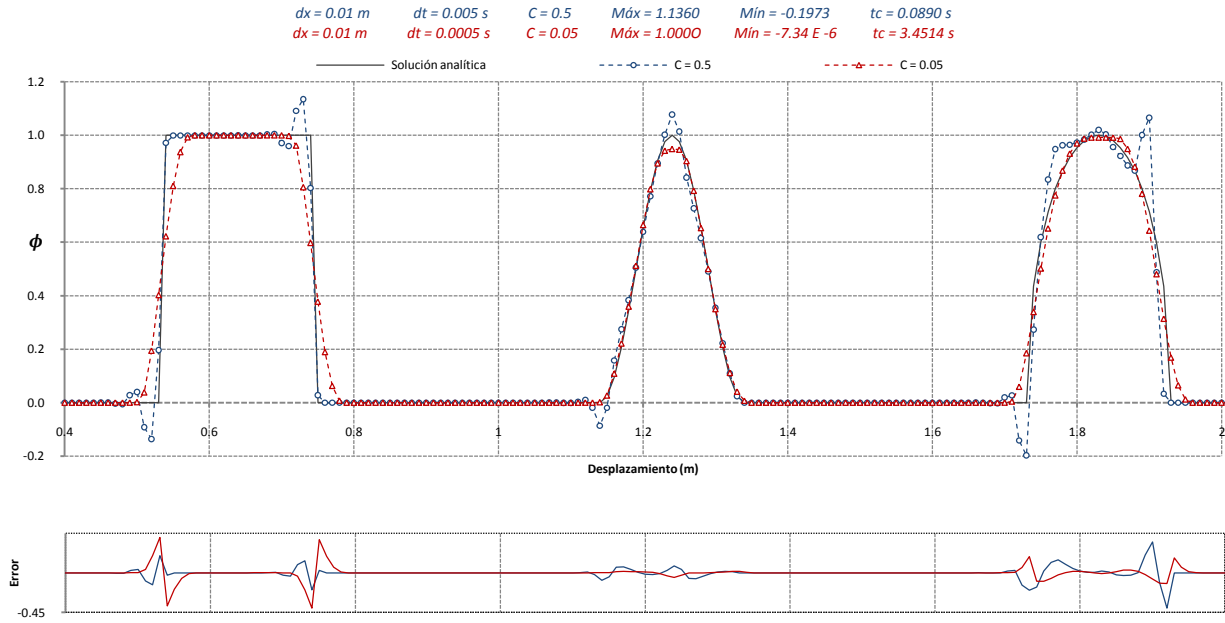


Figura 6.33 Prueba 2, 3 y 4, esquema SMART

Tabla 6.13 Errores del esquema SMART

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0006	0.2913	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.9998	0.7166
2a	1.854	-0.136	0.136	0.000	1.050	7.111	0.906	0.786
3a	1.986	-0.078	0.086	0.000	1.000	0.000	1.000	0.460
4a	4.377	-0.067	0.197	0.000	0.982	-7.246	1.037	2.010
2b	4.380	0.000	0.000	-0.063	1.050	7.111	0.906	1.610
3b	0.788	0.051	0.000	0.000	1.000	-0.003	1.000	0.158
4b	2.297	0.008	0.000	0.000	0.982	-7.107	1.036	0.773

6.4.2 SHARP

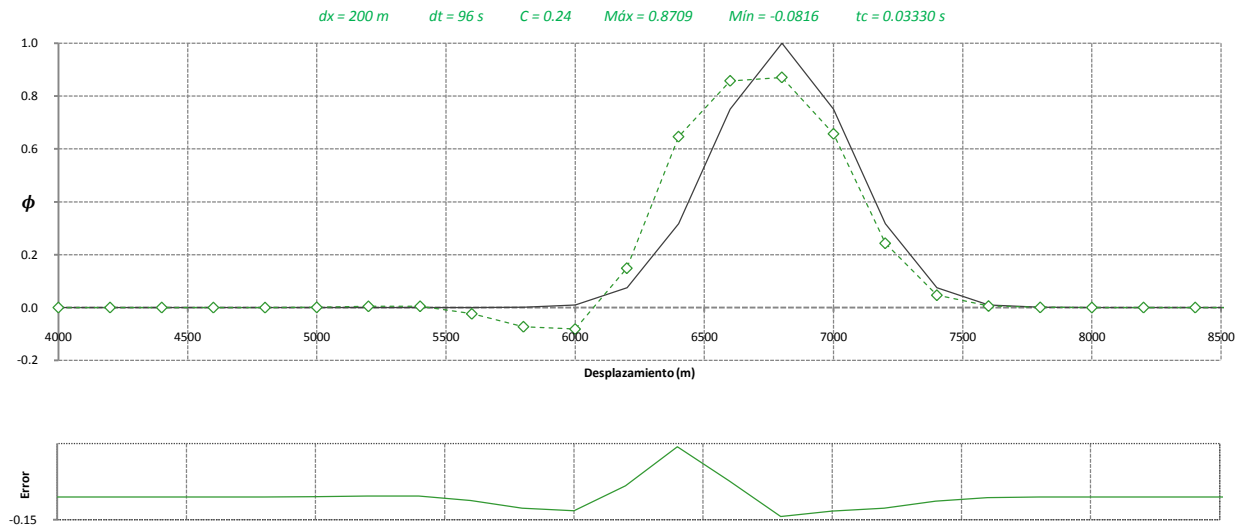


Figura 6.34 Prueba 1, esquema SHARP

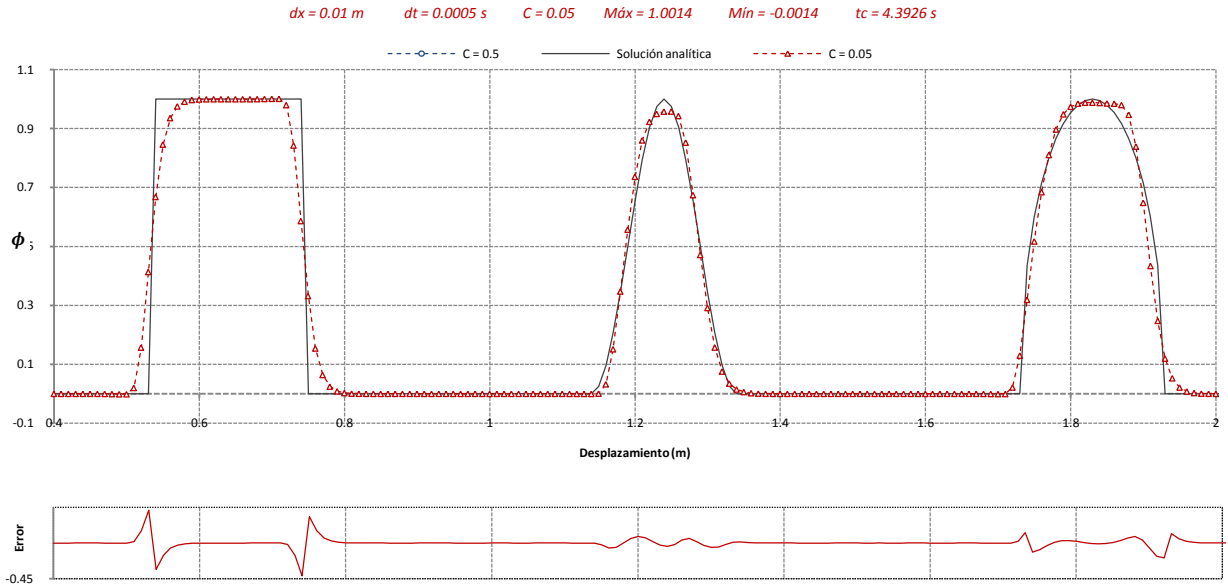


Figura 6.35 Prueba 2, 3 y 4, esquema SHARP

Tabla 6.14 Errores del esquema SHARP

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0006	0.1291	0.0816	0.0000	1.0000	0.0000	0.9900	0.7390
2a	31.402	-2.195	2.194	-0.094	1.050	7.121	0.906	15.437
3a	29.331	-1.101	0.812	-0.016	1.000	0.198	0.999	6.878
4a	27.249	-1.312	1.412	-0.022	0.982	-7.487	1.038	11.230
2b	4.091	-0.001	0.001	-0.078	1.050	7.111	0.906	1.654
3b	1.931	0.042	0.000	-0.008	1.000	0.006	1.000	0.494
4b	2.366	0.012	0.001	0.000	0.982	-7.098	1.036	0.765

6.4.3 BSOU

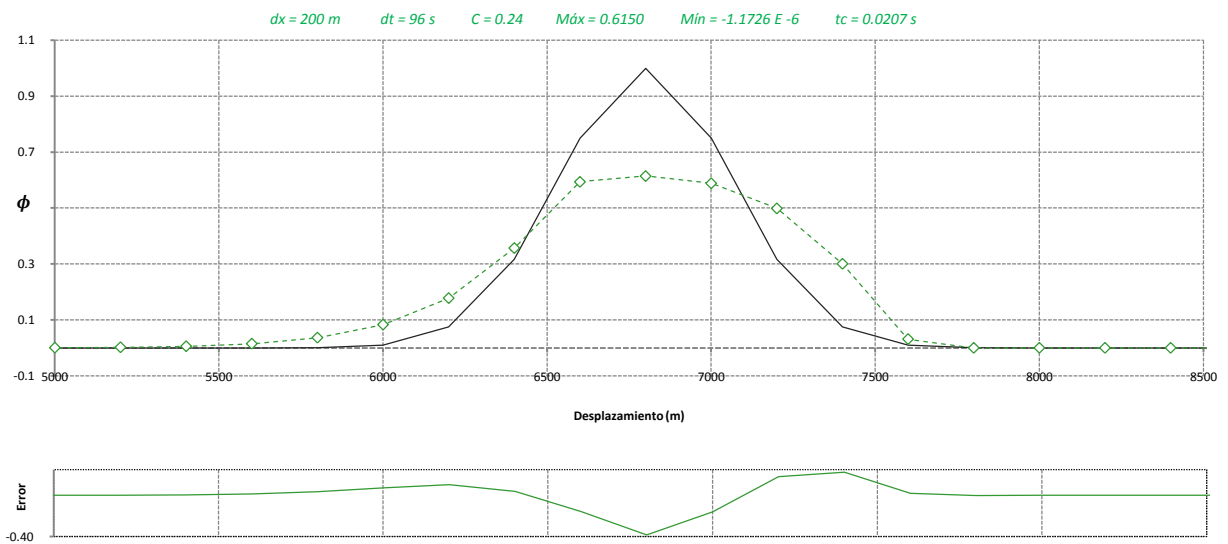


Figura 6.36 Prueba 1, esquema BSOU

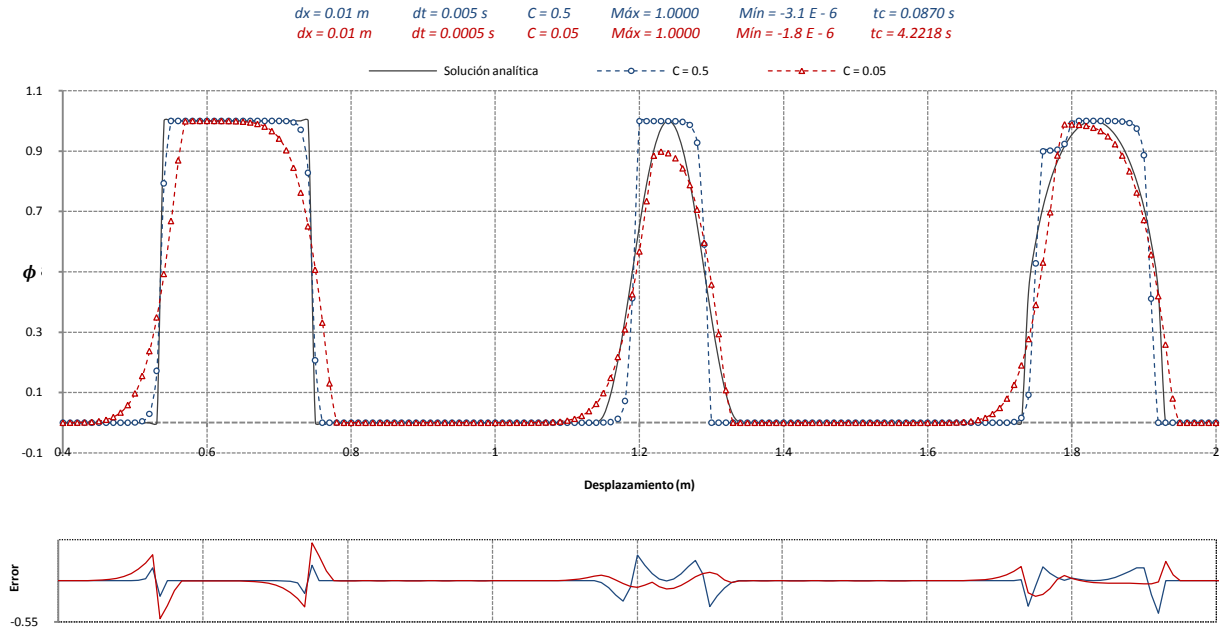


Figura 6.37 Prueba 2, 3 y 4, esquema BSOU

Tabla 6.15 Errores del esquema BSOU

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0008	0.3850	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0037	1.0229
2a	1.913	0.000	0.000	-0.031	1.050	7.111	0.906	0.828
3a	7.747	0.001	0.000	0.032	1.000	-0.001	1.000	2.117
4a	4.397	0.000	0.000	0.011	0.982	-7.017	1.036	1.851
2b	5.482	0.000	0.000	0.094	1.050	7.111	0.906	2.028
3b	3.115	0.102	0.000	0.008	1.000	0.012	1.000	0.707
4b	3.267	0.012	0.000	0.022	0.982	-7.233	1.037	1.143

6.4.4 HPLA

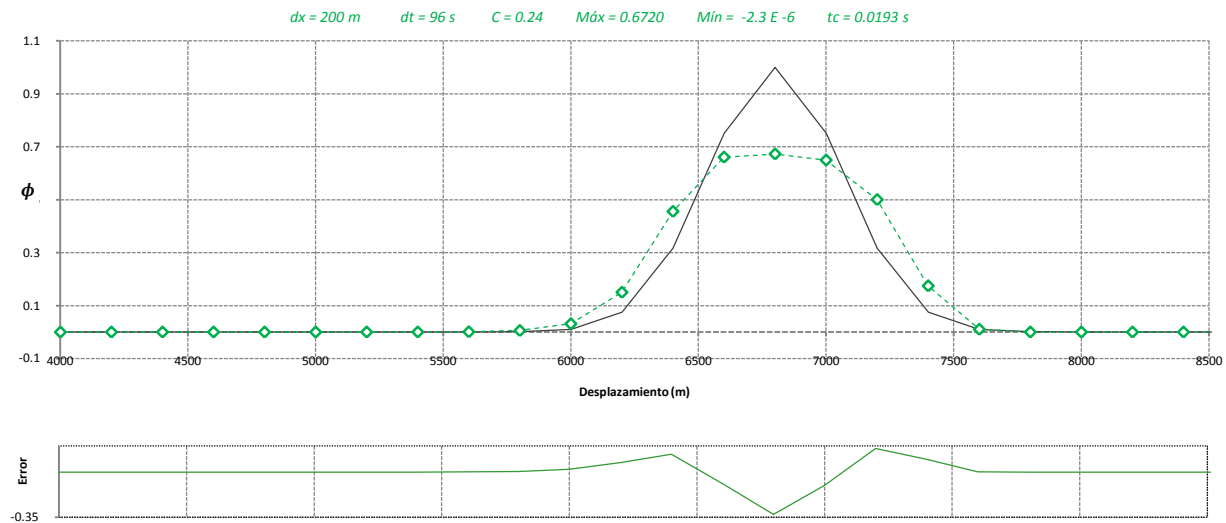


Figura 6.38 Prueba 1, esquema HPLA

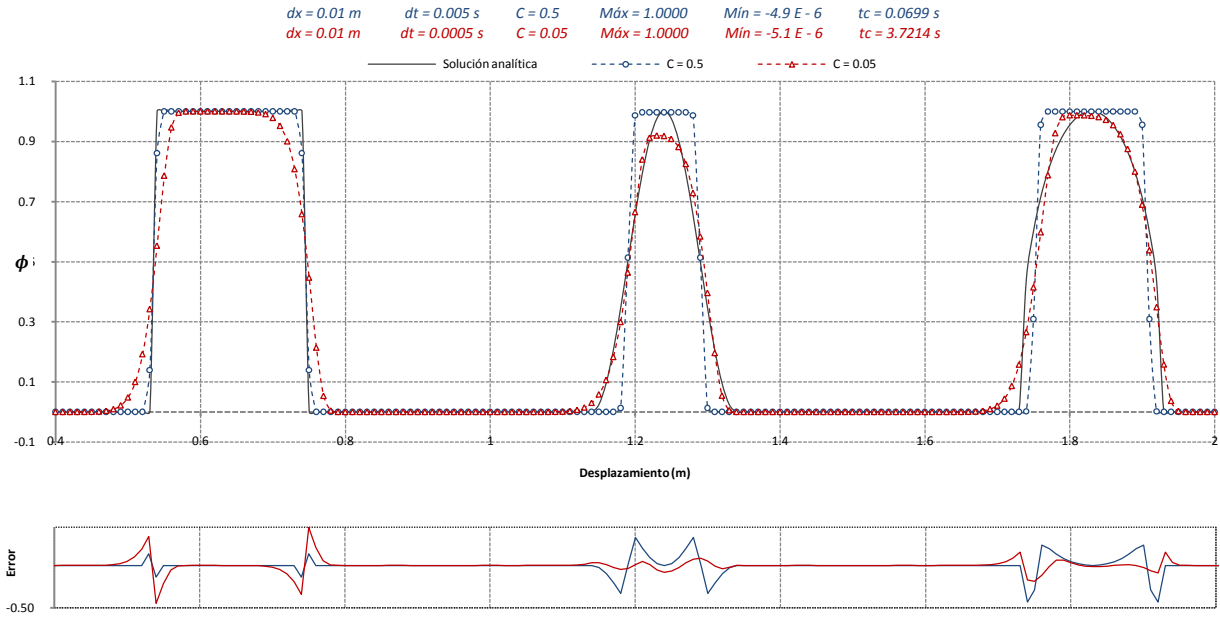


Figura 6.39 Prueba 2, 3 y 4, esquema HPLA

Tabla 6.16 Errores del esquema HPLA

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0007	0.3280	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0014	0.9129
2a	1.392	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	0.557
3a	8.040	0.004	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	2.599
4a	5.646	0.001	0.000	0.000	0.982	-7.140	1.036	1.735
2b	4.556	0.000	0.000	0.063	1.050	7.111	0.906	1.788
3b	2.044	0.080	0.000	0.008	1.000	0.021	1.000	0.543
4b	2.532	0.013	0.000	0.011	0.982	-7.181	1.037	0.821

6.4.5 CHARM

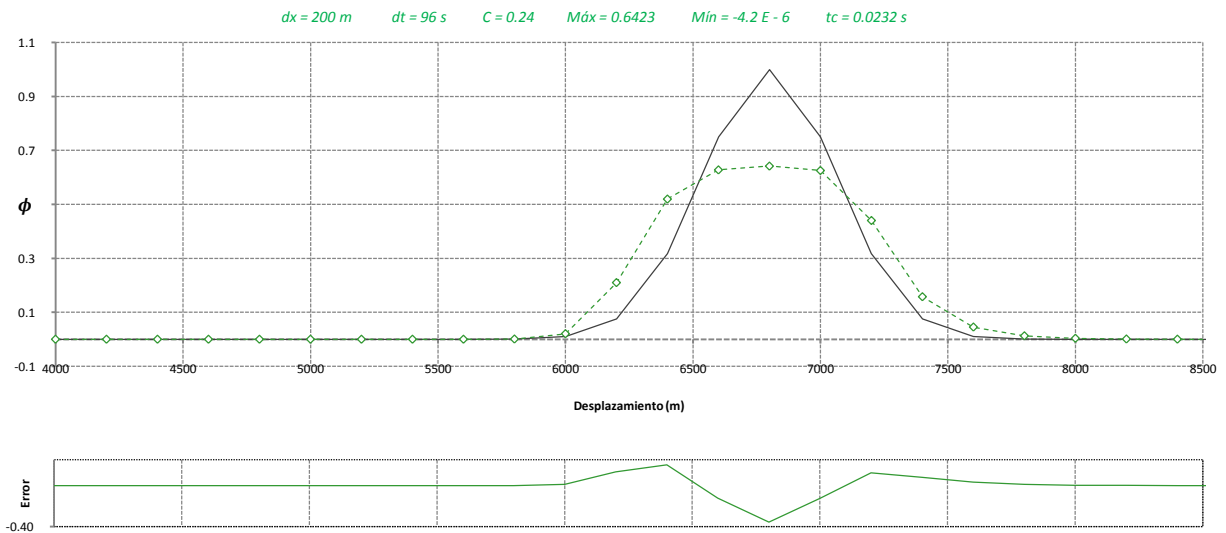


Figura 6.40 Prueba 1, esquema CHARM

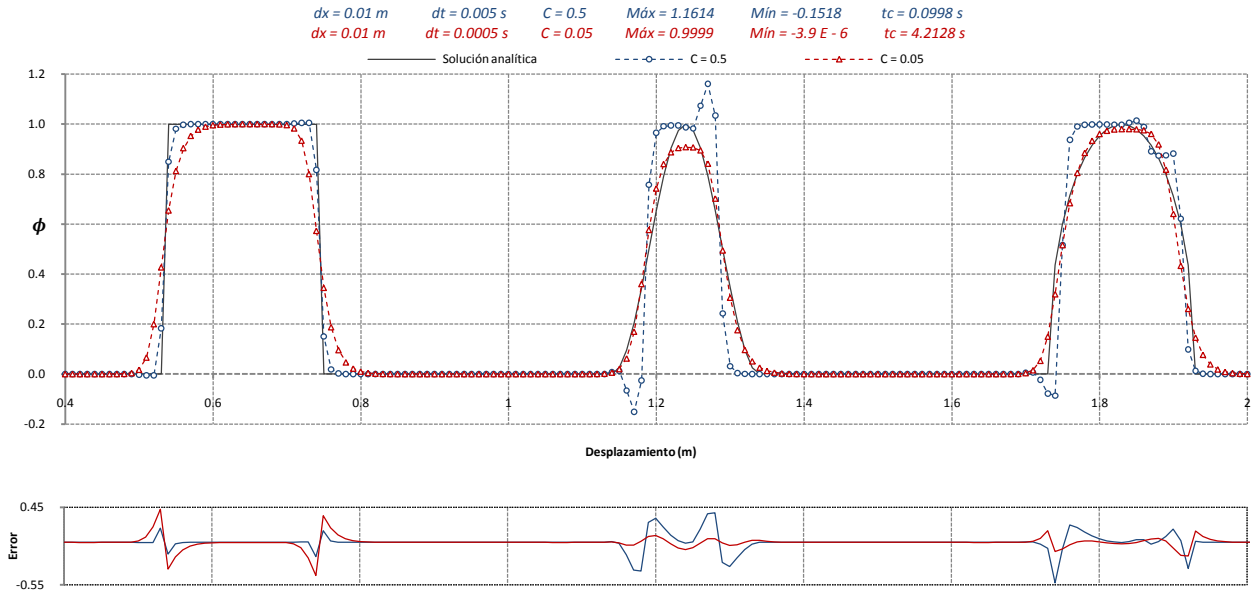


Figura 6.41 Prueba 2, 3 y 4, esquema CHARM

Tabla 6.17 Errores del esquema CHARM

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0007	0.3577	0.0000	0.0000	0.9991	0.0000	0.9968	0.8727
2a	1.683	-0.005	0.005	-0.047	1.050	7.111	0.906	0.733
3a	10.123	-0.161	0.151	-0.024	1.000	-0.028	1.000	1.708
4a	4.695	-0.014	0.086	-0.011	0.982	-7.345	1.037	2.341
2b	4.435	0.000	0.000	-0.031	1.050	7.111	0.906	1.708
3b	2.139	0.092	0.000	0.000	1.000	-0.038	1.000	0.569
4b	2.429	0.020	0.000	-0.005	0.982	-7.118	1.036	0.774

6.4.6 UMIST

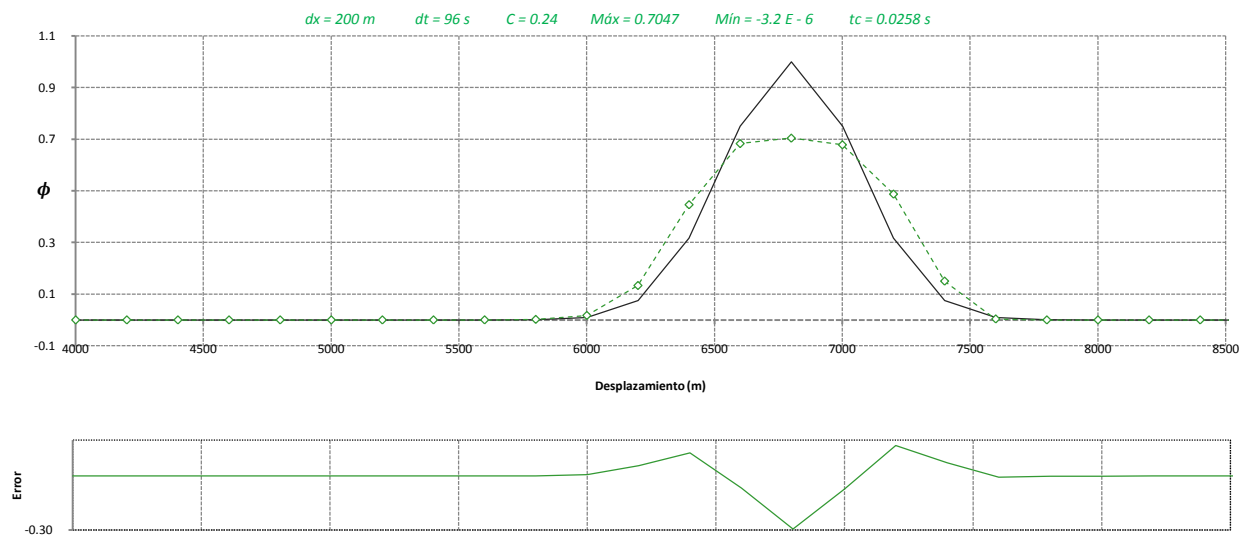


Figura 6.42 Prueba 1, esquema UMIST

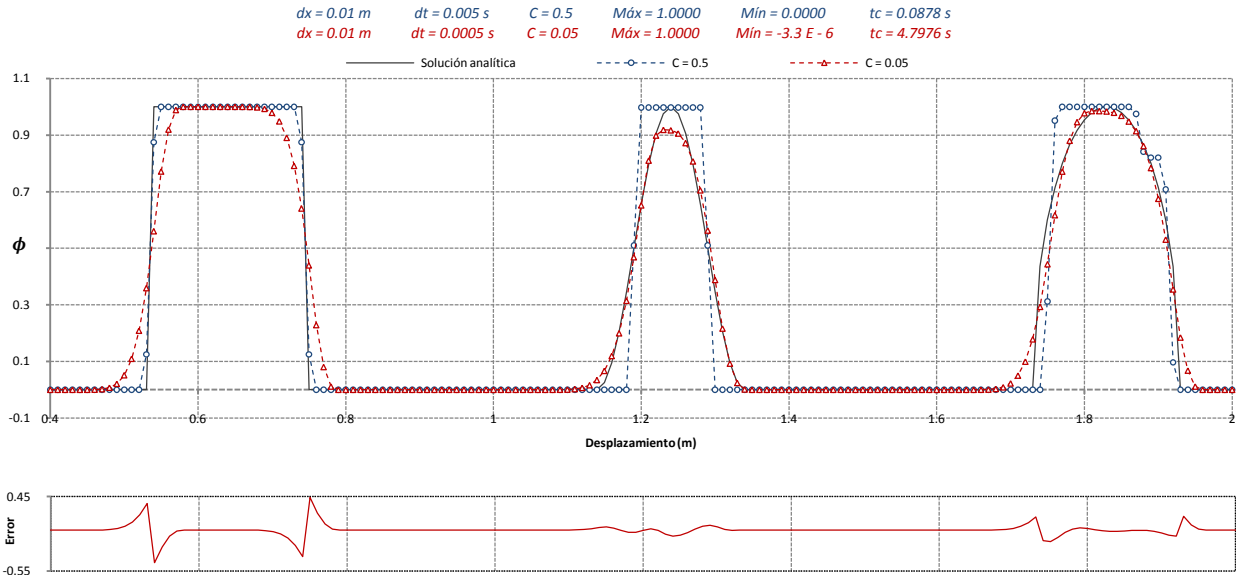


Figura 6.43 Prueba 2, 3 y 4, esquema UMIST

Tabla 6.18 Errores del esquema UMIST

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0006	0.2953	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0017	0.9128
2a	1.250	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	0.500
3a	8.249	0.002	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	2.710
4a	4.656	0.000	0.000	0.005	0.982	-7.306	1.037	1.625
2b	4.691	0.000	0.000	0.016	1.050	7.111	0.906	1.759
3b	1.758	0.082	0.000	0.008	1.000	0.015	1.000	0.416
4b	2.487	0.015	0.000	0.011	0.982	-7.163	1.037	0.801

6.4.7 VONOS

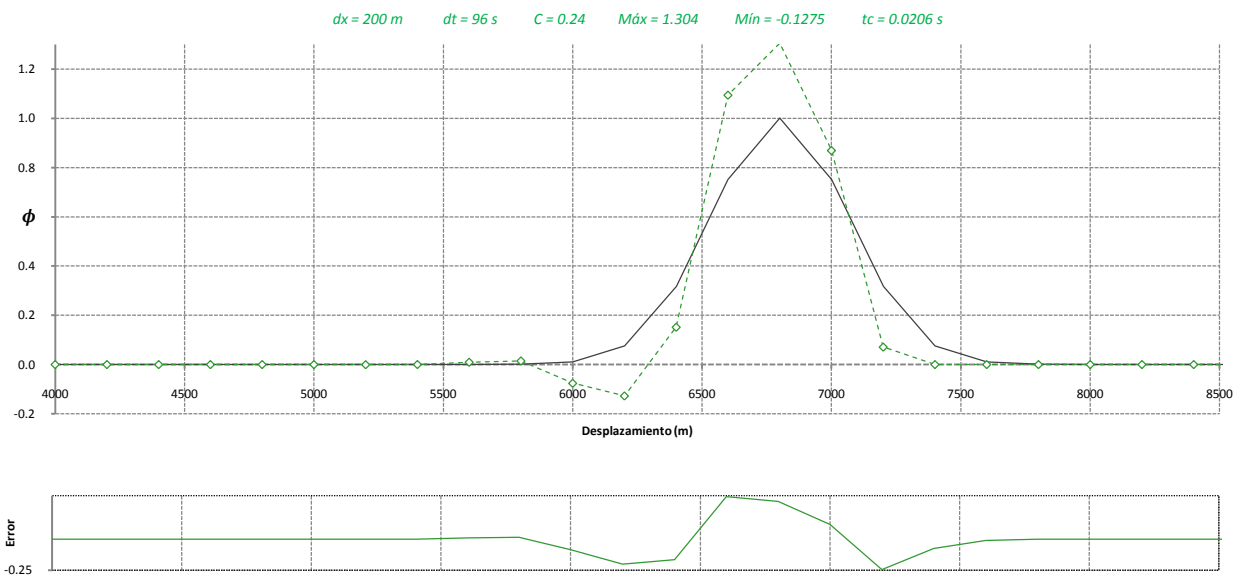


Figura 6.44 Prueba 1, esquema VONOS

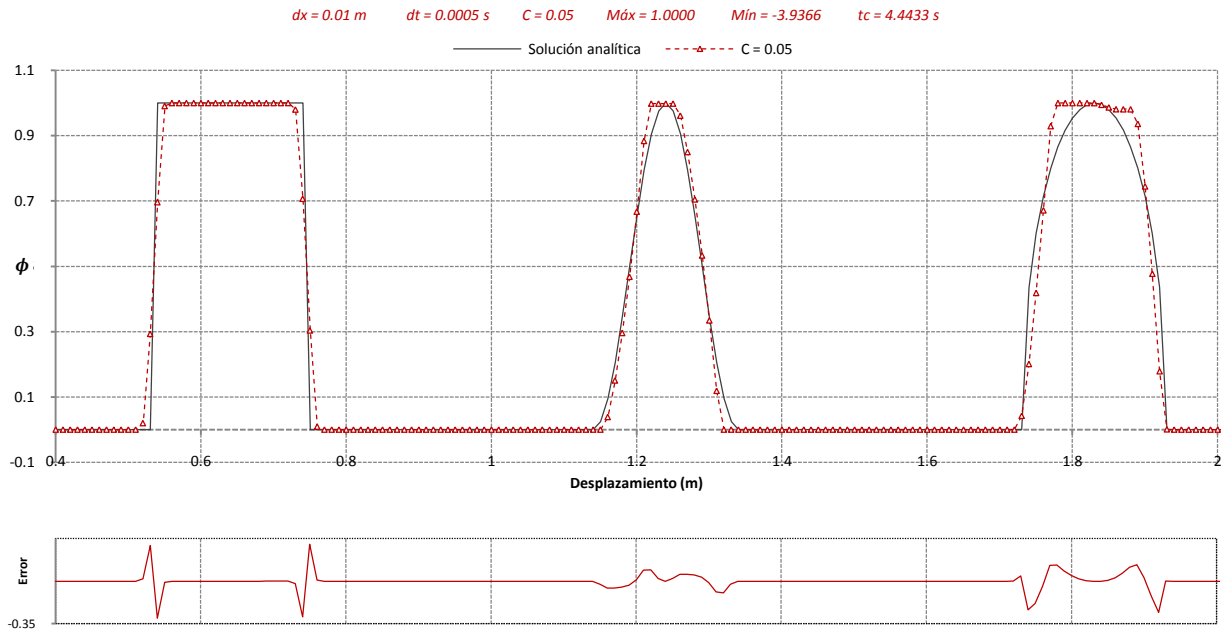


Figura 6.45 Prueba 2, 3 y 4, esquema VONOS

Tabla 6.19 Errores del esquema VONOS

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0009	-0.3040	0.1275	0.0000	1.0000	0.0000	1.0019	1.0180
2a	1.817	-0.185	0.185	-0.141	1.050	7.111	0.906	0.841
3a	31.969	-0.316	1.155	-0.024	1.000	-0.206	1.001	8.208
4a	4.829	-0.064	0.326	-0.016	0.982	-7.219	1.037	2.618
2b	2.988	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.215
3b	2.368	0.002	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.555
4b	3.195	0.000	0.000	0.005	0.982	-7.162	1.037	1.378

6.4.8 WACEB

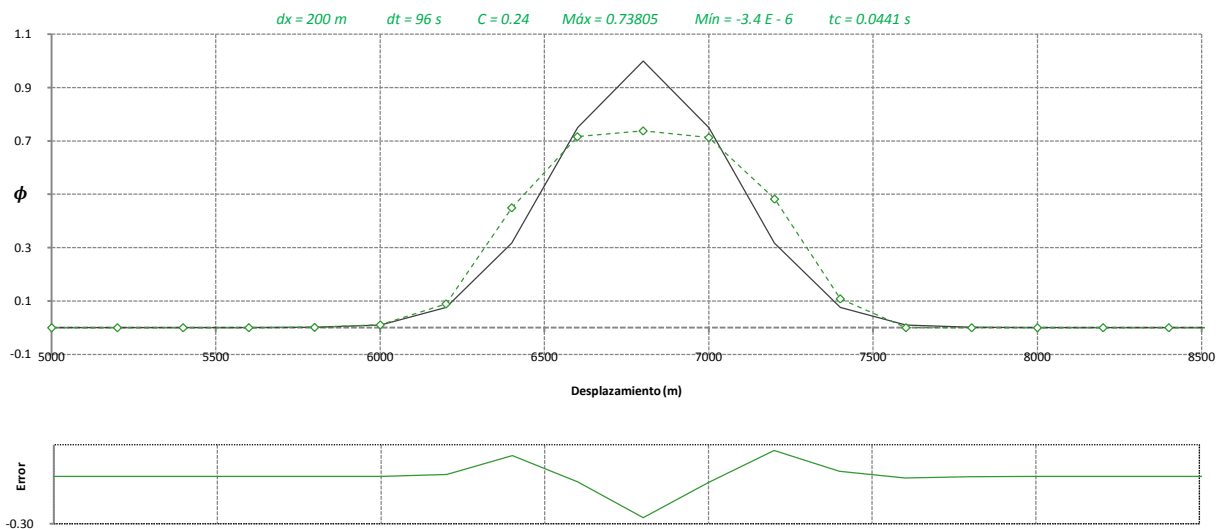


Figura 6.46 Prueba 1, esquema WACEB

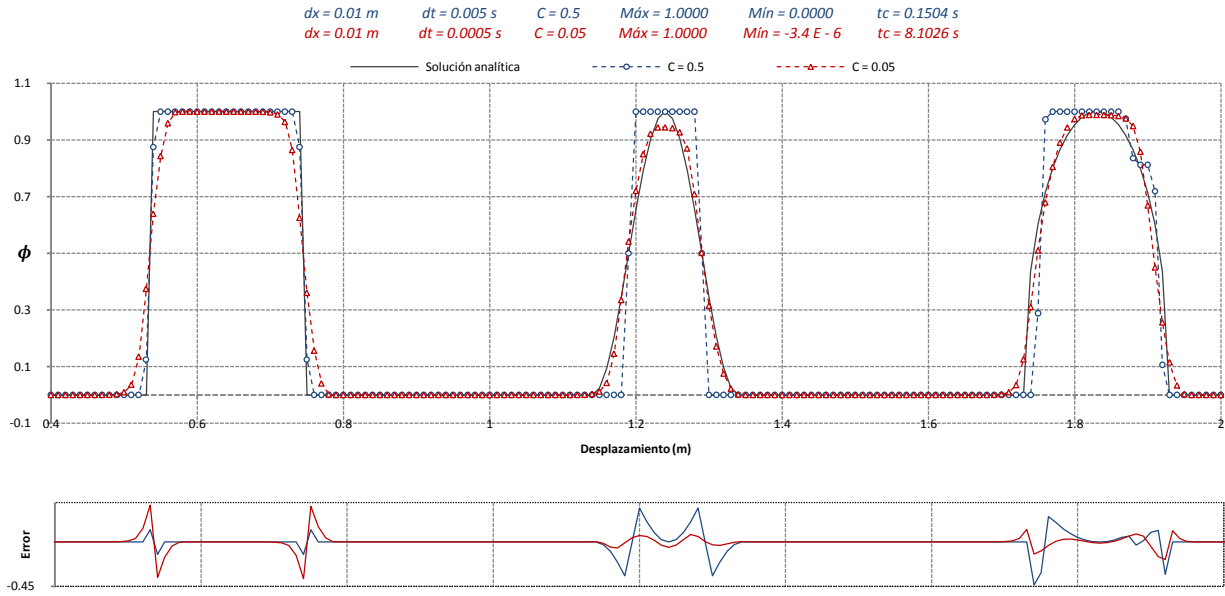


Figura 6.47 Prueba 2, 3 y 4, esquema WACEB

Tabla 6.20 Errores del esquema WACEB

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.001	0.262	0.000	0.000	1.000	0.000	1.002	0.976
2a	1.250	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	0.500
3a	8.284	0.000	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	2.764
4a	4.741	0.000	0.000	0.005	0.982	-7.317	1.037	1.624
2b	3.977	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.499
3b	1.826	0.056	0.000	0.000	1.000	-0.047	1.000	0.480
4b	2.284	0.011	0.000	0.005	0.982	-7.065	1.036	0.728

6.4.9 ULTRA SHARP

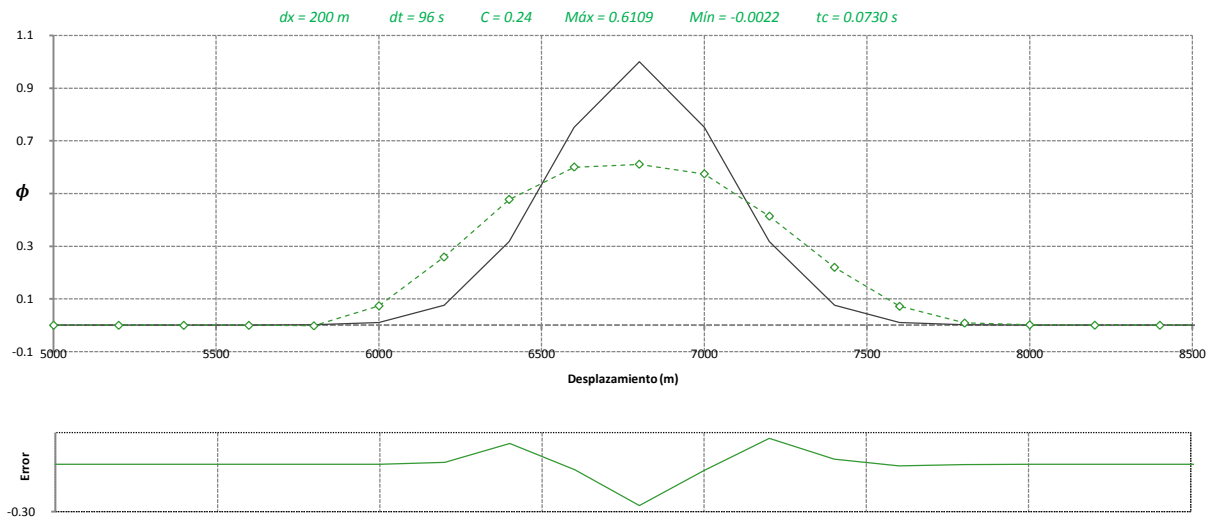


Figura 6.48 Prueba 1, esquema ULTRA SHARP

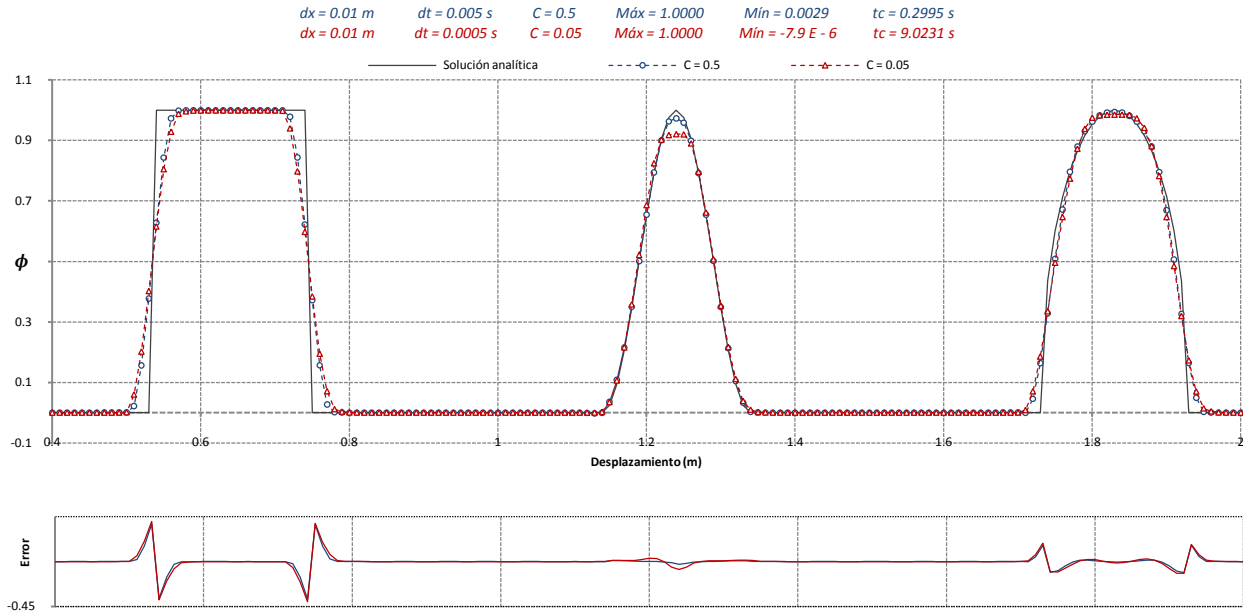


Figura 6.49 Prueba 2a, 3a y 4a, esquema ULTRA SHARP

Tabla 6.21 Errores del esquema ULTRA SHARP

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.001	0.389	0.002	0.000	1.000	0.000	0.997	0.938
2a	4.065	0.000	0.000	0.047	1.050	7.111	0.906	1.510
3a	0.423	0.027	0.003	0.000	1.000	-0.002	1.000	0.100
4a	2.034	0.006	0.001	0.000	0.982	-7.142	1.036	0.701
2b	4.453	0.000	0.000	-0.063	1.050	7.111	0.906	1.608
3b	1.282	0.079	0.000	0.000	1.000	0.029	1.000	0.247
4b	2.324	0.014	0.000	0.000	0.982	-7.122	1.036	0.783

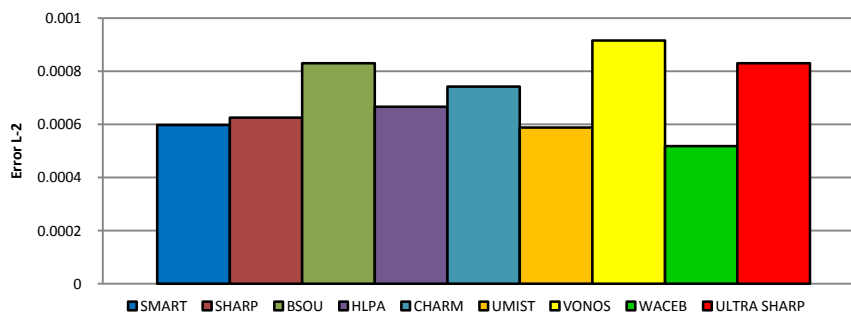


Figura 6.50 Norma del error L-2 de los esquemas de Leonard

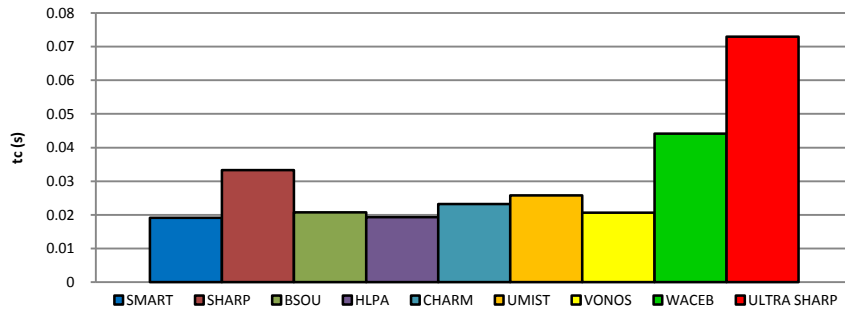


Figura 6.51 Tiempo de cómputo de los esquemas de Leonard

SMART tiene la mejor relación error-tiempo de cómputo de la primera prueba; sin embargo, los resultados mejoran de manera significativa en las otras pruebas con ULTRA SHARP, obviamente a costa de un incremento del tiempo de cómputo.

6.5 ULTIMATE

6.5.1 Segundo Orden Centrado

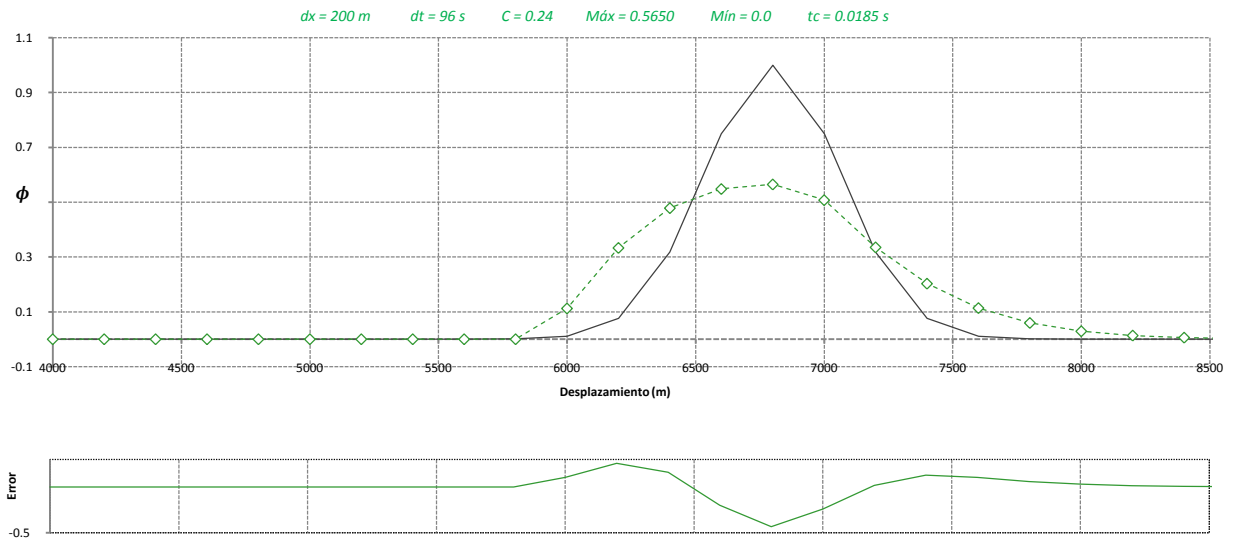


Figura 6.52 Prueba 1, esquema ULTIMATE SOC

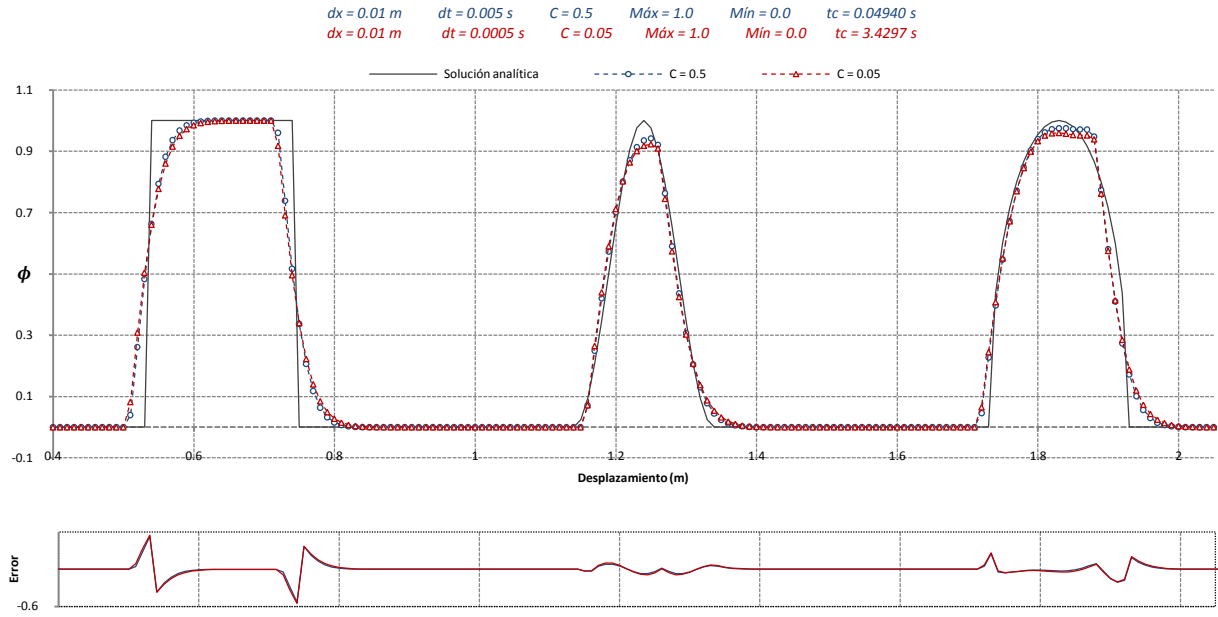


Figura 6.53 Prueba 2, 3 y 4, esquema ULTIMATE SOC

Tabla 6.22 Errores del esquema ULTIMATE SOC

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0010	0.4350	0.0000	0.0000	0.9886	0.0000	0.9792	1.2524
2a	4.896	0.000	0.000	-0.109	1.050	7.111	0.906	1.934
3a	2.108	0.058	0.000	-0.008	1.000	-0.016	1.000	0.466
4a	2.819	0.025	0.000	0.000	0.982	-7.078	1.036	1.001
2b	5.251	0.000	0.000	-0.109	1.050	7.111	0.906	2.017
3b	2.618	0.077	0.000	-0.008	1.000	-0.018	1.000	0.614
4b	2.969	0.040	0.000	0.000	0.982	-7.153	1.037	1.090

6.5.2 Segundo Orden Hacia Atrás

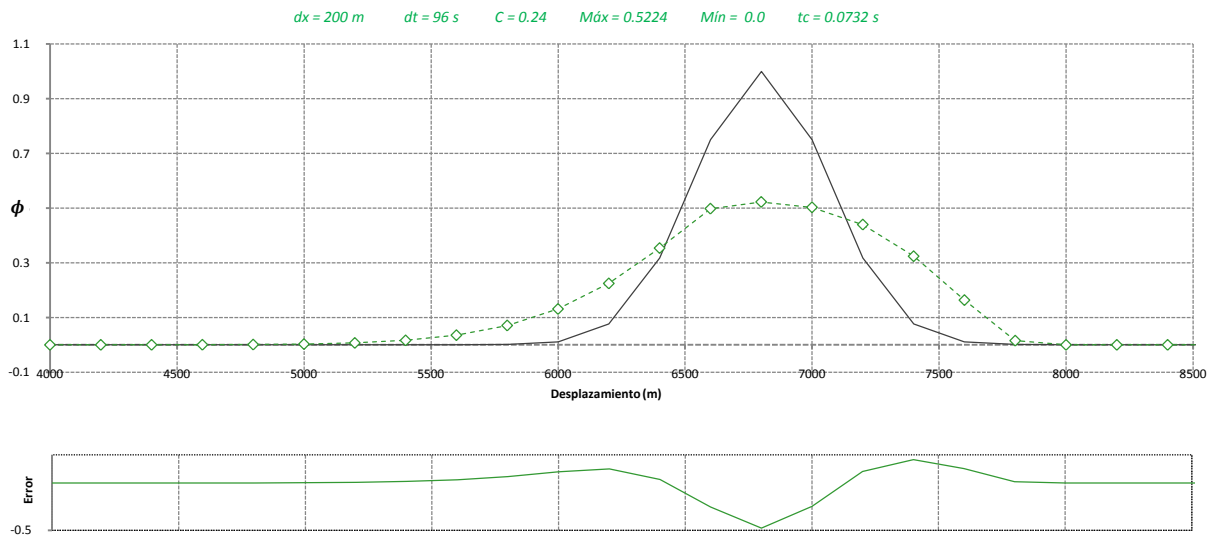


Figura 6.54 Prueba 1, esquema ULTIMATE SOU

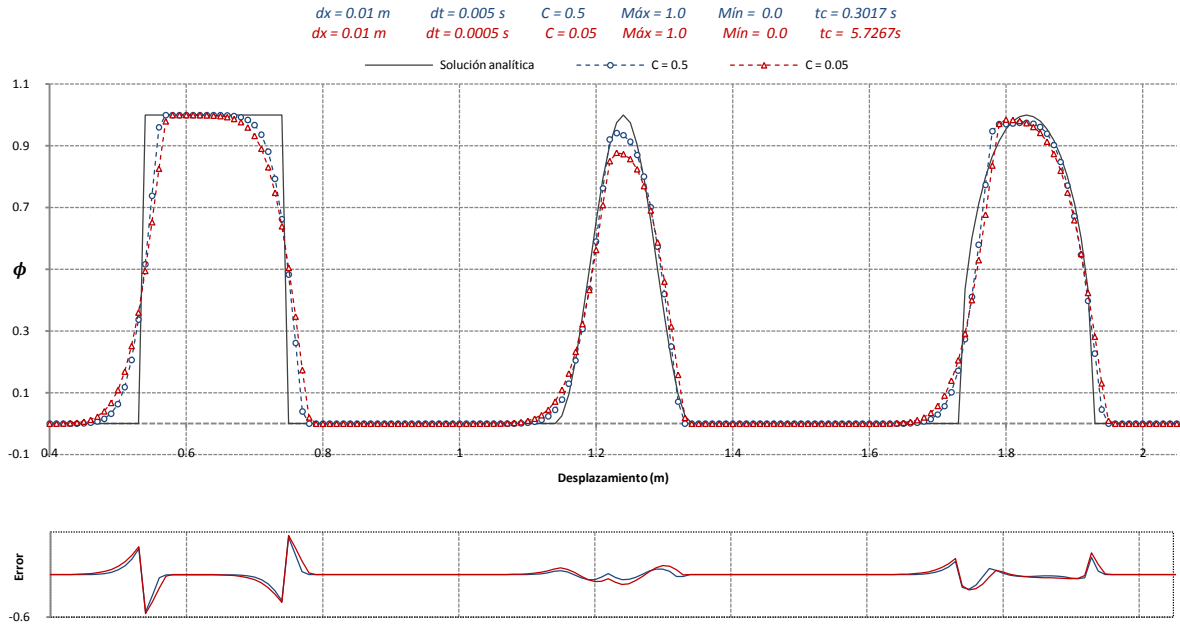


Figura 6.55 Prueba 2, 3 y 4, esquema ULTIMATE SOU

Tabla 6.23 Errores del esquema ULTIMATE SOU

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0011	0.4776	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0018	1.4325
2a	4.896	0.000	0.000	0.109	1.050	7.111	0.906	1.934
3a	2.108	0.058	0.000	0.008	1.000	0.016	1.000	0.466
4a	2.819	0.025	0.000	0.000	0.982	-7.202	1.037	1.001
2b	5.686	0.000	0.000	0.094	1.050	7.111	0.906	2.020
3b	3.590	0.122	0.000	0.008	1.000	0.024	1.000	0.637
4b	3.486	0.015	0.000	0.016	0.982	-7.235	1.037	1.214

6.5.3 Tercer Orden Hacia Atrás

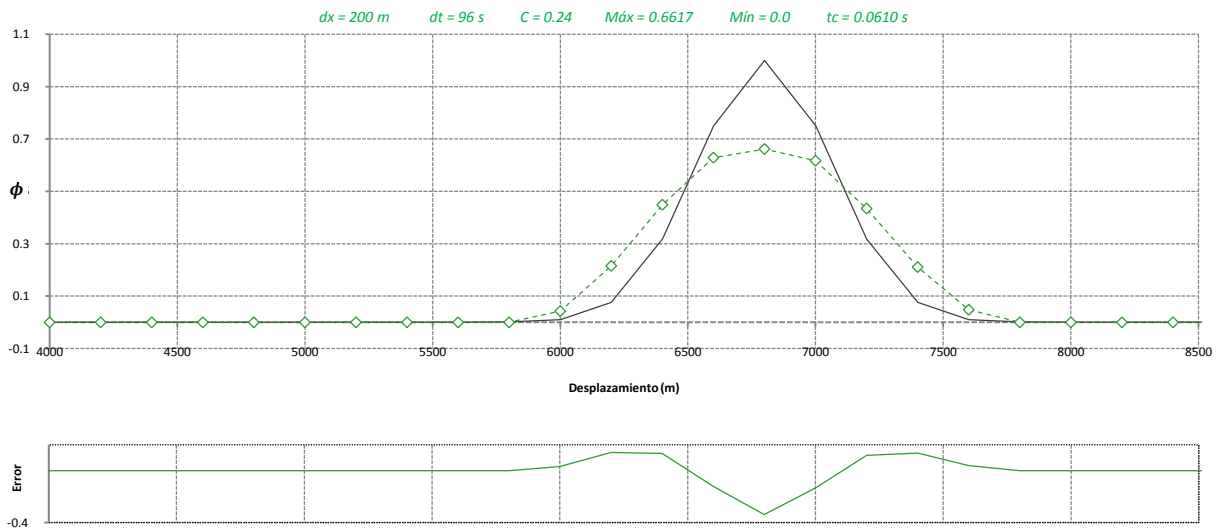


Figura 6.56 Prueba 1, esquema ULTIMATE TOU

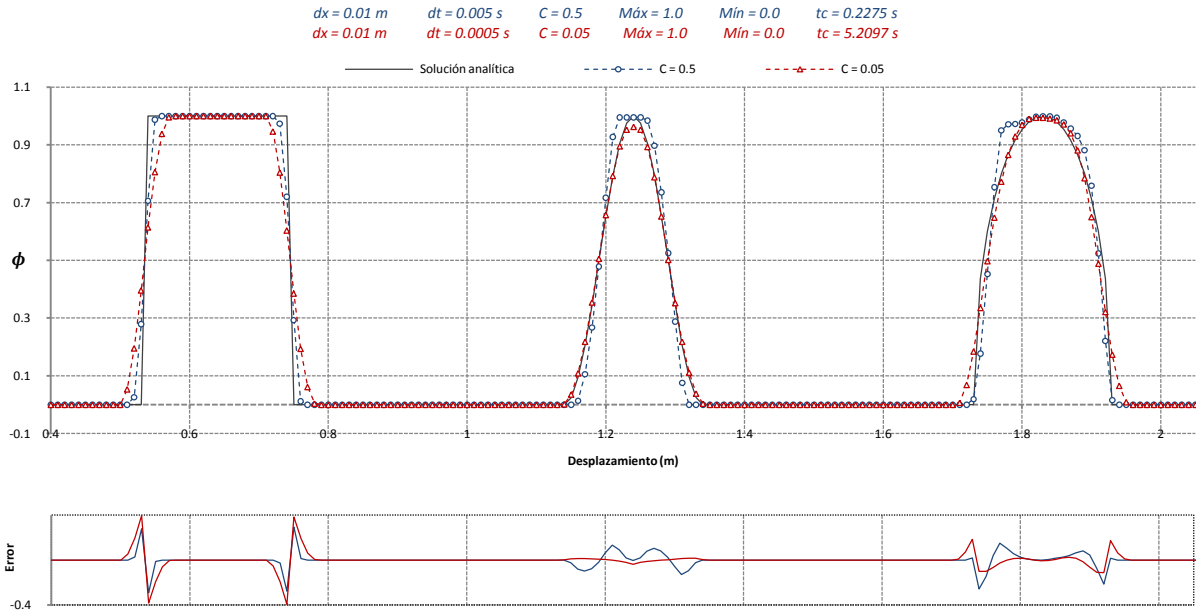


Figura 6.57 Prueba 2, 3 y 4, esquema ULTIMATE TOU

Tabla 6.24 Errores del esquema ULTIMATE TOU

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0007	0.3383	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0006	0.7499
2a	2.873	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.173
3a	3.299	0.005	0.000	0.000	1.000	0.002	1.000	0.832
4a	2.798	0.001	0.000	0.000	0.982	-7.184	1.037	1.241
2b	4.405	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.585
3b	0.628	0.037	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.128
4b	2.288	0.006	0.000	0.005	0.982	-7.124	1.036	0.773

6.5.4 Cuarto Orden Centrado

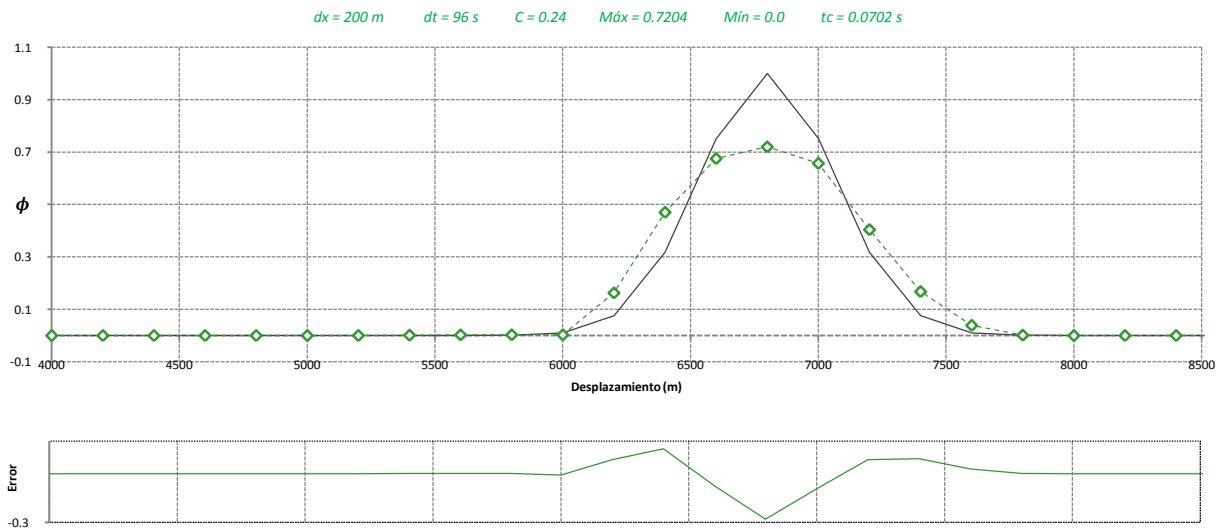


Figura 6.58 Prueba 1, esquema ULTIMATE FOC

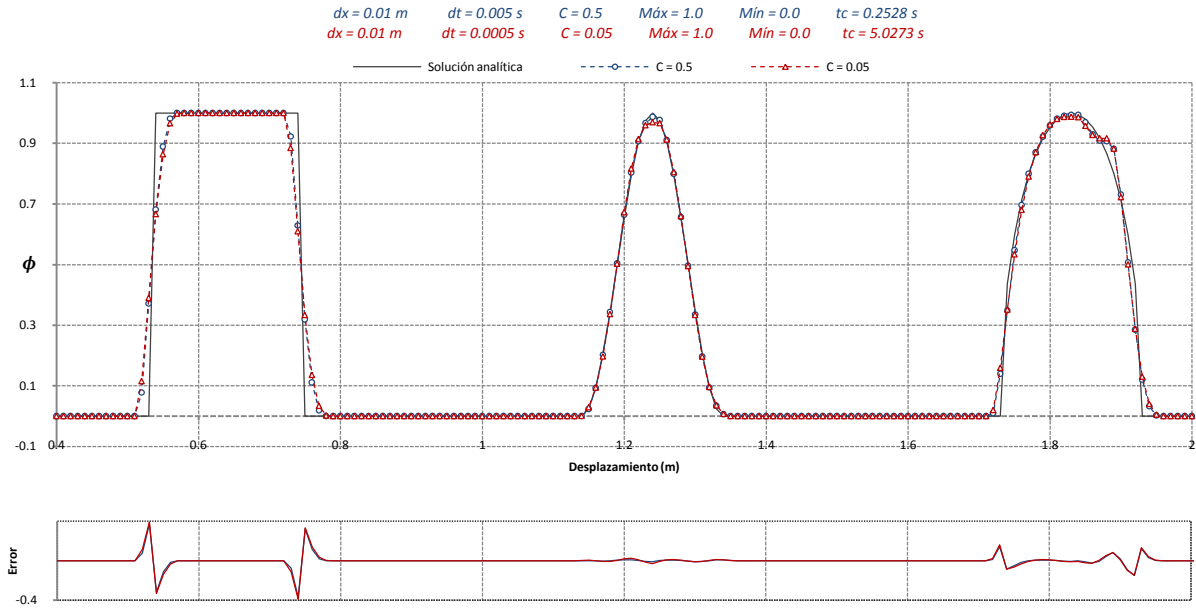


Figura 6.59 Prueba 2, 3 y 4, esquema ULTIMATE FOC

Tabla 6.25 Errores del esquema ULTIMATE FOC

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0006	0.2796	0.0000	0.0294	1.0000	0.0000	1.0004	0.7277
2a	3.594	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.485
3a	0.297	0.013	0.000	0.000	1.000	-0.005	1.000	0.085
4a	1.863	0.007	0.000	0.000	0.982	-7.132	1.036	0.763
2b	3.851	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.561
3b	0.551	0.031	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.149
4b	2.001	0.012	0.000	0.000	0.982	-7.145	1.036	0.833

6.5.5 Quinto Orden Hacia Atrás

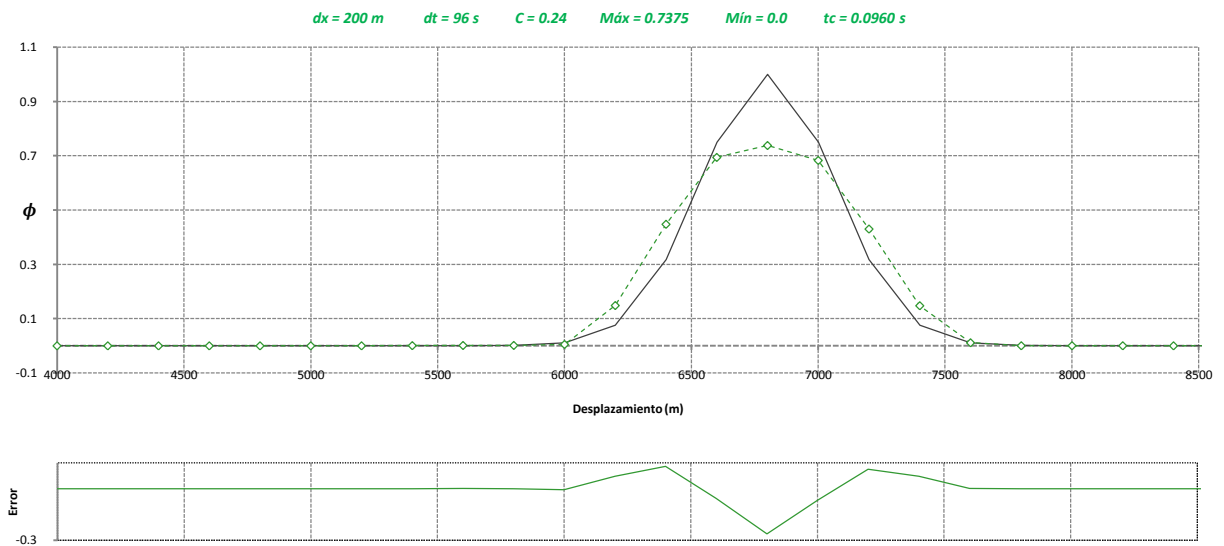


Figura 6.60 Prueba 1, esquema ULTIMATE FOU

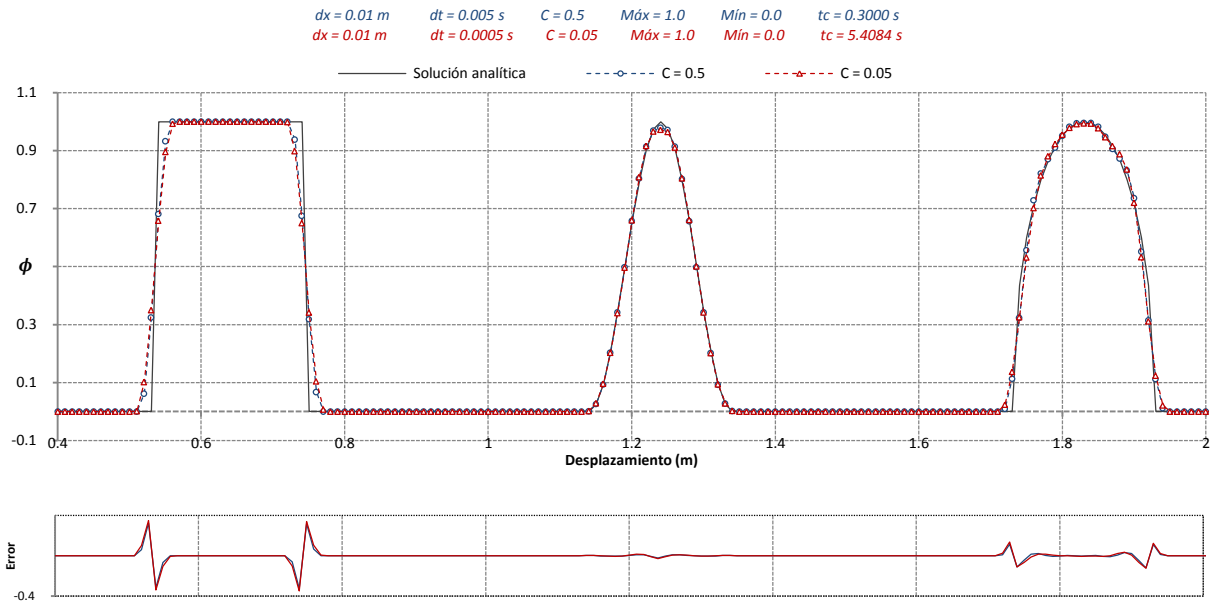


Figura 6.61 Prueba 2, 3 y 4, esquema ULTIMATE FOU

Tabla 6.26 Errores del esquema ULTIMATE FOU

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0005	0.2625	0.0000	0.0000	0.9998	0.0000	0.9996	0.7622
2a	3.278	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.297
3a	0.304	0.021	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.071
4a	1.546	0.004	0.000	0.000	0.982	-7.138	1.036	0.521
2b	3.610	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.400
3b	0.414	0.028	0.000	0.000	1.000	0.001	1.000	0.099
4b	1.730	0.006	0.000	0.000	0.982	-7.132	1.036	0.608

6.5.6 QUICKEST

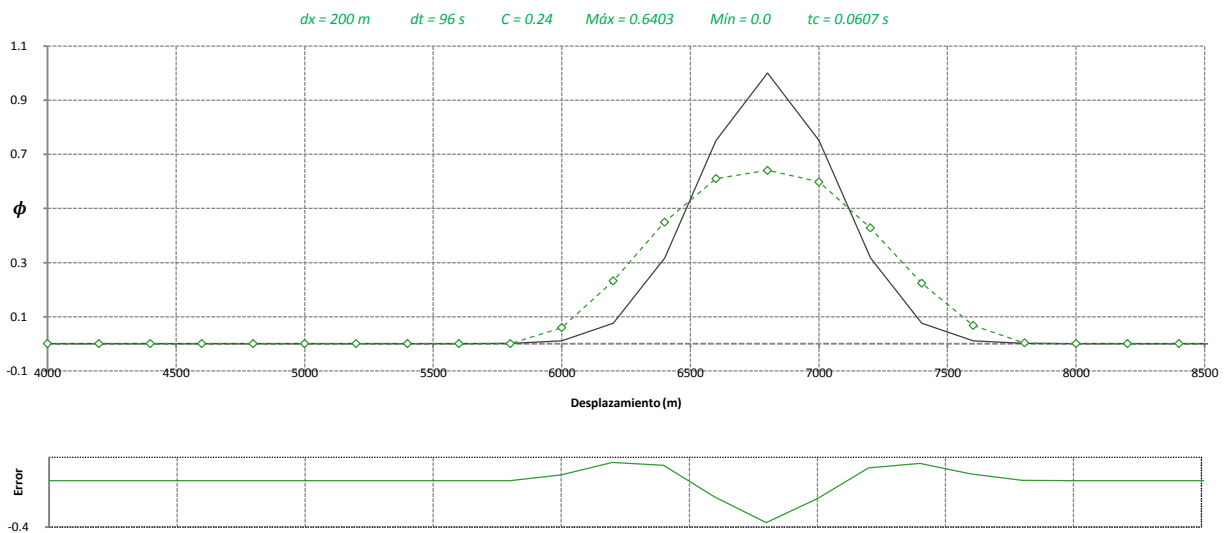


Figura 6.62 Prueba 1, esquema ULTIMATE QUICKEST

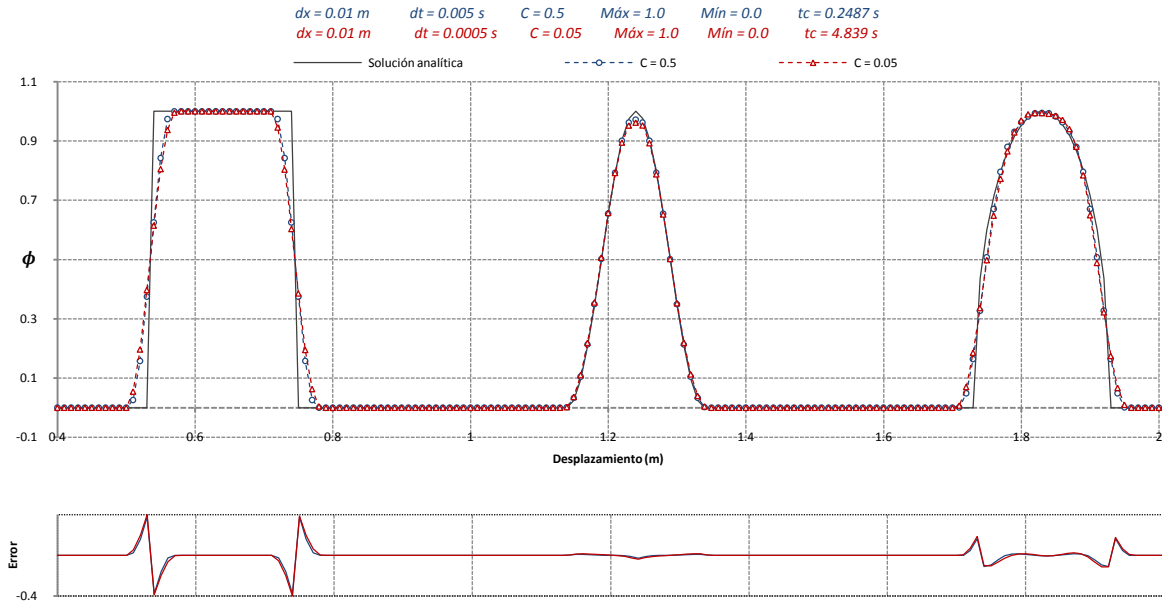


Figura 6.63 Prueba 2, 3 y 4, esquema ULTIMATE QUICKEST

Tabla 6.27 Errores del esquema ULTIMATE QUICKEST

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0008	0.3597	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0008	0.8425
2a	4.076	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.500
3a	0.411	0.028	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.094
4a	2.041	0.005	0.000	0.000	0.982	-7.140	1.036	0.702
2b	4.416	0.000	0.000	0.000	1.050	7.111	0.906	1.588
3b	0.652	0.038	0.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.132
4b	2.294	0.006	0.000	0.000	0.982	-7.123	1.036	0.775

6.6 Espectrales

6.6.1 Explícito

De los esquemas espectrales, los explícitos son los más propensos a la inestabilidad en todas y cada una de las pruebas.

6.6.2 Implícito

El uso de un número reducido de iteraciones garantiza convergencia y estabilidad. La fig 6.64 ilustra la disminución del error, mientras la fig 6.65 corresponde al tiempo de cómputo; todo lo anterior ejerciendo de la prueba 1 para diferente número de iteraciones.

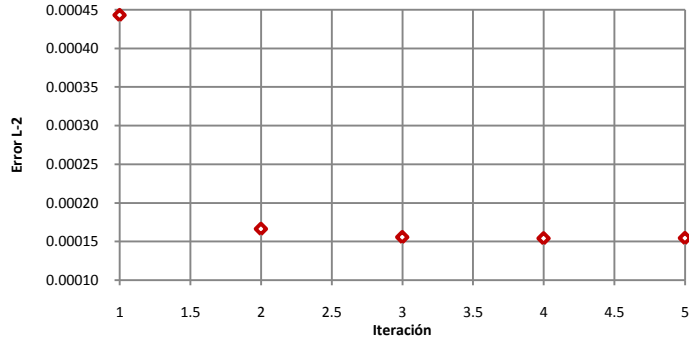


Figura 6.64 Error para diferentes iteraciones

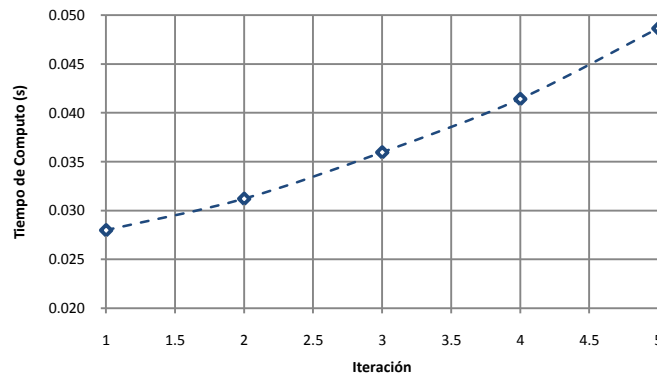


Figura 6.65 Tiempo de cómputo para diferentes iteraciones

A continuación se muestran los resultados de las pruebas con el uso de tres iteraciones, por ser el número óptimo de iteraciones, según las figs 6.64 y 6.65.

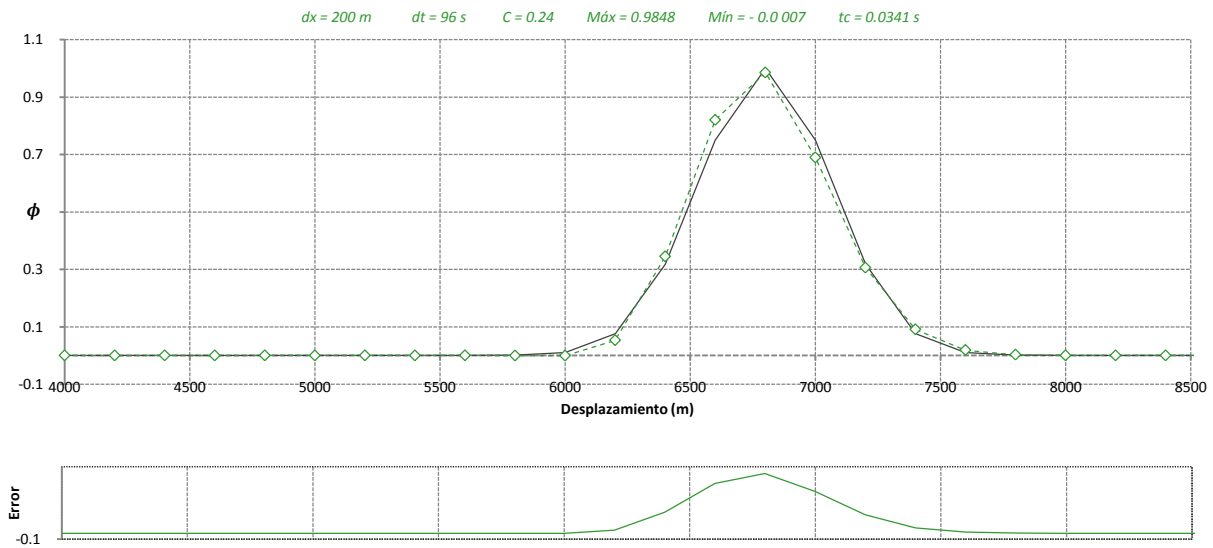


Figura 6.66 Prueba 1, esquema spectral implícito con 3 iteraciones

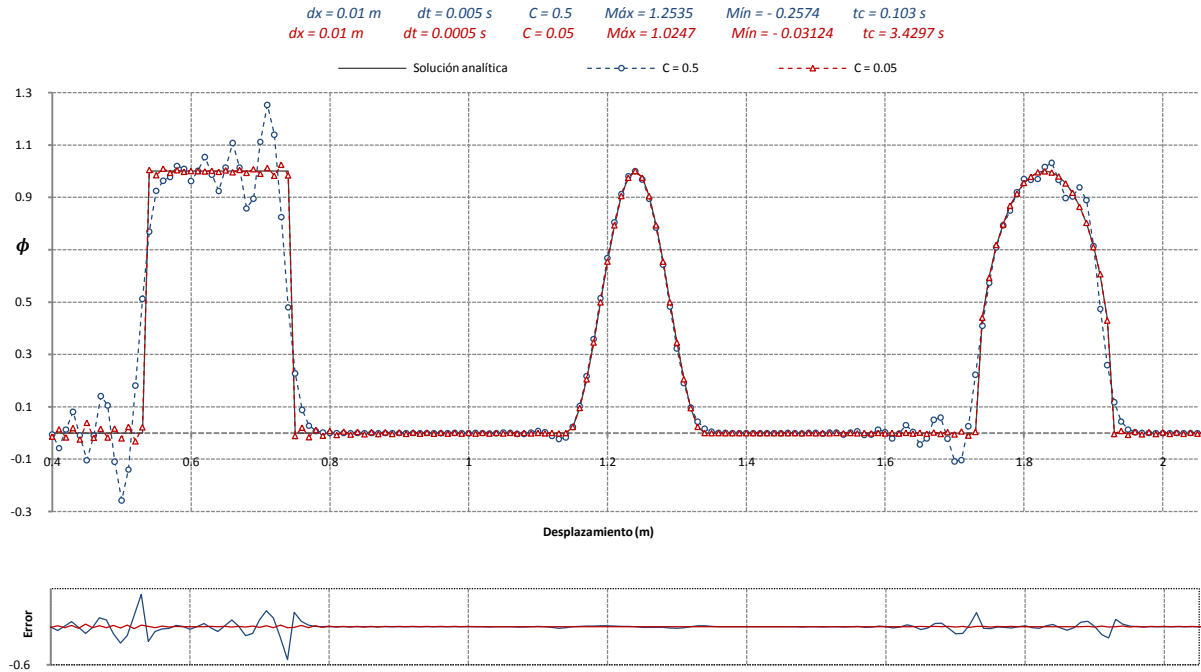


Figura 6.67 Prueba 2, 3 y 4, esquema espectral implícito con 3 iteraciones

Tabla 6.28 Errores del esquema espectral implícito con 3 iteraciones

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0002	0.0152	0.0007	0.0000	0.9997	0.0000	0.9998	0.2392
2a	5.048	-0.254	0.257	-0.109	1.051	7.143	0.907	3.630
3a	0.640	0.000	0.023	0.000	1.000	0.090	0.999	0.181
4a	2.589	-0.032	0.108	-0.005	0.983	-7.151	1.037	1.554
2b	0.514	-0.025	0.031	-0.141	1.051	7.116	0.907	0.188
3b	0.067	0.000	0.002	0.000	1.000	0.031	1.000	0.007
4b	0.169	0.000	0.009	0.000	0.982	-7.169	1.037	0.044

6.6.3 Seudoespectrales

Predictor-Corrector

Como predictor se utiliza el esquema QUICKEST; el resultado del corrector se obtiene con el método espectral. Únicamente se muestran los resultados con estabilidad. Se usa QUICKEST por su buen desempeño, pero bien podría emplearse cualquier otro esquema de alto orden como predictor.

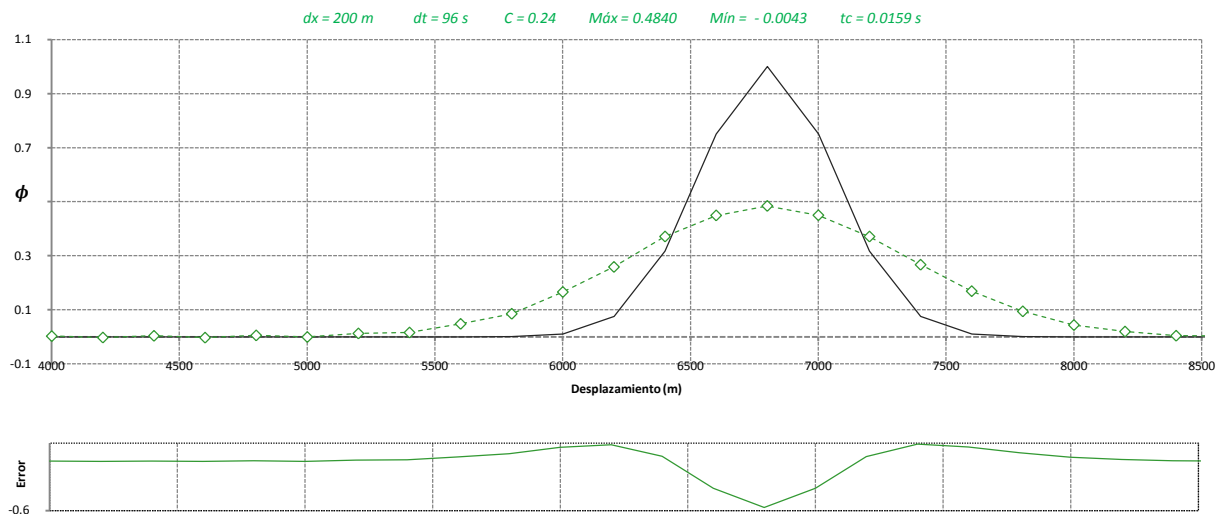


Figura 6.68 Prueba 1, seudoespectral predictor-corrector

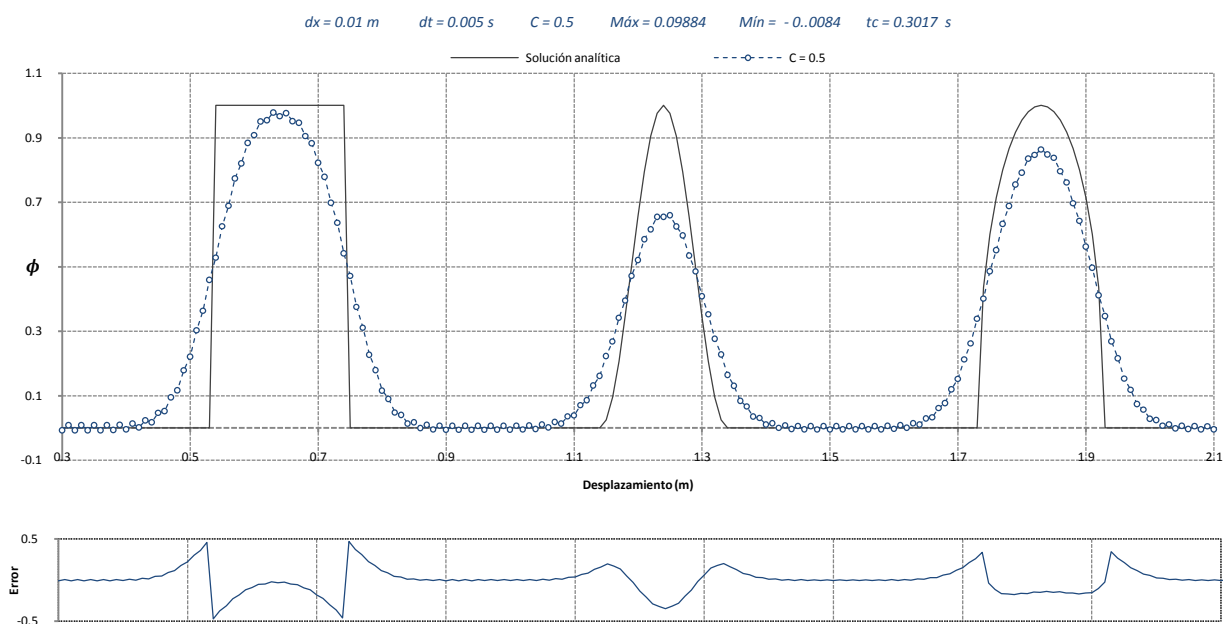


Figura 6.69 Prueba 2, 3 y 4, esquema seudoespectral predictor-corrector

Tabla 6.29 Errores esquema seudoespectral predictor-corrector

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0012	0.5160	0.0043	0.0000	0.9860	0.0001	0.9760	1.5401
2a	7.459	0.022	0.008	0.016	1.050	7.120	0.906	1.922
3a	9.515	0.341	0.006	-0.008	1.000	0.022	1.000	1.460
4a	6.191	0.136	0.005	0.000	0.982	-7.126	1.036	1.736

Predictor-Corrector Ponderados

a) QUICK como predictor

Este tipo de solución emplea la ec 5.90. La fig 6.70 muestra el comportamiento del error con diferentes valores de ponderación, γ , entre el predictor QUICK y el corrector espectral, en la prueba 1. Conforme mayor sea γ , será mayor la presencia del método espectral en la solución, y viceversa.

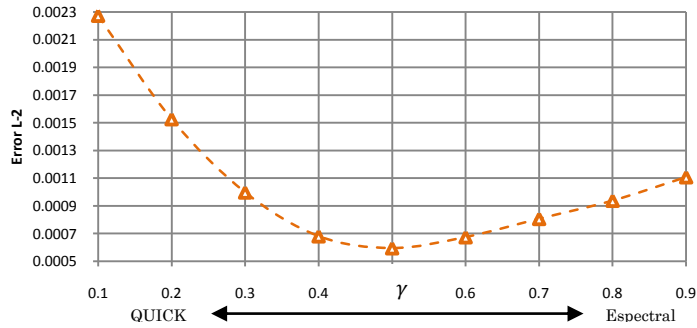


Figura 6.70 Error de cómputo con diferentes γ y esquema pseudoespectral con QUICK

El menor error se encuentra con $\gamma = 0.5$, el valor corresponde al promedio del predictor QUICK y el corrector espectral, este valor es empleado en las pruebas y mostrado en las siguientes figs.

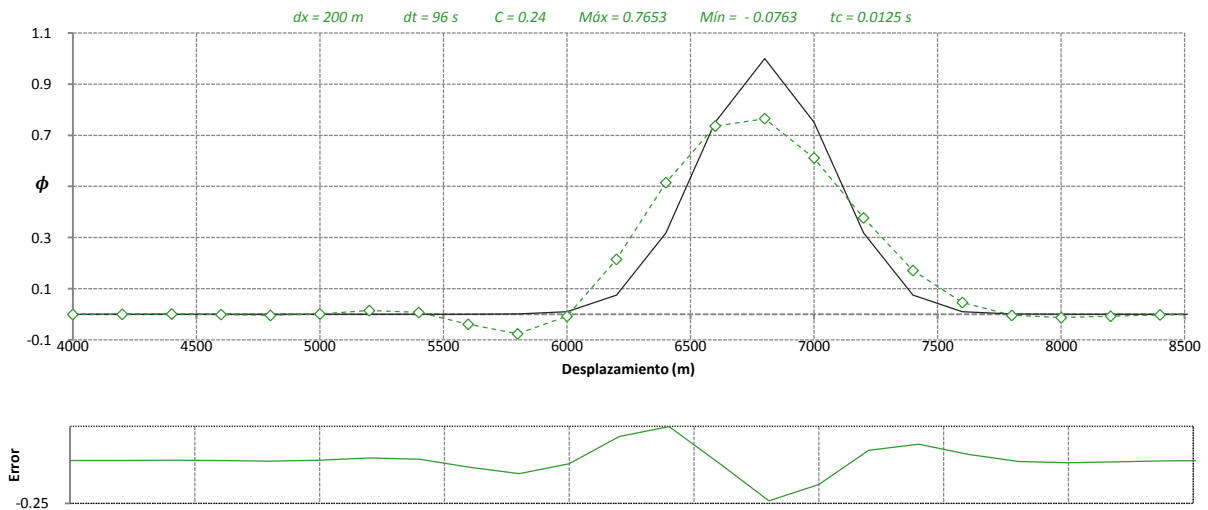


Figura 6.71 Prueba 1, esquema pseudoespectral con QUICK

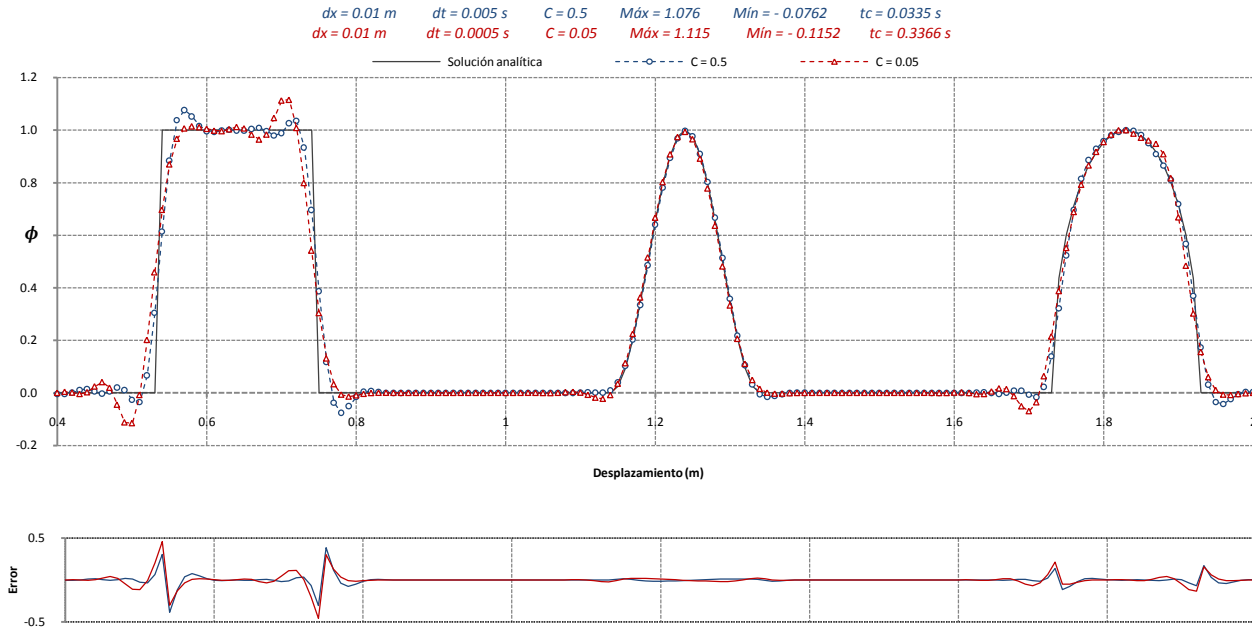


Figura 6.72 Prueba 2, 3 y 4, esquema pseudoespectral con QUICK

Tabla 6.30 Errores del esquema pseudoespectral con QUICK

Prueba	L-2	$\varepsilon(t)$	$\psi(t)$	$\xi(t)$	$\mu_0(t)$	$\mu_x(t)$	$\mu_{xx}(t)$	\mathcal{W}
1	0.0008	0.3597	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0008	0.8425
2a	3.694	-0.076	0.076	0.109	1.051	7.165	0.907	1.790
3a	0.507	0.003	0.016	0.000	1.000	0.001	1.000	0.102
4a	1.799	0.001	0.042	0.000	0.982	-7.141	1.036	0.697
2b	4.428	-0.115	0.115	-0.109	1.051	7.162	0.907	2.404
3b	0.711	0.007	0.022	0.000	1.000	0.002	1.000	0.159
4b	2.280	0.001	0.070	0.000	0.982	-7.140	1.036	0.886

b) QUICKEST como predictor

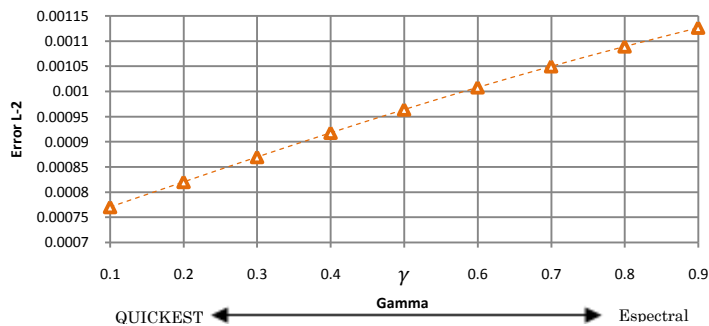


Figura 6.73 Error de cómputo con diferentes γ esquema pseudoespectral con QUICKEST

En el esquema pseudoespectral, utilizar QUICKEST como predictor no resulta conveniente. La presencia del corrector espectral incrementa el error.

REFERENCIAS

Baptista A., Gresho P. y Adams, A., (organizadores), "Convection diffusion fórum, VII Int Conf on Comp Meth in Water Resources, Cambridge, EUA.

Berezowsky V., "Métodos espectrales en hidráulica", *Tesis Doctoral*, Instituto de Ingeniería UNAM, 1998.

Sweby P. K., "High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws" *SIAM Journal Numer. Anal.*, 21, 1984, 995-1011.

Zalesak S. T., in: R. Vichnevetsky and R.S. Steplman, eds. *Advances in Computer Methods for partial Differential Equations VI*, IMACS, Rutgers University, 1987, 385.

7. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

En el presente trabajo se revisa ampliamente el estado del arte de métodos de diferencias finitas, volumen finito y espectrales para resolver la advección pura, fenómeno siempre presente en las ecuaciones de la hidráulica. Además, se comparan cuantitativamente todos los esquemas en problemas tipo de gran exigencia.

Los esquemas de segundo orden evolucionaron a órdenes mayores, y consigo ocupar un número superior de nodos para tener más información de las vecindades. Por otro lado, aparecieron métodos predictor-corrector que mejoran ligeramente los resultados. Todos son de muy bajo costo computacional y en mayor o menor medida generan oscilaciones espurias en presencia de altos gradientes, al grado que algunos llegan a ser inestables. Para los problemas tipo aquí usados, QUICKEST es el mejor de esta familia de esquemas lineales.

Los esquemas tipo Lax-Wendroff se generan con relaciones recurrentes. El incremento de orden mejora los resultados, a costa de usar un mayor número de nodos. Los esquemas de orden impar producen una mejor relación error-tiempo de cómputo que los de orden par inmediato superior. Aquí se muestra que los mejores esquemas de esta familia son el tercero y quinto orden hacia atrás.

Dado que en un cierto tipo de problema, un esquema funciona mejor que otros, aparecen los esquemas híbridos, con la ventaja de poder alternar diferentes esquemas entre un nodo y otro, o entre una región y otra del dominio. Aquí se muestra el uso de dos y tres esquemas en un híbrido, haciendo fácil e intuitivo aplicar un número mayor de esquemas. Desafortunadamente el criterio de elección entre esquemas eleva el costo computacional.

Incluir acotamiento de la variable independiente en el esquema es una excelente opción para evitar oscilaciones espurias. Los esquemas tipo Leonard emplean el criterio de acotamiento de la convección con variables normalizadas, que son de uso cómodo y fácil programación, además generan buenos resultados. ULTRA SHARP es el mejor esquema de este tipo, seguido de SHARP con un esfuerzo computacional menor. ULTIMATE es la evolución de los esquemas de Leonard, en él se usa un esquema cualquiera de alto orden, y si es necesario, los resultados se corrigen a fin de ser acotados. La combinación de ULTIMATE con un esquema de tercer orden, como QUICKEST, produce los mejores beneficios. Este tipo de esquemas funcionan independientes del número de *Courant*.

Calcular espectralmente ambas derivadas (espacial y temporal) implica una mayor precisión y dificultad. Así que se emplean diferencias hacia delante para resolver la derivada temporal y un esquema espectral para la derivada espacial. El esquema espectral explícito es inestable, pero al emplearlo implícito resulta óptimo con tres o cuatro iteraciones, proporcionando alta precisión y estabilidad. Los esquemas seudoespectrales funcionan con un predictor en diferencias finitas o volumen finito, y un corrector espectral. El resultado final, primero se construye con el corrector y posteriormente se prueba una mezcla aritmética con el predictor. Esto último da un mejor desempeño, dependiendo del esquema usado en el predictor. Las desventajas de los métodos espectrales radican en la dificultad de manejar fronteras no periódicas y variables en el tiempo; además, hacer una transformada y antitransformada del dominio involucran un alto costo computacional.

Se espera que la revisión y comparación hecha en el presente trabajo sea de beneficio a estudiosos de la dinámica de fluidos e hidráulica; y además, sea una referencia para emplear métodos más modernos y con desempeño superior. Por otro lado, se sientan las bases para avanzar a modelos prácticos de dos e incluso tres dimensiones; modelos de velocidad variable (espacial y temporal) y de malla variable.

Apéndice A. Variable normalizada de Leonard (VN)

La variable dependiente normalizada $\hat{\phi}_k$, definida para la cara de la derecha del VC centrado en j , y por simplicidad con una velocidad $u_{j+1/2}$ positiva se define como

$$\hat{\phi}_k = \frac{\phi_k - \phi_{j-1}}{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}} \quad \text{para } \phi_{j-1}, \phi_{j-1/2}, \dots, \phi_{j+1} \quad (\text{A.1})$$

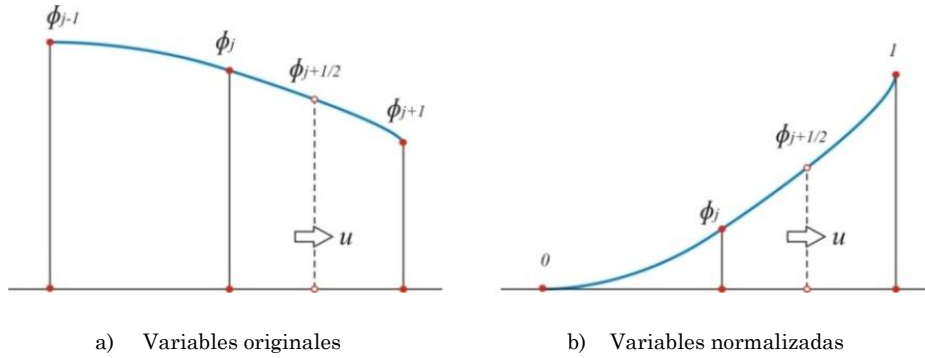


Figura A.1 Nodos vecinos a la cara izquierda del VC

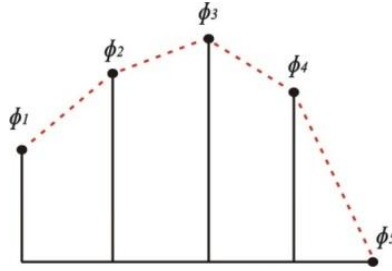
La normalización se hace con tres de los nodos vecinos. La fig A.1 b ilustra los valores posibles que toma $\hat{\phi}_j$, con los $\hat{\phi}_{j+1} = 1$ y $\hat{\phi}_{j-1} = 0$. La variable normalizada vale cuando $\hat{\phi}_{j+1} = \hat{\phi}_{j-1}$.

Apéndice B. Variación total suavizada

La construcción de varios esquemas numéricos requiere preservar de la monotonía, basándose en los siguientes principios:

- No deben ser creados nuevos extremos locales
- El valor de un mínimo local existente no debe ser decreciente y el de un máximo local no aumentar.

Estos principios pueden describir formalmente la definición de la Variación Total Disminuida, *TVD* (*Total Variation Diminishing*), a partir de la variable discreta ϕ como se muestra en la fig B.1, con $i = 1, \dots, 5$



$$\begin{aligned}
 TVD(\phi) &= |\phi_2 - \phi_1| + |\phi_3 - \phi_2| + |\phi_4 - \phi_3| + |\phi_5 - \phi_4| \\
 &= |\phi_3 - \phi_1| + |\phi_3 - \phi_5|
 \end{aligned}$$

Figura B.1 Ejemplo de la discretización de la TVD

Considerando la advección dada por la ec 2.6, Harten (1983) da solución con la TVD de la forma:

$$TVD(\phi^{n+1}) \leq TVD(\phi^n) \quad (B.1)$$

La condición anterior puede cumplirse con diversas estrategias, dependiendo del esquema. El uso de la TVD implica un grado mayor de dificultad que uno por NVD; pero, es sencillo traducir un esquema limitado por la TVD a la NVD.

REFERENCIAS

Baptista A., Gresho P., Adams, A., (organizadores), “Convection diffusion fórum, VII Int Conf on Comp Meth in Water Resources, Cambridge, EUA, 1988.

Harten A., “High resolution schemes for hyperbolic conservation laws”, *Journal of Computational Physics*, 49, 1983, 357.