



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO
FACULTAD DE INGENIERÍA
CENTRO INTERAMERICANO DE RECURSOS DEL AGUA



**“SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL TRANSPORTE
TRIDIMENSIONAL DE FRENTES DE
CONTAMINANTES EN CUERPOS DE AGUA
SUPERFICIALES”**

**Tesis que para obtener el grado de
Doctor en Ingeniería presenta**

DANTE ARTURO GONZÁLEZ SALAS

**Director de tesis
Dr. Jaime Max Gárfias Soliz**

**Codirector de tesis
Dr. Eugenio Gómez Reyes**

Toluca, México

Octubre de 2001

RESUMEN

González, Dante¹,

Gárfias, Jaime²,

Gómez, Eugenio³

¹ Tesista. Profesor investigador. Escuela de Ingeniería de Mazatlán, Universidad Autónoma de Sinaloa. dante@members.asce.org.

² Director de tesis. Profesor investigador. Centro Interamericano de Recursos del Agua, Universidad Autónoma del Estado de México. jgarfias@coatepec.uaemex.mx.

³ Codirector de tesis. Profesor investigador. Ingeniería de Procesos e Hidráulica – CBI, Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa. egr@xanum.uam.mx.

El objetivo de esta investigación, es la implementación eficiente del método de avance cuántico (ACUA), en un modelo orientado al transporte de frentes de contaminantes.

Primeramente se reconceptualiza el ACUA como un método de tipo cuántico, y luego se realiza un análisis probabilístico para demostrar que en problemas tridimensionales, se requiere que la secuencia de vectores para el muestreo sea equidistribuida. Para generar los vectores, se propone un procedimiento de replicación simétrica. Según el análisis estadístico y los experimentos numéricos realizados, las secuencias unidimensionales y bidimensionales así generadas, son mejores que las previamente reconocidas como óptimas. Asimismo, se propone una secuencia tridimensional con buenas cualidades estadísticas.

En esta tesis se replantea el ACUA como un método en diferencias finitas, y se propone un esquema tridimensional sin separación dimensional de operadores. Al realizar un análisis numérico del esquema propuesto, se muestra que el esquema es consistente, estable y convergente. Asimismo, se deduce la estructura de la difusión numérica, y se confirma que el esquema no introduce oscilaciones ni amortigua la solución.

Dado que el ACUA tiene validez al interior de una celda computacional, se propone un modelo (RASTREO ACUA) que integra globalmente las soluciones locales. El modelo se evaluó mediante experimentos numéricos, tomando como referencia el esquema veleta (*upwind*) de primer orden. En ese sentido, se muestra que el RASTREO ACUA es más preciso que el esquema veleta, destacando su capacidad para conservar el 100 % de la masa, y su elevada correlación con la solución teórica, la cual es cercana a 1.

Finalmente, se concluye que el RASTREO ACUA es capaz de simular satisfactoriamente el transporte de frentes. Otra conclusión, derivada de su clasificación como un esquema tipo veleta, es que el ACUA puede aprovechar las mejoras que han beneficiado a los esquemas veleta, ampliando así sus perspectivas de desarrollo.

ABSTRACT



González, Dante¹



Gárfias, Jaime²

Gómez, Eugenio³

¹ Tesista. Profesor investigador. Escuela de Ingeniería de Mazatlán, Universidad Autónoma de Sinaloa. dante@members.asce.org.

² Director de tesis. Profesor investigador. Centro Interamericano de Recursos del Agua, Universidad Autónoma del Estado de México. jgarfias@coatepec.uaemex.mx.

³ Codirector de tesis. Profesor investigador. Ingeniería de Procesos e Hidráulica – CBI. Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa. egr@xanum.uam.mx.

The objective of this investigation, is the efficient implementation of the Random Choice Method (RCM), in a model oriented toward transporting fronts of contaminants.

In a first stage, the RCM is reconceptualized as a quantic type method, and then, a probabilistic analysis is performed in order to show that in three-dimensional problems, equidistribution of sequences of sampling vectors is required. In order to generate the vectors, a symmetric replying procedure is proposed. According to the statistical analysis and to the numerical experiments carried out, one-dimensional and two-dimensional sequences generated this way, are better than those previously recognized as optimal. Likewise, a three-dimensional sequence with good statistical qualities is proposed.

In this thesis, the RCM is restated as a finite differences method, and a three-dimensional scheme without dimensional operator splitting is proposed. After performing a numerical analysis of the proposed scheme, it is shown that the scheme is consistent, stable and convergent. Also, the structure of numerical diffusion is deduced, and it is confirmed that the scheme does not introduce oscillations, nor does it dampen dampen the solution.

Since the RCM is valid inside a computational cell, a model (TRACKED RCM) which globally integrates the local solutions is proposed. The model was assessed through numerical experiments, taking the first order upwind scheme as a reference. In this sense, it is shown that the TRACKED RCM is more accurate than the upwind scheme, detaching its capacity to conserve 100 % of mass, and its high correlation with the theoretical solution, which converges toward 1.

Finally, it is concluded that the TRACKED RCM has the capacity to satisfactorily simulate transport of fronts. Another conclusion, derived from its classification as an upwind biased scheme, indicates that the RCM can make use of improvements that have benefited upwind schemes, this way widening its development perspectives.

DEDICATORIA

Con mucho amor para mi presente, pasado y futuro:

Mi esposa; Ma. de los Angeles

Mis padres; Pedro y Delfina

Mis hijos; Dante Euler, Marlén Ariana y Galileo Arturo

En agradecimiento por el apoyo emocional que me brindaron, y por haberme comprendido en este periodo de relativa desatención hacia la familia.

RECONOCIMIENTOS

En 1993 me inscribí a la maestría en ciencias del agua que ofrece el CIRA de la Universidad Autónoma del Estado de México. El grato ambiente de trabajo y la calidad de la educación recibida, me animaron a continuar con el doctorado que se imparte en este mismo centro de estudios. En algunos periodos de estos 8 años, recibí beca de la Universidad Autónoma de Sinaloa, del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, o del Programa de Mejoramiento del Profesorado. Sin el apoyo para manutención otorgado por estas instituciones, mis estudios de posgrado no hubieran sido posibles. Por tal motivo, les manifiesto mi profundo agradecimiento.

También quiero externar mi reconocimiento al Dr. Juan García, por el apoyo decidido para mi ingreso al programa de doctorado; a los académicos que incidieron en esta etapa "culminante" de mi formación profesional, los profesores – investigadores del CIRA: doctores Juan García, Jaime Gárfias, Khalidou Bâ, Carlos Díaz, Vicenta Esteller y René Muciño, M en I. José Chedid y M en Q. Verónica Martínez, quienes me transmitieron conocimientos académicos y científicos que hoy me enorgullecen. A los miembros de mi comité doctoral, doctores: Adela Gómez, Khalidou Bâ, Carlos Díaz, Eugenio Gómez y Jaime Gárfias; por haber aportado valiosas observaciones y críticas constructivas al presente trabajo de tesis. Al Dr. Eugenio Gómez, por haberme sugerido tan interesante tema de investigación, por su invaluable ayuda en la determinación de los objetivos de la investigación, y por su desinteresada orientación y asesoría científica. Al Dr. Jaime Gárfias, por la delimitación acertada de los alcances de la tesis, por el firme apoyo en la gestión académica de diversos aspectos administrativos relacionados con mis estudios de doctorado, por su carácter "exigente" que empuja a hacer mejor las cosas, por la asesoría académica y por las orientaciones de tipo científico que me transmitió.

Con relación a los aspectos formales de esta tesis (formato, estilo, ortografía y sintaxis), es necesario reconocer a los compañeros M. en P. Javier Urrea y Dra. Florina Olivarría, por haber distraído su valioso tiempo en la lectura del documento, lo cual a la postre se tradujo en observaciones y sugerencias que contribuyeron a mejorar su presentación.

Además, agradezco a la Dra. Vicenta Esteller y a la Lic. Clemencia Ocampo por la atención amable y expedita de mis trámites académico - administrativos.

De la misma manera, manifiesto mi agradecimiento a los compañeros: Pedro Morales, Brenda Pichardo, Mercedes Lucero, Roberto Sarabia, Lorenzo Valenzuela, Elizabeth Romero, Ruth Hernández, Griselle Vega, Fortunato Ibarra y Maximino Rodríguez; quienes me brindaron su amistad y solidaridad durante mis estudios.

Sinceramente,

Dante González

ÍNDICE

LISTA DE TABLAS	iii
LISTA DE FIGURAS	iv
NOTACIÓN	vii
CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Importancia de la presente investigación	2
1.2. Revisión de métodos numéricos para la solución de la EAD	4
1.3. Evolución del RCM	10
1.4. Hipótesis, objetivos y metodología de la investigación	17
CAPÍTULO 2. PLANTEAMIENTO TRIDIMENSIONAL DEL RCM	21
CAPÍTULO 3. GENERACIÓN DE VECTORES ADECUADOS AL RCM	39
3.1. La equidistribución como requisito para que el RCM avance las ondas a la velocidad correcta	40
3.2. Características deseables de un generador de vectores	48
3.3. Procedimiento de generación de vectores	50
3.4. Propuesta de secuencias de vectores	53
3.5. Comparación de parámetros estadísticos de secuencias de vectores	62
3.6. Comparación de resultados numéricos	69
CAPÍTULO 4. ESQUEMA PARA LA SOLUCIÓN LOCAL DE LA EAD	72
4.1. Esquema en diferencias finitas para el ACUA	73
4.2. Esquema ACUA - diferencias centradas	76
4.3. Análisis de consistencia	77
4.4. Análisis de estabilidad	82
4.5. Análisis de convergencia	89
4.6. Difusión numérica	89
4.7. Disipación y dispersión	90
4.8. Error local de truncamiento	91

CAPÍTULO 5. INTEGRACIÓN GLOBAL DE LAS SOLUCIONES LOCALES	92
5.1. Método de rastreo de ondas con avance cuántico (RASTREO ACUA)	93
5.2. Análisis experimental del RASTREO ACUA	100
CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	127
REFERENCIAS	132

LISTA DE TABLAS

Tabla 5.1.	Estadísticos para flujo permanente uniforme con $u = 0.010 \text{ m/s}$	105
Tabla 5.2.	Estadísticos para flujo transitorio uniforme con $u = 0.010 \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \text{ m/s}$	105
Tabla 5.3.	Dimensiones del pulso inicial de concentración. En su interior $c_i^0 = 30.0\%$, mientras que en su exterior $c_e^0 = 0.0\%$	111

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1.	Celda riemanniana centrada en el nodo (i, j, k)	24
Figura 2.2.	Aproximación de $c(x, y, z, t)$ mediante un conjunto de estados uniformes $\tilde{C} _{\dots}^n$	26
Figura 2.3.	Subregiones con diferentes estados uniformes de \tilde{C} dentro de una celda computacional	27
Figura 2.4a.	Avance sesgado hacia delante debido a muestreo inapropiado	36
Figura 2.4b.	Avance sesgado hacia atrás debido a muestreo inapropiado	37
Figura 2.4c.	Avance apropiado obtenido mediante un muestreo correcto	38
Figura 3.1.	Mapeo de puntos del dominio computacional al espacio de muestreo	42
Figura 3.2.	Condición de avance de la solución	43
Figura 3.3.	Primeros 10000 vectores obtenidos con el generador Van der Corput $(\overline{26, 3})(\overline{25, 3})$ simétrico	54
Figura 3.4.	Primeros 10000 vectores obtenidos con el generador Van der Corput $(\overline{2, 1})(\overline{3, 1})$ simétrico	55
Figura 3.5.	Proyección xy de los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(\overline{2, 1})(\overline{3, 1})(\overline{7, 3})$ simétrica	56
Figura 3.6.	Proyección yz de los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(\overline{2, 1})(\overline{3, 1})(\overline{7, 3})$ simétrica	57
Figura 3.7.	Proyección xz de los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(\overline{2, 1})(\overline{3, 1})(\overline{7, 3})$ simétrica	58
Figura 3.8.	Primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(\overline{2, 1})(\overline{3, 1})(\overline{7, 3})$ simétrica	59
Figura 3.9.	Primeros 8 vectores de la secuencia: a) Van der Corput $(\overline{3, 2})(\overline{5, 3})$ convencional y, b) Van der Corput $(\overline{2, 1})(\overline{3, 1})$ simétrica	61
Figura 3.10.	Comparación de Chi cuadrada múltiple entre secuencias Van der Corput $(\overline{2, 1})$ convencional y simétrica	65
Figura 3.11.	Comparación de chi cuadrada múltiple entre secuencias Van der Corput $(\overline{3, 2})(\overline{5, 3})$ convencional y Van der Corput $(\overline{2, 1})(\overline{3, 1})$ simétrica	67
Figura 3.12.	Chi cuadrada múltiple de la secuencia Van der Corput $(\overline{2, 1})(\overline{3, 1})(\overline{7, 3})$ simétrica	68
Figura 3.13.	Comparación de tiempo de cómputo (1D)	70
Figura 3.14.	Comparación de tiempo de cómputo (2D)	71

Figura 5.1.	Efecto de los distintos tipos de onda sobre la variación de masa en el ACUA 1D	94
Figura 5.2.	Avance de una pluma de contaminantes sujeta a la acción de una onda de rarefacción en la dirección x , sobrepuesta linealmente a una onda de contacto en la dirección y	95
Figura 5.3.	Rastreo intramalla (línea discontinua) de una nube	97
Figura 5.4.	Flujo de contaminante entre celdas, caso bidimensional	99
Figura 5.5.	Condiciones iniciales en experimentos numéricos unidimensionales	104
Figura 5.6.	Varianza de los errores residuales, obtenida bajo flujo 1D uniforme y permanente	106
Figura 5.7.	Media de los errores residuales absolutos, obtenida bajo flujo 1D uniforme y permanente	107
Figura 5.8.	Correlación entre la solución del modelo y la solución analítica, obtenida bajo flujo 1D uniforme y permanente	107
Figura 5.9.	Desfasamiento (μ_x) entre la solución calculada con el RASTREO ACUA y la solución analítica, obtenido bajo flujo 1D uniforme y permanente	108
Figura 5.10.	Varianza de los errores residuales, obtenida bajo flujo 1D transitorio uniforme	108
Figura 5.11.	Media de los errores residuales absolutos, obtenida bajo flujo 1D transitorio uniforme	109
Figura 5.12.	Correlación entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica, obtenida bajo flujo 1D transitorio uniforme	109
Figura 5.13.	Desfasamiento en dirección x de la solución del RASTREO ACUA con respecto a la solución teórica, obtenido bajo flujo 1D transitorio uniforme	110
Figura 5.14.	Condiciones iniciales de los experimentos numéricos 2D	112
Figura 5.15.	Error normalizado de la concentración pico en experimentos con flujo 2D rotatorio	113
Figura 5.16.	Varianza de los errores residuales en experimentos con flujo 2D rotatorio	113
Figura 5.17.	Media de los errores residuales absolutos en experimentos con flujo 2D rotatorio	114
Figura 5.18.	Correlación entre la solución del modelo y la solución analítica, obtenida bajo flujo 2D rotatorio	114
Figura 5.19.	Desfasamiento (μ_x) entre la solución del modelo y la solución exacta, obtenidas bajo flujo 2D rotatorio	115
Figura 5.20.	Desfasamiento (μ_y) entre la solución del modelo y la solución teórica, obtenido bajo flujo 2D rotatorio	115
Figura 5.21.	Tiempo de cálculo requerido por el RASTREO ACUA en experimentos con flujo 2D rotatorio	116
Figura 5.22.	Influencia de la resolución intramalla sobre el error normalizado de la concentración pico en experimentos con flujo 2D rotatorio	117
Figura 5.23.	Influencia de la resolución intramalla sobre la varianza de los errores residuales en experimentos con flujo 2D rotatorio	117
Figura 5.24.	Influencia de la resolución intramalla sobre la media de los errores residuales absolutos en experimentos con flujo 2D rotatorio	118

Figura 5.25. Influencia de la resolución intramalla sobre la correlación entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con un flujo 2D rotatorio	118
Figura 5.26. Influencia de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_x) entre la solución del modelo y la solución teórica en experimentos con un flujo 2D rotatorio	119
Figura 5.27. Influencia de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_y) entre la solución del modelo y la solución teórica en experimentos con flujo 2D rotatorio	119
Figura 5.28. Pluma de contaminantes en cuatro distintos instantes de una simulación 2D ...	120
Figura 5.29. Efecto de la resolución intramalla sobre el error normalizado de la concentración pico en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme ...	121
Figura 5.30. Efecto de la resolución intramalla sobre la varianza de los errores residuales en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme	122
Figura 5.31. Efecto de la resolución intramalla sobre la media de los errores residuales absolutos en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme	122
Figura 5.32. Efecto de la resolución intramalla sobre la correlación entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme	123
Figura 5.33. Efecto de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_x) entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme	123
Figura 5.34. Efecto de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_y) entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme	124
Figura 5.35. Efecto de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_z) entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme	124

NOTACIÓN

Variables

- b = cantidad de dígitos de $\langle n \rangle_{r_x}$.
 C = solución numérica obtenida por el RASTREO ACUA.
 \tilde{C} = solución numérica obtenida por el ACUA.
 \hat{C} = solución numérica de los problemas de Riemann.
 \tilde{C}_l = l -ésimo modo de Fourier de la solución.
 c = valor teórico de la concentración del contaminante.
 D = coeficiente de difusión.
 d = dimensionalidad del problema físico.
 F = tasa de flujo entre celdas.
 f = número de grados de libertad.
 G = término difusivo del factor de amplificación.
 \mathbf{g} = vector de parámetros de la secuencia de Van der Corput.
 \hat{i} = unidad de los números imaginarios.
 $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$ = vectores unitarios a lo largo de los ejes x, y, z , respectivamente.
 k = número de subregiones en que se divide el espacio muestral $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]^d$.
 N = número total de nodos en el dominio computacional.
 N_T = número total vectores o de pasos de tiempo.
 n = número de paso de tiempo particular.
 n_l = cantidad de vectores que caen en la l -ésima subregión del espacio muestral.
 $\langle n \rangle_{r_x}$ = número n expresado en base r_x .
 $O(\cdot)$ = notación O grande para indicar orden de magnitud.
 Pe = número de Peclet.
 p = probabilidad de avance de la solución.

p_l = probabilidad de que un vector particular caiga dentro de la l -ésima subregión.

\mathbf{q} = velocidad total del flujo.

$\tilde{\mathbf{q}}$ = velocidad cuántica total del flujo.

\mathbb{R} = conjunto de los números reales.

\mathbf{s} = dirección en el espacio.

t = tiempo.

u, v, w = componentes de la velocidad del flujo en las direcciones x, y, z ; respectivamente.

$\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}$ = componentes de la velocidad cuántica en las direcciones x, y, z ; respectivamente.

X, Y, Z = avances de las interfaces de \widehat{C} a lo largo de las direcciones x, y, z ; respectivamente.

$X_{(\cdot)}^2$ = chi cuadrada calculada con $\langle \cdot \rangle$ grados de libertad.

\bar{x}, \bar{y} = coordenadas del centroide del dominio computacional.

α = nivel de significancia.

Γ = número de avance.

Δt = separación temporal de la malla computacional.

$\Delta x, \Delta y, \Delta z$ = separaciones espaciales de la malla computacional.

ε = error residual.

ε_{abs} = error residual absoluto.

ζ = vector seudo aleatorio.

Θ_l = fase del l -ésimo modo numérico.

λ = relación de malla.

μ = desfaseamiento entre la solución calculada y la solución exacta.

Ξ = factor de conservación de masa.

ξ = vector equidistribuido que rige el avance de las ondas.

Π_l = factor de amplificación de la l -ésima componente de la serie de Fourier.

ρ = coeficiente de correlación.

$\sigma_{x_l}, \sigma_{y_l}, \sigma_{z_l}$ = números de onda de la l -ésima componente de la serie de Fourier.

τ = desplazamientos locales de la nube de isoconcentración.

υ = número de Courant.

χ^2 = función de densidad chi cuadrada.

\aleph = cociente de sucesivas divisiones de $\langle n \rangle_{r_x}$ entre r_x .

Π = dígito de $\langle n \rangle_{r_x}$.

Υ = error normalizado en la concentración pico.

Subíndices

i, j, k = índices enteros asociados respectivamente con las coordenadas x, y, z de los nodos de la malla computacional.

x, y, z = componentes a lo largo de las direcciones x, y, z , respectivamente.

Superíndices

n = paso de tiempo particular.

Abreviaturas

1D, 2D, 3D = unidimensional, bidimensional, tridimensional; respectivamente.

ACUA = método de avance cuántico (traducción al español de *RCM*).

CFL = Courant - Friedrichs - Lewy.

EAD = ecuación de advección - difusión.

EDP = ecuación(es) diferencial(es) parcial(es).

FD = función de densidad de probabilidad.

MDF = método en diferencias finitas.

MEF = método en elementos finitos.

MOE = derivadas de orden superior en el espacio.

MOT = derivadas de orden superior en el tiempo.

RASTREO ACUA = rastreo de ondas con avance cuántico.

RCM = método de avance cuántico.

Símbolos

$\text{Cov}\{\cdot\}$ = operador covariancia.

$E\{\cdot\}$ = operador esperanza matemática.

$\text{esc}(\cdot)$ = función escalón.

$\max(\cdot)$ = mayor valor del argumento (\cdot) en el dominio de las variables indicadas al pie de la expresión.

$\text{MOD}(\cdot, \cdot)$ = función que regresa el residuo de la división entera del primer argumento entre el segundo.

$\text{sgn}(\cdot)$ = función signo.

$\text{Var}\{\cdot\}$ = operador variancia.

$|$ = unión tipográfica de los identificadores de los nodos en la malla espacio - tiempo.

$\{\cdot\}$ = secuencia de vectores.

$[\cdot; \cdot]$ = intervalo espacial cerrado.

$\overline{(\cdot, \cdot)}$ = especificación de parámetros en la secuencia de Van der Corput.

\times = operador de producto cartesiano.

τ = indicador de que la variable (\cdot) es uniforme dentro de un intervalo.

$\bar{\cdot}$ = media de la variable (\cdot) .

1.1 Importancia de la presión osmótica

Entre las fuerzas que se deben vencer para el transporte de un soluto a través de una membrana semipermeable se encuentran la presión osmótica, la presión hidrostática y la presión de difusión. La presión osmótica es la fuerza que tiende a mover el agua desde un área de menor concentración de soluto hacia un área de mayor concentración de soluto. La presión hidrostática es la fuerza que tiende a mover el agua desde un área de mayor presión hidrostática hacia un área de menor presión hidrostática. La presión de difusión es la fuerza que tiende a mover el agua desde un área de mayor concentración de soluto hacia un área de menor concentración de soluto.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

El presente capítulo trata de las propiedades y el transporte de los solutos a través de una membrana semipermeable. Se discute la importancia de la presión osmótica, la presión hidrostática y la presión de difusión en el transporte de un soluto a través de una membrana semipermeable.

$$\left(\begin{matrix} \frac{dC_1}{dt} \\ \frac{dC_2}{dt} \end{matrix} \right) = - \left(\begin{matrix} D_1 \frac{d^2 C_1}{dx^2} \\ D_2 \frac{d^2 C_2}{dx^2} \end{matrix} \right) + \left(\begin{matrix} v_1 \frac{dC_1}{dx} \\ v_2 \frac{dC_2}{dx} \end{matrix} \right) + \left(\begin{matrix} S_1 \\ S_2 \end{matrix} \right)$$

que se puede encontrar en la literatura (sitio web: <http://www.chemeddl.org>)

La concentración del soluto en el agua es:

$$C = \frac{m}{V}$$

donde m es la masa del soluto y V es el volumen del agua. La concentración del soluto en el agua es directamente proporcional a la masa del soluto y inversamente proporcional al volumen del agua.

La presión osmótica es directamente proporcional a la concentración del soluto en el agua.

La presión hidrostática es directamente proporcional a la altura del líquido.

$$P = \rho g h$$

Y la presión de difusión es:

1.1. Importancia de la presente investigación

Entre las tareas que se deben afrontar para el manejo y protección de la calidad de los recursos hidráulicos se pueden mencionar: (a) evaluación del impacto ambiental ocasionado por patrones históricos de disposición de contaminantes; (b) estudio de las consecuencias a corto plazo de un vertido catastrófico de contaminantes; (c) desarrollo de soluciones para la remediación a la degradación de la calidad del agua. Para realizar estas tareas, es necesario conocer la forma en que los contaminantes son transportados por las corrientes de agua.

En ausencia de inyecciones y / o extracciones, el transporte de contaminantes pasivos (*i. e.* que no experimentan reacciones) en cuerpos de agua superficiales puede representarse mediante

$$(1.1) \diamond \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right),$$

que se conoce como ecuación de advección - difusión (EAD), y en la cual:

c es la concentración del contaminante en estudio.

t es el tiempo.

u , v , w son las componentes de la velocidad sobre los ejes coordenados x , y , z , respectivamente.

D_x , D_y , D_z son coeficientes de dispersión sobre los ejes x , y , z , respectivamente.

La ecuación (1.1) se encuentra sujeta a las condiciones iniciales

$$(1.2) \diamond c(x, y, z, 0), \quad x, y, z \in \mathbb{R};$$

y forzada por las condiciones de frontera

$$(1.3) \diamond c(x, y, z, t), \quad x, y, z \in \text{a la superficie de frontera.}$$

La búsqueda de una técnica eficiente para resolver numéricamente la EAD es un área de investigación muy activa. El gran interés por la solución numérica de esta ecuación, obedece a que muchos problemas en ciencia e ingeniería involucran el modelo matemático de la EAD. Pero la aplicación que motiva la presente investigación, es la simulación del transporte de frentes de contaminantes en cuerpos de agua superficiales.

Baptista [1987] resume la principal dificultad en la solución numérica de la EAD como consecuencia del hecho de que, mientras la advección y la difusión son procesos simultáneos, éstos desarrollan el transporte de masa muy diferentemente. En el caso de la advección el transporte de masa tiene lugar en la dirección del flujo, mientras que el transporte difusivo se da en la dirección contraria al gradiente. Este comportamiento físico contrastante se traduce en propiedades matemáticas diferentes, las cuales se pueden identificar caracterizando la EAD por los números adimensionales de Peclet

$$(1.4) \diamond Pe_x = \frac{|u|\Delta x}{D_x}, \quad Pe_y = \frac{|v|\Delta y}{D_y} \quad \text{y} \quad Pe_z = \frac{|w|\Delta z}{D_z},$$

donde Δx , Δy y Δz son las separaciones de la malla computacional en las direcciones x , y y z ; respectivamente. Cuando Pe es pequeño, la difusión domina, y la EAD es de tipo parabólico, mientras que cuando Pe es grande, la advección domina, y el tipo de la ecuación cambia a hiperbólico [Neuman, 1981]. A su vez, las diferentes propiedades matemáticas se reflejan en distinto tratamiento numérico. Si el flujo es altamente difusivo, la distribución de la concentración tiende a ser suave. Por esta razón, la componente difusiva de la EAD es apropiada para resolverse con cualquier técnica numérica tradicional, especialmente por medio de diferencias centrales [Glass y Rody, 1982]. En cambio, cuando el proceso advectivo domina y, sobre todo, cuando el contaminante de interés presenta un frente (gradiente pronunciado en su concentración), la mayoría de los procedimientos numéricos arrojan resultados plagados de errores numéricos como dispersión y / o difusión.

Una complicación que puede surgir durante la simulación numérica del transporte en condiciones de flujo altamente advectivo, es que sin importar que tan suaves sean las condiciones iniciales, su solución puede desarrollar discontinuidades que no satisfacen la EAD debido a que la derivada no está definida en las discontinuidades.

Como consecuencia de las mencionadas complicaciones matemáticas y numéricas, la simulación del transporte de frentes en campos de flujo dominados por la advección es uno de los problemas más desafiantes en la dinámica de fluidos computacional. La presente tesis muestra el desarrollo de un algoritmo numérico para simular el transporte de discontinuidades (representación numérica de los frentes) en procesos dominados por la advección. En particular, el modelo se concibe como una técnica aplicable a la simulación del transporte de frentes de contaminantes en cuerpos de agua superficiales.

1.2. Revisión de métodos numéricos para la solución de la EAD

Los métodos deterministas resuelven la EAD transformándola en un sistema de ecuaciones algebraicas. Usualmente, esta transformación se efectúa usando el método de diferencias finitas (MDF), o bien el método de elementos finitos (MEF). La mayoría de los esquemas numéricos desarrollados en las últimas cuatro décadas mediante estas técnicas, pueden clasificarse en tres categorías: eulerianos, lagrangianos y euleriano - lagrangianos.

Los métodos eulerianos de diferencias finitas resuelven la EAD en los nodos de una malla computacional fija, y se han usado desde las postrimerías de los 1950s. Inicialmente se usaban esquemas centrados para aproximar tanto los términos de advección como los de difusión, obteniéndose buenos resultados en la descripción de procesos predominantemente difusivos, aunque en problemas dominados por la advección se observó la aparición de dispersión numérica (oscilaciones). La literatura reporta que para evitar las oscilaciones de origen numérico, se diseñó el esquema veleta (*upwind*) de primer orden [Forsythe y Wasow, 1960; Lilly, 1965], el cual determina el sentido de la diferenciación espacial de acuerdo al

sentido del flujo. Esta adaptabilidad, es apropiada para el diseño de esquemas orientados al transporte de frentes [Van Leer, 1977a]. Sin embargo, el esquema veleta de primer orden introduce difusión numérica que disipa la solución. Un desarrollo natural para eliminar la disipación de este esquema numérico, fue el diseño de esquemas veleta de segundo orden. Esta mejora redujo la disipación pero introdujo dispersión en la vecindad del frente. En virtud de la gran aceptación de esta estrategia de reducir los errores numéricos mediante un incremento del orden de las aproximaciones, se ha extendido el uso de esquemas veleta de orden superior [Li, 1997]. Entre las alternativas de alto orden, destaca el esquema esencialmente no oscilatorio (ENO), desarrollado por Harten *et al.* [1987], el cual resuelve leyes de conservación no lineales con soluciones discontinuas. Para lograr una precisión de alto orden en regiones en que la solución tiene una pendiente pronunciada, el ENO hace interpolaciones sobre esquemas numéricos (*stencils*) localmente adaptables. Otra opción que se ha empleado para mejorar la precisión, es el refinamiento de malla y la reducción del paso de tiempo, pero estas medidas al igual que los esquemas de alto orden, incrementan el esfuerzo computacional [Healy y Russell, 1993].

En lo referente a los métodos eulerianos en elementos finitos, se presenta el mismo problema. En los albores de los 1970s, el esquema Galerkin se usó para resolver la EAD usando la misma función para interpolación y para ponderación. Pero este enfoque es equivalente al uso de diferencias centrales en un método de diferencias finitas, y por consiguiente está plagado de dispersión cuando la advección es importante [Holly y Useglio, 1984]. Para considerar la dirección del flujo, Christie *et al.* [1976] introdujeron una versión veleta del método del elemento finito (esquema Petrov-Galerkin), el cual evita exitosamente la dispersión. En este método, la función de ponderación (*weighting function*) incrementa el peso relativo de la información de aguas arriba (*upstream*). Sin embargo, Baptista [1987] comenta las siguientes limitaciones de este esquema: *a*) introducción de difusión numérica (estrecha similitud con el esquema veleta en diferencias finitas); *b*) mayor esfuerzo computacional requerido para generar las funciones de ponderación; *c*) dificultad en el manejo de elementos que no son cuadrilaterales. Por otra parte, existe incertidumbre en la elección de la función de ponderación (*weight function*), ya que tiene que ser definida arbitrariamente por el analista [Celia *et al.*, 1989].

Por otro lado, los métodos lagrangianos tratan el transporte de masa mediante partículas que se mueven a lo largo de las líneas características. Esto se logra resolviendo la ecuación

$$(1.5) \diamond \frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right),$$

que es la forma lagrangiana de la EAD [Leith, 1965].

En el enfoque lagrangiano, la dispersión numérica desaparece como consecuencia de la ausencia de términos advectivos en la ecuación (1.5). Esta simplificación le confiere efectividad en el manejo de problemas de transporte dominados por la advección. Sin embargo, los métodos lagrangianos, involucran la deformación continua de coordenadas, o mallas siguiendo globalmente el movimiento del fluido. Esto implica que para simulaciones prolongadas, habrá una deformación excesiva de la malla, lo cual puede complicar enormemente la simulación [Neuman, 1981]. Según Healy y Russell [1993], los métodos lagrangianos también tienen las siguientes limitaciones: (a) Imposibilidad para tratar rigurosamente los flujos en la frontera cuando las características las interceptan, lo cual se refleja en su inhabilidad para asegurar la conservación de masa, (b) La introducción de dispersión numérica para algunos métodos, debido a interpolaciones o integraciones de pequeño orden.

Existe ahora una marcada tendencia a combinar la simplicidad del uso de mallas fijas con el poder de cálculo del enfoque lagrangiano. Esto se logra aplicando algún método lagrangiano para resolver la parte advectiva de la EAD, y usando algún método euleriano para abordar la componente difusiva de la ecuación de advección-difusión. Un típico método euleriano-lagrangiano es el método de características (MOC) desarrollado originalmente por Garder *et al.* [1964]. Este método se implementa resolviendo el término de advección mediante el sembrado de un conjunto de partículas móviles que son rastreadas. Para simular

el transporte de masa, a cada una de estas partículas se le asigna una concentración y un volumen fijo. A pesar de que el MOC es virtualmente libre de dispersión numérica, no es capaz de conservar la masa, y requiere una gran cantidad de recursos computacionales, lo cual se vuelve más severo en simulaciones tridimensionales, haciendo al método impráctico para muchas aplicaciones de campo [Zheng, 1993]. Una alternativa que requiere menos memoria de computadora y que generalmente es más eficiente, es el método modificado de características (MMOC) presentado por Douglas y Russell [1982], el cual rastrea directamente los nodos de una malla fija, eliminando la necesidad de rastrear una gran cantidad de partículas móviles. El MMOC tiene la desventaja de que introduce dispersión numérica en presencia de gradientes pronunciados de concentración, y no es capaz de conservar la masa del contaminante. Por su parte, Mao [1995] presentó una técnica de rastreo de las discontinuidades en problemas unidimensionales. El rasgo distintivo de su técnica, es que para el rastreo usa las leyes de conservación en vez de la condición de salto de Rankine - Hugoniot. Es decir, retoma las ideas de los métodos de captura de discontinuidades para realizar el rastreo de las mismas. A su vez, LeVeque y Shyue [1996] presentaron un método totalmente conservativo de alta resolución para el rastreo de frentes en sistemas no lineales de leyes de conservación en dos dimensiones espaciales. Este método mueve las discontinuidades resolviendo problemas de Riemann normales a cada segmento del frente, y aplicando luego un método de volumen finito para actualizar los valores de la solución en las celdas.

Como consecuencia de que la solución de los términos difusivos de la EAD no representa dificultades numéricas, el principal interés de los modeladores numéricos se ha orientado a la solución de los términos advectivos (ecuación de advección), por lo que se han desarrollado una gran cantidad de esquemas para resolver esta componente del transporte. Pero como señala Rood [1987], muchos de ellos son reformulaciones de esquemas previamente existentes. Con el fin de mostrar las ideas generales que se han manejado para resolver la ecuación de advección, la siguiente revisión bibliográfica reporta métodos representativos que reflejan el desarrollo de los métodos numéricos que abordan el transporte de frentes.

La monotonicidad de un esquema en diferencias finitas implica que no genera nuevos máximos y / o mínimos [Godunov, 1959]. El cumplimiento de esta propiedad garantiza que si las condiciones iniciales son definidas positivas (como es el caso de las concentraciones de contaminante), entonces la solución calculada será también positiva. El reconocimiento de esta propiedad, permitió el desarrollo de esquemas carentes de oscilaciones artificiales. Así, Godunov [1959] publicó un método en el cual el valor inicial de c en cada celda computacional se considera uniforme. En este método, los estados uniformes se obtienen al promediar la masa en la celda, y las discontinuidades resultantes son avanzadas en el tiempo mediante la solución de problemas de Riemann.

Aprovechando que se conoce de antemano la difusión espuria de un determinado esquema numérico, se desarrollaron métodos que introducen “antidifusión” artificial para reducir la disipación de la solución. Así, Boris y Book [1973] desarrollaron el método llamado transporte de flujo corregido (FCT), el cual es una nueva versión del esquema veleta. En este método, la positividad se asegura corrigiendo un flujo de primer orden por medio de la adición de una cantidad limitada de una corrección de segundo orden. Desafortunadamente, la aplicación de este método requiere un excesivo tiempo de cómputo, especialmente en problemas multidimensionales [Smolarkiewicz, 1983].

Representando la distribución de las variables en una celda mediante segmentos lineales por tramos, y permitiendo discontinuidades entre los segmentos, Van Leer [1974, 1977b, 1979] desarrolló en una dimensión el esquema monótono en diferencias veleta - centradas hacia atrás para leyes de conservación (MUSCL), el cual aplica difusión artificial y generaliza el método de Godunov a un segundo orden.

Harten [1983b] actualizó el FCT en una versión que introdujo el concepto de variación total decreciente (*total variation diminishing*), el cual reemplaza los requisitos de preservación de monotonicidad presentes en el FCT. Holly y Usseglio [1984] encontraron que cuando se aplica el esquema FCT a problemas bidimensionales se eliminan la dispersión, pero al hacer esto, se introduce difusión numérica.

Smolarkiewicz [1983, 1984] desarrolló el algoritmo multidimensional de transporte advectivo definido positivo (MPDATA), el cual aplica iterativamente el esquema veleta de primer orden a las ecuaciones modificadas determinadas por el error de truncamiento de la iteración previa.

En tanto que Colella y Woodward [1984] presentaron el método parabólico por partes (PPM) unidimensional. En este método, simplificaron y extendieron el método MUSCL a funciones cuadráticas por tramos, incrementando la precisión espacial a un tercer orden.

El método de Godunov es idóneo para el transporte de frentes porque involucra problemas de Riemann. Su principal inconveniente es que el proceso de promediación ocasiona disipación [Harten, 1983a]. Con el fin de evitar esta desventaja, Glimm [1965] retomó los conceptos de Godunov, e introdujo un método unidimensional que reemplaza la promediación por un muestreo aleatorio. Para resolver numéricamente el método de Glimm, Chorin [1976, 1977] implementó el RCM (*Random Choice Method*), el cual, a diferencia del método de Godunov, preserva la integridad cada onda individualmente tratada, aunque su posición oscila en torno a los valores correctos.

No obstante sus bondades, los métodos mencionados en esta revisión bibliográfica tienen una o más de las siguientes desventajas: difusión numérica, dispersión numérica, incapacidad para conservar la masa, excesivo esfuerzo computacional y/o desarrollo limitado a problemas 1D o 2D. Sin embargo, de entre los métodos abordados, destaca el RCM por conservar la resolución de las discontinuidades. Esta cualidad es deseable para la simulación del transporte de frentes, por lo que con el fin de identificar mejor el potencial del RCM, en la sección 1.3 se documenta más detalladamente el desarrollo de este método.

1.3. Evolución del RCM

La justificación teórica del RCM fue presentada por Glimm [1965], quien probó la existencia de soluciones débiles (*weak*) de sistemas de leyes de conservación estrictamente hiperbólicos en una dimensión espacial. Asimismo, Glimm [1965] demostró que las soluciones de las ecuaciones son límites de aproximaciones en diferencias que involucran una elección aleatoria. Este planteamiento dio origen a una línea de investigación que se desarrolló paralelamente a las técnicas mencionadas en la sección 1.2.

Para realizar la elección “aleatoria”, Lax [1969] propuso el uso de la secuencia de Richtmyer - Ostrowski, definida por $\xi_x|^n = \text{MOD}(n\sqrt{r}, 1)$, donde r es un entero que no es el cuadrado de otro entero, n es el paso de tiempo particular y, $\text{MOD}(\cdot, \cdot)$ denota la función que da como resultado el residuo de la división entera del primer parámetro entre el segundo.

Al analizar la teoría del método de Glimm, Smoller [1969] probó la existencia de una solución débil (*weak*), toda vez que ésta es uniforme excepto por un sencillo salto arbitrario (el problema de Riemann). Las soluciones débiles no están determinadas únicamente por sus condiciones iniciales. Se requiere un criterio de admisibilidad para seleccionar la solución física. En ese sentido, Lax [1971] mostró que la solución satisface las desigualdades de entropía siempre que la ecuación admita una ley de conservación adicional. Kuznecov y Tupciev [1975] mostraron que el teorema del método de Glimm permanece válido sin la suposición de estricta no linealidad del sistema.

El algoritmo numérico del método de Glimm, fue propuesto por Chorin [1976, 1977], quien implementó el RCM como una técnica de captura de choques (*shock capturing*). Así, propuso un procedimiento para introducir las condiciones de frontera y, sugirió extender la aplicabilidad del RCM a situaciones multidimensionales mediante el uso de separación dimensional (*dimensional splitting*) de operadores.

Una tarea crucial en el RCM es la generación de una secuencia de números “aleatorios” para usarse en la etapa de muestreo. En el contexto del RCM, históricamente se han utilizado funciones matemáticas, las cuales producen secuencias idénticas cada vez que se repite una simulación. Por tal motivo, esas secuencias son deterministas [Bendat y Piersol, 1971]. Sin embargo, retomando los conceptos de Yakowitz [1977] y Niederreiter [1992], a las secuencias con apariencia de independencia y uniformidad que se obtienen mediante algoritmos deterministas, en esta tesis se les considerará como pseudo aleatorias.

En las primeras implementaciones del RCM, la operación de muestreo se realizaba generando un número pseudo aleatorio para cada nodo en cada paso de tiempo. De esta manera, existía la probabilidad de que un determinado estado de c en el tiempo n , se propagara hacia ambos lados generando un estado espurio de c en el tiempo $n+1$. Para remediar esa deficiencia, [Chorin, 1976] introdujo la idea de tomar un solo número pseudo aleatorio (ξ_x) por paso de tiempo, lo cual mejoró la precisión y la eficiencia computacional del método. Para reducir la varianza de la secuencia pseudo aleatoria, Chorin [1976] propuso un muestreo estratificado. Según esta estrategia, el espacio muestral se divide en m_2 subintervalos, y luego ξ_x^1 se extrae del primer subintervalo, ξ_x^2 del segundo subintervalo, ..., $\xi_x^{m_2+1}$ del primer subintervalo, $\xi_x^{m_2+2}$ del segundo subintervalo, En vez de tomar los subintervalos en la sucesión natural, el ordenamiento de los intervalos (g^1, g^2, g^3, \dots) , es determinado mediante la fórmula $g^{n+1} = \text{MOD}(m_1 + g^n, m_2)$, donde: m_1, m_2 son números no divisibles entre sí, tales que $m_1 < m_2$; y g^1 es un entero seleccionado de tal forma que $g^1 < m_2$.

Con este procedimiento, cada m_2 pasos de tiempo se muestrean todos los subintervalos. En su trabajo, Chorin [1976] menciona que m_2 no debe ser muy grande porque se introduciría un error sistemático en los cálculos. En sus experimentos numéricos, este autor adoptó $m_1 = 3$ y $m_2 = 7$. La secuencia $\{\xi_x\}$ propuesta por Chorin [1976] se obtiene a partir

de una secuencia de números pseudo aleatorios $\{\psi\}$, equidistribuidos sobre el intervalo

$[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]$ y modificada por la ecuación $\xi_x|^{n+1} = \left(\frac{(g|^{n+1} + \psi|^{n+1} + \frac{1}{2})}{m_2} \right) - \frac{1}{2}$, donde $n = 1, 2, 3, \dots$.

En los artículos de Chorin [1976, 1977] no se especifica cuál fue el generador de números que se utilizó para obtener $\{\psi\}$, inclusive no se especifica cuál valor de $g|$ se utilizó.

Para incorporar lo más pronto posible las condiciones de frontera, Chorin [1977] propuso adaptar la estrategia de muestreo estratificado para que en cada pareja $\xi_x|^{n+1}, \xi_x|^{n+2}$ (siendo n un número non) un valor de ξ_x caiga atrás y el otro caiga adelante del centro del espacio muestral unitario.

Sod [1977] aplicó el RCM en geometrías no rectangulares al resolver la ecuación de dinámica de gases para flujo simétrico cilíndrico o esférico. Para resolver el problema de Riemann con términos no homogéneos, Sod [1977] implementó una técnica de separación de operadores consistente en un procedimiento de dos pasos. En el primer paso removió el término no homogéneo, resultando un sistema en forma conservativa que se resuelve mediante el RCM. En el segundo paso, usando como condiciones iniciales la solución obtenida en el primer paso, resolvió deterministamente un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

El RCM parece tener rasgos estocásticos, pues aparentemente depende de una secuencia aleatoria. Sin embargo, Liu [1977] probó que la demostración de Glimm realmente no depende de una secuencia aleatoria, y que converge para cualquier secuencia equidistribuida (no necesariamente aleatoria). Estos resultados de Liu, le confieren al RCM un carácter determinista.

Otra contribución de Chorin [1978] fue la extensión del RCM para su aplicación a situaciones en que las fronteras del dominio computacional cambian con el tiempo.

Al profundizar sus investigaciones, Sod [1979] concluyó que en vez de resolver deterministamente un sistema de ecuaciones diferenciales, el segundo paso de la técnica de separación de operadores que había propuesto en 1977, debía resolverse con "aleatoriedad" para obtener una solución en fase con la obtenida en el primer paso.

Respecto a la precisión con que se resuelven los problemas de Riemann, Liu [1979] sugirió que no hay necesidad de resolver exactamente las discontinuidades.

Para corregir un error en la posición de las discontinuidades debido al muestreo en el RCM, Glimm y Marchesin [1979] introdujeron el concepto de rastreo, insertando un punto de malla en la posición calculada de cada discontinuidad a ser rastreada. El rastreo de las ondas se simplificó sustancialmente después de que Glimm *et al.* [1980] eliminaron del RCM la etapa en que la malla computacional se desplazaba una distancia $\Delta x/2$ en cada paso de tiempo.

Al hacer un análisis comparativo de los errores en la posición de las ondas, obtenidos al aplicar al RCM los generadores $\xi_x |^n = \text{MOD}(n\sqrt{2}, 1)$ y Van der Corput $(\overline{2}, 1)$, Glimm *et al.* [1980] no identificaron que alguno de ellos fuera más preciso que el otro para todas las velocidades analizadas. Un año más tarde, Glimm *et al.* [1981b] introdujeron la secuencia equidistribuida $\xi_x |^n = \text{MOD}((n+k)\sqrt{2}, 1)$, donde k es una constante. Al aplicar el RCM al cálculo del avance de la interfase agua - petróleo en un medio poroso, Glimm *et al.* [1981b] simularon la heterogeneidad del medio, aplicando el generador de números con un distinto valor de k en cada columna (i constante) de la malla computacional. Es decir, supusieron $k = k(i)$.

Por su parte, Marshall y Menéndez, [1981b] extendieron el RCM para incluir formas no conservativas de las ecuaciones de aguas someras, *i.e.*, sistemas no homogéneos tales como los que resultan de la consideración de efectos de fricción o aquellos que surgen en flujos radiales. Para ello, aproximaron localmente la solución resolviendo problemas de Riemann para el sistema no homogéneo, integrando las curvas características, y a continuación muestreando esa solución.

No obstante las bondades del RCM en problemas 1D, en la solución práctica de problemas multidimensionales, Osher y Salomón [1982] encontraron que si un operador multidimensional es separado en una secuencia de operadores 1D, surgen problemas para manejar el avance oblicuo de una discontinuidad mediante el RCM. En sus investigaciones, Glimm *et al.* [1981b] también notaron que en flujo bidimensional el RCM tiende a degradar la solución de frentes que se propagan oblicuamente a la malla computacional.

En relación al problema de Riemann, Glimm *et al.* [1981a] advirtieron que el RCM no requiere una solución exacta de este problema, porque de todas formas en el proceso de muestreo se pierde información. A su vez, Harten y Lax [1981] propusieron reemplazar la solución exacta del problema de Riemann por una aproximación apropiada en diferencias finitas, la cual sufre la desventaja teórica de no sustentarse en condiciones de entropía naturales [Roe, 1981]. Por su parte, Colella [1982] justificó el uso de soluciones aproximadas porque se pierde información en el muestreo.

Posteriormente, al aplicar sin estratificación el generador de Van der Corput $\overline{(2,1)}$, Colella [1982] reporta resultados más precisos que el muestreo estratificado de Chorin [1976]; inclusive, Colella [1982] sugirió una expansión del uso del generador de Van der Corput a problemas d - dimensionales mediante la descomposición del problema original en d problemas unidimensionales, y generando vectores d - dimensionales cuyas componentes sean variables equidistribuidas sobre intervalos unitarios (centrados en 0) mutuamente perpendiculares. Para problemas 1D, Colella [1982] concluyó que la secuencia Van der

Corput $(\overline{2,1})$ arroja resultados que calificó como óptimos, mientras que en situaciones 2D, concluyó que la secuencia Van der Corput $(\overline{3,2})$ junto con la secuencia Van der Corput $(\overline{5,3})$, generan una distribución supuestamente óptima en el espacio muestral $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]^2$.

Al resolver ecuaciones de dinámica de gases mediante separación dimensional de operadores, Colella [1982] encontró errores inaceptables en la posición de las discontinuidades. Esto lo llevó a desarrollar un método híbrido que usa el RCM en las partes continuas del flujo, y el método de Godunov en lugares donde se generan discontinuidades en la presión. Por su parte, cuando Olivier y Grönig [1986] simularon el problema 2D de una onda de choque que se difracta en una esquina de 90° , observaron errores similares.

La técnica de rastreo de las ondas también fue abordada por Plohr [1987], quien rastreó las fronteras materiales de una placa en movimiento refinando localmente la malla con una relación 3:1.

Científicos de diversos campos de investigación han reportado aplicaciones exitosas del RCM. Este método fue adaptado primeramente a flujo en medio poroso por Concus y Proskurowski [1979], y posteriormente por Glimm y Marchesin. [1979]. Chorin [1980] usó el RCM para aproximar el movimiento del frente de una flama delgada que es adveccionada por un fluido. En tanto que Marshall y Menéndez [1981a] emplearon el RCM en el problema de falla súbita de una presa (*dam-break problem*). El RCM fue aplicado también a la solución de un sistema hiperbólico homogéneo unidimensional en la teoría de aguas someras [Marshall y Méndez, 1981]. Glimm *et al.* [1981a y 1981b] usaron el RCM para calcular la interface agua - aceite en un medio poroso bidimensional. Otra aplicación del RCM fue el cálculo de la perturbación producida por la explosión subacuática de una esfera de gas [Flores y Holt, 1981; Li y Holt, 1981]. Posteriormente, el RCM fue aplicado por Marshall y Plohr [1984] a flujo supersónico, permanente, bidimensional plano y tridimensional axisimétrico de un gas. Sin embargo, en su trabajo hicieron la suposición de axisimetría porque la implementación del RCM usada es aplicable sólo a la ecuación de transporte con dos variables independientes.

Por su parte, Charrier y Tessieras [1986] aplicaron el RCM acoplado al método de Lax - Wendroff para modelar la explosión subacuática de una esfera de gas. Recientemente, el RCM fue aplicado a flujo supersónico e hipersónico 2D y 3D permanente y simétrico [Loh y Hui, 1993; Loh *et al.*, 1999], y fue usado en polución atmosférica por Jazcilevich y Fuentes [1994, 1999], así como al transporte de masa en estuarios por Jazcilevich *et al.* [1995].

Según los investigadores que han aplicado el RCM, este método es capaz de mantener la resolución de las discontinuidades individuales. En situaciones 1D, se le atribuyen al RCM las siguientes ventajas con respecto a otros métodos:

- i) Como consecuencia de que la solución avanza o permanece estacionaria, pero nunca adquiere valores intermedios, las discontinuidades son calculadas sin difusión numérica y sin dispersión.
- ii) Debido a que la solución de los problemas de Riemann, y el muestreo de su solución, se realizan de la misma manera tanto en los puntos del interior del dominio computacional como en los puntos de la frontera, las condiciones de frontera son fácilmente manejables.

Estas cualidades que se le reconocen al RCM unidimensional, lo hacen apropiado para simular el transporte de frentes de contaminantes en procesos dominados por la advección. Sin embargo, el precio de mantener bien definida la resolución de las discontinuidades, es que su localización en un tiempo determinado está sujeta a errores "aleatorios" [Glimm *et al.*, 1980], requiriéndose suficientes pasos de tiempo para que el efecto acumulativo del muestreo arroje el desplazamiento correcto [Colella, 1982].

Las aplicaciones multidimensionales del RCM han sido en flujo: 2D con separación dimensional de operadores, 2D no transitorio o 3D permanente simétrico. Es decir, el esquema del RCM usado es esencialmente 1D, excepto la aplicación de Loh [1999] que es esencialmente bidimensional, aunque las condiciones de flujo son relativamente sencillas.

Otra desventaja del RCM, es que no se comprende cabalmente desde un punto de vista numérico, porque no es fácil ubicarlo en un marco teórico apropiado [Glimm *et al.*, 1980]. Por ejemplo, aunque las soluciones son calculadas sobre una malla computacional, el RCM no es considerado un método en diferencias finitas [Colella, 1982]. Esta falta de comprensión del RCM ha dificultado su desarrollo, a tal grado que permanece prácticamente estancado desde hace varios años.

1.4. Hipótesis, objetivos y metodología de la investigación

Mientras que las técnicas convencionales que se usan para resolver la EAD generan disipación y dispersión numérica, sobre todo cuando un frente es adveccionado, el RCM es capaz de conservar la resolución de discontinuidades sin producir este tipo de errores. No obstante ese comportamiento satisfactorio del RCM en problemas unidimensionales, al aplicarse a situaciones multidimensionales, se acentúan las dificultades para ubicar con precisión las discontinuidades. Esta complicación deteriora la calidad de la solución.

Con el estímulo de las perspectivas promisorias del RCM, y con el reto de sus limitaciones, la meta que se persigue en la presente tesis es, proponer un modelo numérico en diferencias finitas, orientado a resolver eficientemente el transporte advectivo de frentes sin desacoplamiento espacial de operadores. Es preciso resaltar que el principal interés en esta investigación, es implementar el RCM para funcionar bien bajo condiciones dominadas por la advección, y en consecuencia se pondrá poca atención a los términos difusivos, los cuales no tienen problemas numéricos serios.

Dos factores que podrían incidir en el pobre comportamiento multidimensional del RCM son: una definición inapropiada de la secuencia de vectores, y el desacoplamiento espacial de operadores. A partir de la identificación de estas posibles causas, a continuación se comentan las hipótesis a probar en esta tesis.

Respecto al primer factor, a pesar de que se sabe que en problemas unidimensionales, la equidistribución de la secuencia de vectores es un requisito para que la solución avance a la velocidad correcta, esta conclusión no puede extenderse automáticamente a problemas multidimensionales, por lo que en la presente investigación se busca probar que este requisito también es válido para problemas tridimensionales. Adicionalmente, para atender la necesidad de vectores 3D para el esquema tridimensional, se espera que al adoptar generadores de números equidistribuidos, y predefinir dos estratos de muestreo en cada dirección coordinada, se obtenga una secuencia también equidistribuida, que a su vez implemente la alternancia de signos establecida por Chorin [1977].

Con relación al segundo factor, no obstante que el desarrollo matemático original de Glimm [1965] se refiere a un método en diferencias, la implementación numérica actualmente en uso (el RCM) no se considera un método convencional en diferencias finitas. Esta diferencia de planteamientos hace suponer que bajo una reconceptualización apropiada, sería posible desarrollar una implementación tridimensional (sin separación espacial de operadores) del RCM en diferencias finitas, y con ello evitar la falsa difusión mencionada por Patel *et al.* [1985]. En particular, dado el carácter hiperbólico de la componente advectiva del transporte, se buscaría una implementación del tipo veleta (*upwind*) de primer orden. De lograrse este cometido, la estabilidad y convergencia del RCM podrían determinarse mediante los procedimientos acostumbrados en los métodos de diferencias finitas. Por otra parte, la implementación tridimensional del RCM complicaría la solución de los problemas de Riemann asociados a cada celda de la malla computacional. Al respecto, por simplicidad se supondría una solución lineal.

La presente investigación tiene como objetivo principal la implementación eficiente del RCM, en un modelo orientado a simular el transporte tridimensional de frentes de contaminantes conservativos, en cuerpos de agua superficiales dominados por procesos advectivos. Para ello, se han establecido los siguientes objetivos específicos:

- i) Determinar un procedimiento de generación de vectores, adecuado al RCM 3D.
- ii) Plantear una alternativa eficiente de solución del problema de Riemann tridimensional.
- iii) Diseñar un esquema en diferencias finitas para el RCM, y determinar su estabilidad y convergencia.
- iv) Evaluar la capacidad del algoritmo resultante para simular el transporte de frentes.

Después de que en este capítulo 1 se situó al lector en el tema de estudio, y una vez hecho el planteamiento de la investigación, en el capítulo 2 se plantea una versión 3D de la simulación numérica mediante el RCM. Ahí se presenta una versión local simplificada de la EAD, así como sus condiciones iniciales y de frontera. Para facilitar la comprensión de detalles relativos al RCM, se establece la terminología, la notación y conceptos básicos de este método. Asimismo, se indica el procesamiento que se debe dar a las condiciones iniciales para transformarlos en una función uniforme por partes. Además, se muestra el procedimiento de muestreo de la solución de los problemas de Riemann, así como las restricciones que se deben imponer a los números de Courant para evitar interacciones entre ondas adyacentes.

El núcleo de esta tesis lo constituyen los capítulos 3, 4 y 5, ya que en ellos se desarrolla la metodología adoptada.

Considerando la forma en que el RCM avanza las ondas, en el capítulo 3 se hace un planteamiento alternativo del campo de velocidades. Luego, acudiendo a un análisis probabilístico, se demuestra una condición necesaria para que las ondas avancen a la velocidad "correcta". Posteriormente, se establecen cualidades que debe poseer un generador de vectores a emplearse en la etapa de muestreo del RCM, y se propone un nuevo procedimiento de generación. Con el fin de validar este procedimiento, las secuencias de vectores obtenidas con el generador propuesto, se comparan con las de los generadores que actualmente se consideran óptimos. Esta tarea se lleva a cabo mediante un análisis estadístico y se complementa con experimentos numéricos.

El capítulo 4 está dedicado al planteamiento de un esquema numérico para resolver localmente la EAD en tres dimensiones. Para ello, primeramente se propone una discretización de una versión local de la componente advectiva de la EAD. Adoptando un tratamiento vectorial de los desplazamientos y de las velocidades locales, se deduce el esquema numérico del RCM. Para permitir la inclusión de la componente difusiva del transporte, se propone un esquema euleriano – lagrangiano en el que los términos advectivos de la EAD local se resuelven con el RCM, y la parte difusiva se calcula mediante el tradicional esquema de diferencias centradas. El comportamiento numérico local del nuevo esquema se obtiene mediante análisis de consistencia, estabilidad y convergencia. La consistencia se investiga mediante expansiones en series de Taylor; la estabilidad se analiza mediante el método de Fourier; y para identificar la convergencia se recurre al teorema de equivalencia de Lax. De los resultados del análisis de consistencia se determina la difusión numérica, y del análisis de estabilidad se obtiene información acerca de la disipación y la dispersión numérica.

Con el fin de conferirle utilidad práctica al RCM, en el capítulo 5 se presenta un modelo de integración global de las soluciones locales. Para ello, se hacen hipótesis simplificadoras relativas al desplazamiento y rastreo de las ondas. Asimismo, se analizan estrategias de refinamiento real y virtual para obtener mayor precisión. Especial atención recibe la conservación de masa, para lo cual se efectúa un balance de la transferencia entre celdas adyacentes. Por último, el comportamiento del modelo se evalúa mediante experimentos numéricos 1D, 2D y 3D bajo condiciones de flujo permanente, transitorio, uniforme y no uniforme. La evaluación experimental se efectúa comparando una serie de parámetros representativos de los resultados numéricos del modelo propuesto y del esquema veleta (*upwind*) de primer orden, el cual fue tomado como referencia.

CAPÍTULO 2

PLANTEAMIENTO TRIDIMENSIONAL DEL RCM

Para el planteamiento del problema se define un sistema de coordenadas cartesianas (x, y, z) con el origen en el centro del cuerpo. El eje x apunta en la dirección de la fuerza aplicada, el eje y apunta en la dirección de la fuerza de reacción y el eje z apunta en la dirección de la fuerza de gravedad. El cuerpo se considera un sólido elástico homogéneo e isotrópico. Las ecuaciones de equilibrio en el estado de deformación son:

$$\sigma_{ij,j} + b_i = 0 \quad (2.1)$$

donde σ_{ij} y b_i son las componentes de la tensión y la fuerza de cuerpo, respectivamente.

La condición de adhéncia del cuerpo se define en el plano xy en el punto $(x, y, 0)$ de la frontera superior del cuerpo, mediante las siguientes relaciones de compatibilidad:

$$u = v = 0 \quad (2.2)$$

donde u y v son las componentes de la deformación en las direcciones x y y , respectivamente.

$$w = 0 \quad (2.3)$$

donde w es la componente de la deformación en la dirección z .

Aunque el RCM se ha aplicado a problemas multidimensionales, esto se ha hecho mediante separación de operadores en componentes unidimensionales [Glimm *et al.*, 1981a y 1981b; Colella, 1982; Olivier y Grönig, 1986; Loh y Hui, 1993], o bien en problemas idealizados con un campo de flujo que admite simplificaciones por consideraciones de simetría [Marshall y Plohr, 1984]. Por ese motivo, la literatura científica describe el RCM sólo para el caso unidimensional. Retomando las contribuciones que diversos autores han realizado, en este capítulo se plantea una versión tridimensional del RCM.

Considérese un espacio tridimensional con un sistema coordenado x, y, z , en el cual existe un contaminante cuya concentración está dada por $c(x, y, z, t)$, donde t es el tiempo. Para discretizar este sistema espacio - tiempo, por simplicidad se adoptará una malla computacional con una separación internodal uniforme de $\Delta x, \Delta y, \Delta z$, (para la distancia) y Δt (para el tiempo). Ahora, con el fin de obtener una expresión concisa, se denotará con subíndices la localización espacial y mediante superíndices la especificación temporal. Según esta nomenclatura, una variable dependiente (\cdot) definida en la malla puede representarse como

$$(2.1) \diamond \cdot(i \Delta x, j \Delta y, k \Delta z, n \Delta t) = \cdot_{i,j,k}^n,$$

donde i, j, k y n son números enteros positivos.

La componente advectiva del transporte de un contaminante (c) en el interior de un dominio 3D, se describe mediante los siguientes términos de la EAD:

$$(2.2) \diamond \frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} - w \frac{\partial c}{\partial z},$$

sometida a las condiciones iniciales

$$(2.3) \diamond c(x, y, z, 0), \quad -\infty < x, y, z < \infty;$$

y a las condiciones de frontera

(2.4) $\diamond c(x, y, z, t)$; donde x, y y z son puntos sobre la superficie de frontera.

El RCM involucra dos tipos de celda. Las celdas computacionales que están delimitadas por los nodos de la malla computacional; y las celdas riemannianas que tienen las mismas dimensiones de las celdas computacionales, pero están centradas en los nodos. Es decir, las celdas riemannianas tienen un desfase $\Delta x/2$, $\Delta y/2$ y $\Delta z/2$ con respecto a las celdas de la malla computacional (figura 2.1). Esto implica que la rejilla de la malla computacional pasa por el centro de las celdas riemannianas (figura 2.2).

El RCM requiere que sin importar la distribución espacial y temporal real de la concentración del contaminante, su valor al interior de cada celda riemanniana sea considerado como uniforme.

Adoptando la notación testada $\tilde{\tau}$ para indicar que una variable se define mediante un estado uniforme dentro de un intervalo, y que sólo varía mediante discontinuidades con respecto a los intervalos adyacentes, entonces la solución aproximada se denotará por \tilde{C} .

La representación de la distribución de valores del contaminante mediante una función uniforme por partes (\tilde{C}), se indicará como:

$$(2.5) \diamond \quad c(x, y, z, t) \approx \tilde{C}_{i,j,k}^n, \quad \begin{aligned} &(n) \Delta t \leq t \leq (n+1) \Delta t \\ &(i - \frac{1}{2}) \Delta x \leq x \leq (i + \frac{1}{2}) \Delta x \\ &(j - \frac{1}{2}) \Delta y \leq y \leq (j + \frac{1}{2}) \Delta y \\ &(k - \frac{1}{2}) \Delta z \leq z \leq (k + \frac{1}{2}) \Delta z. \end{aligned}$$

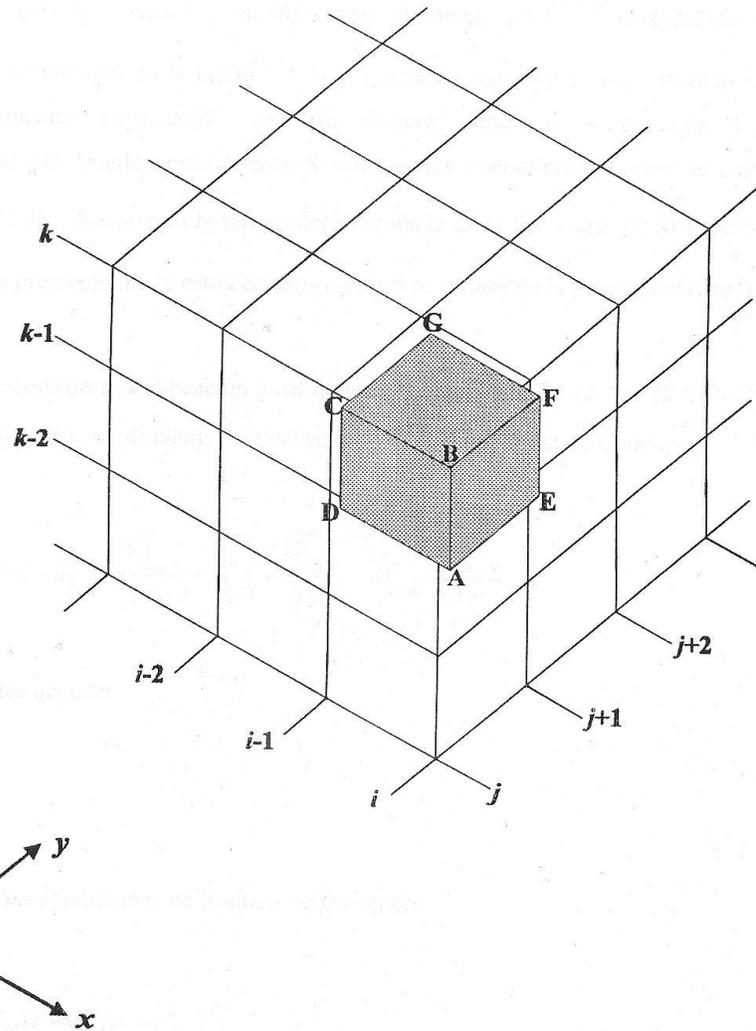


Figura 2.1. Celda riemanniana centrada en el nodo (i, j, k) .

La expresión (2.5) establece que no hay variación espacial de $\tilde{C}_{i,j,k}^n$ dentro de una determinada celda riemanniana y, en todo caso, el cambio de $\tilde{C}_{i,j,k}^n$, representado como una variación del sombreado en la figura 2.2, sólo puede darse mediante una discontinuidad entre celdas riemannianas adyacentes. De esta manera, dentro de cada celda de la malla computacional 3D, pueden existir hasta 8 subregiones con diferentes estados uniformes de $\tilde{C}_{i,j,k}^n$ (figura 2.3). Adoptando la terminología acuñada en la literatura, en lo sucesivo se hará referencia a la propagación de estos estados como si se tratase de la propagación de una onda.

Si se considera la aplicación local de las expresiones (2.2), (2.3) y (2.4) sobre la celda riemanniana (i, j, k) , el problema original se simplifica al problema de Cauchy:

$$(2.6) \diamond \frac{\partial \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\partial t} = -\tilde{u}_{i,j,k}^n \frac{\partial \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\partial x} - \tilde{v}_{i,j,k}^n \frac{\partial \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\partial y} - \tilde{w}_{i,j,k}^n \frac{\partial \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\partial z},$$

con condiciones iniciales

$$(2.7) \diamond \tilde{C}_{i,j,k}^0,$$

y forzado por las condiciones de frontera de Dirichlet

$$(2.8) \diamond \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n,$$

donde la función escalón se define como

$$(2.9) \diamond \text{esc}(\cdot) = \begin{cases} 1 & ; & \text{si } \cdot > 0 \\ 0 & ; & \text{si } \cdot = 0 \\ -1 & ; & \text{si } \cdot < 0. \end{cases}$$

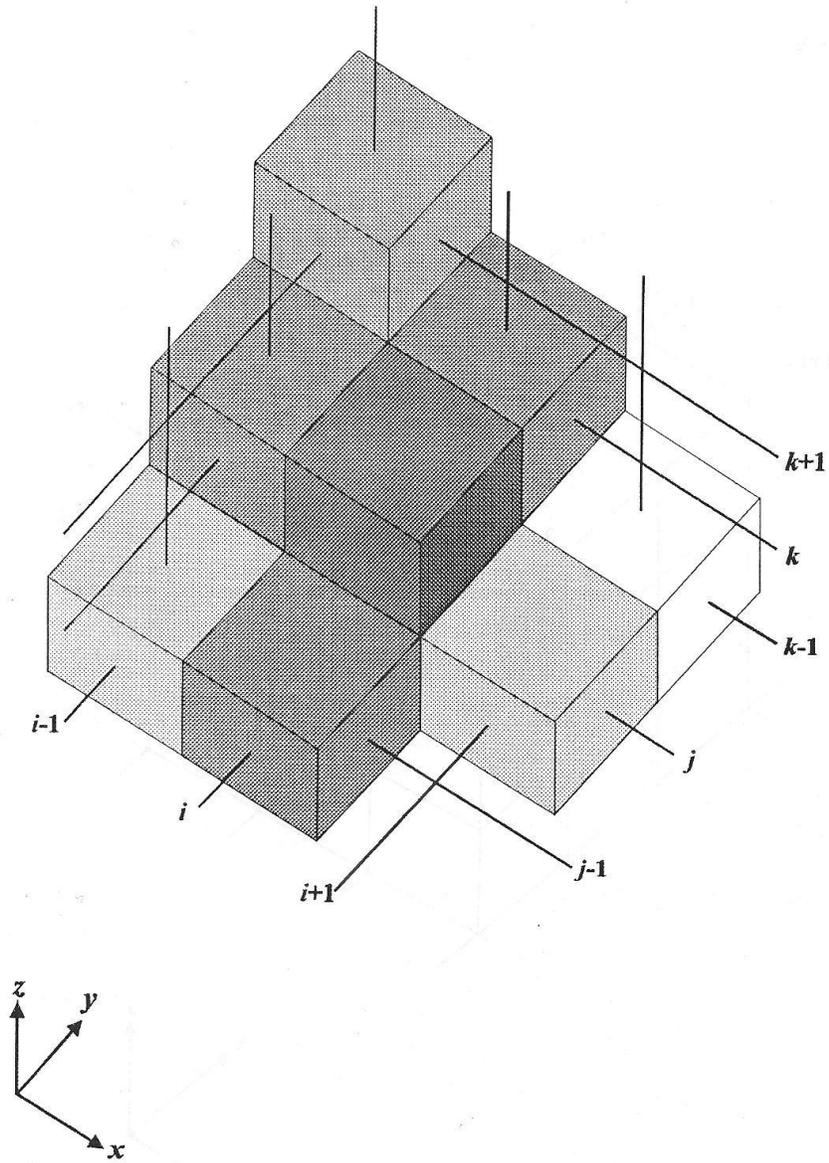


Figura 2.2. Aproximación de $c(x, y, z, t)$ mediante un conjunto de estados uniformes $\tilde{C}_{i,j,k}^n$.

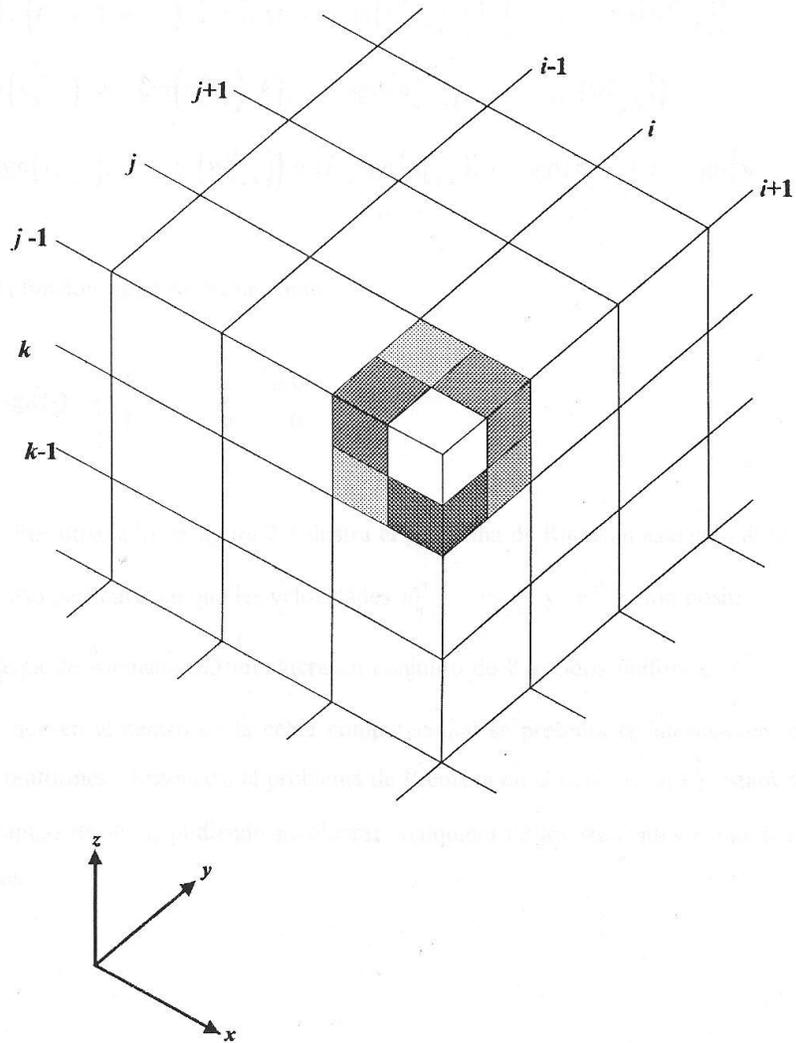


Figura 2.3. Subregiones con diferentes estados uniformes de \tilde{C} dentro de una celda computacional.

Las expresiones (2.6), (2.7) y (2.8) definen el problema de Riemann para la celda computacional delimitada por los nodos:

$$\begin{aligned} & (i, j, k), \left(i - \operatorname{sgn}(u_{i,j,k}^n), j, k \right), \left(i, j - \operatorname{sgn}(v_{i,j,k}^n), k \right), \left(i, j, k - \operatorname{sgn}(w_{i,j,k}^n) \right), \\ & \left(i - \operatorname{sgn}(u_{i,j,k}^n), j - \operatorname{sgn}(v_{i,j,k}^n), k \right), \left(i - \operatorname{sgn}(u_{i,j,k}^n), j, k - \operatorname{sgn}(w_{i,j,k}^n) \right), \\ & \left(i, j - \operatorname{sgn}(v_{i,j,k}^n), k - \operatorname{sgn}(w_{i,j,k}^n) \right) \text{ e } \left(i - \operatorname{sgn}(u_{i,j,k}^n), j - \operatorname{sgn}(v_{i,j,k}^n), k - \operatorname{sgn}(w_{i,j,k}^n) \right). \end{aligned}$$

Donde la función signo se define como

$$(2.10) \diamond \operatorname{sgn}(\cdot) = \begin{cases} 1 & ; \quad \text{si } \cdot \geq 0 \\ -1 & ; \quad \text{si } \cdot < 0. \end{cases}$$

Por otro lado, la figura 2.3 ilustra el problema de Riemann asociado al nodo (i, j, k) para el caso particular en que las velocidades $u_{i,j,k}^n$, $v_{i,j,k}^n$ y $w_{i,j,k}^n$ son positivas. Nótese que el problema de Riemann 3D involucra un conjunto de 8 estados uniformes $\tilde{C}_{i,j,k}^n$. Obsérvese también que en el centro de la celda computacional se presenta la interfase entre esos ocho estados uniformes. Entonces, el problema de Riemann en el nodo (i, j, k) estará determinado por el campo de flujo, pudiendo involucrar cualquiera de los siguientes conjuntos de estados uniformes:

- Estados uniformes para $u \geq 0$, $v \geq 0$ y $w \geq 0$.

$$\begin{aligned}
\tilde{C}_{i-1,j-1,k-1}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-1; j-\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-1; k-\frac{1}{2}) \Delta z \\
\tilde{C}_{i-1,j-1,k}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-1; j-\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-\frac{1}{2}; k) \Delta z \\
\tilde{C}_{i-1,j,k-1}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-\frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k-1; k-\frac{1}{2}) \Delta z \\
\tilde{C}_{i-1,j,k}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-\frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k-\frac{1}{2}; k) \Delta z \\
\tilde{C}_{i,j-1,k-1}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j-1; j-\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-1; k-\frac{1}{2}) \Delta z \\
\tilde{C}_{i,j-1,k}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j-1; j-\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-\frac{1}{2}; k) \Delta z \\
\tilde{C}_{i,j,k-1}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j-\frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k-1; k-\frac{1}{2}) \Delta z \\
\tilde{C}_{i,j,k}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j-\frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k-\frac{1}{2}; k) \Delta z.
\end{aligned}$$

- Estados uniformes para $u \geq 0$, $v \geq 0$ y $w < 0$.

$$\begin{aligned}
\tilde{C}_{i-1,j-1,k}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-1; j-\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k; k+\frac{1}{2}) \Delta z \\
\tilde{C}_{i-1,j-1,k+1}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-1; j-\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k+\frac{1}{2}; k+1) \Delta z \\
\tilde{C}_{i-1,j,k}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-\frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k; k+\frac{1}{2}) \Delta z \\
\tilde{C}_{i-1,j,k+1}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-\frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k+\frac{1}{2}; k+1) \Delta z \\
\tilde{C}_{i,j-1,k}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j-1; j-\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k; k+\frac{1}{2}) \Delta z \\
\tilde{C}_{i,j-1,k+1}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j-1; j-\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k+\frac{1}{2}; k+1) \Delta z \\
\tilde{C}_{i,j,k}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j-\frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k; k+\frac{1}{2}) \Delta z \\
\tilde{C}_{i,j,k+1}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j-\frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k+\frac{1}{2}; k+1) \Delta z.
\end{aligned}$$

- Estados uniformes para $u \geq 0$, $v < 0$ y $w \geq 0$.

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{i-1,j,k-1}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j; j+\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-1; k-\frac{1}{2}) \Delta z \\ \tilde{C}_{i-1,j,k}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j; j+\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-\frac{1}{2}; k) \Delta z \\ \tilde{C}_{i-1,j+1,k-1}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j+\frac{1}{2}; j+1) \Delta y \quad \times [k-1; k-\frac{1}{2}) \Delta z \\ \tilde{C}_{i-1,j+1,k}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j+\frac{1}{2}; j+1) \Delta y \quad \times [k-\frac{1}{2}; k) \Delta z \\ \tilde{C}_{i,j,k-1}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j; j+\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-1; k-\frac{1}{2}) \Delta z \\ \tilde{C}_{i,j,k}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j; j+\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-\frac{1}{2}; k) \Delta z \\ \tilde{C}_{i,j+1,k-1}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j+\frac{1}{2}; j+1) \Delta y \quad \times [k-1; k-\frac{1}{2}) \Delta z \\ \tilde{C}_{i,j+1,k}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j+\frac{1}{2}; j+1) \Delta y \quad \times [k-\frac{1}{2}; k) \Delta z. \end{aligned}$$

- Estados uniformes para $u \geq 0$, $v < 0$ y $w < 0$.

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{i-1,j,k}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j; j+\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k; k+\frac{1}{2}) \Delta z \\ \tilde{C}_{i-1,j,k+1}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j; j+\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k+\frac{1}{2}; k+1) \Delta z \\ \tilde{C}_{i-1,j+1,k}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j+\frac{1}{2}; j+1) \Delta y \quad \times [k; k+\frac{1}{2}) \Delta z \\ \tilde{C}_{i-1,j+1,k+1}^n & , [i-1; i-\frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j+\frac{1}{2}; j+1) \Delta y \quad \times [k+\frac{1}{2}; k+1) \Delta z \\ \tilde{C}_{i,j,k}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j; j+\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k; k+\frac{1}{2}) \Delta z \\ \tilde{C}_{i,j,k+1}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j; j+\frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k+\frac{1}{2}; k+1) \Delta z \\ \tilde{C}_{i,j+1,k}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j+\frac{1}{2}; j+1) \Delta y \quad \times [k; k+\frac{1}{2}) \Delta z \\ \tilde{C}_{i,j+1,k+1}^n & , [i-\frac{1}{2}; i) \Delta x \quad \times [j+\frac{1}{2}; j+1) \Delta y \quad \times [k+\frac{1}{2}; k+1) \Delta z. \end{aligned}$$

- Estados uniformes para $u < 0$, $v \geq 0$ y $w \geq 0$.

$$\begin{aligned}
 \tilde{C}_{i,j-1,k-1}^n & , [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-1; j - \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-1; k - \frac{1}{2}) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i,j-1,k}^n & , [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-1; j - \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k - \frac{1}{2}; k) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i,j,k-1}^n & , [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j - \frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k-1; k - \frac{1}{2}) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i,j,k}^n & , [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j - \frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k - \frac{1}{2}; k) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i+1,j-1,k-1}^n & , [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j-1; j - \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-1; k - \frac{1}{2}) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i+1,j-1,k}^n & , [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j-1; j - \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k - \frac{1}{2}; k) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i+1,j,k-1}^n & , [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j - \frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k-1; k - \frac{1}{2}) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i+1,j,k}^n & , [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j - \frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k - \frac{1}{2}; k) \Delta z.
 \end{aligned}$$

- Estados uniformes para $u < 0$, $v \geq 0$ y $w < 0$.

$$\begin{aligned}
 \tilde{C}_{i,j-1,k}^n & , [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-1; j - \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k; k + \frac{1}{2}) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i,j-1,k+1}^n & , [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j-1; j - \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k + \frac{1}{2}; k + 1) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i,j,k}^n & , [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j - \frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k; k + \frac{1}{2}) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i,j,k+1}^n & , [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j - \frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k + \frac{1}{2}; k + 1) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i+1,j-1,k}^n & , [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j-1; j - \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k; k + \frac{1}{2}) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i+1,j-1,k+1}^n & , [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j-1; j - \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k + \frac{1}{2}; k + 1) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i+1,j,k}^n & , [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j - \frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k; k + \frac{1}{2}) \Delta z \\
 \tilde{C}_{i+1,j,k+1}^n & , [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j - \frac{1}{2}; j) \Delta y \quad \times [k + \frac{1}{2}; k + 1) \Delta z.
 \end{aligned}$$

- Estados uniformes para $u < 0$, $v < 0$ y $w \geq 0$.

$$\tilde{C}_{i,j,k-1}^n, [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j; j + \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-1; k - \frac{1}{2}) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i,j,k}^n, [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j; j + \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k - \frac{1}{2}; k) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i,j+1,k-1}^n, [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j + \frac{1}{2}; j + 1) \Delta y \quad \times [k-1; k - \frac{1}{2}) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i,j+1,k}^n, [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j + \frac{1}{2}; j + 1) \Delta y \quad \times [k - \frac{1}{2}; k) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i+1,j,k-1}^n, [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j; j + \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k-1; k - \frac{1}{2}) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i+1,j,k}^n, [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j; j + \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k - \frac{1}{2}; k) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i+1,j+1,k-1}^n, [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j + \frac{1}{2}; j + 1) \Delta y \quad \times [k-1; k - \frac{1}{2}) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i+1,j+1,k}^n, [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j + \frac{1}{2}; j + 1) \Delta y \quad \times [k - \frac{1}{2}; k) \Delta z.$$

- Estados uniformes para $u < 0$, $v < 0$ y $w < 0$.

$$\tilde{C}_{i,j,k}^n, [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j; j + \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k; k + \frac{1}{2}) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i,j,k+1}^n, [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j; j + \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k + \frac{1}{2}; k + 1) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i,j+1,k}^n, [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j + \frac{1}{2}; j + 1) \Delta y \quad \times [k; k + \frac{1}{2}) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i,j+1,k+1}^n, [i; i + \frac{1}{2}) \Delta x \quad \times [j + \frac{1}{2}; j + 1) \Delta y \quad \times [k + \frac{1}{2}; k + 1) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i+1,j,k}^n, [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j; j + \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k; k + \frac{1}{2}) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i+1,j,k+1}^n, [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j; j + \frac{1}{2}) \Delta y \quad \times [k + \frac{1}{2}; k + 1) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i+1,j+1,k}^n, [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j + \frac{1}{2}; j + 1) \Delta y \quad \times [k; k + \frac{1}{2}) \Delta z$$

$$\tilde{C}_{i+1,j+1,k+1}^n, [i + \frac{1}{2}; i + 1) \Delta x \quad \times [j + \frac{1}{2}; j + 1) \Delta y \quad \times [k + \frac{1}{2}; k + 1) \Delta z.$$

Cuando al menos una de las componentes de la velocidad es igual a cero, las condiciones de frontera están sobreespecificadas en el problema de Riemann asociado a un determinado conjunto de estados uniformes, pero computacionalmente esto no representa problemas porque en ese caso el RCM no avanza la solución a lo largo de la dirección en que se presenta el estancamiento.

El RCM se basa en resolver aproximadamente sendos problemas de Riemann en los nodos de la malla computacional. Este replanteamiento del problema original definido por la ecuación (2.2) sometida a las condiciones (2.3) y (2.4), permite encontrar una solución más fácilmente.

Para representar los datos iniciales mediante una función uniforme por partes, las condiciones iniciales se aproximarán como el siguiente promedio de c

$$(2.11) \diamond \tilde{C}_{i,j,k}^0 = \left(\frac{1}{\Delta z}\right) \left(\frac{1}{\Delta y}\right) \left(\frac{1}{\Delta x}\right) \int_{(k-\frac{1}{2})\Delta z}^{(k+\frac{1}{2})\Delta z} \int_{(j-\frac{1}{2})\Delta y}^{(j+\frac{1}{2})\Delta y} \int_{(i-\frac{1}{2})\Delta x}^{(i+\frac{1}{2})\Delta x} c(x, y, z, 0) dx dy dz.$$

Al hacer esta representación en cada nodo de la malla computacional, es posible que haya discontinuidades en la nueva función uniforme por partes. Estas discontinuidades se localizan en el punto medio (sobre los ejes x , y y z) de las celdas computacionales.

Si se supone que en el lapso de un intervalo de tiempo la velocidad se mantiene uniforme, la solución (\widehat{C}) del problema de Riemann se obtiene con

$$(2.12) \diamond \widehat{C}_{i,j,k}^{n+1} = \tilde{C}_{i,j,k}^n,$$

donde el dominio de \widehat{C} queda definido por

$$(2.13) \diamond \begin{aligned} & \left(i - \frac{1}{2} + u \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) \Delta x < x \leq \left(i + \frac{1}{2} + u \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) \Delta x \\ & \left(j - \frac{1}{2} + v \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \Delta y < y \leq \left(j + \frac{1}{2} + v \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \Delta y \\ & \left(k - \frac{1}{2} + w \frac{\Delta t}{\Delta z} \right) \Delta z < z \leq \left(k + \frac{1}{2} + w \frac{\Delta t}{\Delta z} \right) \Delta z . \end{aligned}$$

El rasgo distintivo del RCM, es que obtiene la nueva representación de la solución en el nuevo tiempo, a través de un muestreo de la solución de los problemas de Riemann en un punto dentro de la respectiva celda computacional. Este procedimiento de muestreo proyecta las soluciones de los problemas de Riemann hacia la malla computacional mediante

$$(2.14) \diamond \tilde{C}_{i,j,k}^{n+1} = \tilde{C} \left(i + \xi_x |^n, j + \xi_y |^n, k + \xi_z |^n \right)^{n+1},$$

lo cual implica que $\tilde{C}_{i,j,k}^{n+1}$ únicamente podrá tomar cualquiera de los siguientes valores:

$$\begin{aligned} & \tilde{C}_{i-1,j-1,k-1}^n, \tilde{C}_{i-1,j-1,k}^n, \tilde{C}_{i-1,j-1,k+1}^n, \tilde{C}_{i-1,j,k-1}^n, \tilde{C}_{i-1,j,k}^n, \tilde{C}_{i-1,j,k+1}^n, \tilde{C}_{i-1,j+1,k-1}^n, \tilde{C}_{i-1,j+1,k}^n, \tilde{C}_{i-1,j+1,k+1}^n, \\ & \tilde{C}_{i,j-1,k-1}^n, \tilde{C}_{i,j-1,k}^n, \tilde{C}_{i,j-1,k+1}^n, \tilde{C}_{i,j,k-1}^n, \tilde{C}_{i,j,k}^n, \tilde{C}_{i,j,k+1}^n, \tilde{C}_{i,j+1,k-1}^n, \tilde{C}_{i,j+1,k}^n, \tilde{C}_{i,j+1,k+1}^n, \tilde{C}_{i+1,j-1,k-1}^n, \\ & \tilde{C}_{i+1,j-1,k}^n, \tilde{C}_{i+1,j-1,k+1}^n, \tilde{C}_{i+1,j,k-1}^n, \tilde{C}_{i+1,j,k}^n, \tilde{C}_{i+1,j,k+1}^n, \tilde{C}_{i+1,j+1,k-1}^n, \tilde{C}_{i+1,j+1,k}^n \text{ o } \tilde{C}_{i+1,j+1,k+1}^n . \end{aligned}$$

La ecuación (2.14) es la esencia del RCM. En ella interviene el vector $\xi |^n = \left(\xi_x |^n, \xi_y |^n, \xi_z |^n \right)$, siendo gobernado el avance de la onda a lo largo de cada dirección por la respectiva componente de $\xi |^n$. La especificación de un mismo superíndice n para todos los nodos, indica que sólo se genera un vector en cada paso de tiempo.

La ecuación original (2.2) es una EDP hiperbólica, por lo que los números de Courant

$$(2.15) \diamond v_x|_{i,j,k}^n = \left| \frac{u|_{i,j,k}^n \Delta t}{\Delta x} \right|, \quad v_y|_{i,j,k}^n = \left| \frac{v|_{i,j,k}^n \Delta t}{\Delta y} \right| \quad \text{y} \quad v_z|_{i,j,k}^n = \left| \frac{w|_{i,j,k}^n \Delta t}{\Delta z} \right|$$

deben satisfacer las siguientes condiciones de Courant - Friedrichs - Lewy (CFL)

$$(2.16) \diamond \max_{x,y,z,t} (v_x|_{\dots}) \leq 1, \quad \max_{x,y,z,t} (v_y|_{\dots}) \leq 1 \quad \text{y} \quad \max_{x,y,z,t} (v_z|_{\dots}) \leq 1,$$

las cuales también se aplican a la ecuación local (2.6). En las desigualdades (2.16), $\max(\cdot)$ indica que debe tomarse el mayor de los valores que adopta el argumento en el dominio de las variables indicadas al pie de la expresión. Sin embargo, dado que computacionalmente es difícil manejar exactamente las interacciones entre ondas adyacentes, éstas se evitarán restringiendo aún más los números de Courant, los cuales deben satisfacer:

$$(2.17) \diamond \max_{x,y,z,t} (v_x|_{\dots}) \leq \frac{1}{2}, \quad \max_{x,y,z,t} (v_y|_{\dots}) \leq \frac{1}{2} \quad \text{y} \quad \max_{x,y,z,t} (v_z|_{\dots}) \leq \frac{1}{2}.$$

Las desigualdades (2.17) determinan Δt de tal forma que ninguna onda recorra más de la mitad de una celda, permitiendo que las soluciones de los problemas de Riemann (uno por cada celda computacional), puedan unirse para formar conjuntamente la solución \tilde{C}^{n+1} en el dominio computacional en el nuevo paso de tiempo. Este procedimiento puede aplicarse repetidamente para valores sucesivos de n , avanzando así la solución en el tiempo.

El principal inconveniente del RCM es la poca precisión en la localización instantánea de la discontinuidad. En las figuras 2.4a, 2.4b y 2.4c se representa el avance 1D de un frente en el sistema espacio - tiempo. La línea continua representa la solución exacta, y la discontinua la solución obtenida mediante el RCM. En los dos primeros casos el avance es incorrecto porque la generación de ξ_x es sesgada. El tercer caso corresponde a valores de ξ_x apropiados.

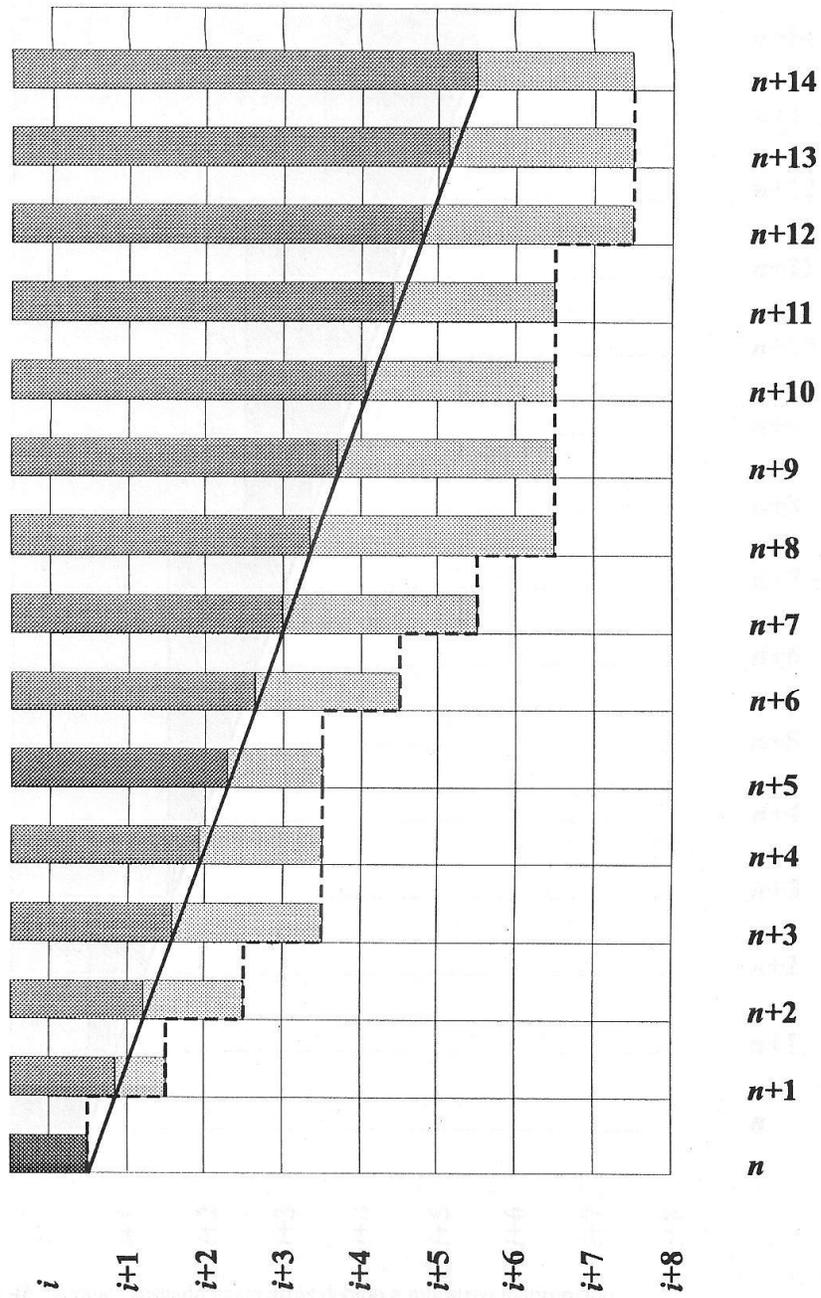


Figura 2.4a. Avance sesgado hacia delante debido a muestreo inapropiado.

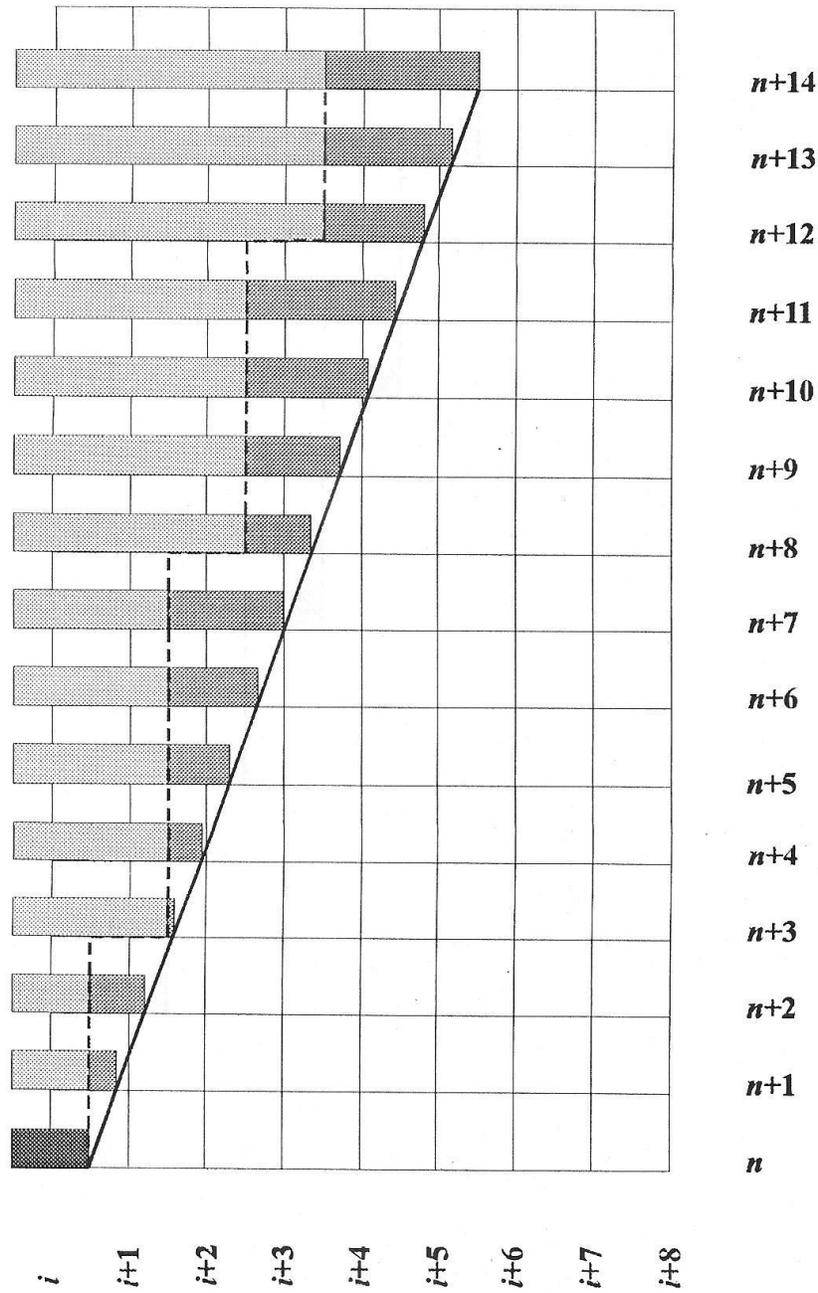


Figura 2.4b. Avance sesgado hacia atrás debido a muestreo inapropiado.

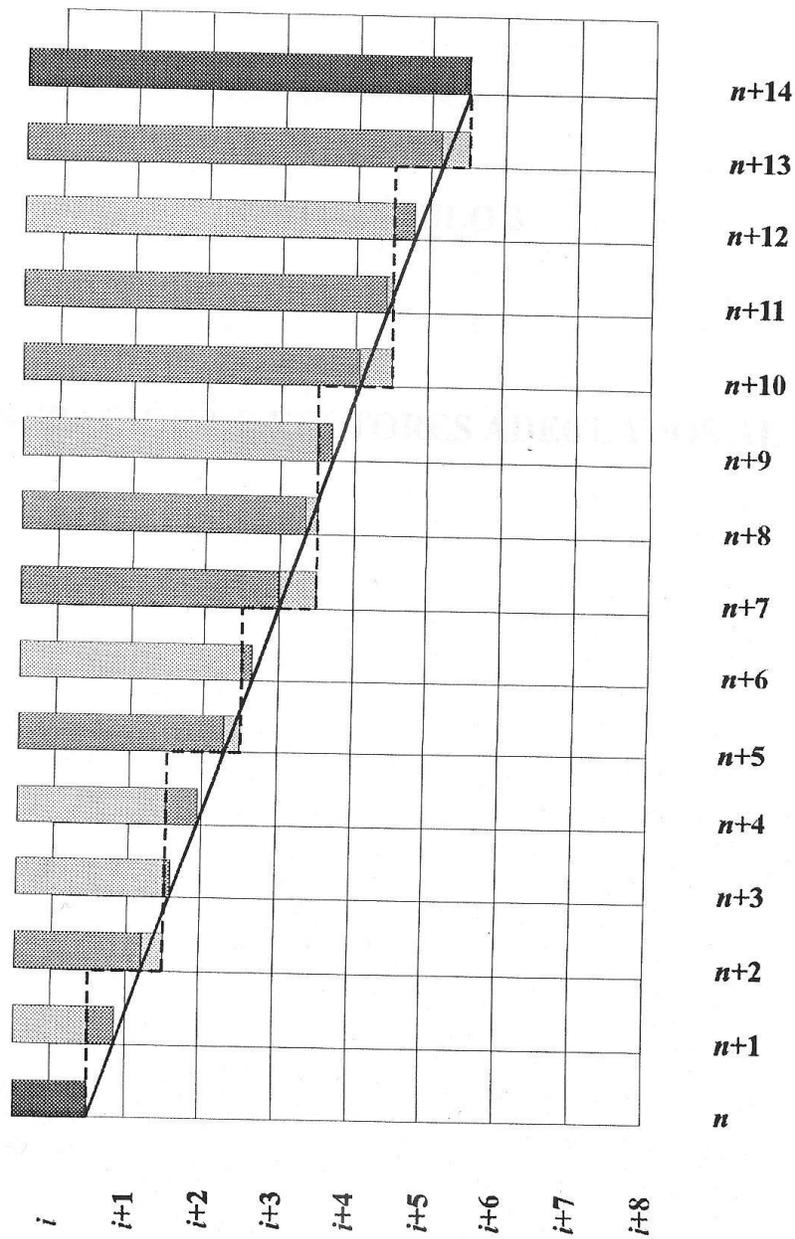


Figura 2.4c. Avance apropiado obtenido mediante un muestreo correcto.

CAPÍTULO 3

GENERACIÓN DE VECTORES ADECUADOS AL RCM

3.1. La equidistribución como requisito para que el RCM avance las ondas a la velocidad correcta

Hasta la fecha, el requerimiento de equidistribución de la secuencia de vectores, ha sido mostrado teóricamente sólo para problemas unidimensionales. En esta sección se analiza el caso tridimensional. Para ello, se supondrá que durante cada paso de tiempo la velocidad es uniforme dentro de cada celda riemanniana, además de que sólo se admitirá que la velocidad cambie hasta que haya transcurrido un tiempo Δt , entonces durante ese lapso, las interfaces de los estados uniformes $\tilde{C}_{i,j,k}^n$ se desplazarán

$$(3.1) \begin{aligned} X_{i,j,k}^n &= u_{i,j,k}^n \Delta t \\ Y_{i,j,k}^n &= v_{i,j,k}^n \Delta t \\ Z_{i,j,k}^n &= w_{i,j,k}^n \Delta t. \end{aligned}$$

Para analizar el avance de las ondas es útil esclarecer la correspondencia entre las celdas riemannianas y el espacio muestral de ξ . Para ello, las celdas se representan como regiones unitarias (el espacio muestral ya lo es). Este escalamiento se efectúa dividiendo las cantidades correspondientes al dominio computacional entre Δx , Δy o Δz , según la dirección de que se trate. Pero esto no es suficiente para efectuar comparaciones, ya que mientras la ecuación (2.14) establece una asociación del centro del espacio muestral con los nodos, la posición de las interfases entre los estados uniformes de \tilde{C} (ya escaladas) al inicio de cada paso de tiempo, se consideran desfasadas $\pm \frac{1}{2}$ en las tres direcciones (el signo del desfaseamiento es opuesto al signo de la velocidad correspondiente) con respecto al centro del espacio muestral. Esta operación de escalamiento y ajuste por desfaseamiento se expresa mediante:

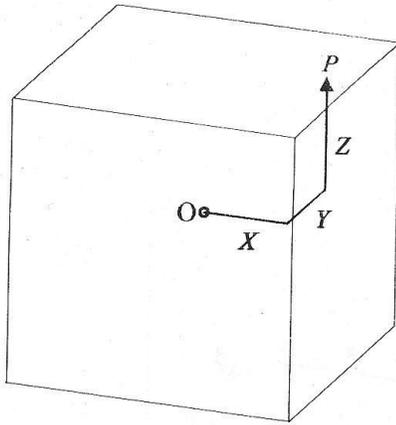
$$\begin{aligned}
 X'^n_{i,j,k} &= \frac{X^n_{i,j,k}}{\Delta x} - \frac{\text{esc}(u^n_{i,j,k})}{2} \\
 (3.2) \diamond Y'^n_{i,j,k} &= \frac{Y^n_{i,j,k}}{\Delta y} - \frac{\text{esc}(v^n_{i,j,k})}{2} \\
 Z'^n_{i,j,k} &= \frac{Z^n_{i,j,k}}{\Delta z} - \frac{\text{esc}(w^n_{i,j,k})}{2}.
 \end{aligned}$$

La transformación (3.2) mapea los puntos (X, Y, Z) referidos a las interfaces, hacia los puntos (X', Y', Z') referidos al centro del espacio muestral.

En la figura 3.1, por simplicidad se muestra el caso en que todas las variables involucradas son positivas. La posición de la interfase $O(0, 0, 0)$ entre los estados constantes de \tilde{C} al inicio de cada paso de tiempo, y su nueva posición $P(X, Y, Z)$ al final del paso de tiempo, son mapeadas a $O'(0, 0, 0)$ y $P'(X', Y', Z')$, respectivamente. Mientras que las dimensiones de las celdas del dominio computacional son Δx , Δy , y Δz , las del espacio muestral son 1, 1, y 1. Para no saturar la figura, en las variables se omite la especificación de índices $_{i,j,k}^n$.

En la figura 3.2 se asocia una celda riemanniana con el espacio muestral (caso en que todas las componentes de la velocidad son positivas). X' , Y' y Z' representan la posición de la interfase respecto al centro del espacio muestral. El cubo externo representa el espacio muestral, y la región sombreada corresponde a la probabilidad de que la solución avance desde un nodo del dominio computacional a uno adyacente. Los desplazamientos de la interfase (ya escalados) son $u^n_{i,j,k} \frac{\Delta t}{\Delta x}$, $v^n_{i,j,k} \frac{\Delta t}{\Delta y}$ y $w^n_{i,j,k} \frac{\Delta t}{\Delta z}$.

Celda computacional



$$(X', Y', Z') = T(X, Y, Z)$$

Espacio muestral

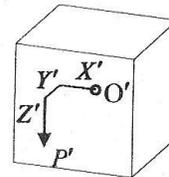
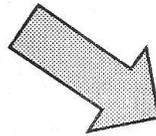


Figura 3.1. Mapeo de puntos del dominio computacional al espacio de muestreo.

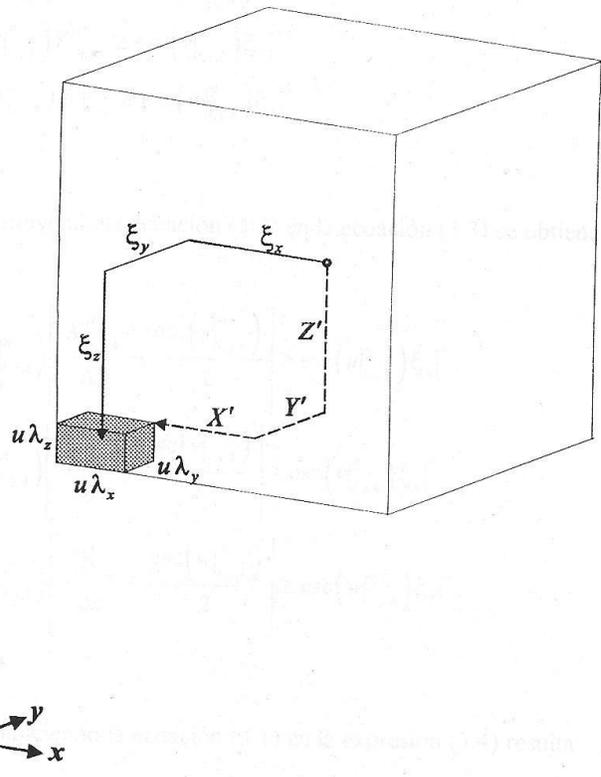


Figura 3.2. Condición de avance de la solución.

Según las ecuaciones (2.14) y (3.2), la onda avanza si $\xi|^n = (\xi_x|^n, \xi_y|^n, \xi_z|^n)$ cae en la región sombreada, lo cual en general se expresa como:

$$(3.3) \diamond \begin{aligned} \operatorname{esc}(u_{i,j,k}^n) X'_{i,j,k} &\geq \operatorname{esc}(u_{i,j,k}^n) \xi_x|^n \\ \operatorname{esc}(v_{i,j,k}^n) Y'_{i,j,k} &\geq \operatorname{esc}(v_{i,j,k}^n) \xi_y|^n \\ \operatorname{esc}(w_{i,j,k}^n) Z'_{i,j,k} &\geq \operatorname{esc}(w_{i,j,k}^n) \xi_z|^n. \end{aligned}$$

Sustituyendo la ecuación (3.2) en la ecuación (3.3) se obtiene:

$$(3.4) \diamond \begin{aligned} \operatorname{esc}(u_{i,j,k}^n) \left[\frac{X'_{i,j,k}}{\Delta x} - \frac{\operatorname{esc}(u_{i,j,k}^n)}{2} \right] &\geq \operatorname{esc}(u_{i,j,k}^n) \xi_x|^n \\ \operatorname{esc}(v_{i,j,k}^n) \left[\frac{Y'_{i,j,k}}{\Delta y} - \frac{\operatorname{esc}(v_{i,j,k}^n)}{2} \right] &\geq \operatorname{esc}(v_{i,j,k}^n) \xi_y|^n \\ \operatorname{esc}(w_{i,j,k}^n) \left[\frac{Z'_{i,j,k}}{\Delta z} - \frac{\operatorname{esc}(w_{i,j,k}^n)}{2} \right] &\geq \operatorname{esc}(w_{i,j,k}^n) \xi_z|^n. \end{aligned}$$

Introduciendo la ecuación (3.1) en la expresión (3.4) resulta:

$$(3.5) \diamond \begin{aligned} \operatorname{esc}(u_{i,j,k}^n) \left[\frac{u_{i,j,k}^n \Delta t}{\Delta x} - \frac{\operatorname{esc}(u_{i,j,k}^n)}{2} \right] &\geq \operatorname{esc}(u_{i,j,k}^n) \xi_x|^n \\ \operatorname{esc}(v_{i,j,k}^n) \left[\frac{v_{i,j,k}^n \Delta t}{\Delta y} - \frac{\operatorname{esc}(v_{i,j,k}^n)}{2} \right] &\geq \operatorname{esc}(v_{i,j,k}^n) \xi_y|^n \\ \operatorname{esc}(w_{i,j,k}^n) \left[\frac{w_{i,j,k}^n \Delta t}{\Delta z} - \frac{\operatorname{esc}(w_{i,j,k}^n)}{2} \right] &\geq \operatorname{esc}(w_{i,j,k}^n) \xi_z|^n. \end{aligned}$$

Definiendo las relaciones de malla

$$(3.6) \diamond \lambda_x = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad \lambda_y = \frac{\Delta t}{\Delta y}, \quad \lambda_z = \frac{\Delta t}{\Delta z};$$

la desigualdad (3.5) se reduce a:

$$(3.7) \diamond \begin{aligned} & \operatorname{esc}\left(u_{i,j,k}^n\right) u_{i,j,k}^n \lambda_x - \frac{1}{2} \geq \operatorname{esc}\left(u_{i,j,k}^n\right) \xi_x^n \\ & \operatorname{esc}\left(v_{i,j,k}^n\right) v_{i,j,k}^n \lambda_y - \frac{1}{2} \geq \operatorname{esc}\left(v_{i,j,k}^n\right) \xi_y^n \\ & \operatorname{esc}\left(w_{i,j,k}^n\right) w_{i,j,k}^n \lambda_z - \frac{1}{2} \geq \operatorname{esc}\left(w_{i,j,k}^n\right) \xi_z^n, \end{aligned}$$

lo cual se puede describir como:

$$(3.8) \diamond \begin{aligned} & \operatorname{esc}\left(u_{i,j,k}^n\right) \left(u_{i,j,k}^n \lambda_x - \xi_x^n\right) \geq \frac{1}{2} \\ & \operatorname{esc}\left(v_{i,j,k}^n\right) \left(v_{i,j,k}^n \lambda_y - \xi_y^n\right) \geq \frac{1}{2} \\ & \operatorname{esc}\left(w_{i,j,k}^n\right) \left(w_{i,j,k}^n \lambda_z - \xi_z^n\right) \geq \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

El RCM retiene la solución en el mismo nodo o la avanza desde un nodo adyacente, pero no mueve la onda a posiciones internodales. Entonces, satisfacer las desigualdades (3.8) para que la onda avance, es equivalente a definir una velocidad cuántica

$$(3.9) \diamond \tilde{\mathbf{q}}_{i,j,k}^n = \tilde{u}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{i}} + \tilde{v}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{j}} + \tilde{w}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{k}},$$

donde $\hat{\mathbf{i}}$, $\hat{\mathbf{j}}$, $\hat{\mathbf{k}}$ son vectores unitarios orientados sobre los ejes x , y , z , respectivamente; y las componentes de $\tilde{\mathbf{q}}$ se definen como:

$$(3.10) \diamond \begin{cases} \tilde{u}_{i,j,k}^n = \begin{cases} 0, & \text{si } \text{esc}(u_{i,j,k}^n)(u_{i,j,k}^n \lambda_x - \xi_x)^n \leq \frac{1}{2} \\ \text{esc}(u_{i,j,k}^n) \frac{\Delta x}{\Delta t} & \text{si } \text{esc}(u_{i,j,k}^n)(u_{i,j,k}^n \lambda_x - \xi_x)^n > \frac{1}{2} \end{cases} \\ \tilde{v}_{i,j,k}^n = \begin{cases} 0, & \text{si } \text{esc}(v_{i,j,k}^n)(v_{i,j,k}^n \lambda_y - \xi_y)^n \leq \frac{1}{2} \\ \text{esc}(v_{i,j,k}^n) \frac{\Delta y}{\Delta t} & \text{si } \text{esc}(v_{i,j,k}^n)(v_{i,j,k}^n \lambda_y - \xi_y)^n > \frac{1}{2} \end{cases} \\ \tilde{w}_{i,j,k}^n = \begin{cases} 0, & \text{si } \text{esc}(w_{i,j,k}^n)(w_{i,j,k}^n \lambda_z - \xi_z)^n \leq \frac{1}{2} \\ \text{esc}(w_{i,j,k}^n) \frac{\Delta z}{\Delta t} & \text{si } \text{esc}(w_{i,j,k}^n)(w_{i,j,k}^n \lambda_z - \xi_z)^n > \frac{1}{2} \end{cases} \end{cases}$$

Analizando la figura 3.2, se tiene que para una secuencia equidistribuida, la probabilidad de avance de la solución está dada por la subregión sombreada. Considerando que las velocidades $u_{i,j,k}^n$, $v_{i,j,k}^n$ y $w_{i,j,k}^n$ no necesariamente son positivas, en el caso general las probabilidades de avance se cuantifican mediante:

$$(3.11) \diamond \begin{cases} p_x|_{i,j,k}^n = \text{esc}(u_{i,j,k}^n) u_{i,j,k}^n \lambda_x \\ p_y|_{i,j,k}^n = \text{esc}(v_{i,j,k}^n) v_{i,j,k}^n \lambda_y \\ p_z|_{i,j,k}^n = \text{esc}(w_{i,j,k}^n) w_{i,j,k}^n \lambda_z, \end{cases}$$

donde $p_x|_{i,j,k}^n$, $p_y|_{i,j,k}^n$ y $p_z|_{i,j,k}^n$ son las probabilidades de que la onda experimente un desplazamiento de $\text{esc}(u_{i,j,k}^n) \Delta x$, $\text{esc}(v_{i,j,k}^n) \Delta y$ y $\text{esc}(w_{i,j,k}^n) \Delta z$, respectivamente.

Entonces, los valores esperados del avance de la solución calculados mediante el RCM son:

$$(3.12) \diamond \begin{cases} E\{\text{esc}(u_{i,j,k}^n) \Delta x\} = [\text{esc}(u_{i,j,k}^n) \Delta x] p_x|_{i,j,k}^n \\ E\{\text{esc}(v_{i,j,k}^n) \Delta y\} = [\text{esc}(v_{i,j,k}^n) \Delta y] p_y|_{i,j,k}^n \\ E\{\text{esc}(w_{i,j,k}^n) \Delta z\} = [\text{esc}(w_{i,j,k}^n) \Delta z] p_z|_{i,j,k}^n, \end{cases}$$

o bien:

$$\begin{aligned}
 E\left\{\text{esc}\left(u_{i,j,k}^n\right)\Delta x\right\} &= \left[\text{esc}\left(u_{i,j,k}^n\right)\Delta x\right]\left[\text{esc}\left(u_{i,j,k}^n\right)u_{i,j,k}^n\lambda_x\right]=u_{i,j,k}^n\Delta t \\
 (3.13)\diamond E\left\{\text{esc}\left(v_{i,j,k}^n\right)\Delta y\right\} &= \left[\text{esc}\left(v_{i,j,k}^n\right)\Delta y\right]\left[\text{esc}\left(v_{i,j,k}^n\right)v_{i,j,k}^n\lambda_y\right]=v_{i,j,k}^n\Delta t \\
 E\left\{\text{esc}\left(w_{i,j,k}^n\right)\Delta z\right\} &= \left[\text{esc}\left(w_{i,j,k}^n\right)\Delta z\right]\left[\text{esc}\left(w_{i,j,k}^n\right)w_{i,j,k}^n\lambda_z\right]=w_{i,j,k}^n\Delta t.
 \end{aligned}$$

Lo cual indica que los valores esperados de las velocidades cuánticas de avance son:

$$\begin{aligned}
 E\left\{\tilde{u}_{i,j,k}^n\right\} &= u_{i,j,k}^n \\
 (3.14)\diamond E\left\{\tilde{v}_{i,j,k}^n\right\} &= v_{i,j,k}^n \\
 E\left\{\tilde{w}_{i,j,k}^n\right\} &= w_{i,j,k}^n.
 \end{aligned}$$

Dado que en las ecuaciones (3.11) se supuso la condición de equidistribución de la secuencia $\{\xi\}$, las ecuaciones (3.14) prueban que muestrear mediante una secuencia equidistribuida asegura el avance de las ondas a la velocidad del campo de flujo.

Con anterioridad, Liu [1977] había demostrado que en problemas unidimensionales puede esperarse que el RCM converja para cualquier secuencia equidistribuida $\{\xi\}$. Inclusive, este autor concluía que la tasa de convergencia depende de qué tan bien esté distribuida la secuencia en el espacio muestral. Los resultados de esta sección, extienden las conclusiones de Liu [1977] a situaciones tridimensionales. Por eso, aunque el planteamiento original del método de Glimm hacía alusión a una secuencia de vectores aleatorios, estos resultados indican que en realidad, el RCM funciona bien con vectores generados por una función matemática determinista. De hecho, según la literatura, quienes han aplicado el RCM lo hacen con secuencias no aleatorias.

Una vez establecido que las secuencias de vectores no necesariamente tienen que ser aleatorias, y después de haberse identificado que se puede considerar un avance cuántico de la solución, en lo sucesivo se empleará el acrónimo ACUA como una traducción de "RCM" al español.

3.2. Características deseables de un generador de vectores

El ACUA debe ser capaz de avanzar las ondas a la velocidad correcta. Para tal efecto, en problemas 1D, Chorin [1976] recomienda empíricamente que los valores de la secuencia $\{\xi\}$ deben tender tan pronto como sea posible a una equidistribución aproximada. Esto puede explicarse porque al haber una equidistribución temprana, se propicia no sólo que la solución aproximada sea una representación válida de la solución real a largo plazo, sino que también en momentos intermedios [Concus y Proskurowski, 1979]. Adicionalmente, en un artículo de Liu [1977], y en la sección 3.1 de esta tesis, se demuestra que la equidistribución de la secuencia de vectores es un requisito para que las ondas avancen a la velocidad impuesta por el campo de flujo.

De acuerdo con lo anterior, para situaciones unidimensionales se busca una secuencia de vectores $\xi_i^n = \xi_x^n$ en el espacio muestral $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]$, que posea mejores cualidades de precisión que la actualmente recomendada para el ACUA. Además, en problemas bidimensionales se busca una secuencia de vectores $\xi_i^n = (\xi_x^n, \xi_y^n)$ más tempranamente equidistribuida en el espacio muestral $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}] \times [-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]$ que la recomendada como óptima por Colella [1982]. En cuanto al caso tridimensional, no se conoce una propuesta de generación de vectores apropiada para su uso en el ACUA, por eso, se busca una secuencia de vectores $\xi_i^n = (\xi_x^n, \xi_y^n, \xi_z^n)$ en el espacio $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}] \times [-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}] \times [-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]$, que posea un comportamiento estadístico propio de secuencias equidistribuidas.

En problemas unidimensionales, Chorin [1977] estableció que para la correcta imposición de las condiciones de frontera, los signos de la variable ξ_x deben alternarse en cada par de pasos de tiempo $n, n+1$ (siendo n un número non). Con ayuda de la figura 3.2 se puede identificar que si alguna de las componentes de $\xi|^n$ fuese del mismo signo que la correspondiente componente de la velocidad, entonces sería imposible que el muestreo incidiese dentro de la región sombreada. Esto es, cada signo influye únicamente en un sentido de flujo (sobre la correspondiente dirección). Así, cuando una componente de la velocidad tiene signo positivo, el avance de la solución sólo es posible si la respectiva componente de $\xi|^n$ tiene signo negativo, y viceversa. De esa manera, el ACUA sólo puede atender un sentido del flujo en cada paso de tiempo, siendo la alternancia de signos lo que permite procesar ambos sentidos en una dirección determinada. Para considerar de inmediato cualquier información surgida en el dominio computacional, se buscará que en cada pareja non – par de pasos de tiempo consecutivos, los vectores posean el siguiente comportamiento:

- Uno de los números ξ_x obtenido cae en el intervalo $[-\frac{1}{2}; 0]$ y el otro en el intervalo $[0; \frac{1}{2}]$.
- En problemas bidimensionales y tridimensionales, uno de los números ξ_y obtenido cae en el intervalo $[-\frac{1}{2}; 0]$ y el otro en el intervalo $[0; \frac{1}{2}]$.
- En problemas tridimensionales, uno de los números ξ_z obtenido cae en el intervalo $[-\frac{1}{2}; 0]$ y el otro en el intervalo $[0; \frac{1}{2}]$.

3.3. Procedimiento de generación de vectores

Debido a que el avance de la solución se determina a partir de un muestreo de la solución de los problemas de Riemann, es evidente que una elección óptima del generador de vectores es crucial para el éxito del ACUA. Retomando las características identificadas en la sección 3.2 como deseables en un generador de vectores, a continuación se presenta un procedimiento de generación adecuado para optimizar el desempeño del ACUA.

Según refiere Colella [1982], las secuencias de Van der Corput son equidistribuidas, siendo la mejor opción para aplicarse al ACUA. Para aprovechar esta cualidad, se retomará la forma general del procedimiento de Van der Corput para generar un vector en la región $[0, 1]^d$.

Sean $\mathbf{r} = (r_x, r_y, r_z)$, $\mathbf{g} = (g_x, g_y, g_z)$ tríadas de enteros mayores que cero; $r_x > g_x$, $r_y > g_y$ y $r_z > g_z$; con: r_x no divisible entre g_x , r_y no divisible entre g_y y r_z no divisible entre g_z .

La secuencia $\{\zeta\}$ de Van der Corput $(\overline{\mathbf{r}, \mathbf{g}})$ se define formalmente a partir de la expansión de n en base r_x , es decir:

$$(3.15) \diamond \zeta_x |^n = \sum_{i=1}^b a_{x_i} \cdot r_x^{-i},$$

donde

$$(3.16) \diamond a_{x_i} = \text{MOD}(g_x \prod_{l=1}^i r_x, r_x),$$

$$(3.17) \diamond \Pi_l = \text{MOD}(\aleph_l, r_x), \text{ y}$$

$$(3.18) \diamond \aleph_l = \frac{\langle n \rangle_{r_x}}{r_x^{l-1}}.$$

En las ecuaciones (3.16) y (3.17), $\text{MOD}(\cdot, \cdot)$ es una función que da por resultado el residuo de la división entera del primer argumento entre el segundo, n es el número de paso de tiempo, $\langle n \rangle_{r_x}$ es el número n expresado en base r_x , b es la cantidad de dígitos de $\langle n \rangle_{r_x}$, \aleph es el cociente de sucesivas divisiones de $\langle n \rangle_{r_x}$ entre r_x , y Π_l es el l -ésimo dígito de $\langle n \rangle_{r_x}$. Así, por ejemplo, el número decimal $n = 29164$, en base hexadecimal se expresa como $\langle n \rangle_{r_x} = 71EC$, siendo $b = 4$, $\Pi_4 = C$, $\Pi_2 = E$, $\Pi_3 = 1$ y $\Pi_4 = 7$. De manera análoga se obtienen $\zeta_y|''$ y $\zeta_z|''$.

Con el fin de garantizar la estricta alternancia de signos (descrita en la sección 3.2) de cada componente de los vectores, se propone un muestreo estratificado en el que los estratos se definen a partir de la división del espacio muestral en mitades a lo largo de cada dirección de coordenadas. La retícula muestral resultante, define dos semiejes en problemas unidimensionales, cuatro cuadrantes en problemas bidimensionales u ocho octantes en problemas tridimensionales (según el caso). La alternancia de signos en las componentes de los vectores se logra forzando que cada dos muestreos se incida una sola vez sobre cada línea, una sola vez sobre cada columna (en problemas 2D y 3D), y una sola vez sobre cada capa (en problemas 3D) de la retícula muestral. Este comportamiento de los puntos de muestreo se logra predefiniendo una secuencia cíclica de estratificación.

Una característica deseable en el procedimiento de generación es la rapidez. Al respecto, para simular la generación de 2^d vectores en cada paso de tiempo (en vez de uno sólo), se propone el siguiente algoritmo computacional:

- i) Generar un vector equidistribuido en el espacio $[0, 1]^d$ aplicando las ecuaciones (3.15), (3.16), (3.17) y (3.18).
- ii) Mapear el vector (mediante un escalamiento de sus componentes) al espacio $[0; \frac{1}{2}]^d$.
- iii) Replicar simétricamente este vector del primer semieje, cuadrante u octante (según el caso) sobre los restantes semiejes, cuadrantes u octantes. Esta replicación se lleva a cabo tomando el vector generado y formando nuevos vectores mediante cambios en los signos de las componentes.

Este algoritmo de replicación simétrica de la secuencia de Van der Corput, atiende los criterios comentados en la sección 3.2, y es similar al procedimiento de generación de Van der Corput convencional, ya que el paso (i) es igual en ambos casos. En tanto que en el paso (ii), los vectores obtenidos mediante el generador convencional se mapean al espacio $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]^d$, a diferencia del generador simétrico que mapea al espacio $[0; \frac{1}{2}]^d$. Sin embargo, en el procedimiento convencional no existe un tercer paso.

Para simplificar la notación de los generadores multidimensionales, en este trabajo se adoptará la notación

$$(3.19) \blacklozenge \text{ Van der Corput } \overline{(r_x, g_x)} \overline{(r_y, g_y)} \overline{(r_z, g_z)}$$

alternativamente a la nomenclatura Van der Corput $\overline{(r, g)}$, la cual expresa el producto cartesiano

$$(3.20) \blacklozenge \text{ Van der Corput } \overline{(r_x, g_x)} \times \text{ Van der Corput } \overline{(r_y, g_y)} \times \text{ Van der Corput } \overline{(r_z, g_z)}.$$

3.4. Propuesta de secuencias de vectores

En problemas unidimensionales, la secuencia de Van der Corput $\overline{(2,1)}$ se reporta como la más apropiada para el ACUA. Considerando además, que de entre todas las posibles secuencias de Van der Corput, el generador $\overline{(2,1)}$ es el más eficiente en términos de tiempo de ejecución porque permite aprovechar que las computadoras operan en sistema binario, en la presente investigación se adopta como base la secuencia de Van der Corput $\overline{(2,1)}$, y se propone transformarla en una secuencia simétrica con el procedimiento mencionado en la sección 3.3.

Para generar vectores d - dimensionales, se pueden formar infinitas combinaciones entre los generadores equidistribuidos conocidos. Con el fin de identificar una propuesta más eficiente que las actualmente en uso, se generaron secuencias de Van der Corput con distintos parámetros $\overline{(r, g)}$ siguiendo el procedimiento de replicación simétrica mencionado en la sección 3.3. A continuación, se siguió el criterio de inspección visual de la nube de puntos de muestreo en el espacio d - dimensional, sugerido por Anderson [1990], descartándose las secuencias de vectores que presentasen una distribución en forma de rejilla (figura 3.3) o con alguna forma de aglomeración no uniforme de puntos, y buscándose las que aparentasen densidad uniforme. Después de una inspección visual inicial, de entre todas las secuencias graficadas, para aplicaciones bidimensionales se seleccionó (esta selección se valida mas adelante en la secciones 3.5 y 3.6) el generador Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}$ simétrico, y para problemas tridimensionales se escogió el generador Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}\overline{(7,3)}$ simétrico (figuras 3.4, 3.5, 3.6, 3.7 y 3.8).

Figura 3.3: Nube de puntos de muestreo obtenidos con el generador Van der Corput $\overline{(26,3)}\overline{(23,3)}$ simétrico.

2D

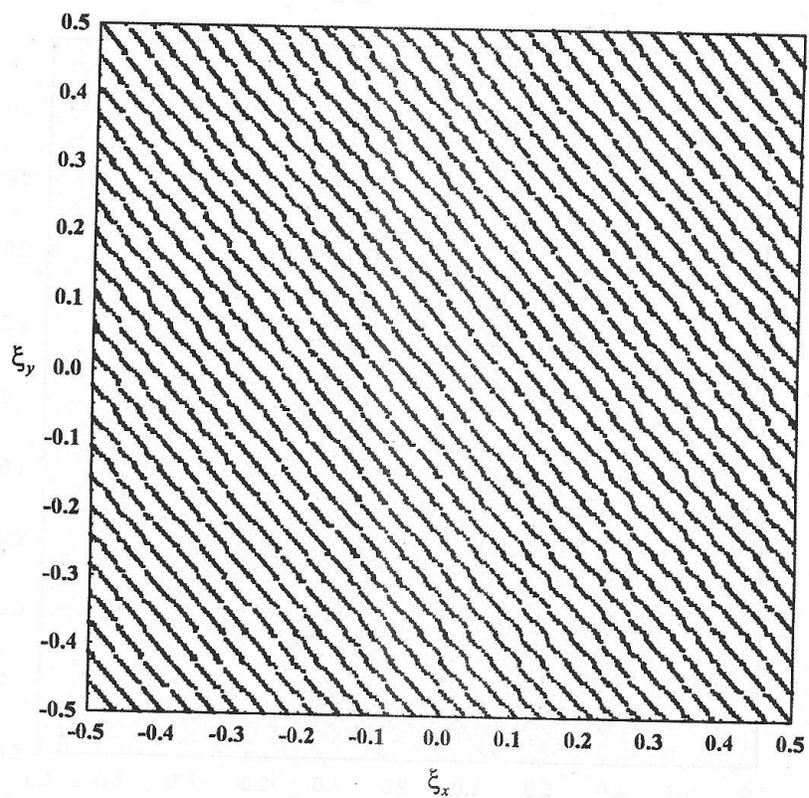


Figura 3.3. Primeros 10000 vectores obtenidos con el generador Van der Corput $\overline{(26,3)}\overline{(25,3)}$ simétrico.

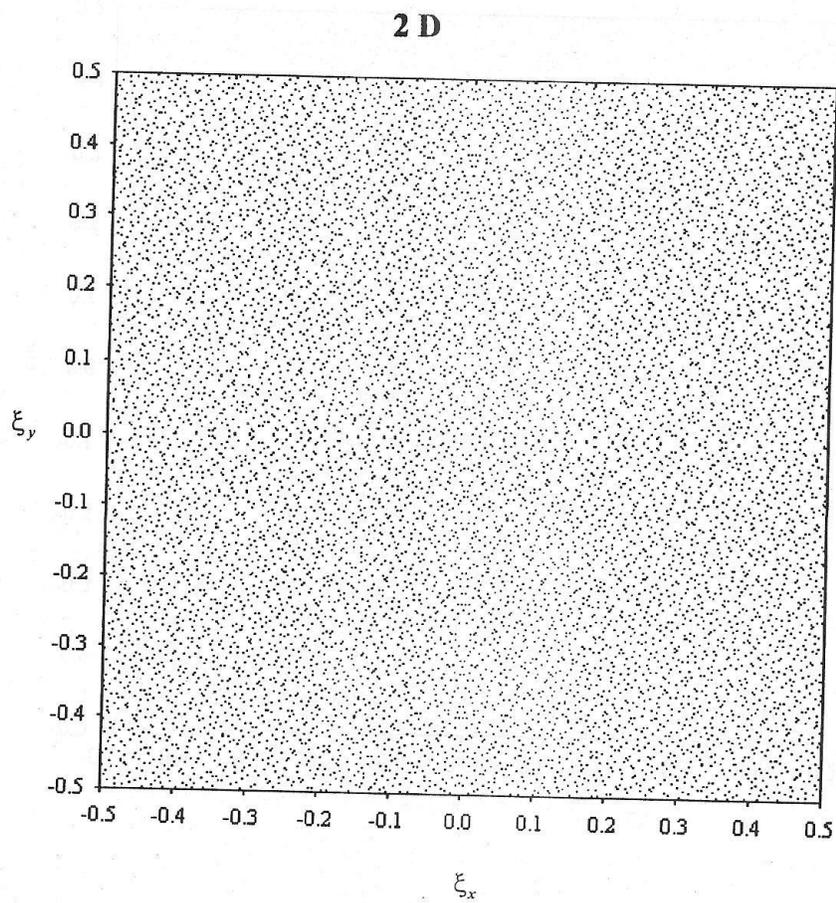


Figura 3.4. Primeros 10000 vectores obtenidos con el generador Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}$ simétrico.

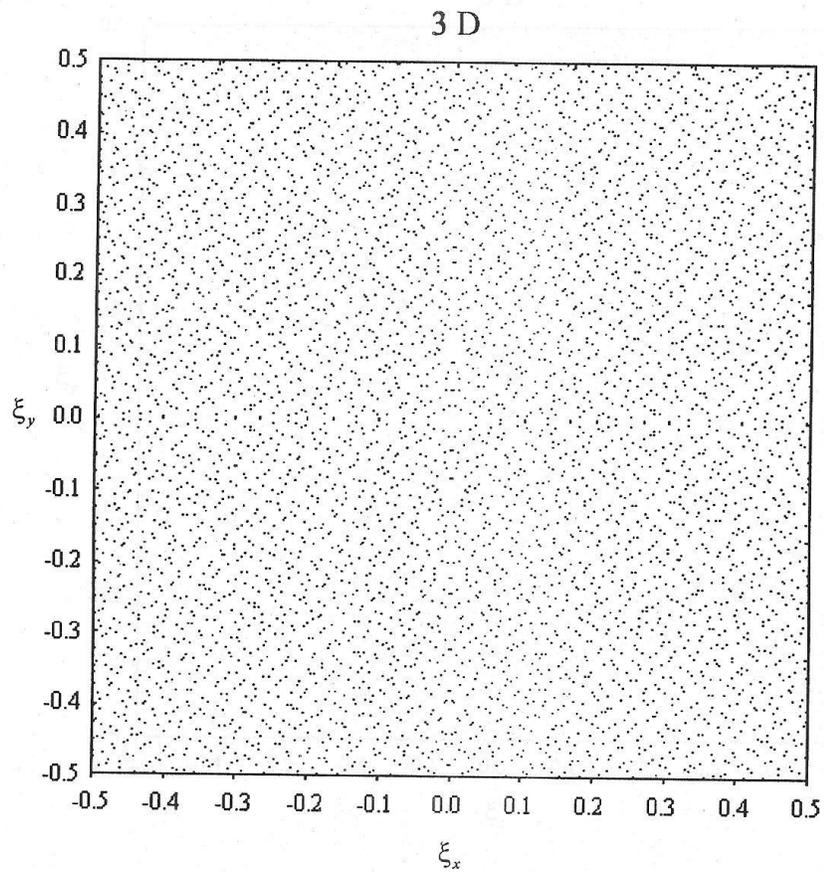


Figura 3.5. Proyección xy de los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput

$(2, 1)(3, 1)(7, 3)$ simétrica.

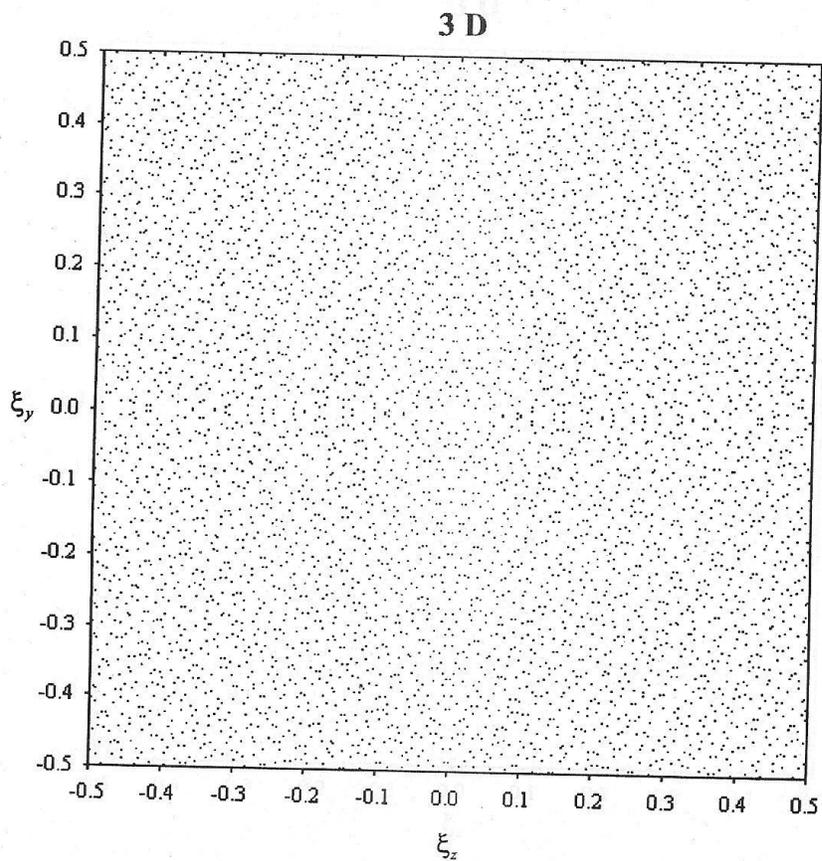


Figura 3.6. Proyección yz de los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(2,1)(3,1)(7,3)$ simétrica.

3 D

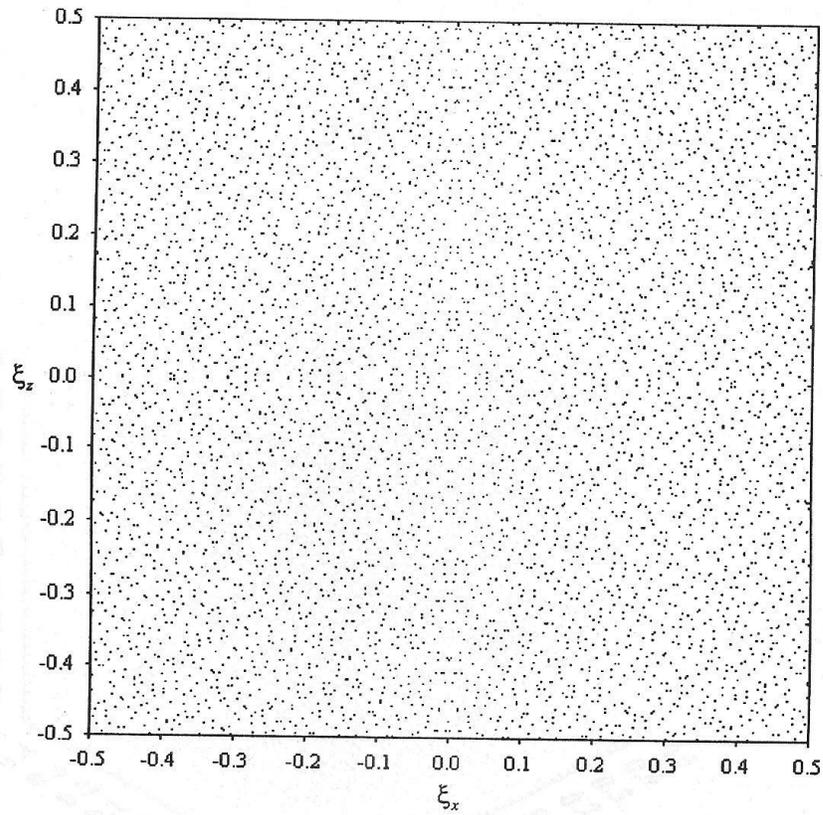


Figura 3.7. Proyección xz de los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(2,1)(3,1)(7,3)$ simétrica.

Figura 3.8. Proyección xz de los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(2,4)(3,1)(7,3)$ simétrica.

En esta figura se muestran los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(2,1)(3,1)(7,3)$ simétrica. En esta figura se muestran los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(2,1)(3,1)(7,3)$ simétrica.

Figura 3.8. Primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(2,1)(3,1)(7,3)$ simétrica. En esta figura se muestran los primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(2,1)(3,1)(7,3)$ simétrica.

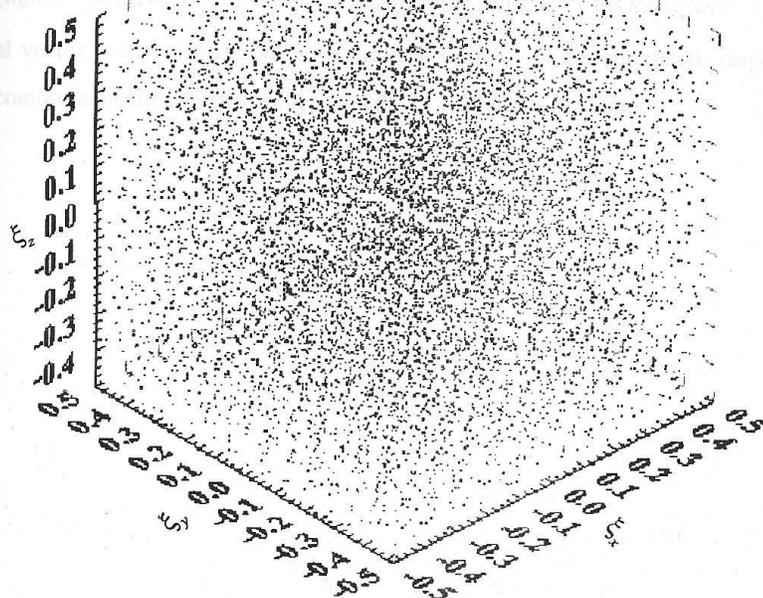


Figura 3.8. Primeros 10000 vectores de la secuencia Van der Corput $(2,1)(3,1)(7,3)$ simétrica.

En las figuras 3.9 se muestran los primeros ocho vectores 2D obtenidos con los generadores Van der Corput $(\overline{3,2})(\overline{5,3})$ convencional y Van der Corput $(\overline{2,1})(\overline{3,1})$ simétrico. En estas figuras, el eje horizontal corresponde a las componentes ξ_x y el vertical a ξ_y . La figura 3.9a muestra la secuencia Van der Corput $(\overline{3,2})(\overline{5,3})$ convencional, reportada como óptima por Colella [1982] para problemas bidimensionales. Como se aprecia, los vectores no se distribuyen por igual en los cuatro cuadrantes, lo cual no favorece la incorporación apropiada de las condiciones de frontera. En cambio, nótese que en la secuencia simétrica (figura 3.9b), el vector 1 cae en la región $[0,1]^d = [0,1]^2$ y los vectores 2, 3 y 4 son simétricos al vector 1 con respecto al eje vertical, al centro y al eje horizontal, respectivamente. Este comportamiento simétrico se repite cada $2^d = 2^2$ pasos de tiempo.

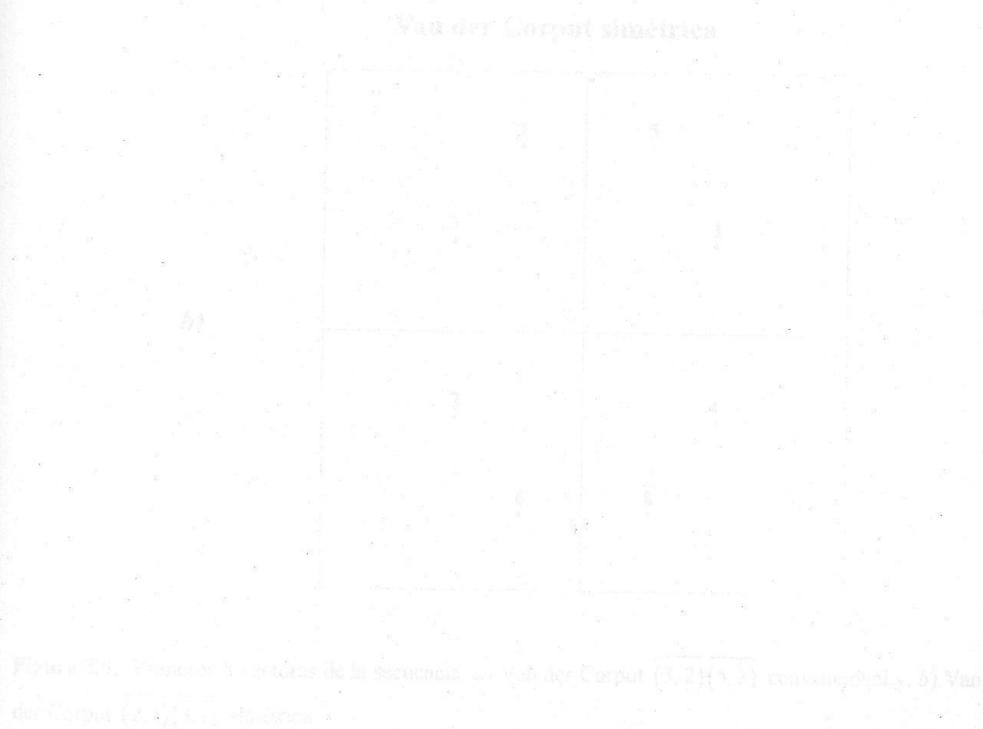


Figura 3.9. Primeros 8 vectores de la secuencia de Van der Corput $(\overline{3,2})(\overline{5,3})$ convencional, b) Van der Corput $(\overline{2,1})(\overline{3,1})$ simétrica.

Van der Corput convencional

a)

$\begin{matrix} & & & 8 \\ & & 3 & \\ & 6 & & \\ & & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{matrix}$
$\begin{matrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & 2 & \end{matrix}$	$\begin{matrix} & & & 1 \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{matrix}$

Van der Corput simétrica

b)

$\begin{matrix} & & & 7 \\ & & 3 & \\ & & & \\ & & & \end{matrix}$	$\begin{matrix} & & & 5 \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{matrix}$
$\begin{matrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & 2 & \end{matrix}$	$\begin{matrix} & & & 1 \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{matrix}$

Figura 3.9. Primeros 8 vectores de la secuencia: a) Van der Corput $\overline{(3,2)}\overline{(5,3)}$ convencional y, b) Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}$ simétrica.

3.5. Comparación de parámetros estadísticos de secuencias de vectores

La prueba chi cuadrada de bondad de ajuste se usa frecuentemente para probar la equivalencia entre dos funciones de densidad de probabilidad (FDP) [Bendat y Piersol, 1971]. En la presente investigación, se requiere probar que las secuencias simétricas 1D y 2D propuestas en la sección 3.4, son mejor equidistribuidas que las secuencias convencionales en uso. Asimismo, se requiere evaluar en que medida la secuencia simétrica 3D propuesta se ajusta a la equidistribución. En una primera valoración, se analizarán las siguientes cualidades estadísticas:

- i) La media aritmética ($\bar{\xi}_x$) definida como

$$(3.21) \diamond \bar{\xi}_x = \frac{1}{N_T} \sum_{n=1}^{N_T} |\xi_x|^n,$$

donde N_T es el número total de pasos de tiempo.

De manera similar se obtienen $\bar{\xi}_y$ y $\bar{\xi}_z$.

- ii) Para medir la discrepancia entre la FDP de las secuencias de vectores, y la FDP uniforme (equidistribuida), se usará el siguiente estadístico con una distribución aproximadamente del tipo chi cuadrada:

$$(3.22) \diamond X_{(k-1)}^2 = \sum_{l=1}^k \frac{(n_l - p_l N_T)^2}{p_l N_T};$$

donde k es el número de subregiones en que se divide el espacio muestral $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]^d$.

Si n_l es la cantidad de vectores que caen en la subregión l , y si p_l es la probabilidad de que cada vector caiga dentro de la subregión l , entonces $p_l N_T$ es la cantidad esperada de incidencias en la subregión l .

La prueba chi cuadrada constituye un mejor indicador de la distribución de una secuencia que la media, sin embargo, es una base insuficiente para obtener conclusiones. No obstante, se puede evaluar mejor la equidistribución si se aplica la prueba a varias particiones del espacio muestral, y luego se suman los estadísticos individuales [Anderson, 1990], *i.e.*:

$$(3.23) \diamond X_{(f=f_1+f_2+\dots+f_r)}^2 = X_{(f_1)}^2 + X_{(f_2)}^2 + \dots + X_{(f_r)}^2$$

En el contexto del ACUA, los valores ideales de estos estadísticos son:

$$\bar{\xi}_x = \bar{\xi}_y = \bar{\xi}_z = 0, \text{ y } X_{(f=f_1+f_2+\dots+f_r)}^2 = 0.$$

Dado que cualquier desviación de la FDP de la secuencia de vectores respecto a la FDP uniforme provocaría un incremento de $X_{(f=f_1+f_2+\dots+f_r)}^2$, la región de aceptación de la hipótesis de que la secuencia de vectores se equidistribuye es

$$(3.24) \diamond X_{(f=f_1+f_2+\dots+f_r)}^2 \leq \chi_{f,\alpha}^2,$$

donde $\chi_{f,\alpha}^2$ es la función de densidad chi cuadrada con f grados de libertad y un nivel de significancia α .

Enseguida se muestra una comparación de las series de tiempo de estos estadísticos, la cuál se realiza entre las secuencias establecidas como las mejores hasta el momento y las secuencias propuestas en la sección 3.4.

Debido a que en el procedimiento de replicación simétrica 1D se genera un vector y luego se reproduce cambiando de signo, cada dos pasos de tiempo se anula $\bar{\xi}_x$. Por esta razón, en función de su aplicación al ACUA, la media de la secuencia Van der Corput $(\overline{2,1})$ simétrica es mejor que la de la secuencia Van der Corput $(\overline{2,1})$ convencional.

Para elaborar la figura 3.10, se dividió el espacio muestral $[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}]$ en 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 100, 150 y 200 subintervalos equidimensionados, y se calculó el estadístico X^2 para cada una de esas particiones. Luego, se sumaron los 14 valores de X^2 obteniéndose $X_{(568)}^2$. Paralelamente, para 568 grados de libertad y un nivel de significancia (α) de 5%, se obtuvo $\chi_{568;0.05}^2 = 624.553$. Al contrastar los valores de $X_{(568)}^2$ para diversos tamaños de la secuencia de vectores contra $\chi_{568;0.05}^2 = 624.553$, se encontró que en todos los casos, $X_{(568)}^2$ cae en la región de aceptación de la hipótesis de que la secuencia Van der Corput $(\overline{2,1})$ simétrica es equidistribuida. Además, la figura 3.10 muestra claramente que los valores $X_{(568)}^2$, son menores para la secuencia Van der Corput $(\overline{2,1})$ simétrica que para la secuencia Van der Corput $(\overline{2,1})$ convencional. Estos resultados, son un indicador de que la secuencia propuesta se distribuye más uniformemente que la convencional.

En una distribución uniforme, $\chi_{568;0.05}^2$ idealmente debe ser cero. La figura 3.10 también muestra que independientemente del tamaño de la secuencia, la versión simétrica del generador Van der Corput $(\overline{2,1})$ muestra una tendencia general a cero conforme el tamaño de la secuencia crece.

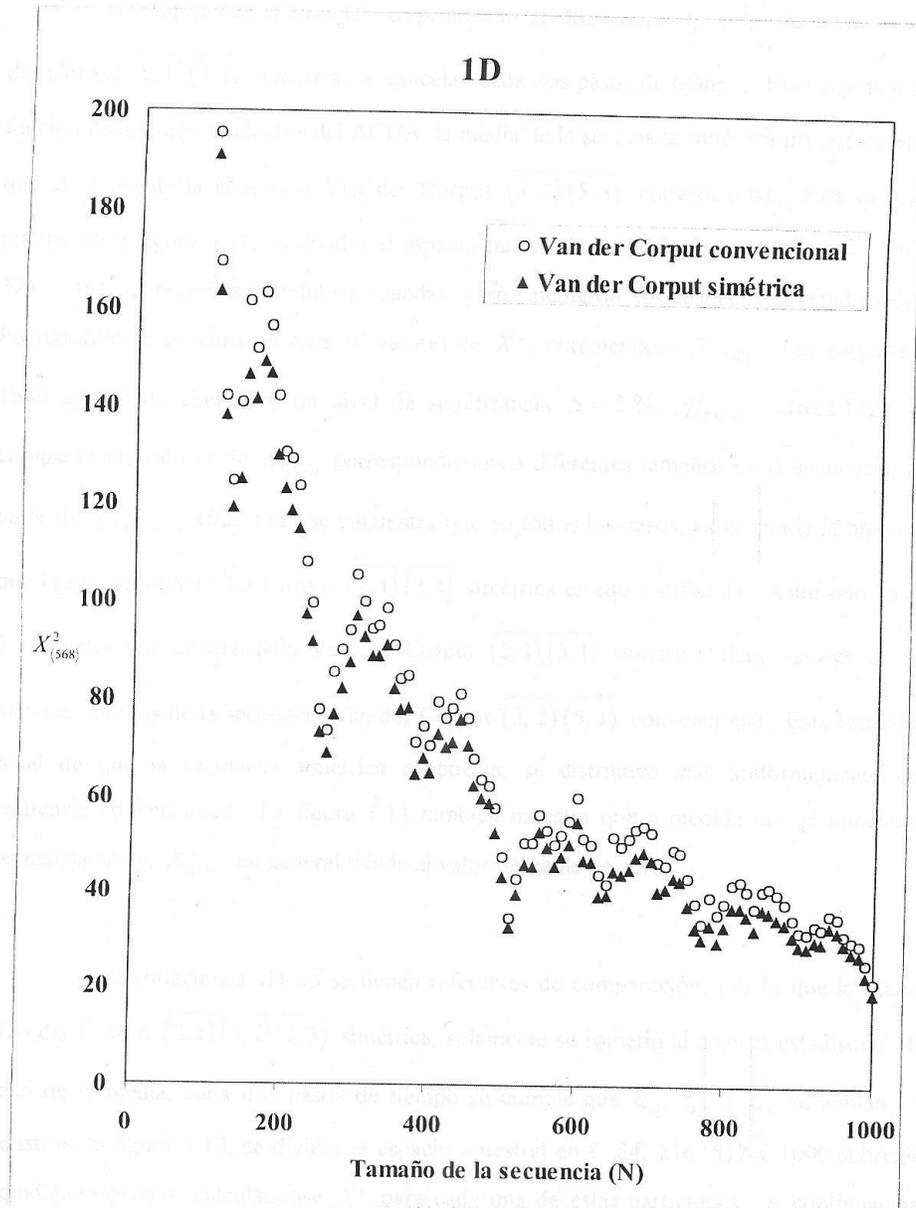


Figura 3.10. Comparación de Chi cuadrada múltiple entre secuencias Van der Corput $(\overline{2,1})$ convencional y simétrica.

Al igual que en el caso 1D, en problemas 2D los valores $\overline{\xi}_x$ y $\overline{\xi}_y$ de la secuencia Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}$ simétrica, se cancelan cada dos pasos de tiempo. Esto significa que en función de los requerimientos del ACUA, la media de la secuencia simétrica propuesta es mejor que la media de la secuencia Van der Corput $\overline{(3,2)}\overline{(5,3)}$ convencional. Para obtener los puntos de la figura 3.11, se dividió el espacio muestral en 4, 16, 36, 64, 100, 144, 196, 256, 324 y 400 subregiones equidimensionadas, y se calcularon sus respectivos estadísticos X^2 . Posteriormente se sumaron esos 10 valores de X^2 , obteniéndose $X^2_{(1530)}$. Por su parte, para 1530 grados de libertad y un nivel de significancia $\alpha = 5\%$, $\chi^2_{1530;0.05} = 1622.112$. Si se comparan los valores de $X^2_{(1530)}$ correspondientes a diferentes tamaños de la secuencia, con el valor de $\chi^2_{1530;0.05} = 1622.112$, se encuentra que en todos los casos, es aceptada la hipótesis de que la secuencia Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}$ simétrica es equidistribuida. Asimismo, la figura 3.11 ilustra que la secuencia Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}$ simétrica, tiene valores de $X^2_{(1530)}$ menores que los de la secuencia Van der Corput $\overline{(3,2)}\overline{(5,3)}$ convencional. Este resultado, es señal de que la secuencia simétrica propuesta, se distribuye más uniformemente que la secuencia convencional. La figura 3.11 también muestra que a medida que el tamaño de la secuencia crece, $X^2_{(1530)}$ en general tiende al valor deseable de cero.

Para situaciones 3D no se tienen referentes de comparación, por lo que la secuencia Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}\overline{(7,3)}$ simétrica, solamente se sometió al análisis estadístico. En el caso de la media, cada dos pasos de tiempo se cumple que $\overline{\xi}_x$, $\overline{\xi}_y$ y $\overline{\xi}_z$ se anulan. Para construir la figura 3.12, se dividió el espacio muestral en 8, 64, 216, 512 y 1000 subregiones equidimensionadas, calculándose X^2 para cada una de estas particiones. A continuación, se sumaron los 5 valores de X^2 para obtener $X^2_{(1795)}$. A su vez, si se tienen 1795 grados de libertad, y si se escoge $\alpha = 5\%$, entonces $\chi^2_{1795;0.05} = 1894.678$.

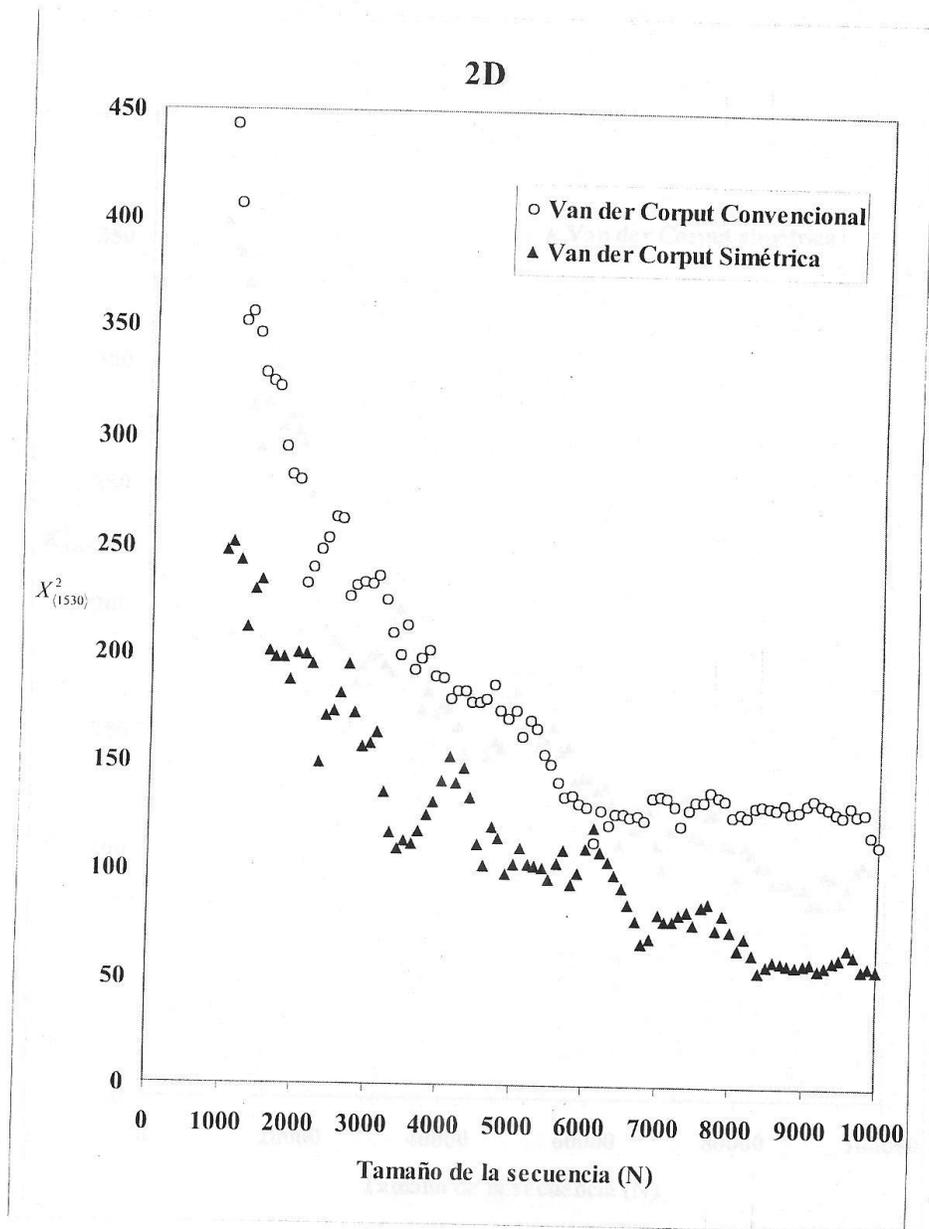


Figura 3.11. Comparación de chi cuadrada múltiple entre secuencias Van der Corput $\overline{(3,2)}\overline{(5,3)}$ convencional y Van der Corput $\overline{(2,1)}\overline{(3,1)}$ simétrica.

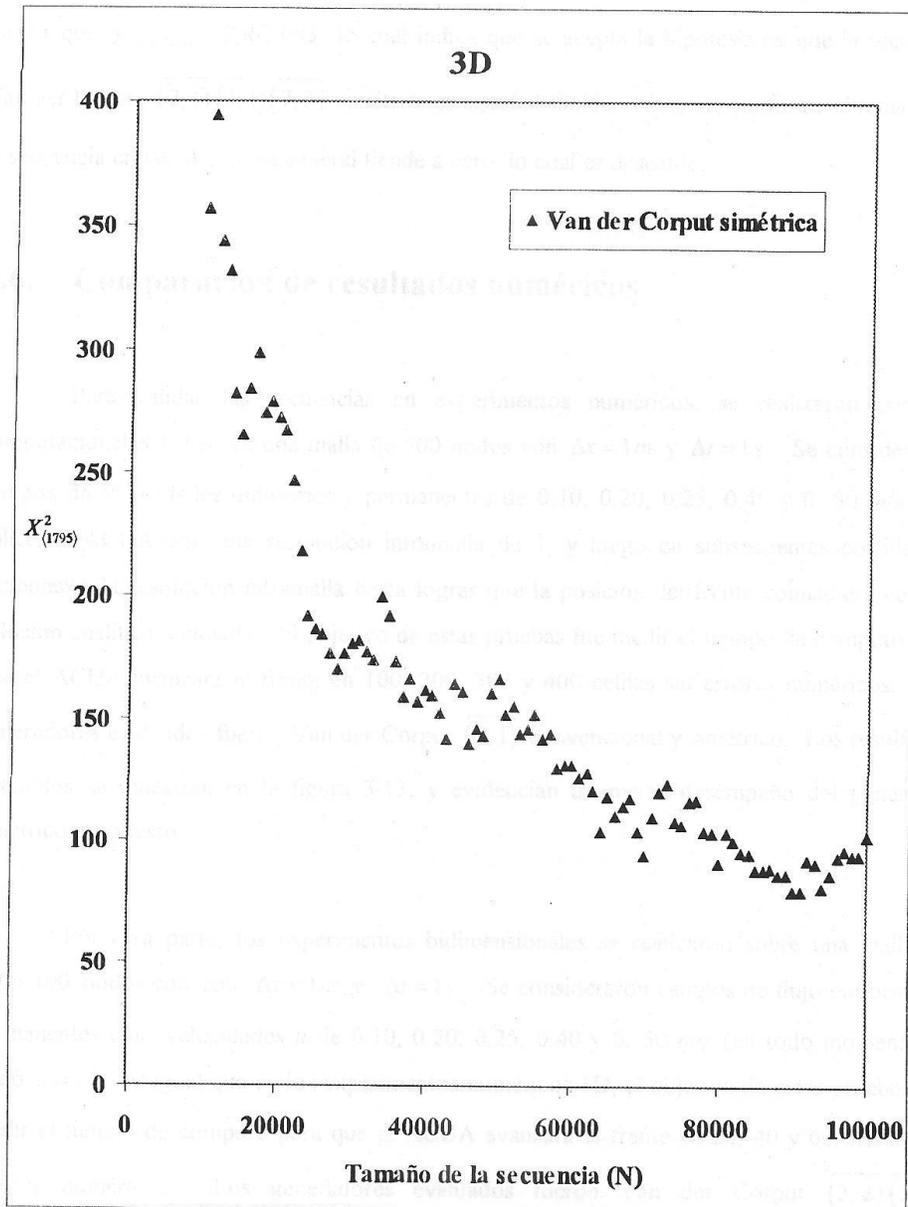


Figura 3.12. Chi cuadrada múltiple de la secuencia Van der Corput $(2,1)(3,1)(7,3)$ simétrica.

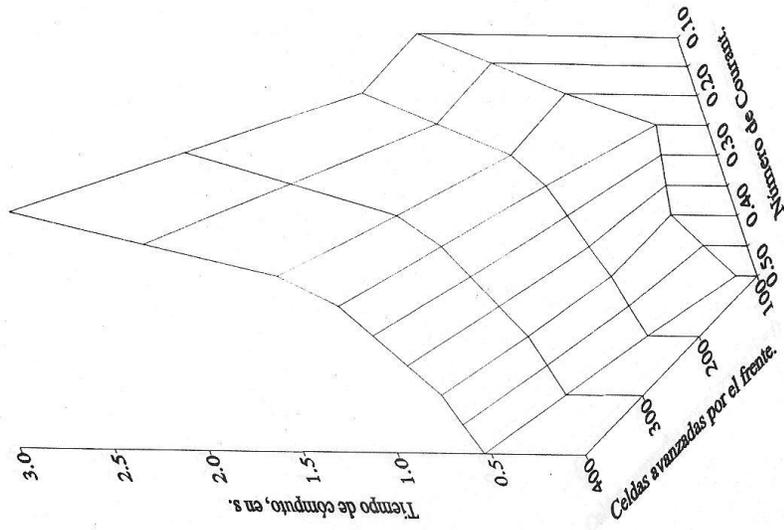
La figura 3.12 muestra que para diferentes tamaños de la secuencia, $X_{(1795)}^2$ siempre es menor que $\chi_{1795,0.001}^2 = 2062.083$, lo cual indica que se acepta la hipótesis de que la secuencia Van der Corput $(\overline{2,1})(\overline{3,1})(\overline{7,3})$ simétrica es equidistribuida. Además, conforme el tamaño de la secuencia crece, $X_{(1795)}^2$ en general tiende a cero, lo cual es deseable.

3.6. Comparación de resultados numéricos

Para validar las secuencias en experimentos numéricos, se realizaron corridas computacionales 1D sobre una malla de 500 nodos con $\Delta x = 1m$ y $\Delta t = 1s$. Se consideraron campos de velocidades uniformes y permanentes de 0.10, 0.20, 0.25, 0.40 y 0.50 m/s. Se aplicó el ACUA con una resolución intramalla de 1, y luego en subsecuentes corridas se incrementó la resolución intramalla hasta lograr que la posición del frente coincidiera con la solución analítica conocida. El objetivo de estas pruebas fue medir el tiempo de cómputo para que el ACUA avanzara el frente en 100, 200, 300 y 400 celdas sin errores numéricos. Los generadores evaluados fueron Van der Corput $(\overline{2,1})$ convencional y simétrico. Los resultados obtenidos se muestran en la figura 3.13, y evidencian un mejor desempeño del generador simétrico propuesto.

Por otra parte, los experimentos bidimensionales se realizaron sobre una malla de 100×100 nodos con $\Delta x = \Delta y = 1m$ y $\Delta t = 1s$. Se consideraron campos de flujo uniformes y permanentes con velocidades u de 0.10, 0.20, 0.25, 0.40 y 0.50 m/s (en todo momento se tomó $u = v$). Al igual que en los experimentos numéricos 1D, el objetivo de estas pruebas fue medir el tiempo de cómputo para que el ACUA avanzara el frente en 20, 40 y 60 celdas, sin errores numéricos. Los generadores evaluados fueron Van der Corput $(\overline{3,2})(\overline{5,3})$ convencional y Van der Corput $(\overline{2,1})(\overline{3,1})$ simétrico. Los resultados obtenidos (figura 3.14) confirmaron claramente la hipótesis del mejor comportamiento de las secuencias simétricas.

Van der Corput convencional



Van der Corput Simétrica

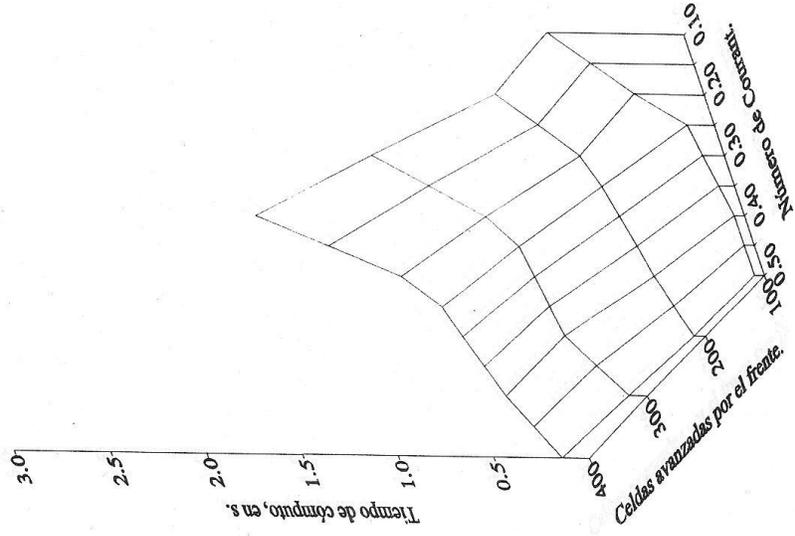
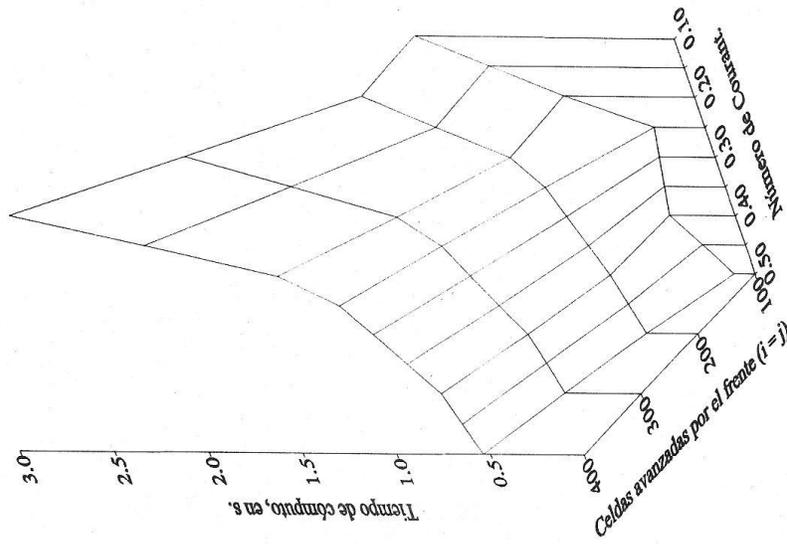


Figura 3.13. Comparación de tiempo de cómputo (1D).

Van der Corput Convencional



Van der Corput Simétrica

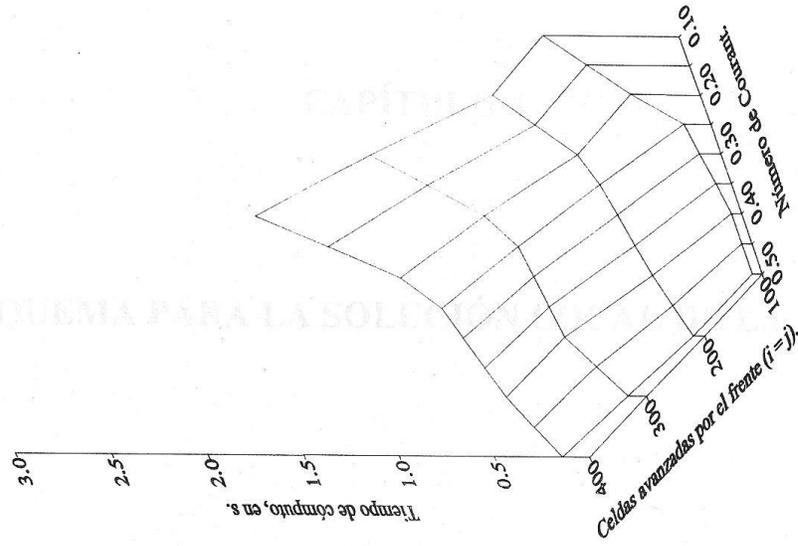


Figura 3.14. Comparación de tiempo de cómputo (2D).

4.1. Esquema en diferencias finitas para el ALEA

El ALEA se aproxima al ALEA continuo para el caso de un paso de tiempo Δt y un paso de espacio Δx suficientemente pequeños. El ALEA se aproxima al ALEA continuo para el caso de un paso de tiempo Δt y un paso de espacio Δx suficientemente pequeños. El ALEA se aproxima al ALEA continuo para el caso de un paso de tiempo Δt y un paso de espacio Δx suficientemente pequeños.

CAPÍTULO 4

ESQUEMA PARA LA SOLUCIÓN LOCAL DE LA EAD

Las velocidades de onda de la EAD se aproximan a las velocidades de la EAD. Las velocidades de onda de la EAD se aproximan a las velocidades de la EAD. Las velocidades de onda de la EAD se aproximan a las velocidades de la EAD.

$$u_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{i,j}^n + u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2 \Delta x} (u_{i,j}^n - u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2 \Delta x} (u_{i,j}^n - u_{i,j}^{n-1})$$

Considerando que el ALEA es un caso particular de la EAD, se puede utilizar el mismo esquema para la solución local de la EAD. El ALEA es un caso particular de la EAD, se puede utilizar el mismo esquema para la solución local de la EAD.

$$u_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{i,j}^n + u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2 \Delta x} (u_{i,j}^n - u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2 \Delta x} (u_{i,j}^n - u_{i,j}^{n-1})$$

Multiplicando Δx por cada uno de los vectores unitarios, se tiene:

$$\begin{aligned} \Delta x u_{i,j}^{n+1} &= \frac{1}{2} (\Delta x u_{i,j}^n + \Delta x u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2} (\Delta x u_{i,j}^n - \Delta x u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2} (\Delta x u_{i,j}^n - \Delta x u_{i,j}^{n-1}) \\ \Delta x u_{i,j}^{n+1} &= \frac{1}{2} (\Delta x u_{i,j}^n + \Delta x u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2} (\Delta x u_{i,j}^n - \Delta x u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2} (\Delta x u_{i,j}^n - \Delta x u_{i,j}^{n-1}) \\ \Delta x u_{i,j}^{n+1} &= \frac{1}{2} (\Delta x u_{i,j}^n + \Delta x u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2} (\Delta x u_{i,j}^n - \Delta x u_{i,j}^{n-1}) + \frac{c \Delta t}{2} (\Delta x u_{i,j}^n - \Delta x u_{i,j}^{n-1}) \end{aligned}$$

4.1. Esquema en diferencias finitas para el ACUA

El ACUA es un método concebido para el transporte advectivo de frentes, pero actualmente su esquema numérico está prácticamente limitado a situaciones unidimensionales. Partiendo de la ecuación advectiva local (2.6), en esta sección se desarrolla el esquema numérico del ACUA tridimensional.

Si se escoge una secuencia equidistribuida para la operación de muestreo, entonces en la representación en diferencias finitas de la ecuación (2.6), se pueden considerar las velocidades cuánticas definidas en las ecuaciones (3.10), lo cual según las igualdades (3.14) garantizaría el transporte de las ondas a la velocidad correcta. De esta manera, se tiene que

$$(4.1) \diamond \frac{\Delta \tilde{C}|_{i,j,k}^n}{\Delta t} = -\tilde{u}|_{i,j,k}^n \frac{\Delta \tilde{C}|_{i,j,k}^n}{\Delta x} - \tilde{v}|_{i,j,k}^n \frac{\Delta \tilde{C}|_{i,j,k}^n}{\Delta y} - \tilde{w}|_{i,j,k}^n \frac{\Delta \tilde{C}|_{i,j,k}^n}{\Delta z}.$$

Considerando que en el ACUA, las ondas permanecen estacionarias o se desplazan únicamente desde un nodo a otro (las ondas no se mueven a posiciones internodales), podemos definir ese desplazamiento (Δs) mediante

$$(4.2) \diamond \Delta s|_{i,j,k}^n = \text{esc}(u|_{i,j,k}^n) \Delta x \hat{\mathbf{i}} + \text{esc}(v|_{i,j,k}^n) \Delta y \hat{\mathbf{j}} + \text{esc}(w|_{i,j,k}^n) \Delta z \hat{\mathbf{k}}.$$

Multiplicando Δs por cada uno de los vectores unitarios, se tiene:

$$(4.3) \diamond \begin{aligned} \hat{\mathbf{i}} \cdot \Delta s|_{i,j,k}^n &= \text{esc}(u|_{i,j,k}^n) \Delta x \\ \hat{\mathbf{j}} \cdot \Delta s|_{i,j,k}^n &= \text{esc}(v|_{i,j,k}^n) \Delta y \\ \hat{\mathbf{k}} \cdot \Delta s|_{i,j,k}^n &= \text{esc}(w|_{i,j,k}^n) \Delta z. \end{aligned}$$

Multiplicando las ecuaciones (4.3) por $\text{esc}(u_{i,j,k}^n)$, $\text{esc}(v_{i,j,k}^n)$ y $\text{esc}(w_{i,j,k}^n)$ respectivamente, se tiene que:

$$(4.4) \diamond \begin{aligned} \Delta x &= \text{esc}(u_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{i}} \cdot \Delta \mathbf{s}_{i,j,k}^n \\ \Delta y &= \text{esc}(v_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{j}} \cdot \Delta \mathbf{s}_{i,j,k}^n \\ \Delta z &= \text{esc}(w_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{k}} \cdot \Delta \mathbf{s}_{i,j,k}^n \end{aligned}$$

Por lo que la expresión (4.1) se transforma en

$$(4.5) \diamond \frac{\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\Delta t} = -\text{esc}(u_{i,j,k}^n) (\tilde{u}_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{i}} \cdot \frac{\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\Delta s_{i,j,k}^n} - \text{esc}(v_{i,j,k}^n) (\tilde{v}_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{j}} \cdot \frac{\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\Delta s_{i,j,k}^n} - \text{esc}(w_{i,j,k}^n) (\tilde{w}_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{k}} \cdot \frac{\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\Delta s_{i,j,k}^n}$$

El ACUA deberá garantizar que cualquier perturbación se propague principalmente en la dirección del flujo. En búsqueda de un esquema que posea este atributo, definido por Roache [1976] como propiedad transportadora, la ecuación (4.5) se discretiza con el esquema veleta (*upwind*) de primer orden, resultando

$$(4.6) \diamond \frac{\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\Delta t} = -(\tilde{u}_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{i}} \cdot \frac{\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\Delta s_{i,j,k}^n} - (\tilde{v}_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{j}} \cdot \frac{\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\Delta s_{i,j,k}^n} - (\tilde{w}_{i,j,k}^n) \hat{\mathbf{k}} \cdot \frac{\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n}{\Delta s_{i,j,k}^n},$$

donde

$$(4.7) \diamond \Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n = \tilde{C}_{i,j,k}^n - \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n$$

Entonces,

$$(4.8) \diamond \Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n = - \left[\tilde{u}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{i}} + \tilde{v}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{j}} + \tilde{w}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{k}} \right] \cdot \frac{\Delta t}{\Delta s_{i,j,k}^n} \Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n = - \tilde{\mathbf{q}}_{i,j,k}^n \cdot \frac{\Delta t}{\Delta s_{i,j,k}^n} \Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n.$$

Si se define el número de avance (Γ) como

$$(4.9) \diamond \Gamma_{i,j,k}^n = \tilde{\mathbf{q}}_{i,j,k}^n \cdot \frac{\Delta t}{\Delta s_{i,j,k}^n},$$

entonces la ecuación (4.8) se convierte en

$$(4.10) \diamond \Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n = - \Gamma_{i,j,k}^n \Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n = - \Gamma_{i,j,k}^n \left(\tilde{C}_{i,j,k}^n - \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n \right).$$

Discretizando $\Delta \tilde{C}_{i,j,k}^n$ hacia delante en el tiempo, resulta

$$(4.11) \diamond \tilde{C}_{i,j,k}^{n+1} = \Gamma_{i,j,k}^n \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n + (1 - \Gamma_{i,j,k}^n) \tilde{C}_{i,j,k}^n.$$

Esta ecuación es el esquema numérico del ACUA.

Respecto al comportamiento de $\Gamma_{i,j,k}^n$, nótese que cuando $\tilde{u}_{i,j,k}^n$, $\tilde{v}_{i,j,k}^n$ y $\tilde{w}_{i,j,k}^n$ son todas cero, $\Gamma_{i,j,k}^n$ también toma el valor de cero. Ahora, en el caso de que la onda avance desde un nodo adyacente, según la ecuación (4.2) se tiene que

$$(4.12) \diamond \frac{\Delta s_{i,j,k}^n}{\Delta t} = \text{esc}(u_{i,j,k}^n) \frac{\Delta x}{\Delta t} \hat{\mathbf{i}} + \text{esc}(v_{i,j,k}^n) \frac{\Delta y}{\Delta t} \hat{\mathbf{j}} + \text{esc}(w_{i,j,k}^n) \frac{\Delta z}{\Delta t} \hat{\mathbf{k}}.$$

Retomando la definición de las velocidades cuánticas dada por la expresión (3.10), se obtiene

$$(4.13) \diamond \frac{\Delta s_{i,j,k}^n}{\Delta t} = \tilde{u}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{i}} + \tilde{v}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{j}} + \tilde{w}_{i,j,k}^n \hat{\mathbf{k}} = \tilde{\mathbf{q}}_{i,j,k}^n.$$

Sustituyendo la ecuación (4.13) en la expresión (4.9), se llega a

$$(4.14) \diamond \Gamma_{i,j,k}^n = \frac{\Delta s_{i,j,k}^n}{\Delta t} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta s_{i,j,k}^n} = 1.$$

Esto significa que, $\Gamma_{i,j,k}^n$ sólo puede tomar los valores de 0 ó 1. De esta manera, en un nodo y un paso de tiempo determinados, dependiendo del término que se anule en el esquema (4.11), la onda avanzará desde un nodo vecino o permanecerá en el mismo nodo.

4.2. Esquema ACUA - diferencias centradas

Al aplicar el esquema (4.11) del ACUA a la componente advectiva de la EAD, y el conocido esquema en diferencias centradas a la componente difusiva del transporte, surge el esquema euleriano - lagrangiano (4.15) que se aplica localmente en el entorno de cada nodo.

$$(4.15) \diamond \begin{aligned} \tilde{C}_{i,j,k}^{n+1} = & \Gamma_{i,j,k}^n \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n + [1 - \Gamma_{i,j,k}^n] \tilde{C}_{i,j,k}^n \\ & + \Delta t \left[D_x \left(\frac{\tilde{C}_{i-1,j,k}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i+1,j,k}^n}{\Delta x^2} \right) + D_y \left(\frac{\tilde{C}_{i,j-1,k}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i,j+1,k}^n}{\Delta y^2} \right) \right. \\ & \left. + D_z \left(\frac{\tilde{C}_{i,j,k-1}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i,j,k+1}^n}{\Delta z^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

4.3. Análisis de consistencia

La consistencia implica que la discretización puede revertirse aplicando series de Taylor para recuperar la EDP original. Para probar la consistencia, los valores nodales de $\tilde{C}_{i,j,k}^{n+1}$ y de $\tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n$ se expandirán en series de Taylor en el tiempo y en el espacio, y la solución exacta será sustituida en la ecuación discretizada.

Expandiendo $\tilde{C}_{i,j,k}^{n+1}$ en el tiempo mediante una serie de Taylor de segundo orden, se tiene que

$$(4.16) \diamond \tilde{C}_{i,j,k}^{n+1} = \tilde{C}_{i,j,k}^n + \Delta t \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} \right) + \text{MOT},$$

donde MOT contiene las derivadas de mayor orden con respecto al tiempo.

Luego, suponiendo que los coeficientes de dispersión son constantes, se diferencia la EAD con respecto al tiempo, quedando

$$(4.17) \diamond \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = -u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) - v \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) - w \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) + D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) + D_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right).$$

Sustituyendo la EAD,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = & -u \frac{\partial}{\partial x} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} - w \frac{\partial c}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \\
& -v \frac{\partial}{\partial y} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} - w \frac{\partial c}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \\
& -w \frac{\partial}{\partial z} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} - w \frac{\partial c}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \\
(4.18) \diamond & + D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} - w \frac{\partial c}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \\
& + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} - w \frac{\partial c}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \\
& + D_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} - v \frac{\partial c}{\partial y} - w \frac{\partial c}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right).
\end{aligned}$$

Reagrupando términos,

$$\begin{aligned}
(4.19) \diamond \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = & u^2 \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) + uv \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} \right) + uw \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} \right) + v^2 \left(\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) + uv \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} \right) + \\
& vw \left(\frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} \right) + w^2 \left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) + uw \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} \right) + vw \left(\frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} \right) + \text{MOE},
\end{aligned}$$

donde MOE contiene las derivadas de mayor orden respecto al espacio. Reordenando,

$$(4.20) \diamond \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v^2 \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + w^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + 2 \left(uv \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + uw \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} + vw \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} \right) + \text{MOE}.$$

Combinando las ecuaciones (4.16) y (4.20), se puede obtener

$$\begin{aligned}
(4.21) \diamond \tilde{C}_{i,j,k}^{n+1} = & \tilde{C}_{i,j,k}^n + \Delta t \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \left[u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v^2 \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + w^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right. \\
& \left. + 2 \left(uv \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + uw \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} + vw \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} \right) \right] + \text{MOE} + \text{MOT}.
\end{aligned}$$

Suponiendo que MOT y MOE son despreciables, de las ecuaciones (4.15) y (4.21) se llega a

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial c}{\partial t} = & -\frac{\Delta t}{2} \left[u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v^2 \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + w^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + 2 \left(uv \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + uw \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} + vw \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} \right) \right] \\
 & + \frac{\Gamma_{i,j,k}^n}{\Delta t} \left(\tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n - \tilde{C}_{i,j,k}^n \right) \\
 (4.22) \diamond & + D_x \left(\frac{\tilde{C}_{i-1,j,k}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i+1,j,k}^n}{\Delta x^2} \right) + D_y \left(\frac{\tilde{C}_{i,j-1,k}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i,j+1,k}^n}{\Delta y^2} \right) \\
 & + D_z \left(\frac{\tilde{C}_{i,j,k-1}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i,j,k+1}^n}{\Delta z^2} \right).
 \end{aligned}$$

Ahora, expandiendo $\tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n$ en el espacio mediante una serie de

Taylor de segundo orden, se tiene la siguiente ecuación (4.23) \diamond

$$\begin{aligned}
 \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n = & \tilde{C}_{i,j,k}^n - \\
 & \left[\text{esc}(u_{i,j,k}^n) \Delta x \frac{\partial c}{\partial x} + \text{esc}(v_{i,j,k}^n) \Delta y \frac{\partial c}{\partial y} + \text{esc}(w_{i,j,k}^n) \Delta z \frac{\partial c}{\partial z} \right] - \\
 & \left[\text{esc}(u_{i,j,k}^n) \right]^2 \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \left[\text{esc}(v_{i,j,k}^n) \right]^2 \frac{(\Delta y)^2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - \\
 & \left[\text{esc}(w_{i,j,k}^n) \right]^2 \frac{(\Delta z)^2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \\
 & 2 \left[-\text{esc}(u_{i,j,k}^n) \right] \Delta x \left[-\text{esc}(v_{i,j,k}^n) \right] \Delta y \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + \\
 & 2 \left[-\text{esc}(u_{i,j,k}^n) \right] \Delta x \left[-\text{esc}(w_{i,j,k}^n) \right] \Delta z \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} + \\
 & 2 \left[-\text{esc}(v_{i,j,k}^n) \right] \Delta y \left[-\text{esc}(w_{i,j,k}^n) \right] \Delta z \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} + \text{MOE},
 \end{aligned}$$

donde $\text{esc}(u_{i,j,k}^n)$, $\text{esc}(v_{i,j,k}^n)$, $\text{esc}(w_{i,j,k}^n)$ sólo pueden tomar valores de $-1, 0$ ó 1 .

Si se supone que la velocidad durante cualquier paso de tiempo es uniforme, entonces

$$(4.24) \diamond \Delta s = \tilde{q} \Delta t = \tilde{u} \Delta t \hat{i} + \tilde{v} \Delta t \hat{j} + \tilde{w} \Delta t \hat{k}.$$

Igualando las ecuaciones (4.2) y (4.24) se tiene que:

$$(4.25) \diamond \begin{aligned} \tilde{u}_{i,j,k}^n \Delta t &= \text{esc}(u_{i,j,k}^n) \Delta x \\ \tilde{v}_{i,j,k}^n \Delta t &= \text{esc}(v_{i,j,k}^n) \Delta y \\ \tilde{w}_{i,j,k}^n \Delta t &= \text{esc}(w_{i,j,k}^n) \Delta z, \end{aligned}$$

lo cual al introducirse en la ecuación (4.23), la transforma en la siguiente ecuación (4.26) \diamond

$$(4.26) \diamond \begin{aligned} \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n),j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n),k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n &= \tilde{C}_{i,j,k}^n - \Delta t \left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \frac{\partial c}{\partial x} + \tilde{v}_{i,j,k}^n \frac{\partial c}{\partial y} + \tilde{w}_{i,j,k}^n \frac{\partial c}{\partial z} \right) + \\ &\frac{\Delta t^2}{2} \left(\left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \right)^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \left(\tilde{v}_{i,j,k}^n \right)^2 \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \left(\tilde{w}_{i,j,k}^n \right)^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) + \\ &\Delta t^2 \left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \tilde{v}_{i,j,k}^n \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + \tilde{v}_{i,j,k}^n \tilde{w}_{i,j,k}^n \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} + \right. \\ &\left. \tilde{u}_{i,j,k}^n \tilde{w}_{i,j,k}^n \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} \right). \end{aligned}$$

Finalmente, sustituyendo esta expresión en la ecuación (4.22) y recordando que en la discretización:

$$\begin{aligned}
D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} &\approx D_x \left(\frac{\tilde{C}_{i-1,j,k}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i+1,j,k}^n}{\Delta x^2} \right) \\
(4.27) \diamond D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} &\approx D_y \left(\frac{\tilde{C}_{i,j-1,k}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i,j+1,k}^n}{\Delta y^2} \right) \\
D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} &\approx D_z \left(\frac{\tilde{C}_{i,j,k-1}^n - 2\tilde{C}_{i,j,k}^n + \tilde{C}_{i,j,k+1}^n}{\Delta z^2} \right),
\end{aligned}$$

resulta la siguiente ecuación (4.28) ♦

$$\begin{aligned}
\frac{\partial c}{\partial t} = & - \left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \frac{\partial c}{\partial x} + \tilde{v}_{i,j,k}^n \frac{\partial c}{\partial y} + \tilde{w}_{i,j,k}^n \frac{\partial c}{\partial z} \right) + D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \\
& \frac{\Delta t}{2} \left\{ \left[\left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \right)^2 - u^2 \right] \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \left[\left(\tilde{v}_{i,j,k}^n \right)^2 - v^2 \right] \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \left[\left(\tilde{w}_{i,j,k}^n \right)^2 - w^2 \right] \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right\} + \\
& \Delta t \left[\left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \tilde{v}_{i,j,k}^n - uv \right) \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + \left(\tilde{v}_{i,j,k}^n \tilde{w}_{i,j,k}^n - vw \right) \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} + \left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \tilde{w}_{i,j,k}^n - uw \right) \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} \right],
\end{aligned}$$

que está compuesta de un tipo de EAD más un residuo, el cual tiende a cero cuando Δx , Δy , Δz , $\Delta t \rightarrow 0$. Bajo estas condiciones, la ecuación (4.28) se reduce a

$$(4.29) \diamond \frac{\partial c}{\partial t} + \tilde{u} \frac{\partial c}{\partial x} + \tilde{v} \frac{\partial c}{\partial y} + \tilde{w} \frac{\partial c}{\partial z} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}.$$

Ahora, de acuerdo con lo encontrado en la sección 3.1, si \tilde{u} , \tilde{v} , \tilde{w} se obtienen a partir de secuencias equidistribuida, entonces los valores esperados $E(\tilde{u})$, $E(\tilde{v})$, $E(\tilde{w})$, serán iguales a u , v , w , respectivamente; por tanto, el valor esperado de la expresión (4.29) es igual a la EAD, lográndose así la consistencia local del esquema (4.15). Como se infiere de este resultado, la forma en que el ACUA propaga la solución es diferente a como lo hacen los métodos convencionales, requiriéndose una cuidadosa selección de la secuencia $\{\xi\}$.

4.4. Análisis de estabilidad

Dado que la solución exacta de la EAD tiene una norma (o energía) que no crece con el tiempo, parece razonable pedir lo mismo de la solución aproximada [Chan, 1984]. La estabilidad está relacionada con el crecimiento o decaimiento de perturbaciones espontáneas (tales como errores de redondeo), introducidas en cualquier momento del cómputo. El procedimiento más sencillo para el establecimiento de condiciones necesarias y suficientes para la estabilidad, es el método de Von Neumann, el cual tiene una amplia aceptación dentro de la comunidad académica [Trapp y Ramshaw, 1976], por lo que se aplicará al análisis de estabilidad del ACUA. En la EAD frecuentemente se involucran velocidades de flujo variables y no linealidades de c , pero si como sucede con el ACUA, la ecuación en diferencias se linealiza alrededor de una vecindad en el espacio y en el tiempo, entonces las condiciones para la aplicabilidad del método de Von Neumann son satisfechas localmente.

Stone y Brian [1963] establecieron que la solución de una ecuación diferencial así como la solución de la ecuación en diferencias, pueden escribirse en la forma de una serie de Fourier. Entonces, la solución general del problema de Riemann definido por las ecuaciones (2.6), (2.7) y (2.8) puede representarse mediante

$$(4.30) \diamond \tilde{C} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \tilde{C}_l e^{i(\sigma_x x + \sigma_y y + \sigma_z z + \omega t)},$$

donde: \tilde{C}_l es la l -ésima componente de la serie de Fourier; ω es la frecuencia; $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ son los números de onda en las direcciones x, y, z , respectivamente; $e^{\hat{i}} = \sqrt{-1}$.

Dado que la solución del ACUA se considera lineal, sólo se necesitaría analizar una componente de la suma (4.30), *i. e.*

$$(4.31) \diamond \tilde{C}(x, y, z, t) \sim \tilde{C}_l e^{\tilde{i}(\sigma_{xl}x + \sigma_{yl}y + \sigma_{zl}z + \omega_l t)}$$

Aplicando la expresión (4.31) a la ecuación (4.15), se tiene que

$$(4.32) \diamond \begin{aligned} \tilde{C}_{l,i,j,k}^{n+1} &= \Gamma_{l,i,j,k}^n \tilde{C}_l^n e^{\tilde{i}[\sigma_{xl}[i-\text{esc}(u_{l,j,k}^n)]\Delta x + \sigma_{yl}[j-\text{esc}(v_{l,j,k}^n)]\Delta y + \sigma_{zl}[k-\text{esc}(w_{l,j,k}^n)]\Delta z + \omega_l n \Delta t]} + \\ &\quad (1 - \Gamma_{l,i,j,k}^n) \tilde{C}_l^n e^{\tilde{i}\kappa_l} + \\ &\quad \Delta t \tilde{C}_l^n \left\{ D_x \left[\frac{e^{\tilde{i}[\sigma_{xl}(i-1)\Delta x + \sigma_{yl}j\Delta y + \sigma_{zl}k\Delta z + \omega_l n \Delta t]} - 2e^{\tilde{i}\kappa_l} + e^{\tilde{i}[\sigma_{xl}(i+1)\Delta x + \sigma_{yl}j\Delta y + \sigma_{zl}k\Delta z + \omega_l n \Delta t]}}{(\Delta x)^2} \right] + \right. \\ &\quad D_y \left[\frac{e^{\tilde{i}[\sigma_{xl}i\Delta x + \sigma_{yl}(j-1)\Delta y + \sigma_{zl}k\Delta z + \omega_l n \Delta t]} - 2e^{\tilde{i}\kappa_l} + e^{\tilde{i}[\sigma_{xl}i\Delta x + \sigma_{yl}(j+1)\Delta y + \sigma_{zl}k\Delta z + \omega_l n \Delta t]}}{(\Delta y)^2} \right] + \\ &\quad \left. D_z \left[\frac{e^{\tilde{i}[\sigma_{xl}i\Delta x + \sigma_{yl}j\Delta y + \sigma_{zl}(k-1)\Delta z + \omega_l n \Delta t]} - 2e^{\tilde{i}\kappa_l} + e^{\tilde{i}[\sigma_{xl}i\Delta x + \sigma_{yl}j\Delta y + \sigma_{zl}(k+1)\Delta z + \omega_l n \Delta t]}}{(\Delta z)^2} \right] \right\}, \end{aligned}$$

siendo

$$(4.33) \diamond \kappa_l = \sigma_{xl} i \Delta x + \sigma_{yl} j \Delta y + \sigma_{zl} k \Delta z + \omega_l n \Delta t.$$

Factorizando en la ecuación (4.32), resulta

$$(4.34) \diamond \begin{aligned} \tilde{C}_{l,i,j,k}^{n+1} &= \tilde{C}_l^n e^{\tilde{i}\kappa_l} \left\{ \Gamma_{l,i,j,k}^n e^{-\tilde{i}[\sigma_{xl}\text{esc}(u_{l,j,k}^n)\Delta x + \sigma_{yl}\text{esc}(v_{l,j,k}^n)\Delta y + \sigma_{zl}\text{esc}(w_{l,j,k}^n)\Delta z + \omega_l n \Delta t]} + (1 - \Gamma_{l,i,j,k}^n) + \right. \\ &\quad \Delta t \left[D_x \left(\frac{e^{-i(\sigma_{xl}\Delta x)} - 2 + e^{i(\sigma_{xl}\Delta x)}}{(\Delta x)^2} \right) + D_y \left(\frac{e^{-i(\sigma_{yl}\Delta y)} - 2 + e^{i(\sigma_{yl}\Delta y)}}{(\Delta y)^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. \left. D_z \left(\frac{e^{-i(\sigma_{zl}\Delta z)} - 2 + e^{i(\sigma_{zl}\Delta z)}}{(\Delta z)^2} \right) \right] \right\}. \end{aligned}$$

De acuerdo con la ecuación (4.31), $\tilde{C}_{i,j,k}^n = \tilde{C}_l^n e^{\tilde{i}k_l}$. Entonces (4.34) se convierte en

$$(4.35) \diamond \quad \frac{\tilde{C}_{i,j,k}^{n+1}}{\tilde{C}_{i,j,k}^n} = \Gamma_{i,j,k}^n e^{-\tilde{i}(\sigma_{x_l}\Delta x + \sigma_{y_l}\Delta y + \sigma_{z_l}\Delta z)} + (1 - \Gamma_{i,j,k}^n) + \Delta t \left[D_x \frac{(e^{-\tilde{i}\sigma_{x_l}\Delta x} - 2 + e^{\tilde{i}\sigma_{x_l}\Delta x})}{\Delta x^2} + D_y \frac{(e^{-\tilde{i}\sigma_{y_l}\Delta y} - 2 + e^{\tilde{i}\sigma_{y_l}\Delta y})}{\Delta y^2} + D_z \frac{(e^{-\tilde{i}\sigma_{z_l}\Delta z} - 2 + e^{\tilde{i}\sigma_{z_l}\Delta z})}{\Delta z^2} \right].$$

Usando $e^{\tilde{i}(\cdot)} = \widehat{cfs}(\cdot)$, la ecuación (4.35) se modifica a

$$(4.36) \diamond \quad \frac{\tilde{C}_{i,j,k}^{n+1}}{\tilde{C}_{i,j,k}^n} = 1 - \Gamma_{i,j,k}^n - 2\Delta t \left[\frac{D_x}{(\Delta x)^2} + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} + \frac{D_z}{(\Delta z)^2} \right] + \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_l^n) + \Delta t \left[\frac{D_x}{(\Delta x)^2} \cos(-\sigma_{x_l}\Delta x) + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} \cos(-\sigma_{y_l}\Delta y) + \frac{D_z}{(\Delta z)^2} \cos(-\sigma_{z_l}\Delta z) + \frac{D_x}{(\Delta x)^2} \cos(\sigma_{x_l}\Delta x) + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} \cos(\sigma_{y_l}\Delta y) + \frac{D_z}{(\Delta z)^2} \cos(\sigma_{z_l}\Delta z) \right] + \widehat{i} \left\{ \Gamma_{i,j,k}^n \operatorname{sen}(\Psi_l^n) + \Delta t \left[\frac{D_x}{(\Delta x)^2} \operatorname{sen}(-\sigma_{x_l}\Delta x) + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} \operatorname{sen}(-\sigma_{y_l}\Delta y) + \frac{D_z}{(\Delta z)^2} \operatorname{sen}(-\sigma_{z_l}\Delta z) + \frac{D_x}{(\Delta x)^2} \operatorname{sen}(\sigma_{x_l}\Delta x) + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} \operatorname{sen}(\sigma_{y_l}\Delta y) + \frac{D_z}{(\Delta z)^2} \operatorname{sen}(\sigma_{z_l}\Delta z) \right] \right\},$$

donde

$$(4.37) \diamond \Psi_{l,i,j,k}^n = -\sigma_{xl} \operatorname{esc}(u_{l,i,j,k}^n) \Delta x - \sigma_{yl} \operatorname{esc}(v_{l,i,j,k}^n) \Delta y - \sigma_{zl} \operatorname{esc}(w_{l,i,j,k}^n) \Delta z.$$

La expresión (4.36) equivale a la siguiente expresión del factor de amplificación (Π_l):

$$(4.38) \diamond \Pi_l = \frac{\tilde{C}_{l,i,j,k}^{n+1}}{\tilde{C}_{l,i,j,k}^n} = 1 - \Gamma_{l,i,j,k}^n - 2\Delta t \left[\frac{D_x}{(\Delta x)^2} + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} + \frac{D_z}{(\Delta z)^2} \right] +$$

$$\Gamma_{l,i,j,k}^n \cos(\Psi_{l,i,j,k}^n) + 2\Delta t \left[\frac{D_x}{(\Delta x)^2} \cos(-\sigma_{xl} \Delta x) + \right.$$

$$\left. \frac{D_y}{(\Delta y)^2} \cos(-\sigma_{yl} \Delta y) + \frac{D_z}{(\Delta z)^2} \cos(-\sigma_{zl} \Delta z) \right] + \hat{i} \Gamma_{l,i,j,k}^n \operatorname{sen}(\Psi_{l,i,j,k}^n),$$

la cual se reduce a

$$(4.39) \diamond \Pi_l = -2\Delta t \left\{ \frac{D_x}{(\Delta x)^2} [1 - \cos(\sigma_{xl} \Delta x)] + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} [1 - \cos(\sigma_{yl} \Delta y)] + \right.$$

$$\left. \frac{D_z}{(\Delta z)^2} [1 - \cos(\sigma_{zl} \Delta z)] \right\} + 1 - \Gamma_{l,i,j,k}^n + \Gamma_{l,i,j,k}^n \cos(\Psi_{l,i,j,k}^n) +$$

$$\hat{i} \Gamma_{l,i,j,k}^n \operatorname{sen}(\Psi_{l,i,j,k}^n).$$

Esta igualdad se simplifica a

$$(4.40) \diamond \Pi_l = 1 - \Gamma_{l,i,j,k}^n - 2\Delta t (G_{xl} + G_{yl} + G_{zl}) + \Gamma_{l,i,j,k}^n \cos(\Psi_{l,i,j,k}^n) + \hat{i} \Gamma_{l,i,j,k}^n \operatorname{sen}(\Psi_{l,i,j,k}^n),$$

donde

$$(4.41) \diamond G_{x_l} = D_x \frac{[1 - \cos(\sigma_{x_l} \Delta x)]}{\Delta x^2}$$

y G_{y_l} , G_{z_l} son definidas de manera similar.

Para obtener condiciones de estabilidad del esquema (4.15) en el dominio real, se utilizará la norma L^2 de la ecuación (4.40), *i. e.*

$$(4.42) \diamond \begin{aligned} |\Pi_l|^2 = & \left[-2\Delta t(G_{x_l} + G_{y_l} + G_{z_l}) + (1 - \Gamma_{i,j,k}^n) \right]^2 + \\ & 2 \left[-2\Delta t(G_{x_l} + G_{y_l} + G_{z_l}) + (1 - \Gamma_{i,j,k}^n) \right] \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_{l,i,j,k}^n) + \\ & \left(\Gamma_{i,j,k}^n \right)^2 \cos^2(\Psi_{l,i,j,k}^n) + \left(\Gamma_{i,j,k}^n \right)^2 \text{sen}^2(\Psi_{l,i,j,k}^n), \end{aligned}$$

o bien

$$(4.43) \diamond \begin{aligned} |\Pi_l|^2 = & \left[-2\Delta t(G_{x_l} + G_{y_l} + G_{z_l}) + (1 - \Gamma_{i,j,k}^n) \right]^2 + \\ & 2 \left[-2\Delta t(G_{x_l} + G_{y_l} + G_{z_l}) + (1 - \Gamma_{i,j,k}^n) \right] \Gamma_{i,j,k}^n \cos(-\Psi_{l,i,j,k}^n) + \left(\Gamma_{i,j,k}^n \right)^2, \end{aligned}$$

lo cual equivale a

$$(4.44) \diamond \begin{aligned} |\Pi_l|^2 = & 4(G_{x_l} + G_{y_l} + G_{z_l})^2 \Delta t^2 - 4(G_{x_l} + G_{y_l} + G_{z_l})(1 - \Gamma_{i,j,k}^n) \Delta t + \\ & (1 - \Gamma_{i,j,k}^n)^2 - 4(G_{x_l} + G_{y_l} + G_{z_l}) \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_{l,i,j,k}^n) \Delta t + \\ & 2(1 - \Gamma_{i,j,k}^n) \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_{l,i,j,k}^n) + \left(\Gamma_{i,j,k}^n \right)^2. \end{aligned}$$

Pero como $\Gamma_{i,j,k}^n$ sólo puede tomar los valores de 0 ó 1, entonces se cumple que

$$(4.45) \diamond \left(1 - \Gamma_{i,j,k}^n\right) \Gamma_{i,j,k}^n = 0.$$

Este resultado permite simplificar la igualdad (4.44) para llegar a la siguiente expresión (4.46) \diamond

$$|\Pi_l|^2 = 4(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl})^2 \Delta t^2 - 4(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl}) \left[1 - \Gamma_{i,j,k}^n + \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_l^n)\right] \Delta t + \left[1 - 2\Gamma_{i,j,k}^n + (\Gamma_{i,j,k}^n)^2\right] + (\Gamma_{i,j,k}^n)^2,$$

que es equivalente a la siguiente expresión (4.47) \diamond

$$|\Pi_l|^2 = (G_{xl} + G_{yl} + G_{zl})^2 \Delta t^2 - 4(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl}) \left(1 - \Gamma_{i,j,k}^n + \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_l^n)\right) \Delta t + 1 + 2\Gamma_{i,j,k}^n (\Gamma_{i,j,k}^n - 1),$$

o bien a la siguiente ecuación (4.48) \diamond

$$|\Pi_l|^2 = 4(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl})^2 \Delta t^2 - 4(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl}) \left[1 - \Gamma_{i,j,k}^n + \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_l^n)\right] \Delta t + 1.$$

Una interpretación del análisis de estabilidad es que cada componente en la serie de Fourier, crecerá o decaerá dependiendo de la ecuación discretizada. Si una componente particular puede crecer sin límite, la ecuación discretizada tiene una solución inestable. Entonces, dado que avanzar la solución en un paso de tiempo mediante el esquema (4.15), es equivalente a multiplicar una componente de la serie de Fourier por el factor de amplificación Π_l , es deseable que $|\Pi_l|^2 \leq 1$, es decir

$$(4.49) \diamond 4(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl})^2 \Delta t^2 - 4(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl}) \left[1 - \Gamma_{i,j,k}^n + \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_l^n)\right] \Delta t + 1 \leq 1,$$

o bien

$$(4.50) \diamond (G_{xl} + G_{yl} + G_{zl}) \Delta t - \left[1 - \Gamma_{i,j,k}^n + \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_l^n) \right] \leq 0,$$

lo cual significa que

$$(4.51) \diamond \Delta t \leq \frac{1 - \Gamma_{i,j,k}^n + \Gamma_{i,j,k}^n \cos(\Psi_l^n)}{(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl})}.$$

El esquema numérico que está siendo analizado involucra problemas de Riemann. Esto significa que alrededor del nodo la solución se considera uniforme, por lo que:

$$(4.52) \diamond \sigma_{xl} = \sigma_{yl} = \sigma_{zl} = 0,$$

lo cual hace que $G_{xl} = G_{yl} = G_{zl} = 0$, que a su vez implica que Δt en la ecuación (4.51) puede ser tan grande como se quiera, confiriéndole al ACUA una estabilidad local incondicional.

No obstante que este resultado indica que desde la perspectiva de la estabilidad no hay restricción en el número de Courant, en el ACUA se requiere prevenir la propagación de las ondas de los problemas de Riemann más allá del intervalo de muestreo, lo cual condiciona que el número de Courant se restrinja a lo establecido en las desigualdades (2.17).

Por otra parte, para que un análisis heurístico local sea relevante en todo el dominio computacional, éste debe efectuarse sobre cada punto de la malla. Ordinariamente, todos los puntos interiores de la región de cómputo son equivalentes, *i. e.* están acoplados a sus vecinos por ecuaciones de forma idéntica. Por ello, sólo se necesita analizar un punto interior representativo. Sin embargo, en muchos modelos numéricos, las ecuaciones en diferencias de los puntos en la frontera son diferentes a las de los puntos interiores. Esta falta de simetría

entre los puntos de la malla tiende a generar errores, y debido a que los sistemas hiperbólicos permiten a los errores propagarse sin amortiguarse, estos errores pueden hacerse presentes en todo el dominio computacional. Consecuentemente, los puntos en la frontera conducen a condiciones de estabilidad diferentes a las de los puntos interiores [Trapp y Ramshaw, 1976; Rood, 1987]. En el caso del ACUA este problema no se presenta, ya que el esquema numérico es el mismo tanto para los puntos interiores como para los puntos en la frontera.

4.5. Análisis de convergencia

Una propiedad básica que el presente esquema debe tener para ser útil, es que sea convergente. Es decir, que su solución se aproxime a la solución del problema de Riemann definido por las ecuaciones (2.6), (2.7) y (2.8); y que la aproximación mejore conforme el espaciado de la malla se acerca a cero. Al respecto, el teorema de equivalencia de Lax establece que para esquemas consistentes en problemas lineales, la convergencia es equivalente a la estabilidad [Thomas, 1995]. Por ello, una vez asegurada la consistencia del esquema (4.15) a través de una selección apropiada de $\{\xi\}$, y después de mostrar su estabilidad, se concluye que este esquema es convergente localmente.

4.6. Difusión numérica

Los esquemas veleta evitan las oscilaciones a expensas de introducir difusión artificial [Holly y Usseglio, 1984]. En el caso de la implementación tipo veleta del ACUA, la difusión numérica está dada por el residuo de la ecuación (4.28), *i. e.*

$$(4.53) \diamond \frac{\Delta t}{2} \left\{ \left[\left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \right)^2 - u^2 \right] \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \left[\left(\tilde{v}_{i,j,k}^n \right)^2 - v^2 \right] \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \left[\left(\tilde{w}_{i,j,k}^n \right)^2 - w^2 \right] \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right\} + \\ \Delta t \left[\left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \tilde{v}_{i,j,k}^n - uv \right) \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + \left(\tilde{v}_{i,j,k}^n \tilde{w}_{i,j,k}^n - vw \right) \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} + \left(\tilde{u}_{i,j,k}^n \tilde{w}_{i,j,k}^n - uw \right) \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} \right].$$

Sea un campo de flujo $\mathbf{q} = u\hat{\mathbf{i}} + v\hat{\mathbf{j}} + w\hat{\mathbf{k}}$. Si el eje x de la malla computacional se orientase coincidente con la dirección de la velocidad total (\mathbf{q}), entonces no habría componentes de velocidades sobre los otros ejes. En tal caso, se anularían cinco de los términos difusivos de (4.53), ilustrando esto que el esquema (4.15) es sensible a la orientación de la malla.

4.7. Disipación y dispersión

La expresión del factor de amplificación (4.40), contiene información valiosa acerca de los errores inducidos por el esquema numérico al propagar la solución. Estos errores se pueden determinar si se conoce la disipación y la dispersión de los modos de Fourier. Considerando la ecuación (4.52) en la expresión (4.40), se obtiene que

$$(4.54) \diamond \Pi_l = 1.$$

Esta identidad (4.54) revela que el esquema numérico (4.15) no disipa la solución (localmente).

De la ecuación (4.40) se puede obtener información adicional. El hecho de que las velocidades numéricas de fase puedan ser diferentes de las velocidades reales de fase, da origen a las familiares oscilaciones en las inmediaciones de las discontinuidades. Según la teoría del análisis de Fourier, la fase del modo numérico está dada por

$$(4.55) \diamond \Theta_l = \arctan \left[\frac{\Gamma_{l,j,k}^n \sin(\Psi_l^n)}{1 - \Gamma_{l,j,k}^n - 2\Delta t(G_{xl} + G_{yl} + G_{zl}) + \Gamma_{l,j,k}^n \cos(\Psi_l^n)} \right],$$

que al considerar la ecuación, (4.52) se simplifica a

$$(4.56) \diamond \Theta_i = 0.$$

Este resultado muestra que el esquema (4.15) no tiene dispersión local, y que en consecuencia, localmente no tiene oscilaciones; asegurando que \tilde{C} se mantiene dentro de sus rangos físicos, *i. e.* que \tilde{C} siempre es una cantidad positiva.

4.8. Error local de truncamiento

El error de truncamiento (*truncation error*) es inevitable cuando se usan diferencias finitas para encontrar la solución de una EDP.

El orden de aproximación del esquema numérico se puede determinar mediante la estimación del error de truncamiento. El error de truncamiento es equivalente al término dispersivo numérico [Neuman, 1981].

$$\text{Expandiendo } \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n, \tilde{C}_{i-\text{esc}(u_{i,j,k}^n), j,k}^n, \tilde{C}_{i,j-\text{esc}(v_{i,j,k}^n), k}^n, \tilde{C}_{i,j,k-\text{esc}(w_{i,j,k}^n)}^n$$

y $\tilde{C}_{i,j,k}^{n+1}$ en series de Taylor, y sustituyendo en la expresión (4.15), se obtiene que

$$(4.57) \diamond \frac{\partial c}{\partial t} + \tilde{u} \frac{\partial c}{\partial x} + \tilde{v} \frac{\partial c}{\partial y} + \tilde{w} \frac{\partial c}{\partial z} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + O(\Delta x) + O(\Delta y) + O(\Delta z) + O(\Delta t),$$

lo cual demuestra que el esquema numérico (4.15) tiene un error local de truncamiento de $O(\Delta x) + O(\Delta y) + O(\Delta z) + O(\Delta t)$.

5.1. Método de cuerpos de ondas con avance sucesivo (RASTREO ACUAL)

CAPÍTULO 5

INTEGRACIÓN GLOBAL DE LAS SOLUCIONES LOCALES

En el capítulo 4 se ha visto que el ACUA es un método del tipo de características en solución de la ecuación de transporte, en el caso unidimensional. Para que el ACUA conserve interés, es conveniente implementar un procedimiento de solución de flujo que integre apropiadamente las soluciones locales para formar una solución global. La respuesta a esta necesidad, y concretamente se describe el método de rastreo de ondas con avance sucesivo (RASTREO ACUAL) que se propone para aplicar el ACUA al transporte de tipos de contaminantes en cuerpos de agua superficiales.

5.1. Método de rastreo de ondas con avance cuántico (RASTREO ACUA)

Al aplicar el ACUA se supone que en el tiempo inicial, cada celda riemanniana contiene una nube de isoconcentración con volumen finito igual al volumen de la celda, el cual se desplaza sin deformarse bajo la acción del campo de flujo. Al implementar localmente el ACUA, estas nubes avanzan en la dirección del flujo o permanecen estacionarias. Dependiendo de la variabilidad del campo de flujo, las nubes adyacentes pueden permanecer en sus mismas posiciones relativas (onda de contacto), separarse (onda de rarefacción) o traslaparse (onda de choque). Cada uno de estos tipos de onda puede tener un efecto diferente en relación a la conservación de masa. La figura 5.1 muestra el comportamiento del ACUA unidimensional. Las ondas de contacto involucran líneas características paralelas por lo que la masa se conserva en todo momento. En cambio, las ondas de rarefacción implican líneas características divergentes, trayendo como consecuencia que en un momento determinado, el ACUA genere masa. En contraste, las ondas de choque tienen asociadas líneas características convergentes que eventualmente provocan pérdida de masa. Para comprender este comportamiento del ACUA, hay que tener presente que según el esquema (4.15), este método realmente no decide avanzar una nube de concentración hacia un nodo adyacente, sino desde un nodo contiguo. Conviene precisar que en campos de flujo complicados, las interacciones entre ondas son complejas, por lo que en un momento determinado pueden presentarse diferentes tipos de onda en las distintas direcciones coordenadas. En la figura 5.2 se ilustra una onda bidimensional compuesta por una onda de choque en la dirección x y una onda de contacto en la dirección y . Por simplicidad, se supone una interacción lineal de las ondas.

Siendo el ACUA un método del tipo de características, su solución de la ecuación de transporte no conserva masa. Para que el ACUA conserve masa, es conveniente implementar un procedimiento de corrección de flujo que integre apropiadamente las soluciones locales para obtener una solución global. En respuesta a esta necesidad, a continuación se describe el modelo de rastreo de ondas con avance cuántico (RASTREO ACUA), que se propone para aplicar el ACUA al transporte de frentes de contaminantes en cuerpos de agua superficiales.

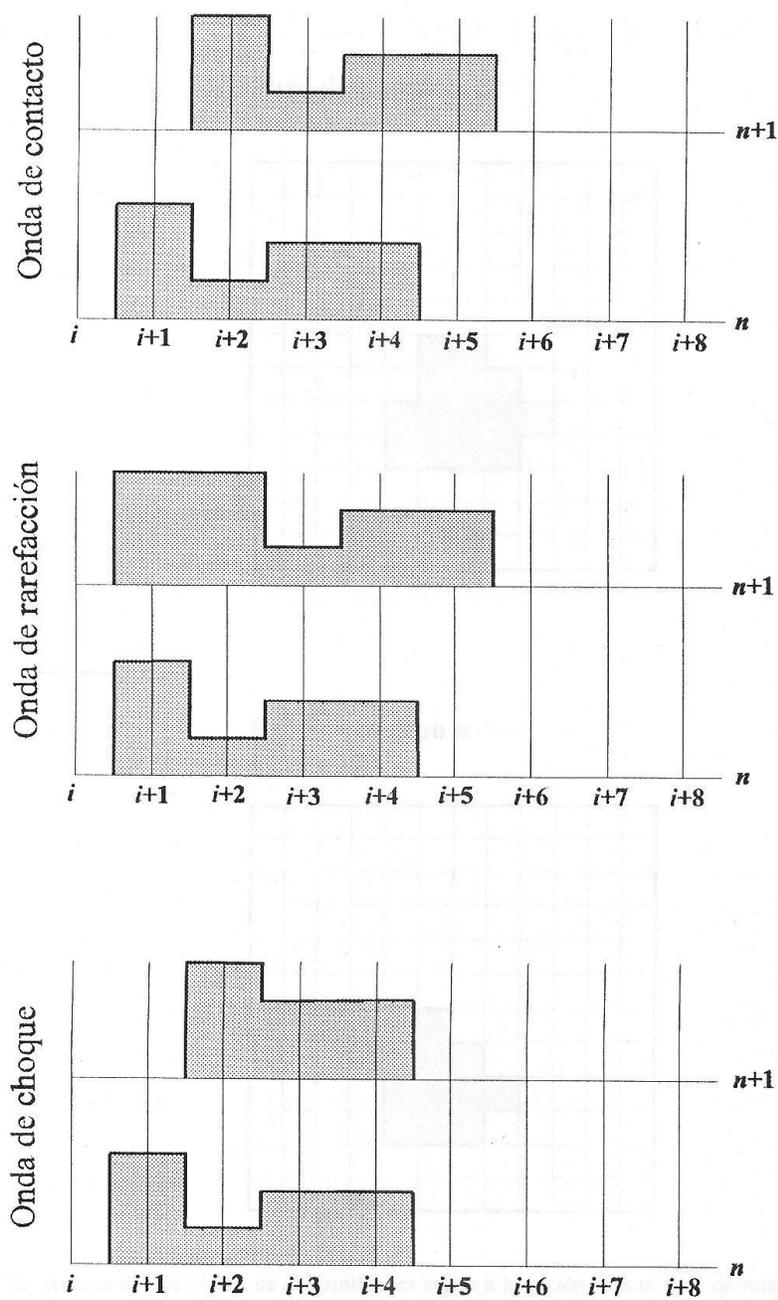
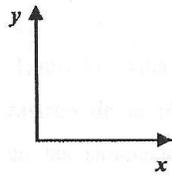
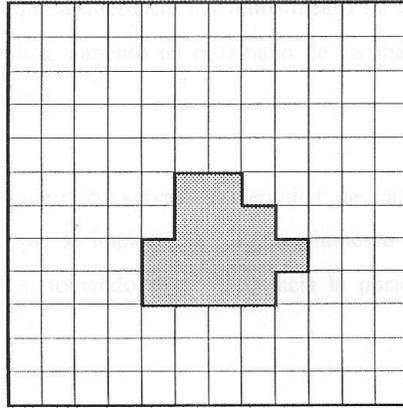


Figura 5.1. Efecto de los distintos tipos de onda sobre la variación de masa en el ACUA 1D.

Paso de tiempo $n+1$



Paso de tiempo n

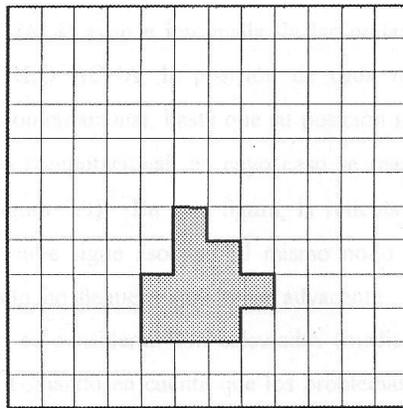


Figura 5.2. Avance de una pluma de contaminantes sujeta a la acción de una onda de rarefacción en la dirección x , sobrepuesta linealmente a una onda de contacto en la dirección y .

Con el fin de evaluar mejor los flujos de masa en cada celda, el modelo se implementa con una resolución intramalla, *i. e.*, se usa una malla virtual más fina que la malla computacional. Esta malla virtual se utiliza sólo en el manejo de la componente advectiva del transporte. Es preciso señalar que a diferencia del refinamiento de malla, la implementación de resolución intramalla no implica aumento en el tamaño de las matrices que contienen los datos en el programa computacional.

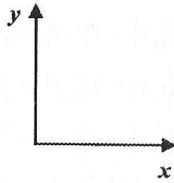
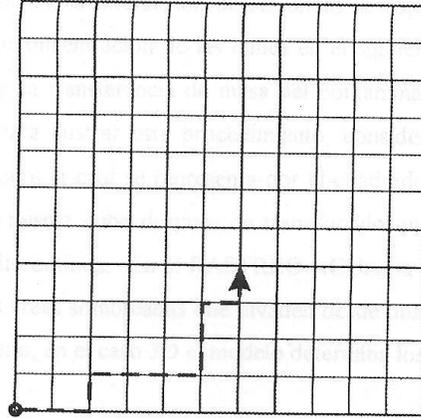
Adicionalmente, se requiere conservar la identidad de cada onda presente en el dominio computacional, por lo que se implementa un procedimiento de rastreo (*tracking*) de las nubes asociadas a los nodos, tomando como referencia la posición de las nubes en el tiempo inicial.

Tanto la malla computacional como la malla virtual, son usadas simultáneamente para el rastreo de la pluma de contaminantes, aunque la segunda de estas mallas sólo se emplea en las simulaciones que involucran resolución intramalla. En este caso, la malla virtual es usada para el rastreo de las nubes al interior de las celdas.

En el RASTREO ACUA, el avance intramalla de las ondas está gobernado por el ACUA. Al aplicar el RASTREO ACUA, la posición de cada nube se referencia a un determinado nodo de la malla computacional, hasta que su posición rastreada intramalla llega a una celda vecina del dominio computacional, en cuyo caso se reasigna la referencia de la nube a esa celda adyacente (figura 5.3). En esta figura, la retícula corresponde a la malla virtual, y se considera que la nube sigue asociada al mismo nodo de la malla mientras la posición rastreada desde el nodo no llegue a una celda adyacente. Para realizar el rastreo intramalla, las velocidades que se consideran son calculadas (mediante interpolación) en la posición rastreada intramalla. Tomando en cuenta que los problemas de Riemann se definen centrados en los nodos, el refinamiento de malla virtual necesariamente debe ser una partición impar. Como consecuencia de esto, en todo momento del rastreo, las nubes de isoconcentración estarán centradas sobre los nodos de la malla computacional, o sobre los nodos de la malla virtual refinada (esto último cuando se aplica resolución intramalla).

La nube no se reasigna

a)



La nube se reasigna

b)

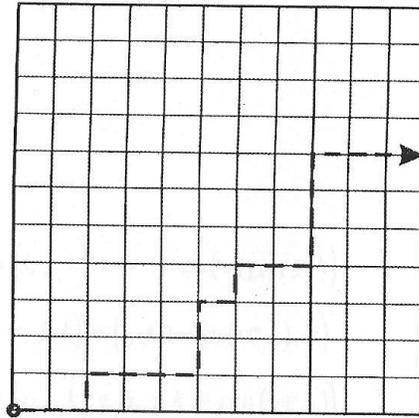


Figura 5.3. Rastreo intramalla (línea discontinua) de una nube.

El modelo considera que cada nube se mueve a la velocidad del flujo en el nodo respectivo de la malla computacional, o de la malla virtual refinada, según el caso. Para simplificar el cálculo de la solución, la interacción de las ondas se supone lineal, por lo que dentro de cada subregión, la isoconcentración de las nubes en el siguiente paso de tiempo se obtiene haciendo un balance de la transferencia de masa del contaminante entre subregiones vecinas (traslape de nubes). Para ilustrar este procedimiento, considérese una nube 2D de contaminante centrada en un nodo, la cual se representa por el cuadrado delimitado con línea continua de la figura 5.4, y la misma nube después de transcurrido un tiempo Δt , dibujada como un rectángulo con línea discontinua. En el RASTREO ACUA, la transferencia de masa entre celdas se calcula como las áreas sombreadas que invaden desde una celda a la adyacente. De acuerdo con este planteamiento, en el caso 3D el modelo determina los siguientes flujos:

$$\begin{aligned}
 F_x &= |\tau_x| (1 - |\tau_y|) (1 - |\tau_z|) \\
 F_y &= |\tau_y| (1 - |\tau_x|) (1 - |\tau_z|) \\
 F_z &= |\tau_z| (1 - |\tau_x|) (1 - |\tau_y|) \\
 (5.1) \diamond F_{xy} &= |\tau_x \tau_y| (1 - |\tau_z|) \\
 F_{xz} &= |\tau_x \tau_z| (1 - |\tau_y|) \\
 F_{yz} &= |\tau_y \tau_z| (1 - |\tau_x|) \\
 F_{xyz} &= |\tau_x \tau_y \tau_z|,
 \end{aligned}$$

donde:

F_x es el flujo entre las celdas (i, j, k) e $(i + \text{sgn}(u_{i,j,k}^n), j, k)$.

F_y es el flujo entre las celdas (i, j, k) e $(i, j + \text{sgn}(v_{i,j,k}^n), k)$.

F_z es el flujo entre las celdas (i, j, k) e $(i, j, k + \text{sgn}(w_{i,j,k}^n))$.

F_{xy} es el flujo entre las celdas (i, j, k) e $(i + \text{sgn}(u_{i,j,k}^n), j + \text{sgn}(v_{i,j,k}^n), k)$.

F_{xz} es el flujo entre las celdas (i, j, k) e $(i + \text{sgn}(u_{i,j,k}^n), j, k + \text{sgn}(w_{i,j,k}^n))$.

F_{yz} es el flujo entre las celdas (i, j, k) e $(i, j + \text{sgn}(v_{i,j,k}^n), k + \text{sgn}(w_{i,j,k}^n))$.

F_{xyz} es el flujo entre (i, j, k) e $(i + \text{sgn}(u_{i,j,k}^n), j + \text{sgn}(v_{i,j,k}^n), k + \text{sgn}(w_{i,j,k}^n))$.

τ_x es el desplazamiento local (en la dirección x) de la nube de isoconcentración.

τ_y es el desplazamiento local (en la dirección y) de la nube de isoconcentración.

τ_z es el desplazamiento local (en la dirección z) de la nube de isoconcentración.

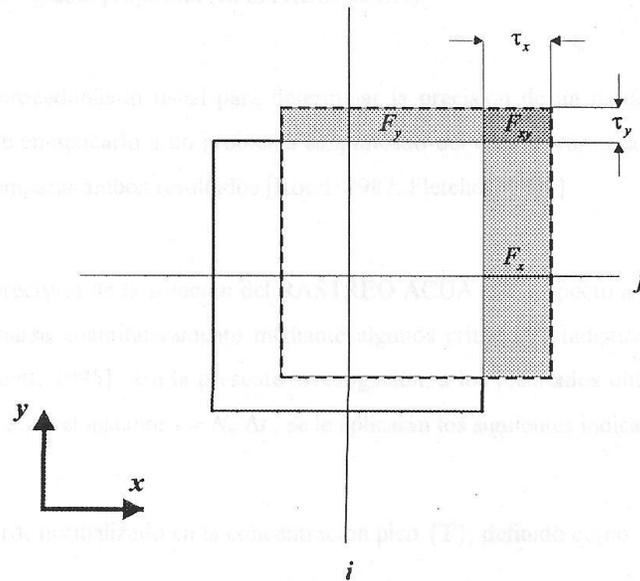


Figura 5.4. Flujo de contaminante entre celdas, caso bidimensional.

Una vez calculada la advección, el RASTREO ACUA determinaría la difusión mediante diferencias centradas. Sin embargo, para apreciar mejor el desempeño del ACUA en la simulación de la componente advectiva del transporte, todos los experimentos numéricos consideraron difusión nula.

5.2. Análisis experimental del RASTREO ACUA

La discusión de convergencia, consistencia y estabilidad, desarrollada en el capítulo 4, se enfocó al análisis del comportamiento de la solución aproximada en el límite Δx , Δy , Δz y $\Delta t \rightarrow 0$. Sin embargo, en la práctica las soluciones aproximadas se obtienen sobre una malla finita, por lo que se hace necesario evaluar la precisión en estas condiciones [Fletcher, 1991]. Adicionalmente, el análisis numérico del ACUA efectuado en el capítulo 4, se desarrolló en el ámbito local, por lo que es imperativo revisar la precisión de la implementación global propuesta (RASTREO ACUA).

Un procedimiento usual para determinar la precisión de un modelo sobre una malla finita, consiste en aplicarlo a un problema simplificado del cual se conozca la solución teórica, para luego comparar ambos resultados [Rood, 1987; Fletcher, 1991].

La precisión de la solución del RASTREO ACUA con respecto a la solución analítica puede examinarse cuantitativamente mediante algunos criterios estadísticos [Quamrul, 1993; Zheng y Bennett, 1995]. En la presente investigación, a los resultados obtenidos al final de la simulación, *i. e.* en el instante $t = N_T \Delta t$, se le aplicarán los siguientes indicadores:

- i) El error normalizado en la concentración pico (Υ), definido como

$$(5.2) \diamond \Upsilon^{N_T} = \frac{\left[\max_{x,y,z} (c_{i,i}^0) - \max_{x,y,z} (C_{i,i}^{N_T}) \right]}{\max_{x,y,z} (c_{i,i}^0)},$$

donde:

C es la solución obtenida mediante el RASTREO ACUA.

c es la solución teórica.

$\max(\cdot)$ es la función que da como resultado, el mayor valor del argumento en el dominio computacional asociado a las variables indicadas al pie de la expresión.

N_T es el paso de tiempo final.

ii) La varianza de los errores residuales, $\text{Var}(\epsilon)$, definida como

$$(5.3) \diamond \text{Var}(\epsilon|^{N_T}) = \frac{1}{N-1} \left\{ \sum_{i=1}^N [\epsilon_i|^{N_T} - \bar{\epsilon}]^2 \right\},$$

donde:

N es el número total de nodos del dominio computacional.

El error residual se define como

$$(5.4) \diamond \epsilon_i|^{N_T} = C_i|^{N_T} - c_i|^{N_T},$$

y la media ($\bar{\epsilon}$) de los errores residuales se obtiene con

$$(5.5) \diamond \bar{\epsilon}|^{N_T} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\epsilon_i|^{N_T}).$$

iii) La media de los errores residuales absolutos ($\overline{\epsilon}_{\text{abs}}$)

$$(5.6) \diamond \overline{\epsilon}_{\text{abs}}|^{N_T} = \frac{1}{N} \left[\sum_{i=1}^N |C_i|^{N_T} - c_i|^{N_T} \right].$$

iv) El coeficiente de correlación lineal (ρ_{cc}) entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica, es determinado por

$$(5.7) \diamond \rho_{cc} |^{N_r} = \frac{\sum_{i=1}^N [(C_i |^{N_r} - \bar{C} |^{N_r})(c_i |^{N_r} - \bar{c} |^{N_r})]}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (C_i |^{N_r} - \bar{C} |^{N_r})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (c_i |^{N_r} - \bar{c} |^{N_r})^2}},$$

donde:

\bar{C} es la media (de todos los nodos) de la solución obtenida mediante el RASTREO ACUA.

\bar{c} es la media (de todos los nodos) de la solución exacta.

v) El desfaseamiento entre la solución calculada y la solución analítica de la pluma de contaminantes. El cual en el caso de la dirección x , se define mediante

$$(5.8) \diamond \mu_x |^{N_r} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N i C_i |^{N_r}}{\sum_{i=1}^N i c_i |^{N_r}},$$

de manera similar se definen μ_y y μ_z para las direcciones y y z .

vi) El factor de conservación de masa (Ξ), calculado mediante

$$(5.9) \diamond \Xi |^{N_r} = \frac{\sum_{i=1}^N C_i |^{N_r}}{\sum_{i=1}^N c_i |^0}.$$

Según Rood [1987], este factor es de suma importancia porque la conservación de masa puede ser usada como un criterio para el diagnóstico del desempeño de un algoritmo.

Idealmente, los valores de estos seis estadísticos a considerar son: $\Upsilon = 0$, $\text{Var}(\varepsilon) = 0$,

$\varepsilon_{\text{abs}} = 0$, $\rho_{cc} = 1$, $\Xi = 1$ y $\mu_x = \mu_y = \mu_z = 0$.

El desarrollo del ACUA es relativamente incipiente. Por eso, se consideró apropiado evaluar la precisión del RASTREO ACUA comparándolo con la precisión del esquema veleta de primer orden, ya que el esquema numérico del ACUA fue concebido como una discretización del mismo tipo. De esta manera, se podría resaltar la percepción de que futuros refinamientos del ACUA, podrían conducir a mejores resultados que su correspondiente versión veleta. Además por su amplia divulgación, el esquema veleta de primer orden es una muy buena referencia para comparación con otros métodos.

Figura 5.5. Condición inicial de un contaminante en celdas unidimensionales.

Para efectuar la evaluación comparativa sobre bases cuantitativas, se emplearon los seis criterios estadísticos definidos por las ecuaciones (5.2) a (5.9), además del tiempo de cómputo, para lo cual se efectuaron experimentos 1D, 2D y 3D bajo diversas condiciones de flujo.

Los algoritmos se codificaron en lenguaje FORTRAN 90, y las corridas computacionales se realizaron en una computadora con procesador Pentium II a 450 Mhz y 256 Mb de memoria RAM.

En algunas situaciones sencillas de flujo en cauces fluviales, el sistema puede considerarse unidimensional. Para representar este tipo de problemas hidráulicos, se realizaron experimentos numéricos sobre una malla unidimensional de 500 nodos con $\Delta x = 1.0 m$. El tiempo total de simulación fue $T = 40000 s$, con $\Delta t = 1.0 s$. La difusión considerada fue $D_x = 0$. A su vez, las condiciones iniciales consistieron en un pulso de contaminante con $c_i^0 = 30.0\%$, el cual abarcaba desde la celda 5 hasta la 30, y en el resto de las celdas se consideró $c_i^0 = 0.0\%$ (figura 5.5), mientras que en las fronteras se impuso la condición $c_i^n = 0.0\%$.

En la primera de los experimentos unidimensionales, con flujo uniforme que genera una onda de cuncho, el RASTREO ACUA se aplicó de resolución intracelda (factor de resolución de 1/2 de grid a grid). Los resultados de estos experimentos 1D se consiguen en

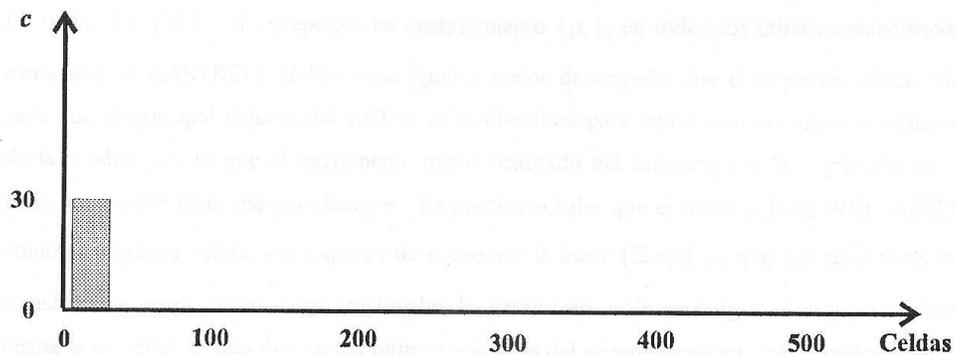


Figura 5.5. Condiciones iniciales en experimentos numéricos unidimensionales.

En los experimentos 1D, el pulso de contaminante fue sometido a la acción de dos campos de flujo diferentes. En unos se consideró $u = 0.010 \text{ m/s}$, y en otros se impuso

$$u = 0.010 \cos\left(\frac{\pi t}{40,000 \text{ s}}\right) \text{ m/s}.$$

En ausencia de difusión, el pulso de contaminantes teóricamente debe desplazarse como un cuerpo sólido, por lo que en el experimento en que se consideró velocidad $u = 0.010 \text{ m/s}$, al final de la simulación, el pulso de contaminantes debe ubicarse sin deformación en las celdas 405 a 430; mientras que en los experimentos en que se consideró

$$u = 0.010 \cos\left(\frac{\pi t}{40,000 \text{ s}}\right) \text{ m/s}, \text{ el pulso debe regresar a su posición inicial sin deformarse,}$$

siempre y cuando no exista pérdida de masa a través de las fronteras. Estas condiciones finales de ambos casos, se toman como solución teórica (analítica) para efectos de comparación con los resultados de los experimentos.

En los primeros dos experimentos unidimensionales, con flujo uniforme que genera una onda de contacto, el RASTREO ACUA se aplicó sin resolución intramalla (factor de resolución intramalla igual a uno). Los resultados de estos experimentos 1D se consignan en

las tablas 5.1 y 5.2. A excepción del desfaseamiento (μ_x), en todos los criterios estadísticos evaluados, el RASTREO ACUA tiene igual o mejor desempeño que el esquema veleta. Se sabe que el principal defecto del ACUA es su dificultad para ubicar con precisión la posición de las ondas, por lo que el ligeramente mejor resultado del esquema veleta, reportado en la tabla 5.1, puede tener esa justificación. Es preciso señalar que el tanto el RASTREO ACUA como el esquema veleta, son capaces de conservar la masa ($\Xi=1$) ya que sus algoritmos de transferencia entre celdas computacionales la garantizan. Sin embargo, el esquema veleta disipa la solución, por lo que en los últimos instantes del segundo experimento expulsa masa a través de las fronteras del dominio computacional. Para explicar la mayor rapidez de ejecución del RASTREO ACUA en estos dos experimentos unidimensionales, es conveniente recordar que el ACUA es similar al esquema veleta. La ventaja del ACUA estriba en que este esquema decide avanzar la solución o mantenerla en el mismo nodo con ayuda de una secuencia de vectores equidistribuidos, lo cual reduce la cantidad de operaciones aritméticas.

Tabla 5.1. Estadísticos para flujo permanente uniforme con $u = 0.010 \text{ m/s}$.

	Υ	$\text{Var}(\varepsilon)$	$\overline{\varepsilon_{\text{abs}}}$, en ‰	ρ_{Cc}	μ_x	t , en s
RASTREO ACUA	0.000	7.214	0.239	0.914	0.004	11.423
Veleta	0.530	20.084	1.690	0.762	0.000	15.819

Tabla 5.2. Estadísticos para flujo transitorio uniforme con $u = 0.010 \cos\left(\frac{\pi t}{40,000 \text{ s}}\right) \text{ m/s}$.

	Υ	$\text{Var}(\varepsilon)$	$\overline{\varepsilon_{\text{abs}}}$, en ‰	ρ_{Cc}	μ_x	t , en s
RASTREO ACUA	0.000	3.607	0.119	0.957	0.057	16.753
Veleta	0.431	14.133	1.178	0.860	-0.083	27.386

Figura 5.6. Evolución de los errores residuales, obtenida bajo flujo 1D uniforme y permanente.

Para conocer de qué manera mejora la precisión del RASTREO ACUA al aumentar el factor de resolución intramalla, se efectuaron experimentos 1D en los que el pulso de contaminantes se sometió a un campo de flujo uniforme y permanente con $u = 0.010 \text{ m/s}$. Los resultados se ilustran en las figuras 5.6 a 5.9. En ellas se aprecia que la mejora más significativa (entre las resoluciones evaluadas) se presenta al pasar de una resolución intramalla de 1 a otra de 11.

Con el fin de estudiar la respuesta del RASTREO ACUA a la resolución intramalla bajo diversos campos de flujo transitorio y uniforme, se hicieron experimentos en los que mediante una variación sinusoidal de la velocidad, se asemejan el flujo y reflujos de marea en un estuario. Para ello, se impuso la velocidad $u = 0.010 \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right)$, donde t es el tiempo transcurrido, y T es el tiempo total de simulación.

Además de haberse verificado que en todo momento se conserva la masa, en esta serie de experimentos se obtuvieron los resultados que se reportan en las figuras 5.10 a 5.13.

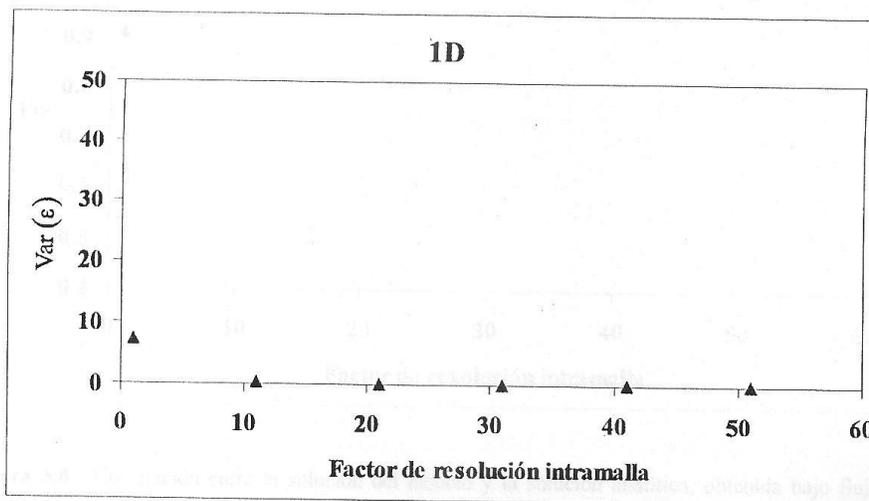


Figura 5.6. Varianza de los errores residuales, obtenida bajo flujo 1D uniforme y permanente.

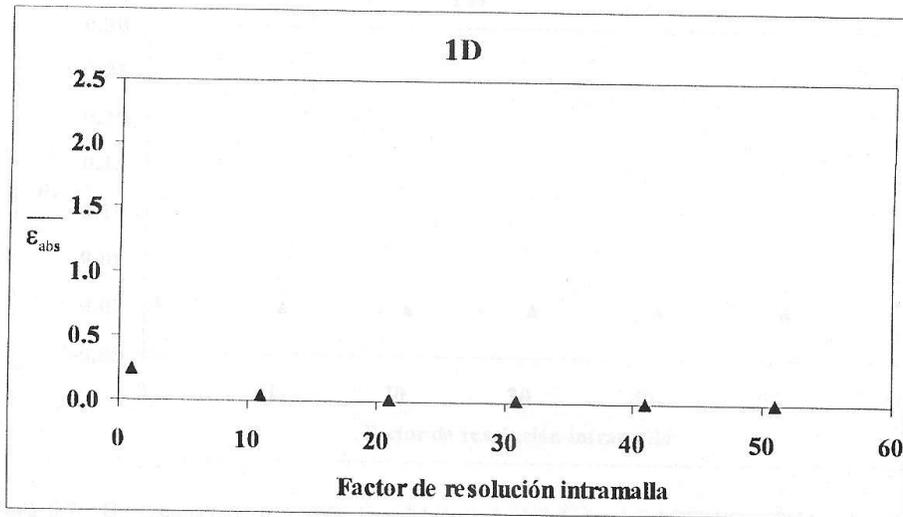


Figura 5.7. Media de los errores residuales absolutos, obtenida bajo flujo 1D uniforme y permanente.

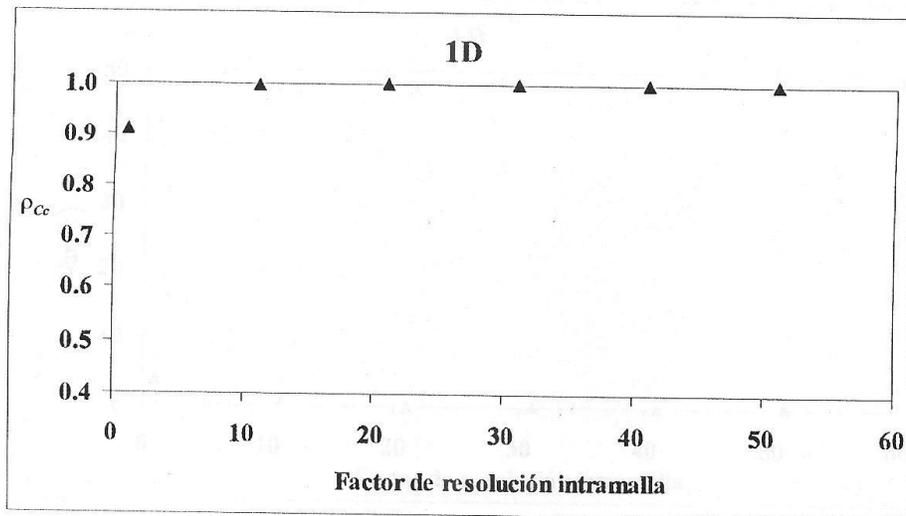


Figura 5.8. Correlación entre la solución del modelo y la solución analítica, obtenida bajo flujo 1D uniforme y permanente.

Figura 5.8. Correlación entre la solución del modelo y la solución analítica, obtenida bajo flujo 1D uniforme y permanente.

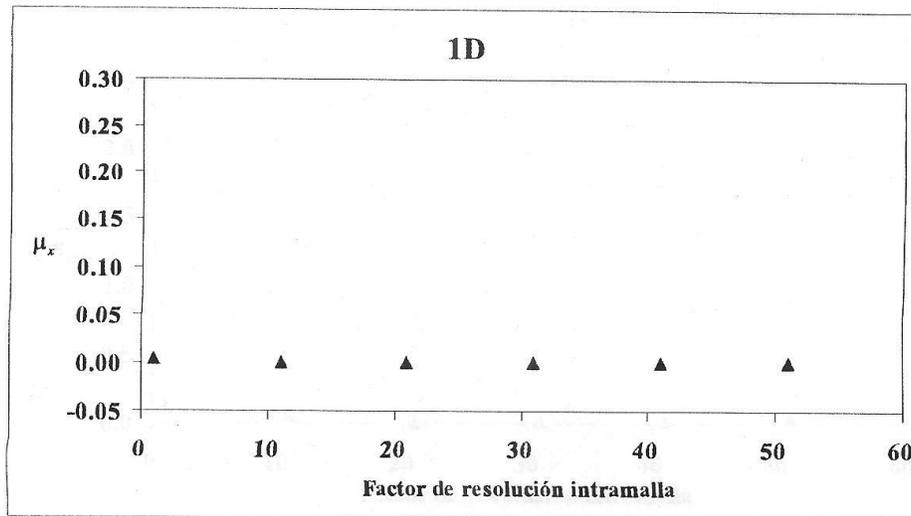


Figura 5.9. Desfasamiento (μ_x) entre la solución calculada con el RASTREO ACUA y la solución analítica, obtenido bajo flujo 1D uniforme y permanente.

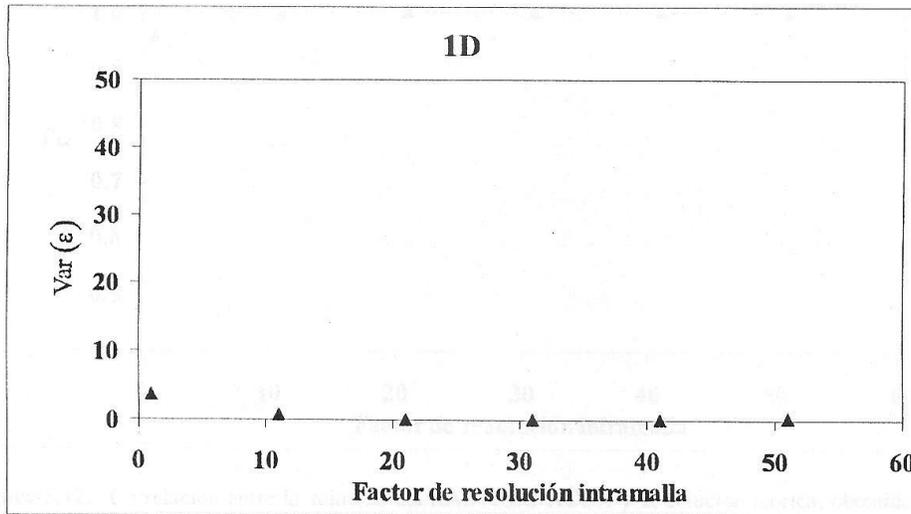


Figura 5.10. Varianza de los errores residuales, obtenida bajo flujo 1D transitorio uniforme.

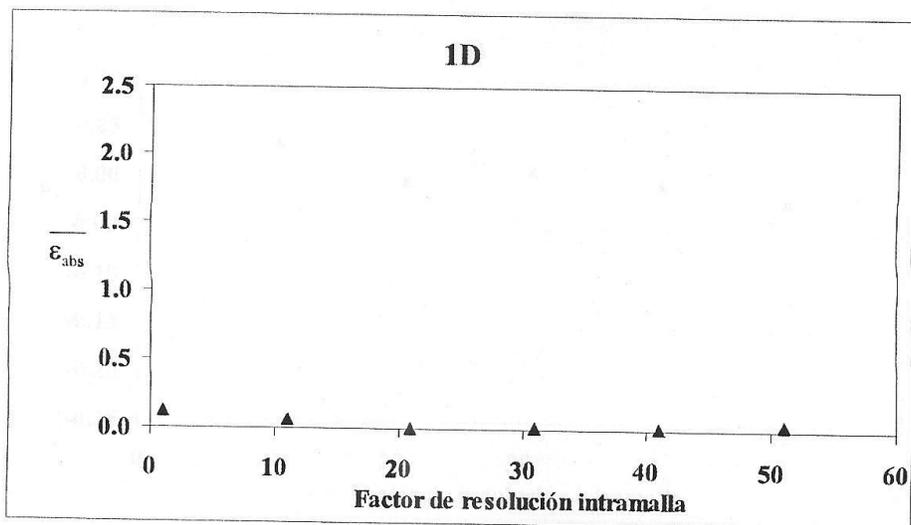


Figura 5.11. Media de los errores residuales absolutos, obtenida bajo flujo 1D transitorio uniforme.

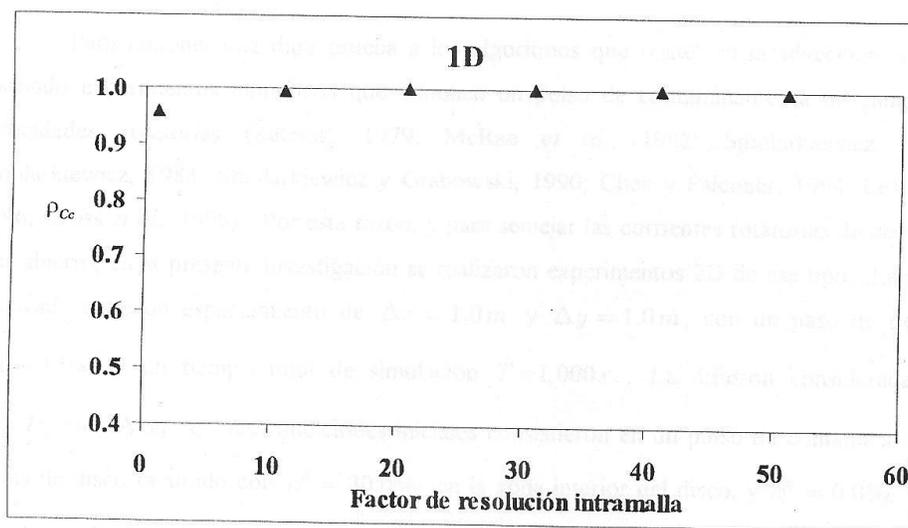


Figura 5.12. Correlación entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica, obtenida bajo flujo 1D transitorio uniforme.

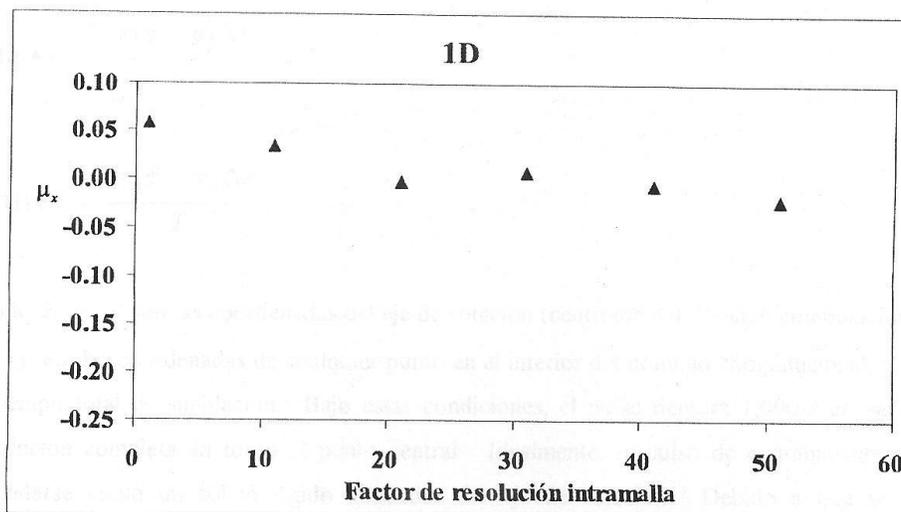


Figura 5.13. Desfasamiento en dirección x de la solución del RASTREO ACUA con respecto a la solución teórica, obtenido bajo flujo 1D transitorio uniforme.

Para imponer una dura prueba a los algoritmos que resuelven la advección, se han diseñado experimentos numéricos que exponen un pulso de contaminantes a un campo de velocidades rotatorias (Zalesak, 1979; McRae *et al.*, 1982; Smolarkiewicz, 1982; Smolarkiewicz, 1983; Smolarkiewicz y Grabowski, 1990; Chen y Falconer, 1994; LeVeque, 1996; Gross *et al.*, 1999). Por esta razón, y para semejar las corrientes rotatorias de marea en mar abierto, en la presente investigación se realizaron experimentos 2D de ese tipo. La malla empleada tiene un espaciamiento de $\Delta x = 1.0m$ y $\Delta y = 1.0m$, con un paso de tiempo $\Delta t = 1.0s$, y un tiempo total de simulación $T = 1,000s$. La difusión considerada fue $D_x = D_y = 0$. A su vez, las condiciones iniciales consistieron en un pulso de contaminante en forma de disco ranurado con $c_i^0 = 30.0\%$ en la zona interior del disco, y $c_i^0 = 0.0\%$ en el exterior del disco ranurado, mientras que en las fronteras se prescribió la condición $c_i^n = 0.0\%$ (figura 5.14). El pulso fue sometido a un campo de flujo rotatorio con velocidades:

$$(5.10) \diamond u = \frac{2\pi(\bar{y} - y)\Delta y}{T}$$

y

$$(5.11) \diamond v = \frac{2\pi(\bar{x} - x)\Delta x}{T},$$

donde \bar{x} y \bar{y} son las coordenadas del eje de rotación (centroide del dominio computacional), x y y son las coordenadas de cualquier punto en el interior del dominio computacional, y T es el tiempo total de simulación. Bajo estas condiciones, el pulso demora 1,000 s en dar una revolución completa en torno al punto central. Idealmente, el pulso de contaminante debe trasladarse como un sólido rígido alrededor del eje de rotación. Debido a que se está considerando difusión nula, después de una revolución completa el pulso debe regresar a su posición inicial sin deformarse. De esta manera, las condiciones iniciales se pueden tomar como solución teórica (analítica) de las dos series de experimentos bidimensionales que se realizaron.

En todos los experimentos bidimensionales, la posición del pulso inicial de concentración se definió con los valores mostrados en la tabla 5.3.

Tabla 5.3. Dimensiones del pulso inicial de concentración. En su interior $c_i^0 = 30.0\%$, mientras que en su exterior $c_i^0 = 0.0\%$.

Factor de refinamiento de malla	Radio	\bar{x}	\bar{y}	Largo x de ranura	Largo y de ranura
1	7.5 m	37.5 m	25.0 m	8.0 m	3.5 m
2	15.0 m	75.0 m	50.0 m	16.0 m	7.0 m
4	30.0 m	150.0 m	100.0 m	32.0 m	14.0 m
8	60.0 m	300.0 m	200.0 m	64.0 m	28.0 m

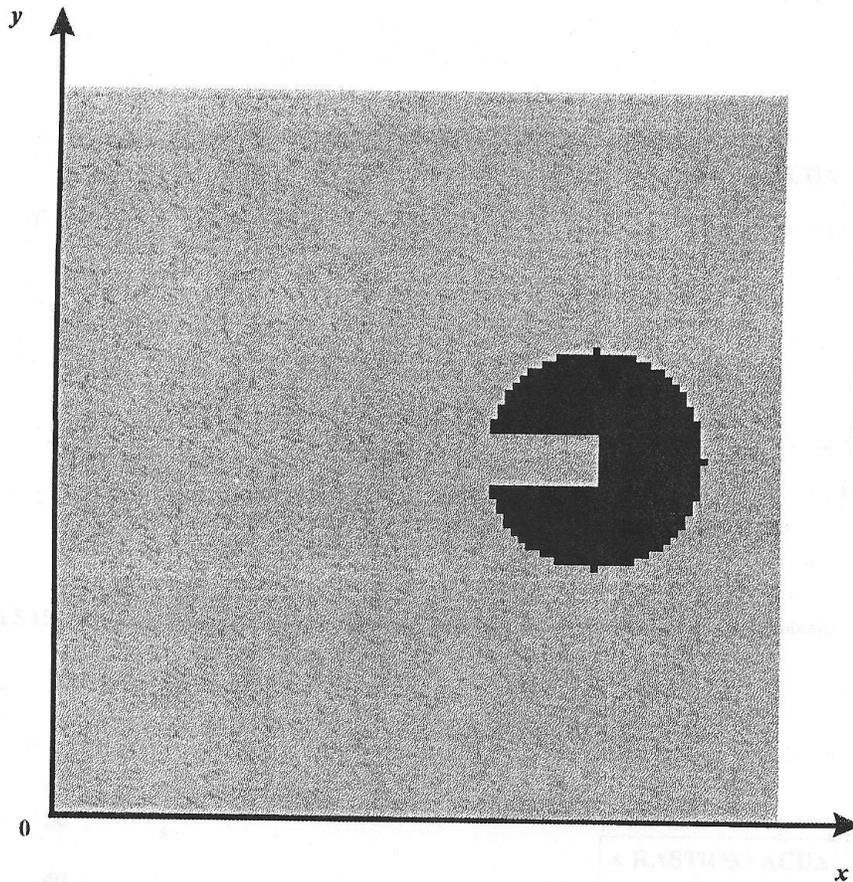


Figura 5.14. Condiciones iniciales de los experimentos numéricos 2D.

En la primera serie de experimentos 2D, se analizó la sensibilidad de los esquemas estudiados respecto al refinamiento de la malla. Los experimentos se realizaron sobre mallas de 50×50 , 100×100 , 200×200 y 400×400 nodos; correspondientes a factores de refinamiento de malla de 1, 2, 4 y 8, respectivamente. Los resultados se ilustran en las figuras 5.15 a 5.21. Estas figuras revelan que el desempeño del RASTREO ACUA en general es mejor que el esquema veleta. Otro aspecto favorable del RASTREO ACUA es que el tiempo de cómputo es similar al del esquema veleta. Es preciso señalar que tanto el RASTREO ACUA como el esquema veleta conservan la masa, aunque debido a la disipación, el esquema veleta expulsa masa a través de las fronteras del dominio computacional.

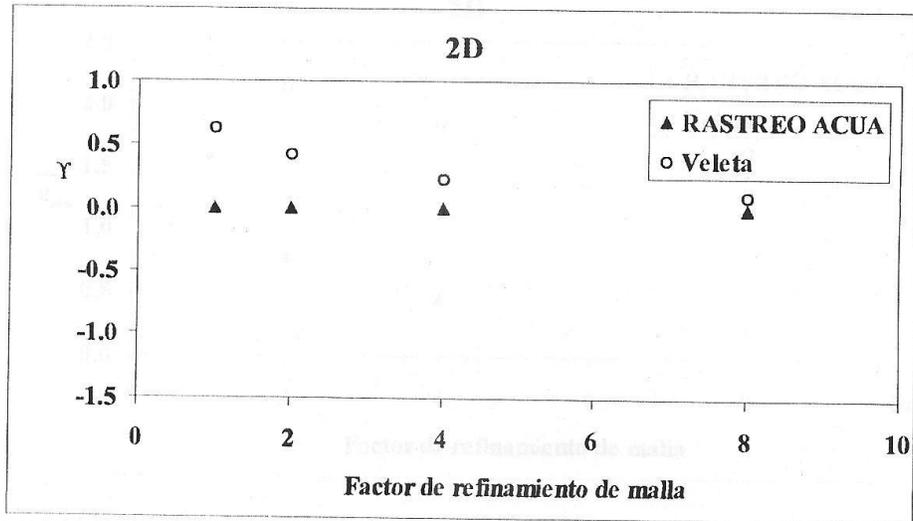


Figura 5.15. Error normalizado de la concentración pico en experimentos con flujo 2D rotatorio.

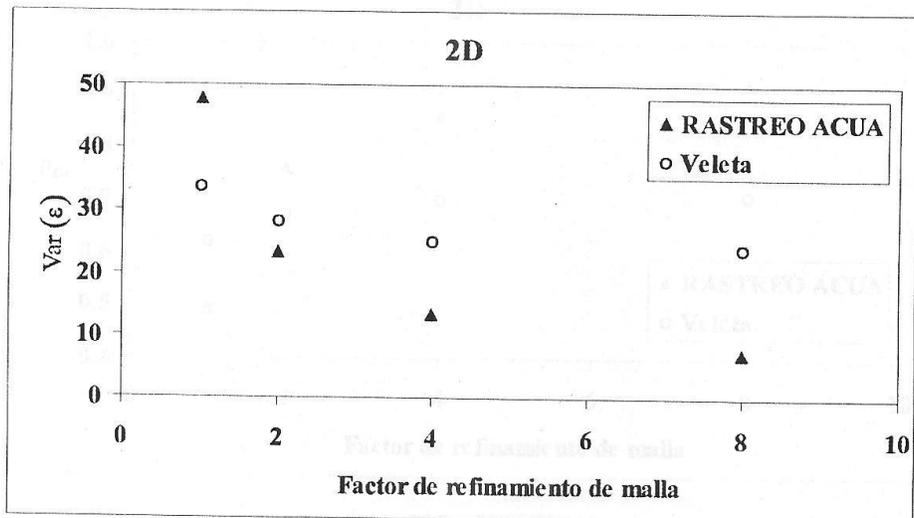


Figura 5.16. Varianza de los errores residuales en experimentos con flujo 2D rotatorio.

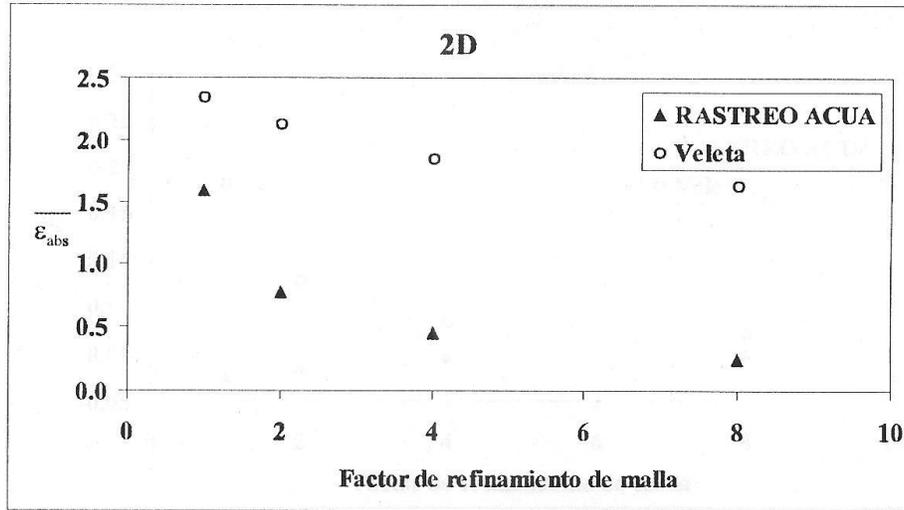


Figura 5.17. Media de los errores residuales absolutos en experimentos con flujo 2D rotatorio.

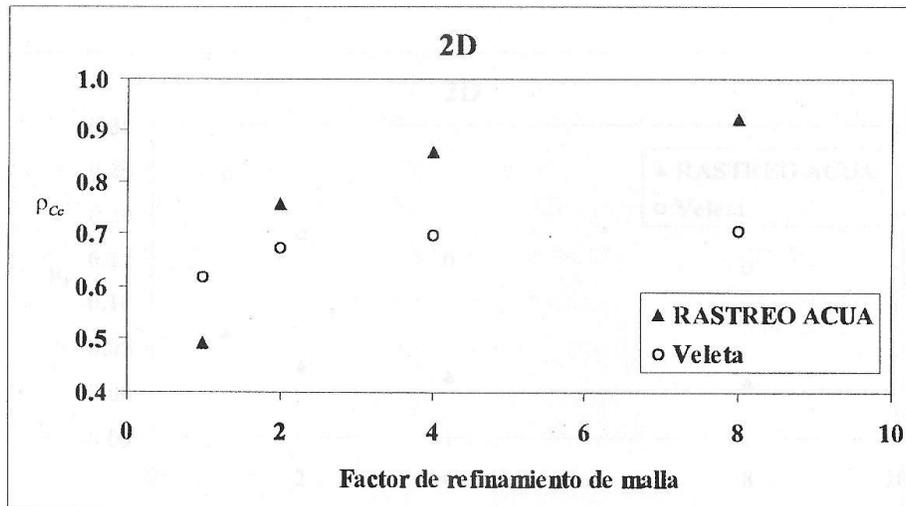


Figura 5.18. Correlación entre la solución del modelo y la solución analítica, obtenida bajo flujo 2D rotatorio.

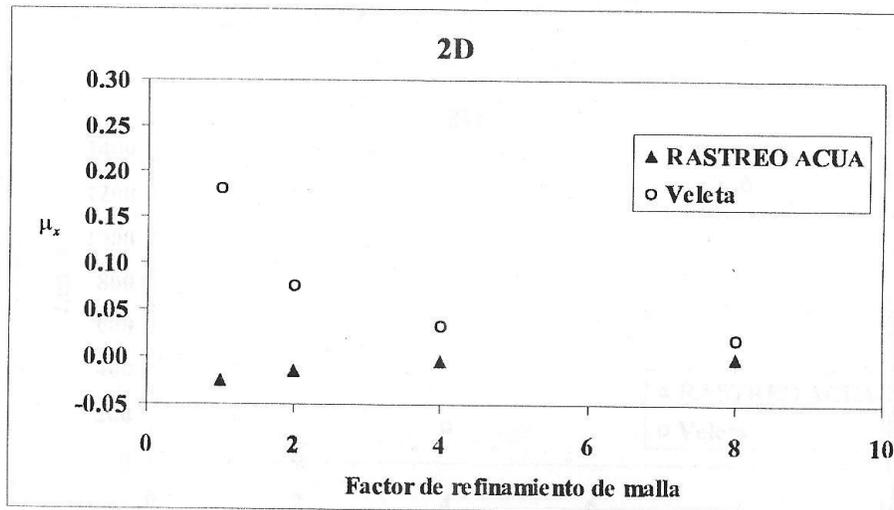


Figura 5.19. Desfasamento (μ_x) entre a solução do modelo e a solução exata, obtidas bajo flujo 2D rotatorio.

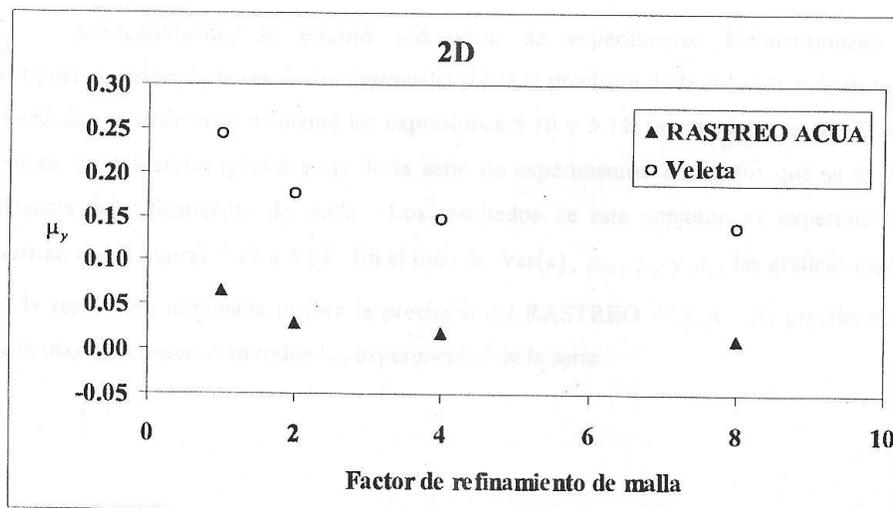


Figura 5.20. Desfasamento (μ_y) entre a solução do modelo e a solução teórica, obtido bajo flujo 2D rotatorio.

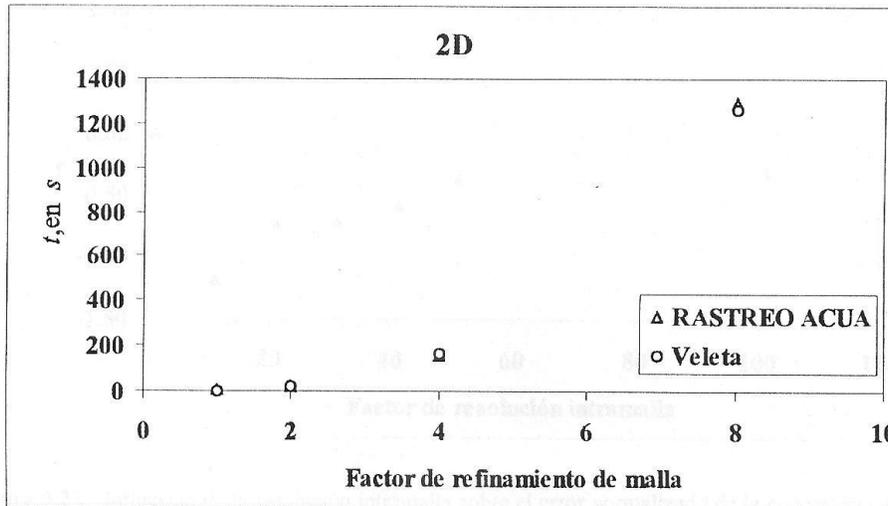


Figura 5.21. Tiempo de cálculo requerido por el RASTREO ACUA en experimentos con flujo 2D rotatorio.

Adicionalmente, se ejecutó una serie de experimentos bidimensionales para identificar el efecto de la resolución intramalla sobre la precisión de la solución calculada. Las velocidades se definieron mediante las expresiones 5.10 y 5.11; las condiciones iniciales y de frontera, se definieron iguales a las de la serie de experimentos 2D en los que se evaluó la influencia del refinamiento de malla. Los resultados de este conjunto de experimentos se muestran en las figuras 5.22 a 5.27. En el caso de $\text{Var}(\epsilon)$, ρ_{Ce} , μ_x y μ_y , las gráficas muestran que la resolución intramalla mejora la precisión del RASTREO ACUA. Es preciso señalar, que la masa se conservó en todos los experimentos de la serie.

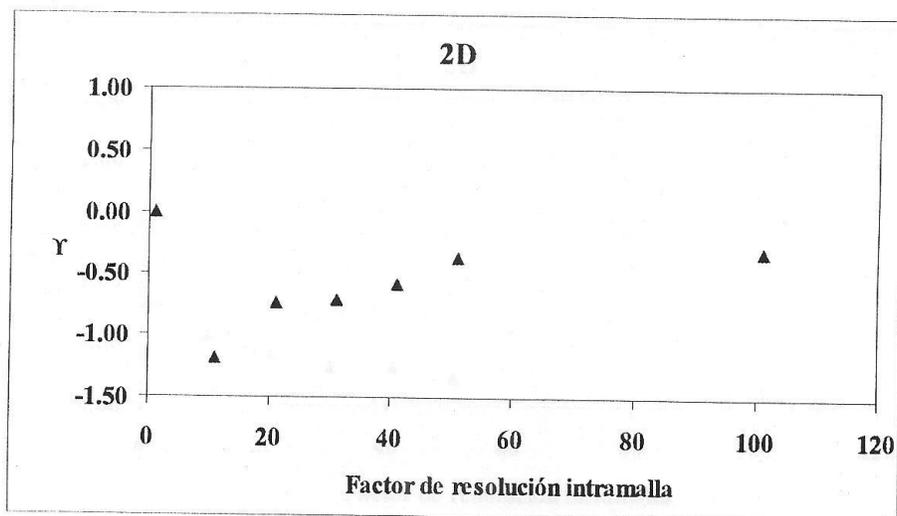


Figura 5.22. Influencia de la resolución intramalla sobre el error normalizado de la concentración pico en experimentos con flujo 2D rotatorio.

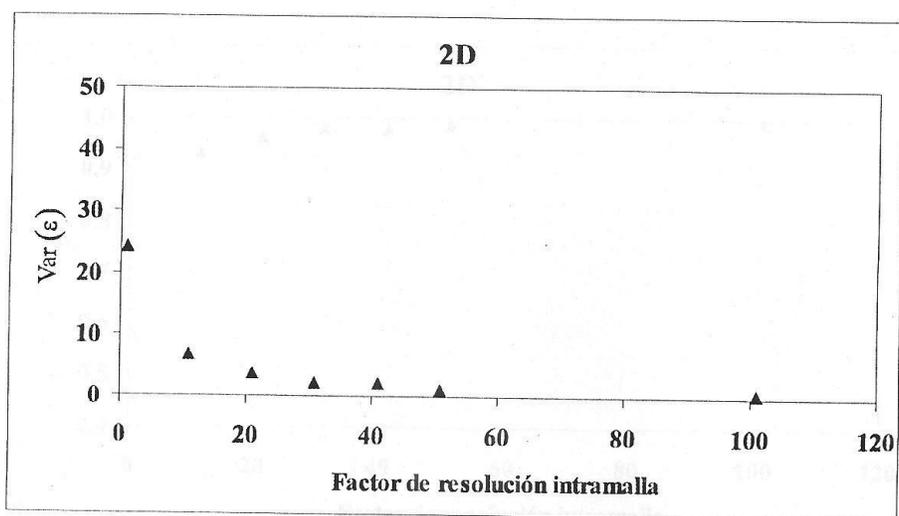


Figura 5.23. Influencia de la resolución intramalla sobre la varianza de los errores residuales en experimentos con flujo 2D rotatorio.

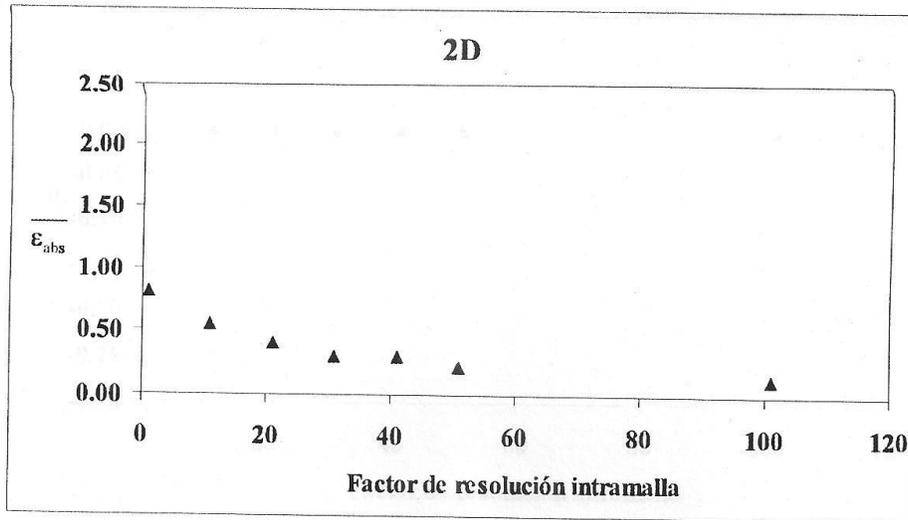


Figura 5.24. Influencia de la resolución intramalla sobre la media de los errores residuales absolutos en experimentos con flujo 2D rotatorio.

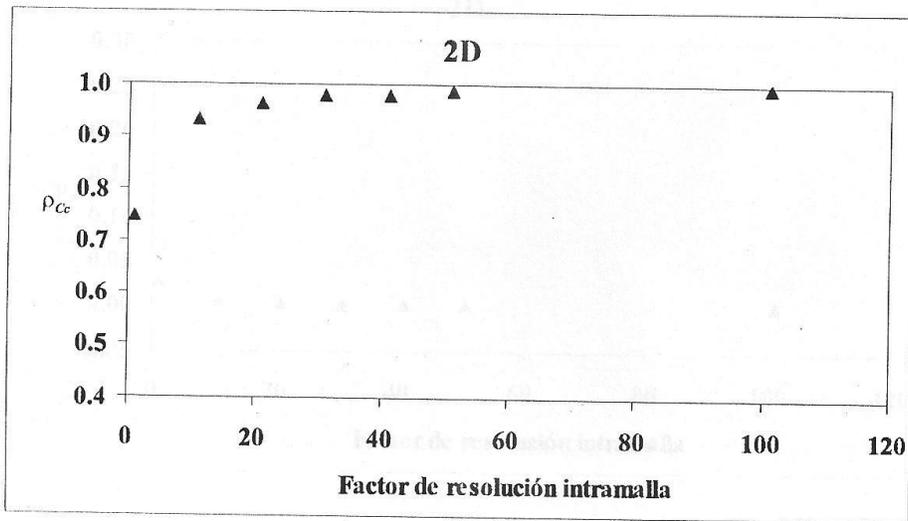


Figura 5.25. Influencia de la resolución intramalla sobre la correlación entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con un flujo 2D rotatorio.

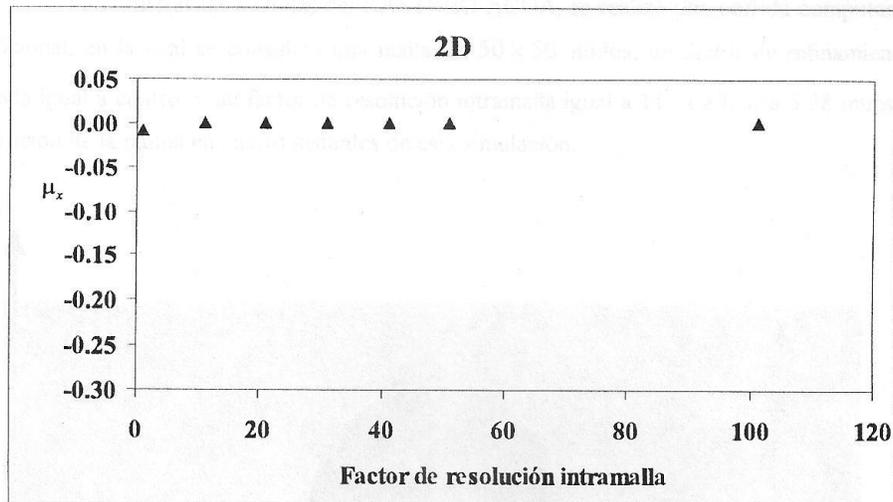


Figura 5.26. Influencia de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_x) entre la solución del modelo y la solución teórica en experimentos con un flujo 2D rotatorio.

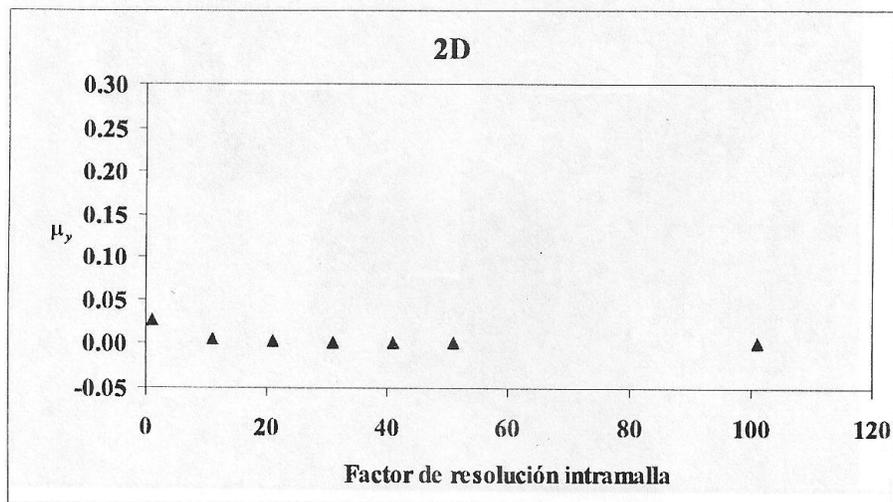


Figura 5.27. Influencia de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_y) entre la solución del modelo y la solución teórica en experimentos con flujo 2D rotatorio.

Para ilustrar las ventajas del RASTREO ACUA, se realizó una corrida computacional adicional, en la cual se considera una malla de 50×50 nodos; un factor de refinamiento de malla igual a cuatro, y un factor de resolución intramalla igual a 11. La figura 5.28 muestra la posición de la pluma en cuatro instantes de esta simulación.

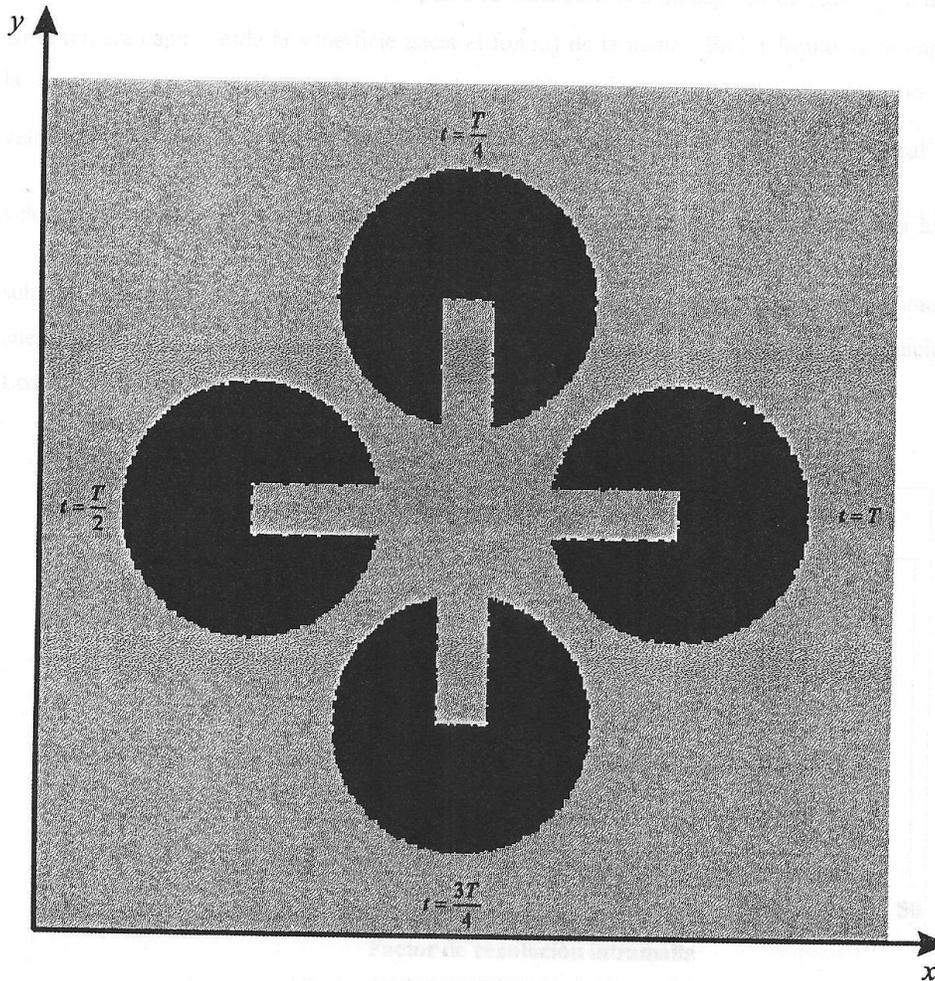


Figura 5.28. Pluma de contaminante en cuatro distintos instantes de una simulación 2D.

Para analizar la aplicabilidad del RASTREO ACUA a problemas 3D no uniformes y transitorios, se realizó una serie de experimentos sobre una malla de $100 \times 100 \times 10$ nodos, con $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1.0 m$. El tiempo de simulación fue $T = 1,000 s$, con $\Delta t = 1.0 s$, y se consideró difusión nula. Las condiciones iniciales consistieron en un pulso de concentración similar al de los experimentos 2D. Este pulso se consideró con un espesor de $1.0 m$, y se ubicó en la tercera capa (desde la superficie hacia el fondo) de la malla. En las fronteras se impuso la condición $c^n = 0.0\%$. El pulso fue sometido a un campo de flujo rotatorio con velocidades horizontales dadas por (5.10) y (5.11), sobrepuestas a un flujo vertical con velocidad $w = 0.01 \cos\left(\frac{\pi t}{1,000 s}\right) m/s$, de tal forma que el pulso rotaría y bajaría para luego subir, y regresar rotando a su posición inicial. Teóricamente, el pulso se mueve como un cuerpo sólido, por lo que las condiciones finales deben ser iguales a las condiciones iniciales. Los resultados de estos experimentos se muestran en las figuras 5.29 a 5.35.

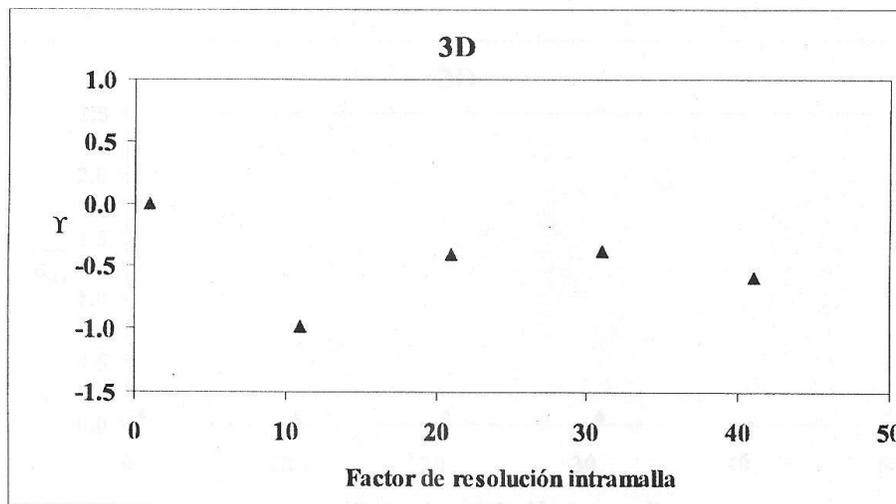


Figura 5.29. Efecto de la resolución intramalla sobre el error normalizado de la concentración pico en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme.

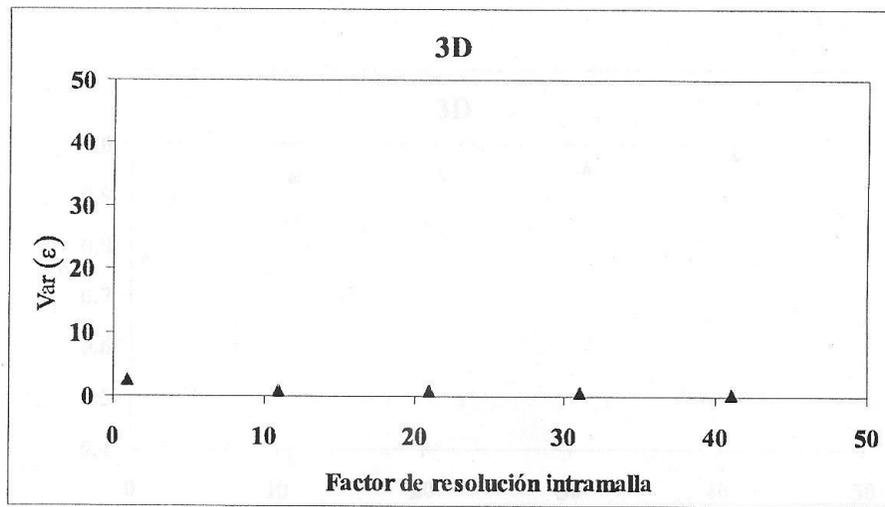


Figura 5.30. Efecto de la resolución intramalla sobre la varianza de los errores residuales en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme.

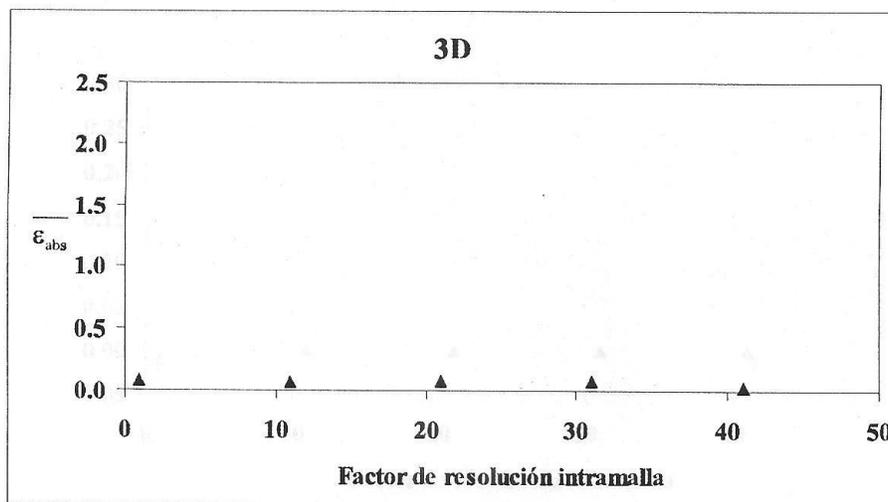


Figura 5.31. Efecto de la resolución intramalla sobre la media de los errores residuales absolutos en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme.

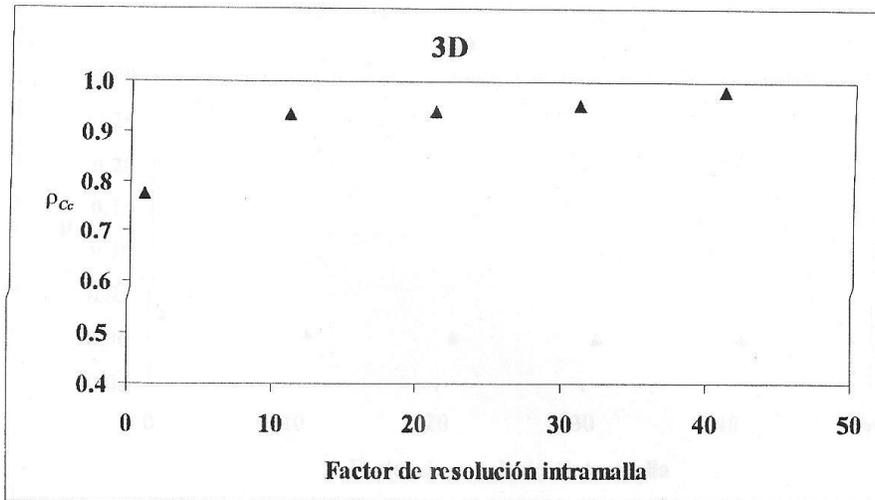


Figura 5.32. Efecto de la resolución intramalla sobre la correlación entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme.

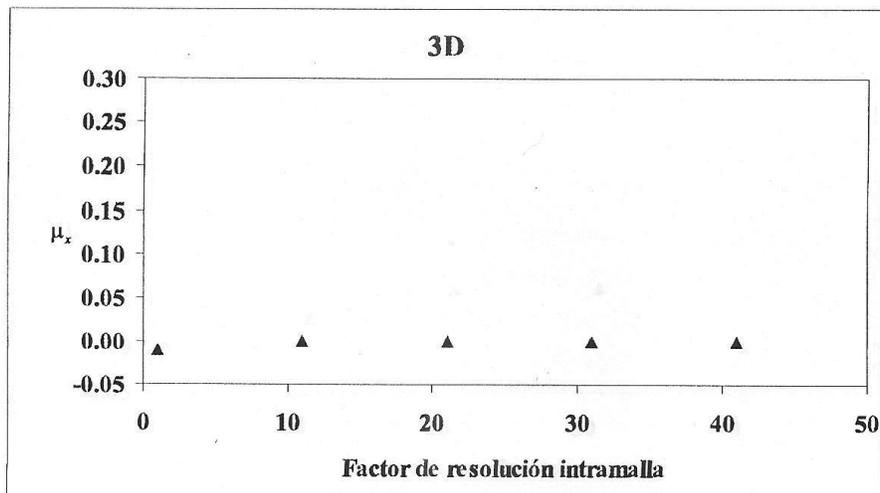


Figura 5.33. Efecto de la resolución intramalla sobre el desfase (μ_x) entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme.

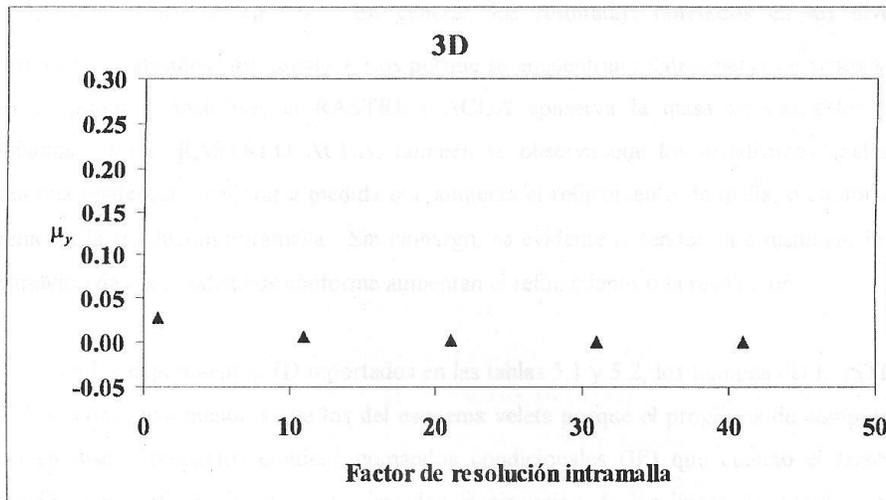


Figura 5.34. Efecto de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_y) entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme.

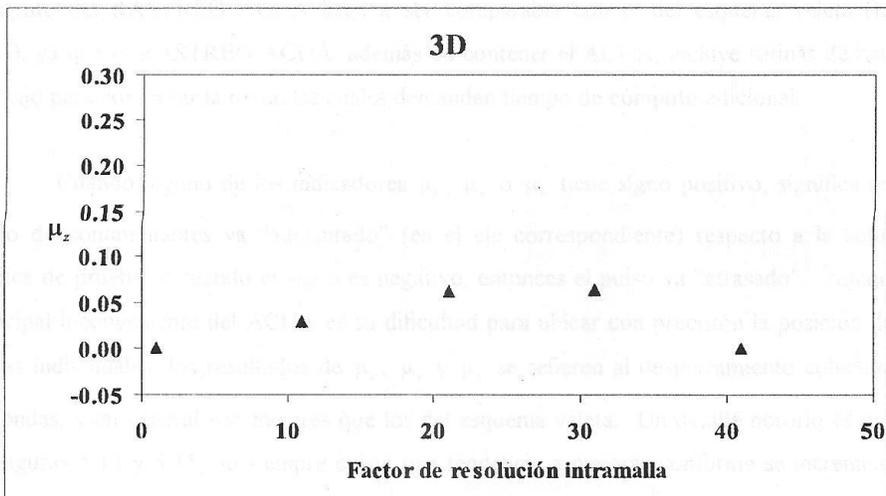


Figura 5.35. Efecto de la resolución intramalla sobre el desfaseamiento (μ_z) entre la solución del RASTREO ACUA y la solución teórica en experimentos con flujo 3D transitorio y no uniforme.

Los valores ideales de los estadísticos analizados son: $\Upsilon = 0$, $\text{Var}(\varepsilon) = 0$, $\overline{\varepsilon_{\text{abs}}} = 0$, $\rho_{cc} = 1$, $\Xi = 1$ y $\mu_x = \mu_y = \mu_z = 0$. En general, los resultados obtenidos en los diversos experimentos realizados, son satisfactorios porque se encuentran relativamente cercanos a esos valores óptimos. Inclusive, el RASTREO ACUA conserva la masa en todos los casos estudiados. En el RASTREO ACUA, también se observa que los estadísticos analizados tienen una tendencia a mejorar a medida que aumenta el refinamiento de malla, o conforme se incrementa la resolución intramalla. Sin embargo, es evidente la tendencia a disminuir la tasa de variación de los estadísticos conforme aumentan el refinamiento o la resolución.

En los experimentos 1D reportados en las tablas 5.1 y 5.2, los tiempos del RASTREO ACUA se consignan menores que los del esquema veleta porque el programa de cómputo (se anexa en disco compacto) contiene comandos condicionales (IF) que cuando el factor de resolución intramalla es igual a uno, impiden la ejecución de las líneas de programas que contienen el procedimiento de balance de masa entre celdas. En estas circunstancias, computacionalmente el RASTREO ACUA opera como si se tratase del ACUA, el cual es más rápido de ejecutar que el esquema veleta. Por su parte, en problemas 2D el tiempo de cómputo del RASTREO ACUA llega a ser comparable con el del esquema veleta (figura 5.21), ya que el RASTREO ACUA, además de contener el ACUA, incluye rutinas de balance de flujo para conservar la masa, las cuales demandan tiempo de cómputo adicional.

Cuando alguno de los indicadores μ_x , μ_y o μ_z tiene signo positivo, significa que el pulso de contaminantes va “adelantado” (en el eje correspondiente) respecto a la solución teórica de prueba, y cuando el signo es negativo, entonces el pulso va “atrasado”. Aunque el principal inconveniente del ACUA es su dificultad para ubicar con precisión la posición de las ondas individuales, los resultados de μ_x , μ_y y μ_z se refieren al desplazamiento colectivo de las ondas, y en general son mejores que los del esquema veleta. Un detalle notorio es que en las figuras 5.13 y 5.35, no siempre existe una tendencia a mejorar conforme se incrementa el factor de resolución intramalla. Este comportamiento anómalo se le atribuye a la transitoriedad del flujo, ya que justamente en esos dos casos el flujo es no permanente (recuérdese que en los experimentos 3D, la velocidad vertical no es permanente).

En el RASTREO ACUA, el hecho de que Υ sea menor que cero indica la presencia de oscilaciones (*overshoots*), las cuales se manifiestan como estados uniformes de C que admiten discontinuidades respecto a las celdas adyacentes. Esto se explica porque en presencia de flujo con onda de choque (figura 5.1), la operación de balance de masa incrementa al valor de c en una celda determinada a expensas de disminuirlo en alguna(s) celda(s) adyacente(s). Es notorio que cuando no se acude a la resolución intramalla (cuando el factor de resolución intramalla es igual a uno), Υ es nulo y no se ajusta a la tendencia de variación del resto de los puntos de las figuras 5.22 y 5.29, lo cual indica que en ese caso particular no hay disipación ni dispersión en la solución. Esto obedece a que cuando el factor de resolución intramalla es uno, la masa permanece en el nodo, o avanza desde un nodo adyacente, pero no hay transferencia parcial de masa, es decir, en esas circunstancias, el flujo de masa en el RASTREO ACUA se efectúa de la misma manera que en el esquema ACUA.

En todas las series de experimentos numéricos realizados, es de resaltarse la alta correlación con la solución teórica de prueba, además de que el RASTREO ACUA conserva rigurosamente la masa. Pero la eficiencia computacional del RASTREO ACUA sobresale cuando se le contrasta con los resultados obtenidos por otro modelo. Por ejemplo, Quamrul [1993] implementó un modelo que resuelve la componente advectiva mediante el método retrospectivo de características, y la difusión mediante un método implícito de direcciones alternantes. Al comparar el esfuerzo computacional de su modelo *versus* el esquema veleta, el citado autor reporta lo siguiente: 16.5 veces más tiempo en campo de flujo uniforme, 22 veces más tiempo en el caso de un campo rotatorio de velocidades, y 20 veces más tiempo para flujo transitorio.

En consecuencia, se concluye que si se satisface el requisito de redistribución de la actividad de los vectores de ACJA, el problema de encontrar un camino de búsqueda en la velocidad del tiempo de ejecución. Esta conclusión se refiere a la velocidad de ejecución de los algoritmos de búsqueda y a la consistencia de sus resultados. El presente estudio se centró en el proceso de búsqueda de...

CAPÍTULO 6

Este capítulo se refiere a los resultados de un procedimiento de búsqueda de caminos. El procedimiento se aplicó a los problemas de búsqueda de caminos en un grafo. Los resultados muestran que el procedimiento es eficiente y que los caminos encontrados son óptimos. El presente estudio se centró en el proceso de búsqueda de...

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

El presente estudio se centró en la resolución de los problemas de búsqueda de caminos en un grafo. Los resultados muestran que el procedimiento es eficiente y que los caminos encontrados son óptimos. De esta manera, el cumplimiento del segundo objetivo específico resultó satisfactorio. Se recomienda...

El presente estudio se centró en la resolución de los problemas de búsqueda de caminos en un grafo. Los resultados muestran que el procedimiento es eficiente y que los caminos encontrados son óptimos. De esta manera, el cumplimiento del segundo objetivo específico resultó satisfactorio. Se recomienda...

En esta parte, la continuación teórica de la búsqueda de caminos se refiere a la búsqueda de caminos en un grafo. Los resultados muestran que el procedimiento es eficiente y que los caminos encontrados son óptimos. De esta manera, el cumplimiento del segundo objetivo específico resultó satisfactorio. Se recomienda...

En este trabajo, se demostró que si se satisface el requisito de equidistribución de la secuencia de vectores 3D, entonces el ACUA tridimensional es capaz de avanzar la solución a la velocidad del campo de flujo. Este requerimiento, aunado a la necesidad de alternar los signos de las componentes de los vectores, y a la conveniencia de reducir el tiempo consumido por el proceso de generación de vectores, condujo a la modificación del generador de Van der Corput mediante la incorporación de un procedimiento de replicación simétrica. Adicionalmente, se identificaron secuencias de vectores particulares, que a la luz de pruebas estadísticas y de experimentos numéricos, representan una mejora al compararse con las secuencias previamente en uso, cumpliéndose así al primer objetivo específico de esta tesis.

La suposición de linealidad de los problemas de Riemann 3D no representó problema alguno, y en cambio facilitó enormemente el planteamiento de un procedimiento de solución sumamente sencillo. De esta manera, el cumplimiento del segundo objetivo específico no tuvo mayores complicaciones.

El ACUA mantiene la solución en un nodo o lo avanza desde un nodo adyacente. La conceptualización cuántica de este comportamiento, fue un factor determinante para la implementación del ACUA como un esquema en diferencias finitas tipo veleta (*upwind*). De esta manera, se dio cumplimiento al tercer objetivo específico de la investigación, y se pudo demostrar la consistencia, la estabilidad y la convergencia del ACUA. Considerando que las velocidades cuánticas dependen de los vectores empleados para el muestreo, y de la velocidad del flujo, los resultados obtenidos permiten deducir que la eficiencia de la equidistribución de la secuencia de vectores aplicada, influye en la consistencia, y por tanto en la convergencia del ACUA. Inclusive, la influencia de la secuencia de vectores se refleja en la difusión numérica.

Por otra parte, la confirmación teórica de la ausencia de disipación y dispersión de la solución local obtenida mediante el ACUA 3D, refrenda que este esquema es una opción atractiva para simular el transporte de estructuras frontales. Por lo que, atendiendo al objetivo principal de la presente investigación, el esquema del ACUA se implementó en el modelo RASTREO ACUA, el cual conserva masa integrando globalmente las soluciones locales.

En cumplimiento al cuarto objetivo específico, el RASTREO ACUA fue evaluado tomado como referente de comparación al universalmente conocido esquema veleta (*upwind*) de primer orden. Con sustento en la evaluación a que fue sometido el modelo propuesto, se puede afirmar que su capacidad para simular el transporte de frentes de contaminantes es satisfactoria. Entre los resultados obtenidos con el RASTREO ACUA destacan las siguientes ventajas: rapidez de ejecución, conservación total de masa y alta correlación con la solución teórica de prueba. Además, el RASTREO ACUA presenta una mejor tasa de convergencia hacia la solución analítica, aunque esa tasa disminuye al aumentar los factores de refinamiento de malla y de resolución intramalla. Asimismo, el esquema numérico del ACUA es de primer orden, lo cual facilita la incorporación de las condiciones de frontera. Otra ventaja, debida a que el flujo de masa se calcula a través del traslape entre nubes de contaminantes asociadas a celdas computacionales contiguas, consiste en que se tiene la garantía de que el RASTREO ACUA no genera valores negativos de la solución. Por otra parte, su desventaja es que en simulaciones prolongadas, se requiere una gran cantidad de memoria para almacenar las condiciones de frontera. Además, a pesar de que el ACUA no introduce dispersión, en el RASTREO ACUA las oscilaciones surgen eventualmente debido al procedimiento seguido para la determinación de la transferencia de masa entre celdas computacionales vecinas.

El ACUA es un método diseñado para simular el transporte de frentes con gran eficiencia. En consecuencia, el modelo RASTREO ACUA hereda esa aptitud. Aunque este modelo no fue sometido a experimentos con un campo de concentración sin discontinuidades, es posible que otros métodos sean más eficientes en esas condiciones.

La investigación realizada esclarece la estructura del ACUA, ubicándolo dentro del marco teórico de los métodos en diferencias finitas. El replanteamiento del ACUA como un método en diferencias finitas, facilitó el diseño de un esquema 3D sin separación espacial de operadores, lográndose dar cumplimiento a la meta de la presente investigación. Asimismo, la clasificación del ACUA como un esquema veleta, permite adaptar al ACUA muchos avances que se han tenido en torno a los métodos de ese tipo. Esto hace suponer que se reactivará el interés en el desarrollo y aplicación del ACUA al transporte de frentes. En ese sentido, se recomienda que se profundicen las investigaciones al menos en las siguientes líneas:

- i)* Aplicación de funciones de mayor orden para la concentración del contaminante. Actualmente, al aplicar el ACUA, la concentración del contaminante al interior de las celdas riemannianas debe ser uniforme. Un desarrollo del ACUA que se hace evidente, es la aceptación de variación de la concentración al interior de las celdas riemannianas, permitiendo a la vez discontinuidades entre celdas contiguas.
- ii)* Aplicación de antidifusión artificial. Las técnicas de introducción de difusión artificial han sido útiles para la corrección de flujos cuando se conoce de antemano la difusión numérica. Precisamente, a raíz de que en la presente investigación se identificó la estructura de la difusión del ACUA, se facilita la introducción de “antidifusión” artificial, por lo que este artificio se presenta como una opción interesante para conservar masa.
- iii)* Implementación del ACUA en coordenadas curvilíneas. La aplicabilidad del ACUA a cuerpos de agua con geometría irregular se incrementaría si se desarrollase una versión en coordenadas curvilíneas ajustable a las fronteras.
- iv)* Aplicación del ACUA en la advección de momentum. A diferencia del manejo de la concentración de un contaminante mediante la EAD, el momentum es una cantidad que no es definida positiva. Sería importante conocer las propiedades del ACUA para transportar una variable con esa particularidad.
- v)* Aplicación del ACUA a sistemas reales. En esta tesis se desarrolla el ACUA para resolver una sola ley de conservación (la EAD). Sin embargo, usualmente la EAD se resuelve acoplada a otras EDP, v. gr. La ecuación de movimiento. La solución simultánea de dos o más EDP plantea nuevos desafíos numéricos que deben explorarse. Por ejemplo, las consideraciones de linealidad de los problemas de Riemann no podrían seguir siendo válidas, debido a que en esas circunstancias, la interacción entre ondas originaría nuevas ondas no lineales.

- vi) Algoritmo eficiente para el manejo de las condiciones de frontera. El algoritmo propuesto para la integración global del ACUA, incluye un procedimiento de rastreo (referido a la posición inicial) de las ondas. Esta operación involucra la definición de arreglos matriciales en el código computacional. En simulaciones prolongadas, la presencia de condiciones de frontera implica el manejo de una gran cantidad de elementos en estos arreglos matriciales, para lo cual sería conveniente una administración dinámica y eficiente de la memoria de la computadora.

Anderson, S. J. (1981). "Reading Number Distributions on Vector Spectrographs and Other Advanced Spectrographs." *SIAM Review*, 23(2): 127-151.

Bajraktari, A. B. M. (1989). "History of Advances in Numerical Integration of Ordinary Differential Equations." *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2(1): 1-10. Massachusetts Institute of Technology, 200 pp.

REFERENCIAS

Burr, A. J. (1971). "Computer Simulation of Random Walks." *Applied and Numerical Harmonic Analysis*, Wiley-Interscience, New York, U.S.A.

Burr, J. P. (1980), D. L. (1973). "Data-Centered Transport." *SIAM Review*, 22(1): 1-10. *Journal of Computational Physics*, 11: 28-69.

Cela, J. A., D. G. (1987), E. (1988), J. (1989). "A New Numerical Solution of the Advection-Dispersion Equation." *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 5: 1-10.

Celina, J. (1982). "Gibbs's Method for Gas Dynamics." *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 3(1): 1-10.

Colella, P. (1984). "The Piecewise-Linear Method for Solving Problems in Computational Physics." *Journal of Computational Physics*, 43: 171-201.

Colella, P. (1985). "Numerical Solution of a Nonlinear Hyperbolic Equation by the Runge-Kutta Method." *Journal of Computational Physics*, 59: 125-150.

Chan, C. (1984). "Stability Analysis of Finite Difference Schemes for the Advection-Dispersion Equation." *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(2): 272-284.

- Anderson, S. L. [1990]. "Random Number Generators on Vector Supercomputers and Other Advanced Architectures". *SIAM Review*. **32(2)**: 221-251.
- Baptista, A. E. M. [1987]. "Solution of Advection-Dominated Transport By Eulerian-Lagrangian Methods Using the Backwards Method of Characteristics". *Ph. D. Thesis*, Massachusetts Institute of Technology. 260 pp.
- Bendat, J. S. y Piersol, A. G. [1971]. "Random Data: Análisis and Measurement Procedures". Wiley-Interscience. New York, U. S. A.
- Boris, J. P. y Book, D. L. [1973]. "Flux-Corrected Transport. I. SHASTA, A Fluid Transport Algorithm That Works". *Journal of Computational Physics*. **11**: 38-69.
- Celia, M. A.; Herrera, I.; Bouloutas, E. y Kindred, J. S. [1989]. "A New Numerical Approach for the Advective-Diffusive Transport Equation". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. **5**: 203-226.
- Colella, P. [1982]. "Glimm's Method for Gas Dynamics". *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*. **3(1)**: 76-110.
- Colella, P. y Woodward, P. [1984]. "The Piecewise-Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations". *Journal of Computational Physics*. **87**: 171-200.
- Concus, P. y Proskurowski, W. [1979]. "Numerical Solution of a Nonlinear Hyperbolic Equation By the Random Choice Method". *Journal of Computational Physics*. **30**: 153-166.
- Chan, T. F. [1984]. "Stability Analysis of Finite Difference Schemes for the Advection-Diffusion Equation". *SIAM. Journal on Numerical Analysis*. **21(2)** : 272-284.

- Charrier, P. y Tessieras, B. [1986]. "On Front-Tracking Methods Applied to Hyperbolic Systems of Nonlinear Conservation Laws". *SIAM Journal on Numerical Analysis*. **23(3)**: 461-472.
- Chen, Y. y Falconer, R. A. [1994]. "Modified Forms of the Third-Order Convection, Second-Order Diffusion Scheme for the Advection-Diffusion Equation". *Advances in Water Resources*. **17**:147-170.
- Chorin, A. J. [1976]. "Random Choice Solution of Hyperbolic Systems". *Journal of Computational Physics*. **22**: 517-533.
- Chorin, A. J. [1977]. "Random Choice Methods with Applications to Reacting Gas Flow". *Journal of Computational Physics*. **25**: 253-272.
- Chorin, A. J. [1978]. "Vortex Sheet Approximation of Boundary Layers". *Journal of Computational Physics*. **27**: 428-442.
- Chorin, A. J. [1980]. "Flame Advection and Propagation Algorithms". *Journal of Computational Physics*. **35**: 1-11.
- Christie, I. ; Griffiths, D. F.; Mitchell, A. R. y Zienkiewicz, O. C. [1976]. "Finite Element Methods for Second Order Differential Equations with Significant First Derivatives". *International Journal of Numerical Methods in Engineering*. **10**:1389-1396.
- Douglas, J., Jr. y Rusell, T. F. [1982]. "Numerical methods for for Convection-Dominated Diffusion Problems Based on Combining the Method of Characteristics with Finite Element or Finite Differences Procedures". *SIAM Journal on Numerical Analysis*. **19**: 871-885.
- Fletcher, C. A. J. [1991]. "Computational Techniques for Fluid Dynamics 1. Fundamental and General Techniques". 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, Germany. 401 pp.

- Flores, J. y Holt, M. [1981]. "Glimm's Method Applied to Underwater Explosions". *Journal of Computational Physics*. **44**: 377-387.
- Forsythe, G. E. y Wasow, W. [1960]. "Finite Difference Methods for Partial Differential Equations". Wiley, New York. 444 pp.
- Garder, A. O., Jr.; Peaceman, D. W. y Pozzi, A. L. Jr. [1964]. "Numerical Calculation of Multidimensional Miscible Displacement by the Method of Characteristics". *Soc. Pet. Eng. Journal*. **6(2)**: 175-182.
- Glass, J. y Rodi, W. [1982]. "A Higher Order Numerical Scheme for Scalar Transport". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. **31**: 337-358.
- Glimm, J. [1965]. "Solutions in the Large for Nonlinear Hyperbolic Systems of Equations". *Communications on Pure and Applied Mathematics*. **18**: 697-715.
- Glimm, J. y Marchesin, D. [1979]. "Subgrid Resolution of Fluid Discontinuities". Proceedings of the 1979. *Army Numerical Analysis and Computer Conference*. 353-360.
- Glimm, J.; Marchesin, D. y McBryan, O. [1980]. "Subgrid Resolution of Fluid Discontinuities, II". *Journal of Computational Physics*. **37**: 336-354.
- Glimm, J.; Marchesin, D. y McBryan, O. [1981a]. "Unstable Fingers in Two Phase Flow". *Communications on Pure and Applied Mathematics*. **34**: 53-75.
- Glimm, J.; Marchesin, D. y McBryan, O. [1981b]. "A Numerical Method for Two Phase Flow With an Unstable Interface". *Journal of Computational Physics*. **37**: 336-354.
- Godunov, S. K. [1959]. "Finite Difference Methods for Numerical Computation of Discontinuous Solutions of the Equations of Fluid Dynamics". *Mat. Sb.* **47**: 271-295.

- Gross, E. S.; Koseff, J. R. y Monismith, S. G. [1999]. "Evaluation of Advective Schemes for Estuarine Salinity Simulations". *Journal of Hydraulic Engineering*. **125(1)**: 32-46.
- Harten, A. [1983a]. "Adaptive Numerical Methods for Hyperbolic Conservation Laws". En: Babuska, Ivo *et al.* (eds). *Adaptive Computational Methods for Partial Differential Equations*. SIAM. 251 pp.
- Harten, A. [1983b]. "High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws". *Journal of Computational Physics*. **49**: 357-393.
- Harten, A. y Lax, P. D. [1981]. "A Random Choice Finite Difference Scheme for Hyperbolic Conservation Laws". *SIAM Journal on Numerical Analysis*. **18(2)**: 289-315.
- Harten, A.; Engquist, B.; Osher, S. y Chakravarthy, R. [1987]. "Uniformly High Order Accurate Essentially Non-Oscillatory Schemes, III". *Journal of Computational Physics*. **71**: 231-303.
- Healy, R. W. y Russell, T. F. [1993]. "A Finite-Volume Eulerian-Lagrangian Localized Adjoin Method for Solution of the Advection-Dispersion Equation". *Water Resources Research*. **29(7)**: 2399-2413.
- Holly, F. M. y Usseglio P., J. M. [1984]. "Dispersion Simulation in Two-Dimensional Tidal Flow". *Journal of Hydraulic Engineering*. **110(7)**: 905-926.
- Jazcilevich D., A. y Fuentes G., V. [1994]. "The Random Choice Method in the Numerical Solution of the Atmospheric Transport Equation". *Environmental Software*. **21**: 253-272.

- Jazcilevich D., A; Gómez R., E; Valle L., A. y Fuentes G., V. [1995]. "Application of the Random Choice Method to the Estuarine Mass Transport". En: Wrobel, L. C.; Latinopolus, P. (Eds.). *Water Pollution 95. Third International Conference on Water Pollution: Modelling, Measuring and Prediction*. 253-259.
- Jazcilevich D., A. y Fuentes G., V. [1999]. "The Conservative Random Choice Method for the Numerical Solution of the Advection Equation". *Monthly Weather Review*. **127(10)**: 2281-2292.
- Kuznecov, N. N. y Tupciev, V. A. [1975]. "On an Extension of a Theorem Due to Glimm". *Soviet Math. Doklady*. **16(2)**: 340-343.
- Lax, P. D. [1969]. "Nonlinear Partial Differential Equations and Computing". *SIAM Review*. **11(1)**: 7-19.
- Lax, P. D. [1971]. "Shock Waves and Entropy". En: Zarantonello, E. H. (ed.). *Contributions to Nonlinear Functional Analysis*. Academic Press, New York and London. 603-635.
- Leith, C. E. [1965]. "Numerical Simulation of the Earth's Atmosphere". *Methods in Computational Physics*. **4**: 1-28
- LeVeque, R. J. [1996]. "High-Resolution Conservative Algorithms for Advection in Incompressible Flow". *SIAM Journal on Numerical Analysis*. **33(2)**:627-665.
- LeVeque, R. J. y Shyue, K. M. [1996]. "Two-Dimensional Front Tracking Based on High Resolution Wave Propagation Methods". *Journal of Computational Physics*. **123**: 354-368.
- Li, K. M. y Holt, M. [1981]. "Numerical Solutions to Water Waves Generated by Shallow Underwater Explosions". *Physics of Fluids*. **24(5)**: 816-824.

- Li, Y. [1997]. "Wavenumber-Extended High-Order Upwind-Biased Finite-Difference Schemes for Convective Scalar Transport". *Journal of Computational Physics*. **133**: 235-255.
- Lilly, D. K. [1965]. "On the Computational Stability of Numerical Solutions of Time-Dependent Non-Linear Geophysical Fluid Dynamics Problems". U. S. Weather Bureau. *Monthly Weather Review*. **93(1)**: 24-33.
- Liu, T. P. [1977]. "The Deterministic Version of the Glimm Scheme". *Communications in Mathematical Physics*. **57**: 135-148.
- Liu, T. P. [1979]. "Quasilinear Hyperbolic Systems". *Communications in Mathematical Physics*. **68**: 141-172.
- Loh, C. Y. y Hui, W. H. [1993]. "Lagrangian Random Choice Method for Steady Two-Dimensional Supersonic/Hypersonic Flow". *AIAA Journal*. **31(12)**: 2193-2194.
- Loh, C. Y.; Liou, M. S. y Hui, W. H. [1999]. "An Investigation of Random Choice Method for Three-Dimensional Steady Supersonic Flows". *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. **29**: 97-119.
- Mao, D. K. [1995]. "A Shock Tracking Technique Based on Conservation in One Space Dimension". *SIAM Journal on Numerical Analysis*. **23(5)**: 1677-1703.
- Marshall, G. y Méndez, R. [1981]. "Computational Aspects of the Random Choice Method for Shallow Water Equations". *Journal of Computational Physics*. **39**: 1-21.
- Marshall, G. y Menéndez, A. N. [1981a]. "Numerical Solution of the Dam Failure Problem by the Random Choice Method". *Advances in Water Resources*. **4**: 125-133.

Marshall, G. y Menéndez, A. N. [1981b]. "Numerical Treatment of Nonconservation Forms of the Equation of Shallow Water Theory". *Journal of Computational Physics*. **44**: 167-188.

Marshall, G. y Plohr, B. [1984]. "A Random Choice Method for Two-Dimensional Steady Supersonic Shock Wave Diffraction Problems". *Journal of Computational Physics*. **56**: 410-427.

McRae, G. J.; Goodin, W. R.; y Seinfeld, J. H. [1982]. "Numerical Solution of the Atmospheric Diffusion Equation for Chemically Reacting Flows". *Journal of Computational Physics*. **45**:1-42.

Neuman, S. P. [1981]. "A Eulerian-Lagrangian Scheme for the Dispersion-Convection Equation Using Conjugate Space-Time Grids". *Journal of Computational Physics*. **41**: 270-294.

Niederreiter, H. [1992]. "Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods". Society for Industrial and Applied Mathematics. Philadelphia, Pennsylvania, U. S. A.

Olivier, H. y Grönig, H. [1986]. "The Random Choice Method Applied to Two-Dimensional Shock Focusing and Diffraction". *Journal of Computational Physics*. **63**: 85-106.

Osher, S. y Solomon, F. [1982]. "Upwind Difference Schemes for Hyperbolic Systems of Conservation Laws". *Math. Comput.* **38**: 339-374.

Patel, M. K.; Markatos, N. C. y Cross, M. [1985]. "A Critical Evaluation of Seven Discretization Schemes for Convection-Diffusion Equations". *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. **5**: 225-244.

Plohr, B. J. [1987]. "Shockless Acceleration of Thin Plates Modeled by a Tracked Random Choice Method". *AIAA Journal*. **26(4)**: 470-478.

- Quamrul A., A. K. M. [1993]. "Modeling of a Three-Dimensional Advection Dominated Problem by Eulerian-Lagrangian Methods". *Ph. D. Thesis*. Department of Civil, Environmental and Coastal Engineering. Stevens Institute of Technology. Castle Point, Hoboken, New Jersey. 122 pp.
- Roache, P. J. [1976]. "Computational Fluid Dynamics". Hermosa Publishers. Albuquerque, New Mexico. 446 pp.
- Roe, P. L. [1981]. "Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes". *Journal of Computational Physics*. **43**: 357-372.
- Rood, R. B. [1987]. "Numerical Advection Algorithms and Their Role in Atmospheric Transport and Chemistry Models". *Reviews of Geophysics*. **25(1)**: 71-100.
- Smolarkiewicz, P. K. [1982]. "The Multidimensional Crowley Advection Scheme". *Monthly Weather Review*. **110**:1968-1983.
- Smolarkiewicz, P. K. [1983]. "A Simple Positive Definite Advection Scheme With Small Implicit Diffusion". *Monthly Weather Review*. **111(3)**: 479-486.
- Smolarkiewicz, P. K. [1984]. "A Fully Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm With Small Implicit Diffusion". *Journal of Computational Physics*. **54**: 325-362.
- Smolarkiewicz, P. K.; y Grabowski, W. W. [1990]. "The Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm: Nonoscillatory Option". *Journal of Computational Physics*. **86**:355-375.
- [1976]. "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme IV. A New Approach to Numerical Convection". *Journal of Computational Physics*. **23**: 316-323.

- Smoller, J. A. [1969]. "On the Solution of the Riemann Problem With General Step Data for an Extended Class of Hyperbolic System". *Mich. Math. J.* **16**: 201-210.
- Sod, G. A. [1977]. "A Numerical Study of a Converging Cylindrical Shock". *Journal Fluid Mechanics.* **83(4)**: 785-794.
- Sod, G. A. [1979]. "A Hybrid Random Choice Method with Applications to Internal Combustion Engines". *Springer Lecture Notes in Physics.* Springer-Verlag, New York, USA. **90**: 492.
- Stone, H. L. y Brian, P. L. T. [1963]. "Numerical Solution of Convective Transport Problems". *American Institute of Chemical Engineering.* **9**: 681-688.
- Thomas, J. W. [1995]. "Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods". *Texts in Applied Mathematics*, 22. Springer-Verlag, New York, USA. 437 pp.
- Trapp, J. A. y Ramshaw, J. D. [1976]. "A Simple Heuristic Method for Analyzing the Effect of Boundary Conditions on Numerical Stability". *Journal of Computational Physics.* **20**: 238-242.
- Van Leer, B. [1974]. "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second Order Scheme". *Journal of Computational Physics.* **14**: 361-370.
- Van Leer, B. [1977a]. "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme III. Upstream-Centered Finite-Difference Schemes for Compressible Flow". *Journal of Computational Physics.* **23**: 263-275.
- Van Leer, B. [1977b]. "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme IV. A New Approach to Numerical Convection". *Journal of Computational Physics.* **23**: 276-299.

Van Leer, B. [1979]. "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A Second-Order Sequel to Godunov's Method". *Journal of Computational Physics*. **32**: 101-136.

Yakowitz, S. J. [1977]. "Computational Probability and Simulation". Addison-Wesley Publishing Company. Reading, Massachusetts, U. S. A. 240 pp.

Zalesak, S. T. [1979]. "Fully Multidimensional Flux Corrected Transport Algorithms for Fluids". *Journal of Computational Physics*. **31**: 335-362.

Zheng, C. [1993]. "Extension of the Method of Characteristics for Simulation of Solute Transport in Three Dimensions". *Ground Water*. **31(3)**: 456-465.

Zheng, C. y Bennett, G. D. [1995]. "Applied Contaminant Transport Modeling. Theory and Practice". Van Nostrand Reinhold. 262-263.