

© 1183

1
29.



**UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE MÉXICO**
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO
FACULTAD DE INGENIERÍA

TESIS

Métodos espectrales en Hidráulica

QUE PRESENTA:

Moisés Berezowsky Verduzco

PARA OBTENER EL GRADO DE:

**DOCTORADO EN INGENIERÍA
(HIDRÁULICA)**

DIRIGIDA POR:

Dr Carlos Cruickshank Villanueva



Ciudad Universitaria, México D.F., febrero de 1998

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

259324



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

SPECTRAL METHODS IN HYDRAULICS
PHD THESIS OF MOISES BEREZOWSKY VERDUZCO
ABSTRACT

Spectral methods are presented. A trigonometrical polinomial is built in a way that fits exactly a given function in the grid points (collocation points). The Fourier collocation method is one of the most used given its precision and computational efficiency. Nevertheless, it has two disadvantages: a constant grid spacing is required and the boundary conditions of the differential equations to be solved should be periodical. Once the polynomial is obtained, it is relatively simple to compute numerically with high precision the derivative of the function. This is the reason why spectral methods are very convenient to solve differential equations. In the thesis, they are applied for the solution of some differential equations from Hydraulics.

After reviewing the theoretical foundations of spectral methods, an implicit scheme is built based in Fourier collocation method. The method is applied to solve the one-dimensional transport of pollutant differential equation. The great precision of the method is shown, mainly for the computation of pure convection; better results than those reported with the common procedures of the literature are obtained with the proposed method. The theory of curvilinear grid generation is used to overcome the difficulty of a non-uniform grid. Although the obtained results are not as good as those of a uniform grid, satisfactory values are still gained if a filter is used. There are several ways to solve problems with non-periodical boundary conditions. In the thesis, Chebyshev collocation method is used. Iterative methods for the solution of differential equations are described. A procedure for the solution of the gradually varied flow differential equation is developed.

The computational resources requirements from spectral methods are higher than those of finite difference schemes used commonly in Hydraulics. Nevertheless, spectral methods have the advantage of resulting in the highest possible precision for the number of grid nodes used. In the applications described in the thesis it is shown the versatility and precision of spectral methods when applied to some problems of Hydraulics.

RESUMEN

En el trabajo se presentan los métodos espectrales. Con dichos métodos, se construye un polinomio trigonométrico que es idéntico a la función que se desea representar en los nudos de la malla de cálculo llamados puntos de colocación. Uno de los métodos espectrales más empleados es el de Fourier, por su precisión y eficiencia de cálculo. Sin embargo, tiene dos desventajas: rigidez en la definición de la malla de cálculo (es necesario que la malla tenga un espaciamiento uniforme) y en el manejo de las condiciones de frontera (deben ser periódicas).

Una vez obtenido el polinomio ajustado a la función, es posible calcular numéricamente la derivada de la función con mucha precisión de una manera relativamente simple. Por ello, los métodos espectrales son muy adecuados para resolver ecuaciones diferenciales. Se aplican aquí en la solución de ecuaciones diferenciales de la hidráulica.

Después de discutir las bases teóricas de los métodos espectrales, se construye un esquema implícito, basado en el método de colocación de Fourier, para resolver la ecuación diferencial parcial del transporte unidimensional de especies. Se demuestra la gran precisión del método, sobre todo para el cálculo del transporte convectivo; se muestra que el algoritmo propuesto da resultados más precisos que los obtenidos con otros procedimientos numéricos. Utilizando la teoría de coordenadas curvilíneas, se discute la forma de tratar problemas definidos en mallas con espaciamiento no uniforme; aunque los resultados no son tan buenos como en el caso de la malla con espaciamiento constante, con la introducción de un filtro se obtienen resultados muy satisfactorios.

Existen varias formas de tratar problemas con condiciones de frontera no periódicas; aquí se escoge emplear el método de colocación de Chebyshev. Se describen técnicas iterativas para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias basados en métodos de colocación, y se propone un algoritmo para resolver la ecuación del flujo gradualmente variado con el método de colocación de Chebyshev.

Los métodos espectrales, aunque requieren más recursos de cómputo que los métodos de diferencias finitas utilizados en hidráulica, ofrecen la ventaja de lograr la máxima precisión posible para el número de puntos de malla empleada. En las aplicaciones presentadas en la tesis se comprueba la gran exactitud de los métodos espectrales y su versatilidad en algunos problemas de hidráulica.

Apenas se encuentra quien haya llegado a algo bueno si antes no se equivocó de algún modo

Maestro Eckhart

PRÓLOGO

Después de innumerables empujones, sobre todo de Ramón Domínguez, concluyo esta etapa. Paco Sánchez Sesma generó suficiente ruido con relación a los métodos espectrales para que me arriesgara a entrar al tema. Realmente fue apasionante y divertido ver la gran precisión y elegancia de dichos métodos en el cálculo de derivadas de funciones sencillas; eso me animó a desarrollar un algoritmo para resolver la ecuación diferencial de transporte convectivo; escogí dicha ecuación pues, a pesar de su sencillez, genera bastantes dolores de cabeza. Fui incluyendo cada vez más factores y apreciando cada vez más la bondad de los métodos. Finalmente, me involucré con los polinomios de Chebyshev, tema totalmente nuevo para mí. Con estos, exploré la solución de ecuaciones diferenciales con condiciones de frontera no periódicas. El problema resultó más complejo de lo que esperaba pero finalmente llegué a un algoritmo para resolver iterativamente una ecuación diferencial, que en este trabajo lo aplico a la del flujo gradualmente variado. Intenté resumir toda esta experiencia en la tesis; confío en haberlo logrado y que el lector lo pueda apreciar. Agradezco los comentarios y sugerencias de los sinodales, así como los de Abel Jiménez; he intentado evitar los errores y hacer más legible este trabajo.

Dediqué mi tesis de licenciatura a *aquellos que hicieron de mí lo que soy*; aunque no de manera determinante, sigo creyendo en esa idea. Desde el punto de vista académico, reconozco por supuesto a todos mis profesores del Posgrado, a los colegas y amigos del Instituto de Ingeniería,

de CFE, del IMTA y de la UPC en Barcelona. Siempre ha sido muy edificante para mí el intercambio de ideas con los estudiantes y becarios, con los que en muchos casos hemos construido una duradera amistad. No menciono nombres para no omitir a nadie; sin embargo, es inevitable que cite a mi querido amigo Carlos Cruickshank quien, para mí, ha sido y sigue siendo una guía, tanto en lo personal como en su visión de la Ingeniería. Siempre me sorprende cuando encuentra aquel error que yo ni me imaginaba y reconoce también los aciertos; espero poder seguirle "dando lata" en el futuro.

También desde le punto de vista personal estoy agradecido con muchas personas que se caracterizan más por su calidad humana o, como dice una amiga muy querida, porque tienen *alas*. María Auxilio me ha acompañado en este proyecto, pero sobre todo en la búsqueda de *Aquél* a quien nos queremos volver porque sus caminos y pensamientos aventajan inmensamente a los nuestros (cfr Is 55, 1-11). En este caminar y luchar por un mundo con justicia y dignidad hemos ido con la familia y con amigos/amigas y hermanos/hermanas de las comunidades de Betania, de Cuernavaca, de Barcelona, del Arca, del CUC, etc.

Finalmente, pero primero que nada, doy gracias a

*Aquél que tiene poder para realizar todas las cosas
incomparablemente mejor de lo que podemos pedir
o pensar, conforme al poder que actúa en nosotros,
a Él la gloria y el honor por los siglos de los siglos*

Ef 3, 20-22

RESUMEN

PRÓLOGO

1. INTRODUCCIÓN	1
2. SERIES DE FOURIER, POLINOMIOS Y SUS DERIVADAS	5
2.1 Transformada de Fourier discreta	5
2.2 Derivación del polinomio de Fourier	8
2.3 Ejemplo	10
3. POLINOMIOS Y SUS DERIVADAS	13
3.1 Mallas	13
3.2 Interpolación polinomial	14
3.3 Polinomios de Chebyshev	15
3.4 Derivación de los polinomios de Chebyshev	20
3.5 Ejemplos	21
4. MÉTODO DE COLOCACIÓN DE FOURIER	25
4.1 Ecuaciones fundamentales	25
4.2 Procedimiento general de solución	27
4.3 Transformación al espacio computacional	28
4.4 Primer paso. Transporte convectivo puro	29
4.5 Segundo paso. Dispersión	38
4.6 Secuencia general de cálculo	40
4.7 Aplicación	40
5. MÉTODO DE COLOCACIÓN DE CHEBYSHEV	44
5.1 Métodos iterativos	45
5.2 Ecuación del flujo gradualmente variado	47
5.3 Procedimiento de solución	48
5.4 Aplicación	50
6. CONCLUSIONES	54
REFERENCIAS	56
APÉNDICE A. TRANSFORMADA DE FOURIER CONTINUA	61
APÉNDICE B. POLINOMIOS ORTOGONALES	68
APÉNDICE C. TÉRMINOS FUENTE O SUMIDERO EN LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE	71
APÉNDICE D. MEDIDAS DE ERROR DE MÉTODOS NUMÉRICOS DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE Y DISPERSIÓN	76

Antes del Zen, las montañas no eran más que montañas y los ríos nada más que ríos. Cuando me interné en el Zen, las montañas ya no fueron montañas y los ríos tampoco fueron ríos. Pero cuando comprendí el Zen, las montañas fueron sólo montañas y los ríos, sólo ríos.

Dicho Zen

1. INTRODUCCIÓN

Desde el punto de vista matemático, los métodos numéricos de diferencias finitas y del elemento finito empleados para resolver las ecuaciones diferenciales comunes en ingeniería civil pueden clasificarse como métodos de residuos pesados. En estos, se supone que la ecuación diferencial se aproxima por dos funciones: una de ajuste (llamada en inglés *trial function*) y una de peso o de prueba (*test function*). La función de ajuste, también llamada de aproximación se usa como base de una expansión de la solución con una serie truncada; la función de prueba se escoge para obligar a que la ecuación diferencial se satisfaga lo mejor posible con dicha serie. Esto se logra minimizando el residuo que resulta en la ecuación diferencial al emplear la serie en lugar de la solución exacta.

Así, en el método de diferencias finitas, se remplazan las derivadas por una serie de Taylor, y la función de prueba es unitaria; según el número de puntos empleados, en la práctica la serie se trunca en el segundo, tercero y, como máximo, el cuarto término, por lo que resultan esquemas de primero, segundo y a lo sumo tercer orden. Desde ese punto de vista, en este grupo de métodos puede incluirse el del volumen finito, en el cual se remplazan las ecuaciones diferenciales por un balance (que incluye el cambio en el almacenamiento y la diferencia entre lo que entra y lo que sale) en un volumen dado.

En el método del elemento finito, las funciones base se eligen en general de manera que sean funciones locales formadas con polinomios de un orden fijo y no nulos sobre uno o como máximo dos subintervalos. Según se especifiquen las funciones de prueba, se tienen distintas versiones del método. Dado que la

función base es en general un polinomio de grado dos o tres a lo sumo, y ajustado localmente, el método es muy conveniente cuando se desea resolver problemas con geometrías complejas.

Es claro que cada método numérico tiene ventajas y desventajas; la práctica ha llevado al mejor uso de los diferentes métodos. Por ejemplo, la mayoría de los códigos comerciales disponibles para cálculo de hidrodinámica están basados en el método de diferencias finitas (o volumen finito); el método del elemento finito se emplea más en investigación, sobre todo de flujos permanentes, y hasta la aparición de los métodos en diferencias basados en coordenadas curvilíneas ajustadas a las fronteras era la mejor posibilidad en problemas con fronteras irregulares.

Un tercer grupo de métodos numéricos que también pertenece a los métodos de residuos pesados lo constituyen los llamados métodos espectrales. En estos, las funciones base son polinomios (en general trigonométricos) de alto orden ajustados globalmente sobre todo el dominio e infinitamente diferenciables en el intervalo; esto da al método gran precisión (de hecho, la máxima posible para el número de puntos de la malla empleados). Según sea la función de prueba escogida, se tienen métodos espectrales de tipo *Galerkin*, *tau* y *colocación*.

Al igual que en el método del elemento finito, en *Galerkin* la función de prueba es igual que la función de ajuste y resulta por tanto en funciones infinitamente suaves que satisfacen individualmente las condiciones de frontera. Se obliga a que la integral del residuo multiplicado por cada una de las funciones de prueba sea nula. El enfoque *tau* es semejante, aunque no se obliga que las funciones de prueba satisfagan las condiciones de frontera; en su lugar, se requiere un conjunto de ecuaciones para completar el sistema a fin de incluir las condiciones de frontera. Cuando se emplea *colocación*, las funciones de prueba son del tipo *delta* de Dirac centradas en los llamados puntos de colocación (que corresponden a los nudos de la malla de cálculo); en este enfoque es necesario que la ecuación diferencial se satisfaga exactamente en los puntos de colocación.

Se considera que los métodos tipo Galerkin son enfoques atractivos desde el punto de vista formal por el hecho de que las funciones base y de prueba son las mismas; esto permite resolver las ecuaciones diferenciales con el principio variacional (ésta es una de las razones por las que muchos autores prefieren el elemento finito sobre diferencias finitas: desde el punto de vista teórico, se garantiza que se cumple la ecuación diferencial). Sin embargo, en problemas altamente no lineales, ese enfoque se complica radicalmente. El método *tau* es una modificación del de Galerkin aplicable a condiciones de frontera no periódicas. Se emplea sobre todo en ecuaciones lineales pues es muy difícil de aplicar en el caso contrario. El enfoque de colocación es especialmente atractivo en problemas no lineales o con coeficientes variables; por esta razón, será el método espectral que se discutirá principalmente en este trabajo.

Las primeras versiones de los métodos espectrales se usaron en la década de los treinta para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias. Aunque se emplearon desde los años cincuenta para resolver ecuacio-

nes parciales, es desde los años setenta cuando dichos métodos se difunden más ampliamente. A partir de ese momento, un grupo de investigadores los han empleado para resolver sobre todo problemas de flujos permanentes de mecánica de fluidos en dominios con geometrías suaves y regulares. Son, por mucho, los más precisos de los métodos variacionales y por ello, se han empleado sobre todo en cálculo del detalle de flujos turbulentos.

Conviene aclarar aquí un problema de nomenclatura. El nombre de métodos espectrales comprende una familia de métodos; en sentido estricto, un método espectral se utilizaría para calcular tanto las derivadas espaciales como las temporales; sin embargo, al igual que con el elemento finito, esto es complicado y muy costoso desde el punto de vista computacional. Por tal razón, en general sólo se emplean para calcular las derivadas espaciales y la parte temporal se resuelve por diferencias finitas; por ello, algunos autores los llaman entonces métodos pseudoespectrales. Por otro lado, como se ve posteriormente, existen varios métodos de colocación, de los cuales los más empleados son Fourier y Chebyshev. Dado que los polinomios de Chebyshev son una serie de cosenos, algunos autores los denominan genéricamente métodos de Fourier. Aún más, muchos autores evitan diferenciarlos en detalle y a cualesquiera de los métodos los incluyen en lo que llaman en general simplemente como métodos espectrales.

Los métodos espectrales, aunque se usan en mecánica de fluidos [Abbott y Basco (1989), Avgousti *et al* (1993), Canuto *et al* (1988), Ku *et al* (1987), Voigt *et al* (1984), etc], apenas se han empleado en hidráulica. Al contrario de lo que sucede en muchos problemas de mecánica de fluidos, los problemas prácticos de hidráulica (tránsito de avenidas en ríos, golpe de ariete en sistemas de bombeo, etc) son fuertemente dependientes de las variaciones en las condiciones de frontera. Por ejemplo: en flujo no permanente unidimensional se tienen condiciones de frontera de Dirichlet no nulas (esto es, se prescribe la variable en la frontera, como un hidrograma aguas arriba y una marea aguas abajo); en flujo en dos dimensiones se tienen condiciones de frontera de Neumann (se prescribe la derivada normal de la variable, como sucede en las fronteras impermeables) o mixtas. De la revisión de varias aplicaciones se deduce que en general los métodos espectrales se aplican a problemas con condiciones de frontera de Dirichlet periódicas o nulas (por ejemplo, la variable es nula en el infinito o muy lejos de la zona de interés). Según puede verse en De Fainchtein *et al* (1995) y Orzag *et al* (1986), generalmente es bastante complejo manejar condiciones de frontera variables y no periódicas, comunes en hidráulica.

Como se verá en los próximos capítulos, los métodos de colocación requieren intervalos espaciales a una distancia prefijada (constante con Fourier, o con una función coseno con Chebyshev). Esto puede limitar el método si se toma en cuenta que, en muchas aplicaciones de hidráulica, el espaciamiento entre secciones es un dato topográfico; en otras situaciones, el diseñador prefiere espaciamientos pequeños en ciertas zonas, por ejemplo, cerca de las fronteras. Otra desventaja de estos métodos consiste en que, como por eficiencia conviene usar la transformada rápida de Fourier, *TRF*, el número de puntos debe ser potencia de 2 (2^N : 2, 4, 8, etc), esto es, el número de puntos en que se divide el dominio está obligado y es rígido. Finalmente, vale la pena mencionar que en problemas con flujo no permanente, los métodos espectrales

explícitos tienen una restricción más severa en el incremento de tiempo si se les compara con esquemas de diferencias finitas también explícitos .

Los objetivos de este trabajo son investigar la bondad del método espectral de colocación, así como su versatilidad cuando se desea aplicar en problemas de hidráulica, de manera de aprovechar al máximo su gran precisión. En particular, se demuestra la precisión de los métodos en el cálculo de derivadas; se propone una forma de vencer la limitación de los métodos de Fourier que requieren una malla con espaciamiento uniforme; se estudia también cómo trabajar problemas con condiciones de frontera no periódicas. Como resultado de la investigación se elaboró un algoritmo (basado en esquemas implícitos) para calcular transporte y dispersión unidimensional de especies en ríos basado en el método de colocación de Fourier, y un procedimiento iterativo para resolver la ecuación diferencial del flujo gradualmente variado. En ambos casos se demuestra la gran precisión de los métodos propuestos.

En el cap 2 se presenta la construcción de polinomios basados en la serie discreta de Fourier; en el cap 3 se describen los polinomios de Chebyshev y sus derivadas; estos dos capítulos contienen las bases para los desarrollos del resto del trabajo. En el cap 4 se discute el método de colocación de Fourier y se desarrolla un esquema implícito para resolver la ecuación de transporte unidimensional de especies; en el cap 5 se describen métodos iterativos para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y se propone un procedimiento, con base en el método de colocación de Chebyshev, para resolver la ecuación del flujo gradualmente variado. Finalmente, en el cap 6 están las conclusiones del trabajo.

Como siempre, la ola vive la vida de una ola y simultáneamente la vida del agua

Tich Nhat Hanh

2. SERIES DE FOURIER, POLINOMIOS Y SUS DERIVADAS

Los métodos de colocación se basan en ajustar una serie o un polinomio a una función definida en los puntos de la malla de cálculo; en este capítulo se presentan las nociones necesarias de series de Fourier. La presentación se hace para variables discretas que son las que se emplean en el trabajo; sin embargo, debido a que gran parte de la teoría está desarrollada para variables continuas, se resume dicha teoría en el Apéndice A.

2.1 Transformada de Fourier discreta

Sea la función $u(x)$ una variable de una ecuación diferencial con condiciones de frontera periódicas. El dominio, en el intervalo $[0, 2\pi]$ se divide en N nudos que definen la malla de cálculo; la coordenada de estos puntos, llamada puntos de colocación está definida por

$$x_j = \frac{2\pi j}{N} \quad j = 0, \dots, N-1 \quad (2.1)$$

Esta es una malla uniforme (espaciamiento constante); aunque la malla dada por la ec 2.1 es la más común (pues si N es potencia de 2 permite el uso de la transformada rápida de Fourier, *TRF*) existen otras mallas posibles [ver Gottlieb *et al* (1984)]:

$$x_j = \frac{2\pi j}{2N+1} \quad j = 0, \dots, 2N \quad (2.2a)$$

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

Para los puntos de colocación dados por la ec 2.1, los coeficientes de Fourier discretos son (ver ec a.1 del Apéndice A)

$$\bar{u} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-ikx_j} \quad -\frac{N}{2} \leq k \leq \frac{N}{2} \quad (2.3)$$

Estos coeficientes dependen únicamente de los valores nodales de u . La transformada de Fourier inversa es (ver ec a.2, Apéndice A):

$$u(x_j) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \bar{u}_k e^{ikx_j} \quad j = 0, \dots, N-1 \quad (2.4)$$

Se conoce como transformada de Fourier discreta a la transformación de los N valores (reales o complejos) $u(x_j)$, $j=0, \dots, N-1$, en los N números complejos \bar{u}_k , $k = -N/2, \dots, N/2-1$. Mientras

que la ec 2.3 es la transformada de Fourier discreta, la ec 2.4 es conocida como la transformada inversa; estas ecuaciones son equivalentes a las ecs a.1 y a.2 (del Apéndice A) en el caso continuo. En lugar de hacer las sumas indicadas en estas ecuaciones, ambas transformadas pueden calcularse de manera muy eficiente empleando la transformada rápida de Fourier, *TRF* (en inglés es común en las referencias encontrar se abreviatura *FFT*).

Existen distintas versiones de la *TRF*; en general, se requiere que N sea resultado de I^N donde $I = 2, 3, 4, \text{ etc}$; las versiones más comunes emplean $I = 2$, aunque Temperton (1983) discute que si $I > 2$ se logra un ahorro computacional del 10 por ciento (a cambio de que el número de puntos sea mayor). Si $N = 2$, y la función u es compleja, el número de operaciones para calcular la transformada es $5N \log_2 N - 6N$ (y la mitad, si u es real).

Se define con:

$$I_N u(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \bar{u}_k e^{ikx} \quad (2.5)$$

al polinomio trigonométrico de grado $N/2$, que además cumple la condición de que $I_N u(x_j) = u(x_j)$ en cada uno de los nudos dados por la ec 2.1. Este polinomio corresponde a la serie de Fourier discreta de u , ver ec a.18. Si se emplean relaciones trigonométricas, la ec 2.5 puede escribirse como:

$$I_N u(x) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) g_j(x) \quad (2.6)$$

donde

$$g_j(x) = \frac{1}{N} \operatorname{sen} [N(x-x_j)] \cot \left[\frac{x-x_j}{2} \right] \quad (2.7)$$

La relación entre cada uno de los coeficientes de Fourier discretos y continuos es:

$$\tilde{u}_k = \hat{u}_k + \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{u}_{k-N/m} \quad (m \neq 0) \quad k = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}-1 \quad (2.8)$$

es decir, el k -ésimo coeficiente del polinomio trigonométrico depende también de todos los términos de las frecuencias relativas a los números de onda de los elementos de la malla; esto es lo que se conoce como enmascaramiento (*aliasing*, en inglés). La $(k+N/m)$ -ésima frecuencia enmascara o es el alias de la k -ésima frecuencia en la malla. Una manera sencilla de entender este fenómeno es la siguiente: por los N puntos de una malla pasa una senoide con una frecuencia dada (la mínima necesaria para describir adecuadamente la función que pasa por los puntos); sin embargo, otras senoides de alta frecuencia pueden pasar también por los puntos y no dejan ver la correcta. El enmascaramiento puede interpretarse como un error en el polinomio:

$$I_N u = P_N u + R_N u \quad (2.9)$$

donde P_N es el polinomio de la serie de Fourier truncada (ec a.28) y a

$$R_N u = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{u}_{k-N/m} \right) e^{ikx} \quad (2.10)$$

se le conoce como error por enmascaramiento; si se emplea la norma L^2 es posible demostrar [Kreiss y Oliger(1979)] que

$$\|u - I_N u\|^2 = \|u - P_N u\|^2 + \|R_N u\|^2 \quad (2.11)$$

es decir, el error por la interpolación es mayor que el error de truncado; afortunadamente, este error y el de truncado decaen asintóticamente conforme aumenta N ; por tanto, el enmascaramiento es poco importante en la mayoría de las situaciones. De cualquier forma, existen distintas formas de eliminar este error; como puede verse por ejemplo en Canuto *et al* (1988).

Los coeficientes de Fourier discretos tienen las mismas propiedades de convergencia que los continuos; por ello, los polinomios convergen de la misma manera que las series de Fourier conforme $N \rightarrow \infty$. Por

tanto es posible establecer también en este caso que: a) si u es continua, periódica y acotada en el intervalo $[0, 2\pi]$, I_N converge uniformemente a u ; b) si u está acotada en el intervalo, el polinomio I_N está uniformemente acotado y converge puntualmente a u en cualquier punto en que u sea continua; c) en el caso de funciones discontinuas, es válida la versión discreta de la integral de Riemann o de Fourier (ec a.7 del Apéndice A), esto es, en funciones discontinuas, I_N converge a la media de los valores de u a ambos lados de la discontinuidad; d) si u es infinitamente suave y con todas sus derivadas periódicas, el módulo de los coeficientes discretos de Fourier decae más que algebraicamente; en general, si u cumple los mismos requisitos revisados en el Apéndice A, los coeficientes discretos convergen también con un orden $O(k^{-m})$, ver ec a.24.

2.2 Derivación del polinomio de Fourier

En el teorema a.6 del Apéndice A puede verse la forma de la derivación de la transformada de Fourier, y la derivada de la serie de Fourier se da en la ec a.25. En el caso discreto, para obtener la derivada de una función u , los coeficientes de Fourier discretos obtenidos con la ec 2.3, se multiplican por ik (la unidad imaginaria por el número de onda); la derivada es la antitransformada del resultado:

$$(D_N u)_l = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} a_k e^{2ikl\pi/N} \quad (l = 0, \dots, N-1) \quad (2.12)$$

donde

$$a_k = \frac{ik}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u_j e^{-2ikj\pi/N} \quad (2.13)$$

Este procedimiento equivale a calcular los valores de la derivada de la serie de Fourier discreta en los nudos, es decir

$$(D_N u) = (I_N u)' \quad (2.14)$$

A la función $D_N u$ se le conoce como la derivada de colocación de Fourier. En general, la derivada de colocación difiere del polinomio de la derivada de u :

$$(D_N u) \neq P_N u'$$

y además, ahora, la interpolación y la derivación no son conmutativas, es decir

$$(I_N u)' \neq I_N (u')$$

Sin embargo, Canuto *et al* (1988) prueban que la diferencia entre estas es del mismo orden del error de

truncado de la derivada (que es $u' - P_N u'$). Por tanto, se conserva la precisión espectral en la derivación, ver también Tadmor (1986).

En lugar de la representación con transformadas de Fourier, la derivada puede obtenerse también a partir de la ec 2.6:

$$(D_N u) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) g(x_j)' = \sum_{j=0}^{N-1} (M_N)_{lj} u_j \quad (2.15)$$

donde M_N es la siguiente matriz:

$$(M_N)_{lj} = \begin{cases} \frac{1}{2} (-1)^{l-j} \cot \left[\frac{(l-j)\pi}{N} \right] & l \neq j \\ 0 & l = j \end{cases} \quad (2.16)$$

Gotlieb *et al* (1984) presentan las expresiones de la matriz de la segunda derivada; en general, la m -ésima derivada es $(M_N)^m$. Las derivadas impares resultan en matrices antisimétricas y las pares en simétricas. En general, a menos que $N < 8$ es preferible calcular la derivada con la transformada de Fourier pues al emplear matrices se requieren mucho más operaciones. Por ello, en este trabajo se emplean siempre las ecs 2.12 y 2.13.

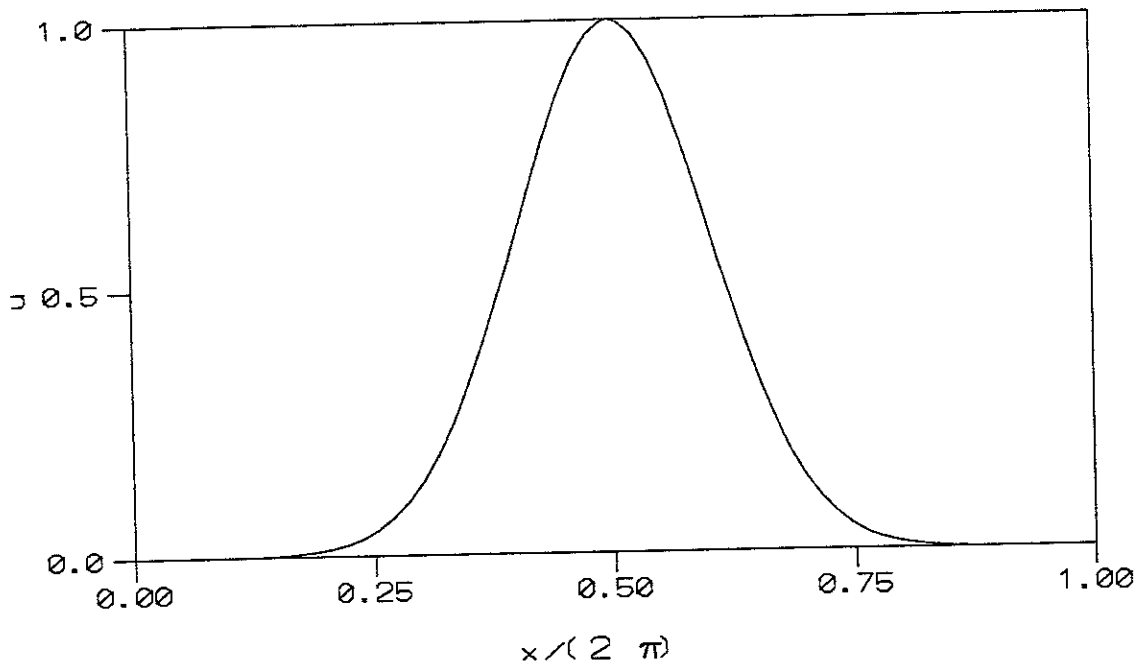


FIG 2.1 FUNCION GAUSSIANA

En Gotlieb *et al* (1984) se presentan las expresiones para el polinomio de interpolación y su derivada, si los puntos de colocación son los de la malla de la ec 2.2a; no es posible emplear la TRF pues el número de puntos no puede ser potencia de 2. Si se emplea la malla de la ec 2.2b, las expresiones del polinomio y sus derivadas son iguales a los de la malla dada por la ec 2.1.

En el cap 4 se estudia la forma de aplicar los métodos espectrales a la solución de ecuaciones diferenciales parciales; a continuación se discute un ejemplo para concretar ideas sobre lo expuesto.

2.3 Ejemplo

Sea la siguiente función periódica definida en el intervalo $[0, 2\pi]$:

$$u(x) = \exp\left[-\frac{(x-x_c)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (2.17)$$

donde x_c y σ son parámetros de la distribución (que corresponden al centro de masa y a su desviación estándar); a estos parámetros se dan los valores $x_c = \pi$ y $\sigma = 0.2\pi$, ver fig 2.1. Se desea calcular la derivada de la función.

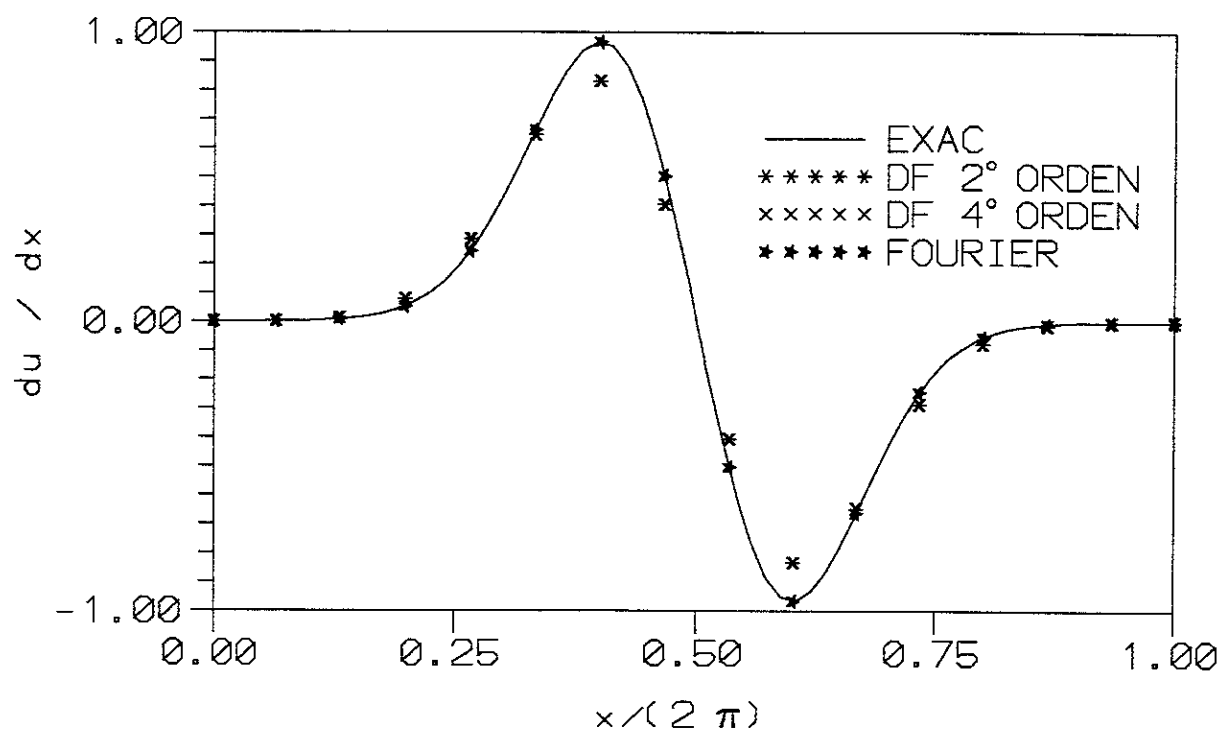


FIG 2.2 DERIVADA DE LA FUNCION DE GAUSS

En la fig 2.2 se muestra la derivada analítica $(-u(x-x_0)/(\sigma^2))$. Como puede apreciarse, la derivada es muy suave. Se comparan la derivada analítica con la calculada con el método de colocación de Fourier y con diferencias finitas de segundo y cuarto orden (en las fronteras se obtiene con un esquema de tercer orden); se consideran dos casos, variando en cada uno de ellos el número de puntos en dirección x .

Caso 1: $N = 16$. En la fig 2.2 se comparan las derivadas numéricas con la analítica y en la fig 2.3 puede verse el error normalizado definido como:

$$ERROR = \frac{(u'_{num}(x) - u'_{exac}(x))}{u_{exac}(x=\pi)} \quad (2.18)$$

Los errores máximos son de 0.134 , 0.033 y 6×10^{-5} con diferencias finitas de segundo orden (diferencias centradas), cuarto orden y de colocación de Fourier, respectivamente

Caso 2: $N = 64$. Como era de esperarse, al aumentar el número de puntos mejora radicalmente la solución con diferencias finitas; los errores máximos (fig 2.4) son 9×10^{-3} , 2×10^{-4} y 2×10^{-6} , con diferencias finitas de segundo orden, cuarto orden y colocación de Fourier, respectivamente.

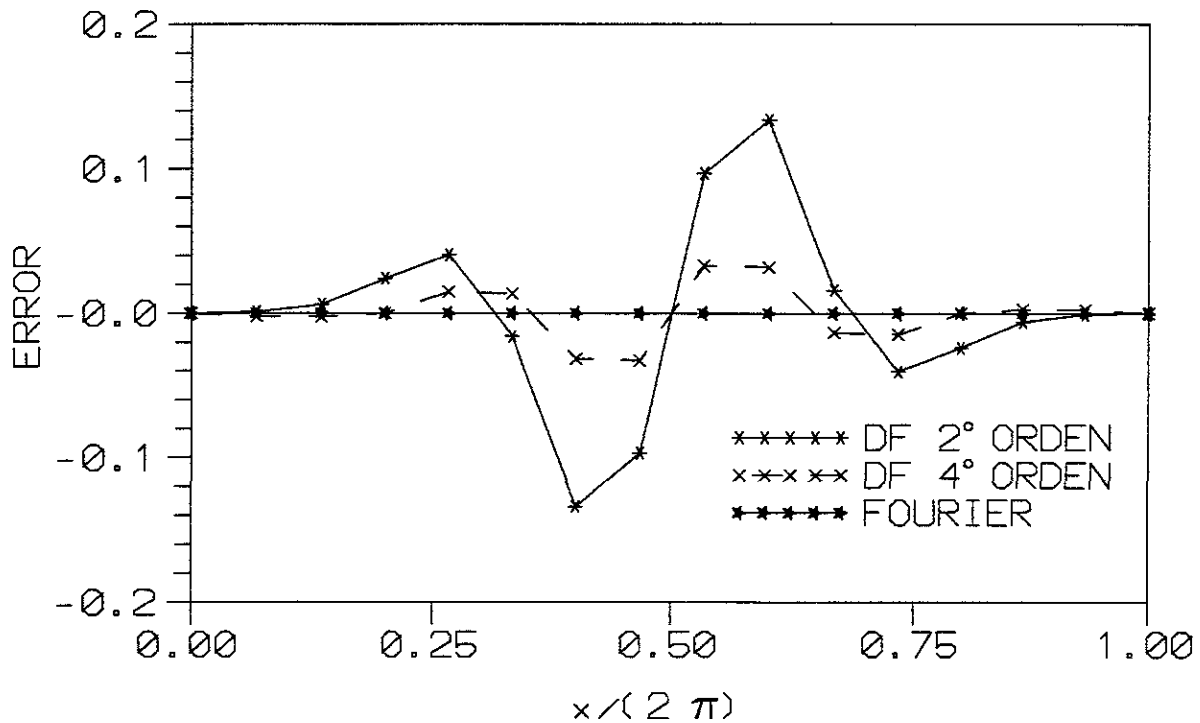


FIG 2.3 ERROR NORMALIZADO. $N = 16$

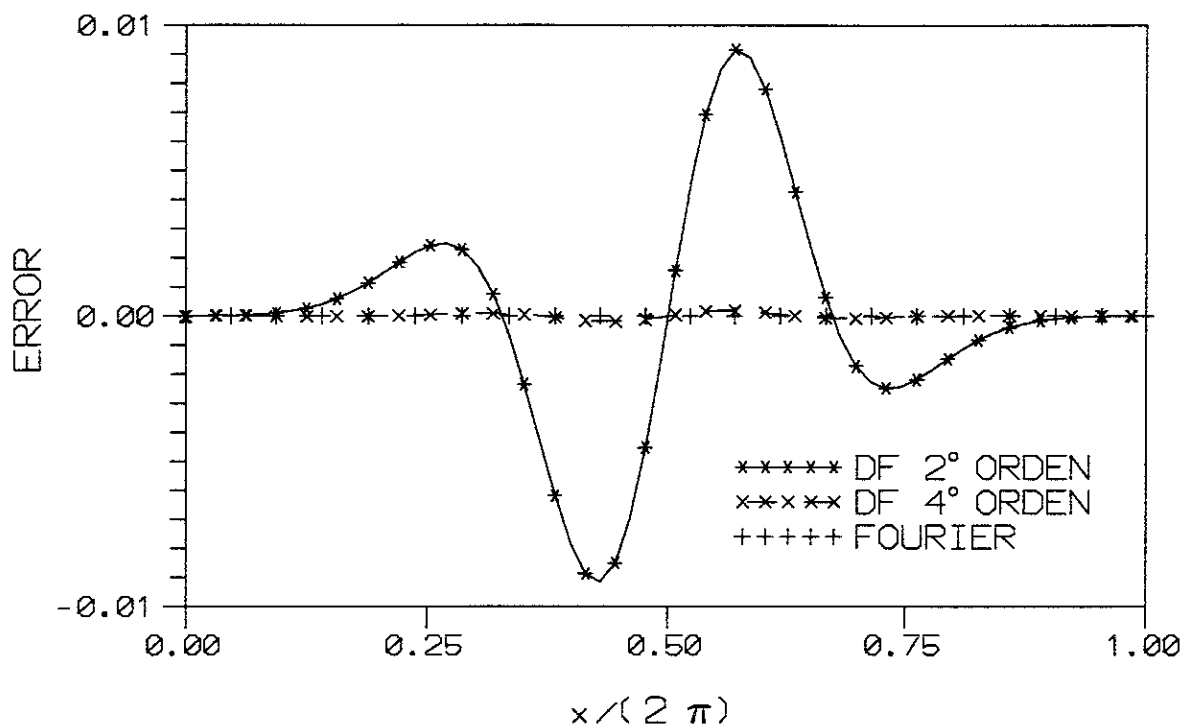


FIG 2.4 ERROR NORMALIZADO. CASO 2

Al soplo de tu ira se apiñaron las aguas, se irguieron las olas como un dique, los abismos cuajaron en el corazón del mar

Ex 15,8

3. POLINOMIOS Y SUS DERIVADAS

Cuando la variable $u(x)$ no es periódica, el polinomio trigonométrico de interpolación dado por la ec 2.5 no es suficientemente preciso; por ello, el cálculo de la derivada de la función no es tampoco preciso. Existe una familia de métodos espectrales de colocación que emplean otros polinomios; en general se emplean polinomios ortogonales (ver Apéndice B) en los que se obliga a que el polinomio sea idéntico a la función en los nudos. La teoría de polinomios ortogonales continuos se resume en el Apéndice B; con apoyo en dichos conceptos, se presentan aquí los principales resultados para el caso discreto.

3.1 Mallas o puntos de colocación

En el método de colocación de Fourier, la malla se define a distancias equidistantes; para los polinomios ortogonales se ha encontrado que es mucho más preciso emplear mallas con otros espaciamentos; se trabaja en este caso en el intervalo $[-1,1]$.

Sea una función $u(x)$, supuesta suficientemente suave en el intervalo y que se representa en términos de valores discretos en los puntos de integración dados por las siguientes expresiones [Canuto *et al* (1988), Gotlieb *et al* (1984) y Boyd (1989)]:

a) Chebyshev-Gauss-Lobato

$$x_j = \cos \frac{\pi j}{N} \quad (3.1)$$

b) Chebyshev-Gauss-Radau

$$x_j = \cos \frac{2\pi j}{2N+1} \quad (3.2)$$

c) Chebyshev-Gauss

$$x_j = \cos \frac{\pi(2j+1)}{2N+2} \quad (3.3)$$

3.2 Interpolación polinomial

En el Apéndice B se presentan las ecuaciones para integrar polinomios continuos con las mallas anteriores; en el caso discreto, el polinomio de interpolación es

$$I_N u = \sum_{k=0}^N \tilde{u}_k P_k \quad (3.4)$$

donde P es el sistema de polinomios ortogonales y los \tilde{u} son los coeficientes discretos de la expansión del polinomio de u

Los coeficientes del polinomio deben satisfacer que:

$$I_N u(x_j) = u(x_j) \quad (3.5)$$

para $0 \leq j \leq N$, es decir, el polinomio está obligado a tomar el valor de la función en cada uno de los puntos de la malla;

De manera semejante a lo visto en el Apéndice A, en el caso de los polinomios ortogonales también existe la transformación inversa a la ec 3.4, esto es

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{V_k} \sum_{j=0}^N u(x_j) P_k(x_j) w_j \quad (3.6)$$

donde

$$Y_k = \sum_{j=0}^N P_k^2(x_j) w_j \quad (3.7)$$

El par de ecuaciones 3.4 y 3.6 es totalmente análogo a la transformación 2.3 y 2.4 para la serie trigonométrica (de Fourier); por tanto aquí también puede hablarse del espacio físico (relativo a las distancias x) y el espacio transformado (relativo a la frecuencia k). Además, las derivadas de la función se aproximan por derivadas analíticas del polinomio de interpolación.

3.3 Polinomios de Chebyshev

Existen distintos polinomios ortogonales; un requisito que deben cumplir es que converjan a la función original; se ha encontrado [ver Gotlieb *et al* (1984)] que en algunos polinomios es difícil asegurar su convergencia, aun para funciones suficientemente suaves. Por otro lado, si los puntos de colocación se definen con la estructura de polinomios ortogonales, como los Chebyshev y Legendre, y la función tiene derivadas suaves, se obtienen muy buenos resultados. Se presentan aquí los polinomios de Chebyshev (de primera clase) que son mucho más empleados que los de Legendre (pues en general con estos últimos resultan en expresiones muy complejas y requieren mayor esfuerzo computacional). Un tratamiento completo de los polinomios de Chebyshev puede verse por ejemplo en Snyder (1966).

Los polinomios de Chebyshev de grado k se definen como

$$T_k(x) = \cos(k\theta) ; \quad \theta = \arccos(x) \quad (3.8)$$

Se tienen las siguientes ecuaciones recursivas para obtener los polinomios de Chebyshev [ver Boyd (1989)]:

$$T_0(x) = 1 ; \quad T_1(x) = x$$

$$T_k(x) = 2x T_{k-1}(x) - T_{k-2}(x) ; \quad k \geq 2 \quad (3.9)$$

Así por ejemplo, los polinomios 2 y 3 resultan

$$T_2(x) = 2x^2 - 1 ; \quad T_3(x) = 4x^3 - 3x$$

En la fig 3.1 se presentan los primeros seis polinomios de Chebyshev. Las principales propiedades de estos polinomios en el intervalo $[-1, 1]$ son:

a) están acotados entre ± 1 , esto es, $|T_k(x)| \leq 1$;

b) en $x = -1$, la ordenada de los pares es 1 y de los impares es -1 ; en $x = 1$, la ordenada de todos es 1 , o sea, $T_k(\pm 1) = (\pm 1)^k$; además, son funciones pares, es decir, $T_k(x) = (-1)^k T_k(-x)$.

c) T_k tiene k raíces (cruces por la ordenada 0) en el intervalo; estas raíces están localizadas en los puntos:

$$x_j = \cos\left(\pi\left(j - \frac{1}{2}\right) / k\right); \quad j=1, \dots, k \quad (3.10)$$

d) T_k tiene $k+1$ extremos (máximos o mínimos localizadas en los puntos dados por la ec 3.1)

e) en la frontera derecha, $T_k'(1) = k^2$.

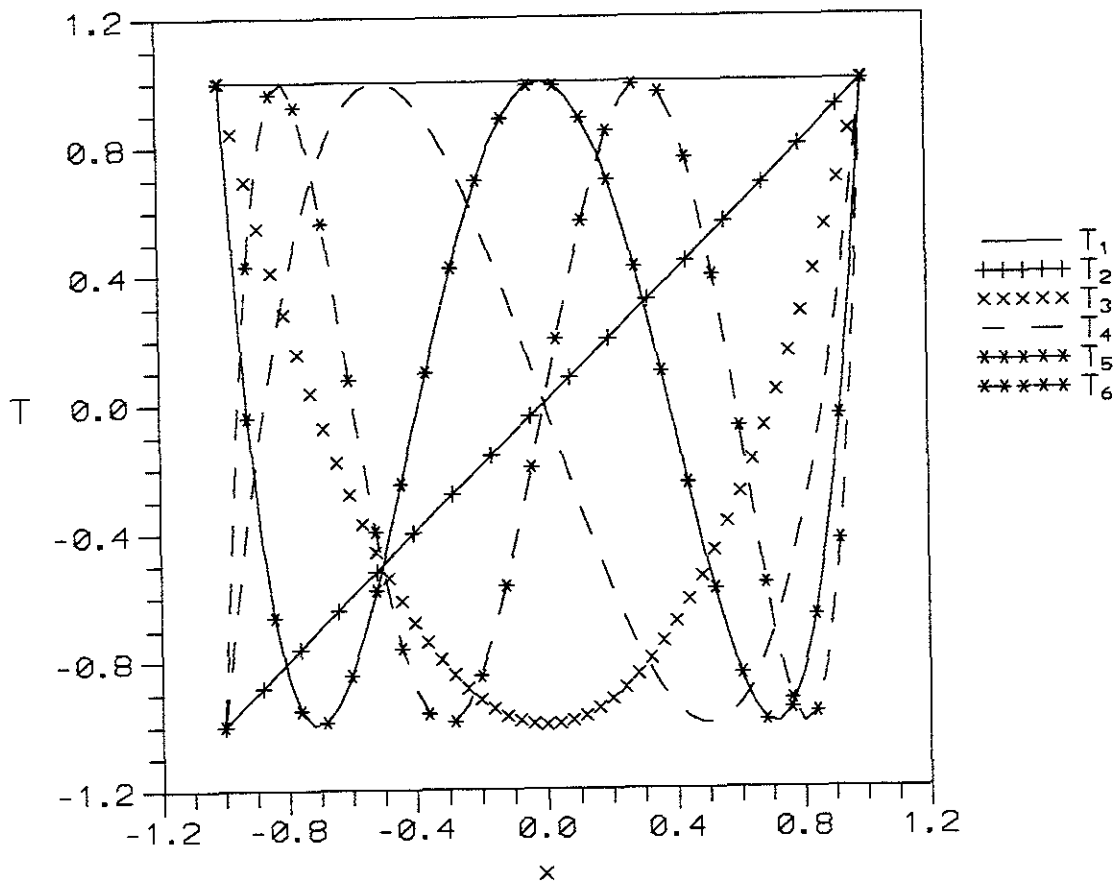


FIG 3.1 POLINOMIOS DE CHEBYSHEV T_1 A T_6

f) los polinomios son ortogonales en el intervalo con un peso $w = (1-x^2)^{-1/2}$, esto es:

$$\int_{-1}^1 \frac{T_i T_j}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ \frac{\pi}{2} & i=j \neq 0 \\ \pi & i=j=0 \end{cases} \quad (3.11)$$

La versión discreta de esta ecuación es válida en los ceros dados por la ec 3.10 y es:

$$\sum_{k=1}^N T_i(x_k) T_j(x_k) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ \frac{m}{2} & i=j \neq 0 \\ m & i=j=0 \end{cases} \quad (3.12)$$

La serie de los polinomios de Chebyshev está dada por (ver ecs b.3 y b.4):

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{u}_k T_k(x) \quad (3.13)$$

donde

$$\hat{u}_k = \frac{2}{\pi c_k} \int_{-1}^1 u(x) T_k(x) w(x) dx \quad (3.14)$$

$$c_k = 2 \text{ si } k = 0, \text{ ó bien } c_k = 1 \text{ si } k \geq 1 \quad (3.15)$$

y $w(x)$ es el peso (Apéndice B). Dada la definición de $T(x)$, ec 3.8, la serie 3.13 corresponde a una serie de cosenos (Boyd define a los polinomios de Chebyshev como una serie de Fourier "disminuida"); por ello, tiene las propiedades de convergencia de las series de Fourier, es decir, los coeficientes de Fourier decaen más que algebraicamente [Boyd (1989)].

En el caso discreto, los pesos para cada una de las mallas son:

a) Chebyshev-Gauss-Lobato

$$w_j = \begin{cases} \frac{\pi}{2N} & j=0, N \\ \frac{\pi}{N} & 1 \leq j \leq N-1 \end{cases} \quad (3.16)$$

b) Chebyshev-Gauss-Radau

$$w_j = \begin{cases} \frac{\Pi}{2N+1} & j=0 \\ \frac{2\Pi}{2N+2} & 1 \leq j \leq N \end{cases} \quad (3.17)$$

c) Chebyshev-Gauss

$$w_j = \frac{\Pi}{N+1} \quad j=0, \dots, N \quad (3.18)$$

La malla Gauss-Lobato es la más utilizada. Tomando como base las ecs 3.13 y 3.14, el polinomio de interpolación resulta [Gotlieb (1984)]:

$$I_N u(x) = \sum_{k=0}^N \bar{u}_k T_k(x) \quad (3.19)$$

donde

$$\bar{u}_k = \frac{2}{N} \frac{1}{\bar{c}_k} \sum_{j=0}^N \frac{u(x_j) T_k(x_j)}{\bar{c}_j} \quad (3.20)$$

donde

$$\bar{c}_j = 2 \quad \text{si } j = 0, N \quad \text{ó bien} \quad \bar{c}_j = 1 \quad \text{si } 1 \leq j \leq N-1 \quad (3.21)$$

Los coeficientes de la ec 3.20 pueden obtenerse usando la *TRF*.

En forma matricial, la transformación del espacio físico al espacio transformado, ec 3.6, está dada por la siguiente matriz:

$$C_{jk} = \frac{2}{N \bar{c}_j c_k} \cos \frac{\Pi j k}{N} \quad (3.22)$$

donde c_k y \bar{c}_j están dados por las ecs 3.15 y 3.21, respectivamente; la transformación inversa, ec 3.4, es ahora:

$$(C^{-1})_{jk} = \cos \frac{\Pi j k}{N} \quad (3.23)$$

que pueden obtenerse también con la transformada rápida de Fourier. Al evaluar con la ec 3.7 los coeficientes de la ec 3.6 se tiene:

$$\gamma_k = \frac{\pi}{2} c_k \quad (3.24)$$

si $k < N$, y $\gamma_N = \pi$.

En Canuto *et al* (1988), y Boyd (1989) pueden verse expresiones para los coeficientes si se emplean los puntos de colocación de las mallas 3.2 y 3.3. Para la malla definida con la ec 3.10 de los ceros de los polinomios, Press *et al* (1987) proponen calcular la ec 3.20 como:

$$\bar{u}_k = \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N u(x_k) T_{j-1}(x_k) \quad (3.25)$$

donde

$$x_k = \cos \frac{\pi(k-\frac{1}{2})}{N}; \quad T_{j-1}(x_k) = \cos \frac{\pi(j-1)(k-\frac{1}{2})}{N}$$

y el polinomio de interpolación es entonces:

$$I_N u(x) = \frac{\bar{u}_1}{2} + \sum_{k=1}^N \bar{u}_k T_{k-1}(x) \quad (3.26)$$

En lugar de evaluar esta suma, se emplean ecuaciones de recurrencia de la siguiente forma; sean

$$d_{N,2} \equiv d_{N,1} \equiv 0;$$

entonces

$$d_j = 2x d_{j+1} - d_{j,2} + \bar{u}_j \quad (3.27)$$

donde \bar{u} se evalúa con la ec 3.20 y $j = N, N-1, \dots, 2$; finalmente, una vez calculadas todas las d_j , la ecuación para la interpolación es

$$I_N u(x) = x d_2 - d_3 + \frac{\bar{u}_1}{2} \quad (3.28)$$

Este procedimiento es relativamente sencillo y fácil de programar [ver por ejemplo, Press *et al* (1987)]; sin embargo, si N es grande es más eficiente emplear la transformada rápida de Fourier.

El error por enmascaramiento por interpolar con los polinomios de Chebyshev tiene la forma (ver ec 2.8):

$$\tilde{u}_k = \hat{u}_k + \sum_{j=2, mN \pm k} \hat{u}_j \quad (3.29)$$

es decir, el k -ésimo modo del polinomio depende de todos los modos que enmascaran al $T_k(x)$.

3.4 Derivación de los polinomios de Chebyshev

Se tienen distintas expresiones, según las ecuaciones del cap 3.3 que se empleen; Gottlieb *et al* (1984) proponen el siguiente procedimiento si el polinomio de interpolación se evalúa con las ecs 3.19 y 3.20; la derivada de esta ecuación es

$$D_N u(x) = (I_N u(x))' = \sum_{k=0}^N \tilde{u}_k T_k'(x) = \sum_{k=0}^N b_k T_k(x) \quad (3.30)$$

donde

$$b_N = 0, \quad b_{N-1} = 2N \tilde{u}_N$$

y

$$\bar{c}_k b_k = b_{k-2} + 2(k+1) \tilde{u}_{n-1} \quad (3.31)$$

El procedimiento para obtener la derivada consiste en:

- calcular los coeficientes \hat{u} con la TRF;
- calcular los coeficientes b_k con la ec 3.31; la derivada es simplemente

$$D_N u(x) = \sum_{k=0}^N b_k \cos \frac{\pi k}{N} \quad (3.32)$$

El número de operaciones para obtener la derivada con este método es $(5 \log_2 N + 10)N$ si se toma ventaja de que los polinomios son funciones pares. Canuto *et al* (1988) reportan tiempos de cómputo de 20 al 40 por ciento mayores con este método que con el método de colocación de Fourier.

Si ahora se emplea la representación matricial dada por las ecs 3.22 y 3.23, la derivada sería:

$$(D_N u)(x_1) = \sum_{j=0}^N (M_N)_{1j} u(x_j) \quad (3.33)$$

donde los elementos de la matriz M_N están dados por

$$(M_N)_{lj} = \begin{cases} \frac{\bar{c}_l (-1)^{l-j}}{\bar{c}_j (x_l - x_k)} & l \neq j \\ \frac{-x_l}{2(1-x_j^2)} & 1 \leq l = j \leq N-1 \\ -\frac{2N^2+1}{6} & l = j = N \end{cases} \quad (3.34)$$

Esta matriz no es simétrica como ocurre en el caso de la derivada de Fourier y por ello se requieren N^2 operaciones para el cálculo de la derivada, mucho mayor que con el procedimiento anterior.

Gotlieb *et al* (1984) presentan expresiones para derivadas de orden superior con los dos procedimientos ya vistos.

Al considerar las ecs 3.27 a 3.28, la derivada se obtiene con las ecuaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} \bar{u}'_N &= \bar{u}'_{N-1} = 0 \\ \bar{u}'_{j-1} &= \bar{u}'_{j,1} + 2(j-1) \bar{u}_j \quad j = N-1, \dots, 2 \end{aligned} \quad (3.35)$$

En el cap 5 se aplica el método de colocación de Chebyshev a la solución de una ecuación diferencial de una función no periódica; a continuación se discuten dos aplicaciones para centrar ideas.

3.5 Ejemplos

En primer lugar se estudia la función de Gauss discutida en el cap 2.3. Los cálculos se hacen con mallas de 16 y 64 puntos. En la fig 3.2 se muestra la derivada de la función calculada. Dado que con la malla Gauss-Lobato (ec 3.1), la densidad de puntos es mayor en los extremos del intervalo que en el centro, la definición de la función con $N = 16$ puntos no es la más adecuada; no obstante, los valores de los máximos obtenidos son bastante precisos. En la fig 3.3 se incluyen los errores normalizados (ec 2.18) y se comparan con los obtenidos con el método de colocación de Fourier. Los errores máximos son de 2×10^{-2} y de 4×10^{-5} , si se emplean mallas de 16 y 64 puntos, respectivamente; estos errores son mayores que los del método de Fourier. Este resultado es de esperarse pues en problemas periódicos el método de colocación de Fourier es más eficiente, sencillo y preciso. Puede observarse en la figura que los errores máximos se presentan en los extremos de la malla.

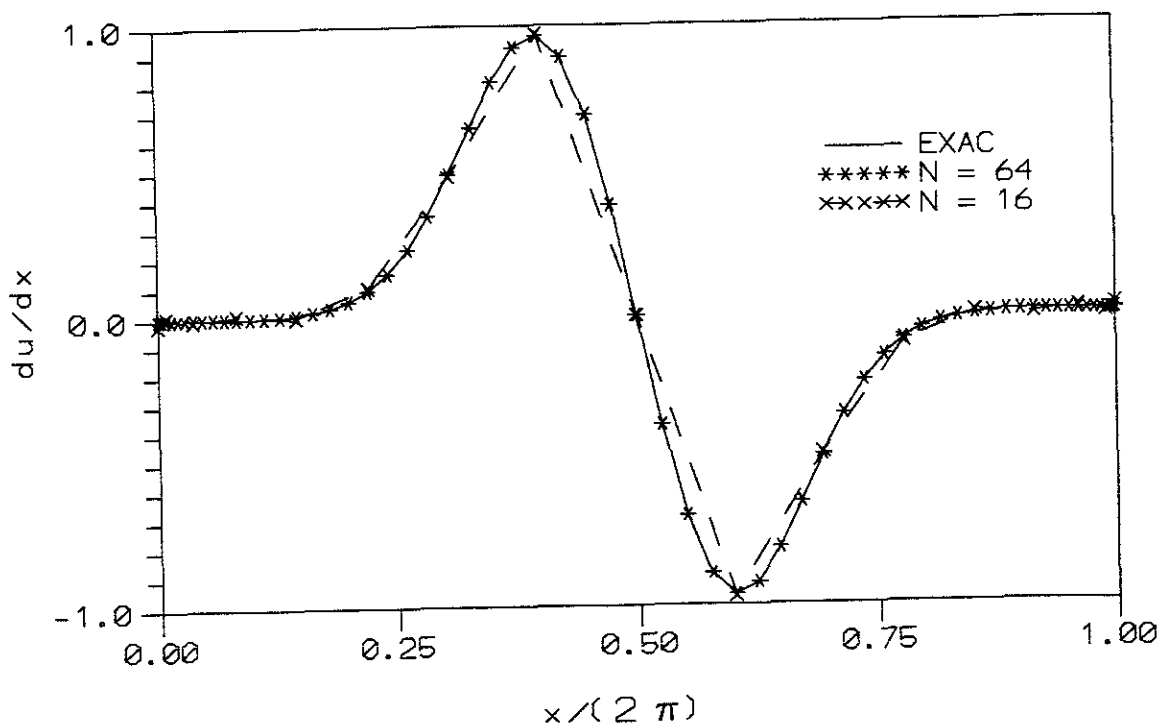


FIG 3.2 DERIVADA DE FUNCION DE GAUSS. COLOCACION DE CHEBYSHEV

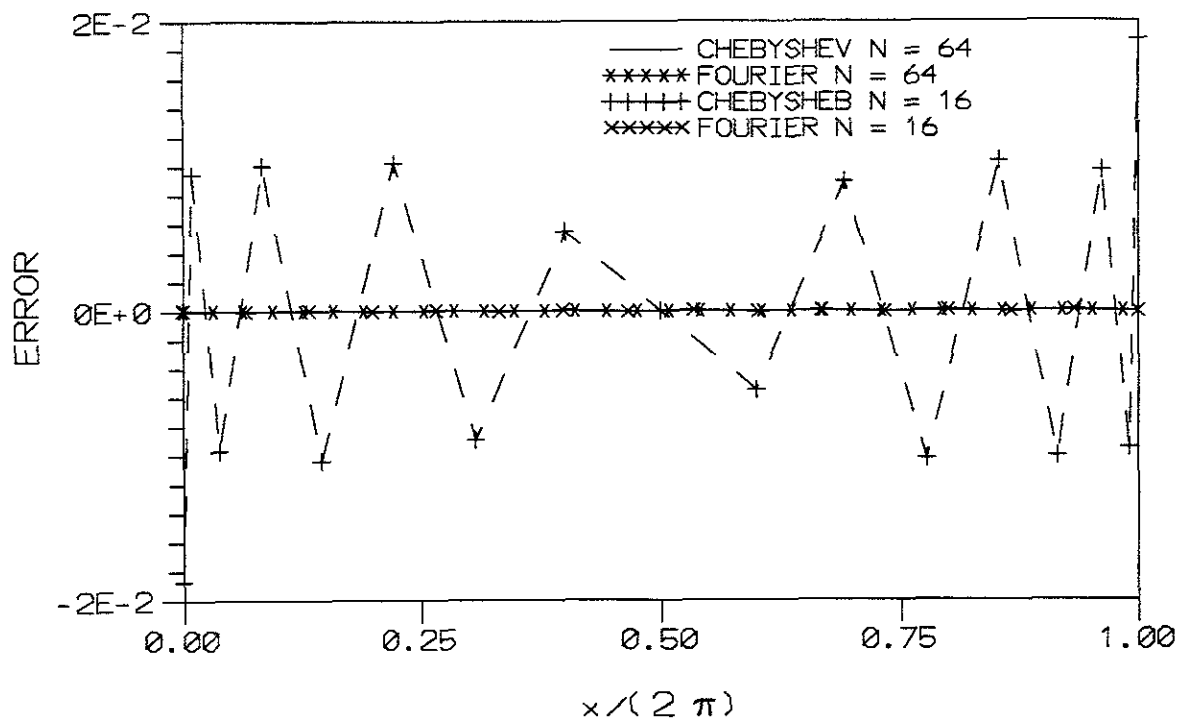


FIG 3.3 ERROR NORMALIZADO

El método de colocación de Fourier no es adecuado cuando la función no es periódica; en la fig 3.4 se muestra la función

$$u(x) = \frac{1}{3} e^{3x/2}$$

definida en el intervalo $[-1, 1]$; su derivada exacta es $3u/2$. En la fig 3.5 se muestra la derivada calculada con $N = 4, 8$ y 16 puntos con el método de colocación de Chebyshev. Los errores normalizados con el valor de la función en $x = 0$ se reportan en la fig 3.6; la aproximación es muy buena, sobre todo si $N \geq 8$.

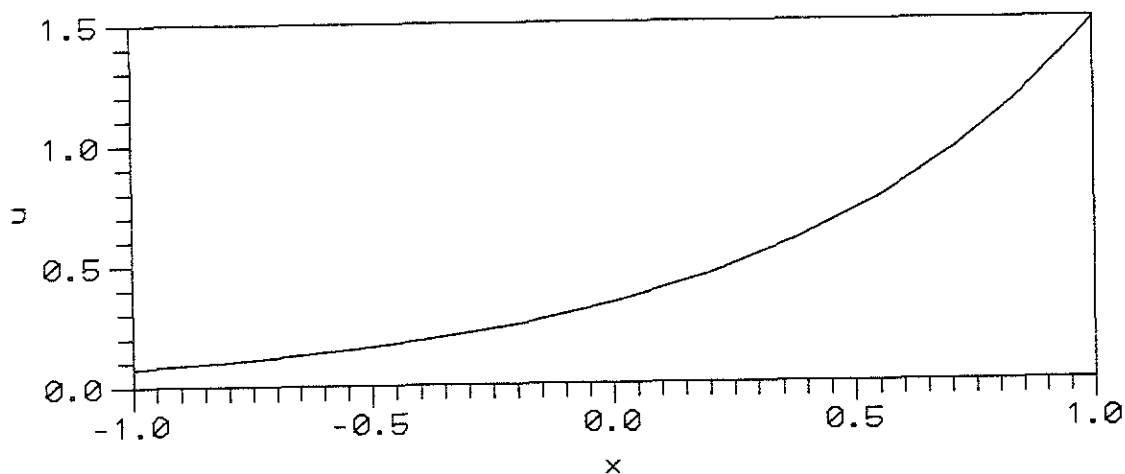


FIG 3.4 FUNCION $u = 1/3 \exp(1.5x)$

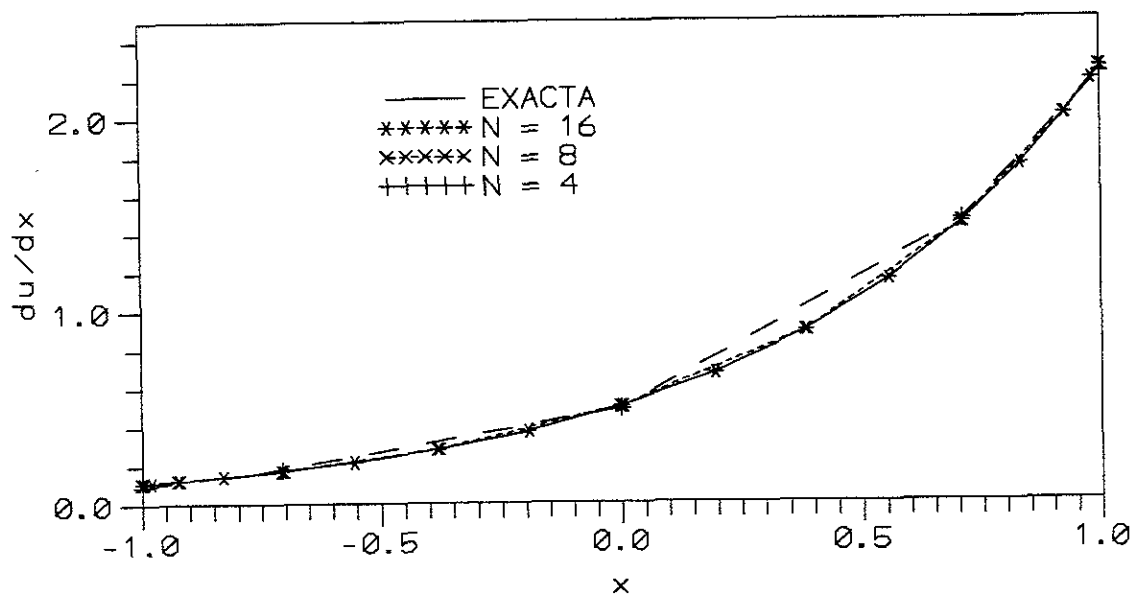


FIG 3.5 DERIVADA DE LA FUNCION u

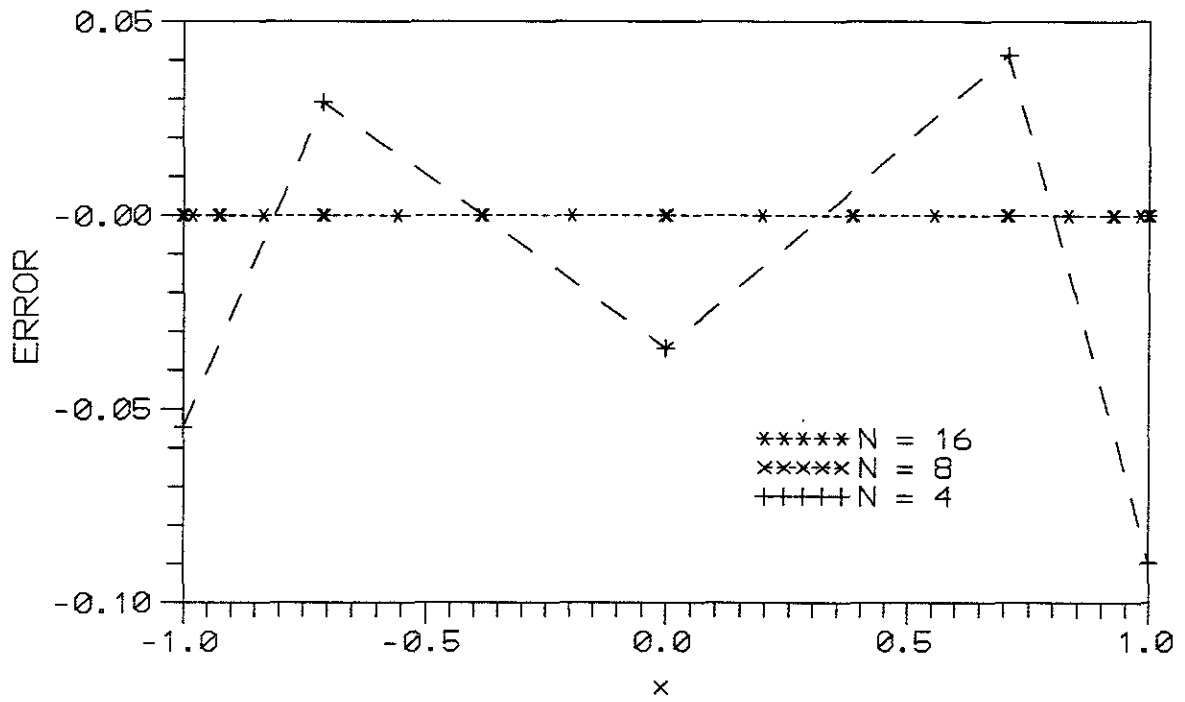


FIG 3.6 ERROR NORMALIZADO

La verdad se encuentra siempre en la simplicidad y no en la multiplicidad y confusión de cosas... Él es un Dios de orden y no de confusión

Newton

4. MÉTODO DE COLOCACIÓN DE FOURIER

En este capítulo se discute la forma de emplear el método de colocación de Fourier en la solución de ecuaciones diferenciales parciales; como se deduce de lo visto en el cap 2, este método requiere que la función y las condiciones de frontera sean periódicas.

Se propone un algoritmo basado en el método de colocación de Fourier para la solución de la ecuación unidimensional de transporte y dispersión de contaminantes en ríos; en la discusión, se introducen dos ideas: un cambio de coordenadas que permite emplear métodos espectrales aún cuando las secciones transversales dadas como datos estén a distancias cualesquiera y un esquema implícito. Las principales contribuciones del autor de este trabajo en el tema se han publicado en distintos foros (las referencias se dan en la secuela) ; aquí se discuten los resultados más relevantes incluyendo las discusiones fruto de las ponencias.

4.1 Ecuaciones fundamentales

Para dar más generalidad al análisis, se considera el caso de que el transporte de especies es en un flujo no permanente; las ecuaciones del flujo unidimensional no permanente son la de continuidad

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (4.1)$$

y la ecuación dinámica que se obtiene a partir del principio de cantidad de movimiento

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A} \right) + gA \frac{\partial H}{\partial x} + gAS_f = 0 \quad (4.2)$$

donde

A	área de la sección transversal, en m^2
Q	gasto o caudal, en m^3/s
H	cota de la superficie libre, en m
g	constante de la aceleración de la gravedad, en m/s^2
S_f	pendiente de pérdidas, también llamada de fricción
x	coordenada a lo largo del eje del río, en m
t	tiempo, en s

Se supone que se cumplen las hipótesis de Saint-Venant; la deducción de estas ecuaciones y una discusión más amplia del tema puede verse por ejemplo en Cunge *et al* (1982) y Berezowsky y Jiménez (1995).

El transporte y dispersión unidimensional de contaminantes en cauces se calcula con la siguiente ecuación diferencial parcial [Fischer *et al* (1979), Berezowsky (1993) y Berezowsky (1994)]:

$$\frac{\partial AC}{\partial t} + \frac{\partial QC}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(AF \frac{\partial C}{\partial x} \right) + S \quad (4.3)$$

donde

C	concentración media de la especie en la sección transversal, por ejemplo en mg/l
S	término fuente o sumidero (decaimiento) de la especie, en $(mg/l) (m^2/s)$
F	coeficiente de dispersión longitudinal, m^2/s

La hipótesis más importante implícita en la ec 4.3 es que se considera que la especie está uniformemente distribuida en la sección transversal. La ec 4.3 puede emplearse para modelar el transporte de varias sustancias a la vez; en este caso, C y por tanto S son vectores. En el Apéndice C se presentan algunas expresiones del término S para distintas especies o sustancias.

La determinación del coeficiente de dispersión longitudinal F se discute en Berezowsky (1993); depende esencialmente de la distribución de velocidades en la sección y se obtiene a partir de mediciones. En su lugar, Fischer propone la siguiente ecuación empírica para flujos medios permanentes [Fischer *et al* (1979)]:

$$F = K \frac{(U B)^2}{h U_s} \quad (4.4)$$

donde

- B ancho de la superficie libre del cauce, en m
- h tirante, en m
- U_s velocidad al esfuerzo cortante, en m/s.
- K constante empírica con valor 0.011

En la práctica, la dependencia de F del tiempo es débil; por otro lado, aunque el orden del valor de F es muy importante, la influencia de su variación no lo es tanto. Esto es debido al carácter parabólico de la ec 4.3.

Desde el punto de vista físico, el primer término de la ec 4.3 representa la variación temporal de la concentración; el segundo, el transporte global de la concentración (llamado transporte por advección); el último término incorpora varios procesos de mezclado: difusión molecular, difusión turbulenta y lo que se ha denominado transporte diferencial; como puede verse en Berezowsky (1993 y 1994), estos dos últimos procesos aparecen al integrar en la profundidad y con el ancho la ecuación tridimensional de transporte turbulento.

4.2 Procedimiento general de solución

Se considera aquí que las variaciones de concentración no afectan la densidad del agua; por ello, las ecs 4.1 y 4.2 son independientes de la 4.3; sin embargo, esta última ecuación sí depende del flujo. Esta hipótesis es válida en la mayoría de los casos prácticos. Se sigue aquí el siguiente procedimiento de solución:

En cada intervalo de tiempo:

- 1) se resuelven las ecuaciones del flujo, ecs 4.1 y 4.2; de aquí resultan los tirantes, gastos, velocidades, etc, en cada sección
- 2) se resuelve la ecuación de transporte, ec 4.3 con los valores del flujo y de los parámetros geométricos.

La solución de las ecs 4.1 y 4.2 está bastante estudiada y en la actualidad no representa gran dificultad; aquí se resuelven con el esquema de diferencias finitas implícito de Cruickshank-Berezowsky descrito en Berezowsky y Jiménez (1995).

Existen muchas maneras de intentar resolver numéricamente la ec 4.3. Esta es una ecuación diferencial parcial de tipo parabólico; la mayoría de los métodos numéricos (sobre todo los de diferencias finitas)

introducen difusión numérica, sobre todo en la solución de la parte advectiva (también llamada convectiva) de la ecuación (ver por ejemplo, Cunge *et al*, 1982); esta difusión numérica puede ser del orden de la dispersión física (representada por el coeficiente F), lo que echa a perder la solución numérica; ver Abbott y Basco (1989), Holly y Preissmann (1977), etc. Por ello, la ecuación debe resolverse poniendo especial cuidado en el método numérico. Aquí se resuelve con el método espectral de colocación de Fourier. Esta solución se discute con bastante detalle.

Si se ha resuelto ya el sistema de ecs 4.1 y 4.2, aprovechando la ec 4.1, la ec 4.3 puede escribirse como:

$$A \frac{\partial C}{\partial t} + UA \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(AF \frac{\partial C}{\partial x} \right) + S \quad (4.5)$$

Esta ecuación se resuelve con un método de pasos fraccionados, Yanenko (1979); en el primer paso se resuelve la ecuación siguiente:

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} - U \frac{\partial C^*}{\partial x} = 0 \quad (4.6)$$

donde C^* es un valor intermedio de la concentración; en el segundo paso se resuelve la ecuación

$$A \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(AF \frac{\partial C^*}{\partial x} \right) + S \quad (4.7)$$

De esta manera, se han separado los dos procesos físicos que aparecen en la ec 4.3: la ec 4.6 representa el transporte por convección y la 4.7 la dispersión. Se ha encontrado que este procedimiento es el más conveniente para la ecuación de transporte [ver por ejemplo, Holly y Preissmann (1977)] pues permite escoger el método numérico más adecuado para cada proceso.

4.3 Transformación al espacio computacional

El método espectral fue planteado de manera que se trabaja en el intervalo $[0, 2\pi]$ y el espaciamiento entre nudos es fijo y está dado por la ec 2.1; por otro lado, las ecs 4.1 a 4.3 se resuelven en un dominio de longitud L cualquiera; además, cuando se hace el cálculo en ríos, el espaciamiento entre secciones es variable. Como se menciona en la introducción (cap 1) esta es una de las limitantes de los métodos espectrales.

Para vencer esta dificultad, se transforman las ecuaciones diferenciales y la malla de cálculo física empleando las relaciones de transformación de coordenadas curvilíneas [Thompson *et al* (1985), Mejía y

Berezowsky (1996)]; estas transformaciones permiten cambiar de coordenadas de manera de trabajar en una malla con espaciamiento uniforme, tal como se requiere en el método espectral.

En primer lugar, la malla de cálculo se transforma al llamado espacio lógico o computacional y que tiene espaciamiento unitario; los N nudos con coordenadas x_j , en el plano físico, corresponden entonces a la coordenada ξ , con espaciamiento unitario, $\Delta\xi = 1$. La malla tendrá los mismos N nudos pero los $N-1$ elementos son unitarios.

Las ecuaciones diferenciales 4.5 a 4.7 se transforman con la regla de la cadena y quedan como sigue:

$$A \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{UA}{x_\xi} \frac{\partial C}{\partial \xi} = \frac{1}{x_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{AF}{x_\xi} \frac{\partial C}{\partial \xi} \right) + S \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} + \frac{U}{x_\xi} \frac{\partial C}{\partial \xi} = 0 \quad (4.9)$$

$$A \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{x_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{AF}{x_\xi} \frac{\partial C^*}{\partial \xi} \right) + S \quad (4.10)$$

donde x_ξ es la derivada de la coordenada x con respecto a la coordenada ξ . Nótese que si U y x_ξ son constantes, la ec 4.9 es idéntica a la ec 4.6 con una velocidad equivalente $U_e = U/x_\xi$.

La transformación a la malla espectral de tamaño 2π es trivial pues se reduce a un cambio de escala.

4.4 Primer paso. Transporte convectivo puro

Se discute con detalle en Berezowsky (1996c). La derivada espacial de la ec 4.9 se calcula espectralmente con el método de colocación de Fourier:

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = -\frac{U}{x_\xi} (D_N C) \quad (4.11)$$

donde $D_N C$ está dado por las ecuaciones 2.12 y 2.13 (con C_j como variable dependiente en lugar de u_j en esta última ecuación) y N es el número de nudos. El problema es ahora cómo calcular la derivada temporal de la ec 4.11.

4.4.1 Esquema explícito

Se propone el siguiente esquema espectral explícito, del tipo de Euler:

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{\Delta t U_j^n}{(x_\xi)_j} (D_N C)^n \quad (4.12)$$

donde, como es usual, el subíndice j corresponde a los nudos en el espacio, y el superíndice n al intervalo de tiempo. Aunque el método espectral hace al esquema espacialmente de alto orden, tiene fuertes limitantes de estabilidad; Mercier (1989) discute que en estos esquemas el límite de estabilidad es de la forma $\Delta t < K/N^2$, donde K es una constante que depende de la ecuación diferencial.

A este esquema aquí se le denomina **SPEC-E**; el procedimiento de cálculo es realmente simple. Dada la distribución espacial de la concentración en el instante n , C_j^n ,

1. Se obtiene la TRF de C_j^n
2. Se multiplica dicha transformada por $ik [-U_j^n \Delta t / (x_j)_j]$, $j=0, \dots, N-1$,
3. Se obtiene la TRF inversa (ec 2.4)
4. El valor de C^* al final del intervalo es igual al resultado del paso 3 sumado a C_j^n

4.4.2 Esquema implícito

Para evitar la restricción en la estabilidad del esquema explícito, se propone el siguiente esquema iterativo implícito. La primera estimación al final del intervalo es explícita con la ec 4.12

$$[C_j^{n+1}]^1 = C_j^n - \frac{\Delta t U_j^n}{(x_\xi)_j} (D_N C)^n \quad (4.13)$$

Con los valores de $[C_j^{n+1}]^1$ se calcula espectralmente $(D_N C)^{n+1}$; la ecuación recursiva para estimar la concentración es:

$$[C_j^{n+1}]^{m+1} = C_j^n - \frac{\Delta t}{2(x_\xi)_j} \left[U_j^n (D_N C)^n + U_j^{n+1} [(D_N C)^{n+1}]^m \right] \quad (4.14)$$

donde m señala las iteraciones. Se ha encontrado que con 3 o 4 iteraciones los valores obtenidos son muy semejantes; de hecho, el esquema puede usarse simplemente con dos iteraciones con resultados muy satisfactorios. Es conveniente recalcar que se requieren calcular dos TRF por cada iteración.

A este esquema aquí se le denomina **SPEC-I**

4.4.3 Pruebas al modelo

a) Malla con espaciamento constante

Con fines de comparación de resultados numéricos, se escoge un problema típico que tiene solución analítica. Se usa el problema 1 del Foro de Convección-difusión descrito por Baptista *et al* (1988). La velocidad del flujo es constante, $U = 0.5 \text{ m/s}$; con el objeto de ver qué tan difusivo es el método numérico, en el foro se sugiere emplear un incremento de tiempo, $\Delta t = 96 \text{ s}$ y se pide avanzar la solución hasta $T = 9600 \text{ s}$ (esto es, $100 \Delta t$). La malla tiene 64 nudos con espaciamento constante de $\Delta x = 200 \text{ m}$. El número de Courant de la ec 4.9 es $C_r = U \Delta t / \Delta x = 0.24$. La distribución inicial de la concentración está dada por una curva tipo de Gauss:

$$C(x, t=0) = C_o \exp [-(x-x_c)^2 / (2\sigma_o^2)] \quad (4.15)$$

con $C_o = 1.0$ (concentración de pico), $x_c = 2000 \text{ m}$ y $\sigma_o = 264 \text{ m}$ (ver ec 2.17 para la explicación del sentido de x_c y σ_o).

La solución analítica de este problema corresponde a una función idéntica a la dada por la ec 4.15 pero desplazada hacia aguas abajo la distancia UT , es decir, el pico de esta distribución estará a 4800 m aguas abajo del original.

Como $\sigma_o / \Delta x = 1.32$, la distribución inicial de la función de Gauss se describe con relativamente pocos puntos de malla, lo que hace este problema especialmente exigente para el método numérico.

Como condición de frontera aguas arriba se impone que la concentración que entra al dominio es cero. La ec 4.14 no requiere condición de frontera aguas abajo.

En el Apéndice D se definen diversas normas de error propuestas en el mencionado Foro, que se usarán para fines de confrontar los métodos.

Se compara el método espectral con la solución analítica y con otro método numérico; de los dos mejores procedimientos conocidos para el cálculo de transporte convectivo puro están los de Holly y Preissmann (1977) y de Leonard (1979); el primero se basa en el método de las características con interpolación de Hermite de tercer orden; el segundo, llamado **QUICK**, está basado en una interpolación de segundo orden con diferencias finitas hacia atrás. Rodi (1984) demuestra que en la mayoría de los casos producen resultados muy semejantes. Aquí se escoge el primero de ellos y se le llama **CAR-HER**. Si se considera la definición de derivada total, la ec 4.6 tiene la estructura de una ecuación del método de las características

$$\frac{dC}{dt} = 0 \quad (4.16)$$

válida si se define la trayectoria de las partículas como

$$dx/dt = U \quad (4.17)$$

Por tanto, en cada nudo, se calcula primero la trayectoria de la partícula; luego se hace una interpolación de tercer orden con un polinomio de Hermite; este polinomio se construye con los valores en los dos nudos adyacentes al punto de intersección de la trayectoria y con la derivada con x de la concentración, CX . Esta derivada se obtiene por diferencias finitas centradas a partir de la distribución inicial de las concentración. Una descripción detallada del método puede verse en Berezowsky (1993).

En Berezowsky (1996a) se presenta un método mixto características- espectral en el que, en lugar de calcular la derivada CX por diferencias finitas, esta se obtiene espectralmente; este método mixto se denomina aquí **CAR-FOUR**.

Discusión de resultados

En la fig 4.1 pueden verse los resultados del problema de prueba y su comparación con la solución exacta; conforme la solución avanza en el tiempo -y en este caso hacia aguas abajo- en los resultados de los métodos numéricos aparecen tres fenómenos: dispersión numérica, cambio de fase y oscilaciones espurias, ver por ejemplo, Abbott (1978) y Richtmyer y Morton (1967). En este caso, dado que la solución analítica es una función idéntica, la dispersión se ve en la atenuación del pico; el cambio de fase se ve en que el pico de distribución numérica llegue a distinto tiempo, o en que la distribución cambié su forma (en este caso que deje de ser simétrica); finalmente, las oscilaciones espurias, son oscilaciones que no tienen base física, como por ejemplo, oscilaciones negativas al principio y final de la distribución. Las medidas de error del Apéndice D contemplan estos aspectos; en las primeras seis líneas de la tabla 4.1 se reportan los valores de las normas de error para cada método.

Como puede observarse en las columnas 4 y 6 de la tabla 4.1, ninguno de los métodos aquí presentados introduce error de fase; con el método **CAR-HERM** (línea dos de la tabla), la atenuación del pico es del orden del 10 por ciento. Nótese la presencia de algunas pequeñas oscilaciones (*wiggles*), que incluyen valores negativos (no físicamente válidos) antes y después de la función. Como ya se discutió, las oscilaciones aparecen en la mayoría de los métodos numéricos siendo resultado de altas frecuencias no resueltas satisfactoriamente (fenómeno de Gibbs); en este caso, las oscilaciones son pequeñas y se deben en gran parte al carácter mismo del polinomio de Hermite que tiende a oscilar si los valores de la función o de las derivadas varían radicalmente de punto a punto. Con el método mixto **CAR-FOUR** disminuye un poco la

dispersión numérica del pico aunque aparece error global de fase.

Aún cuando en las figs 2.2 y 2.3 puede apreciarse que el cálculo espectral de la derivada de una función Gaussiana es muy preciso, al avanzar la solución en el tiempo y realizar el paso 2 del procedimiento de cálculo del inciso 4.4.1, se introduce un error de dispersión; de hecho, si en el método espectral explícito se usa un incremento de tiempo $\Delta t = 96 s$, los resultados son bastante deficientes por lo que se reportan los valores obtenidos empleando un $\Delta t = 10 s$. La concentración de pico tiene una atenuación del 14 por ciento, las oscilaciones espurias son insignificantes y hay un pequeño error de dispersión global.

Puede verse que los resultados con el método implícito SPEC-I son muy buenos; la atenuación del pico es del 1.5 por ciento y las oscilaciones espurias son muy pequeñas.

b) Malla con espaciamiento variable

La idea es verificar la validez de la transformación de coordenadas propuesta; al modelo se le identifica en este caso como SPEC-XI. Se hacen pruebas con dos mallas. En la primera, sugerida también en el Foro de Convección, las coordenadas de los nudos se obtienen a partir de:

$$x_0 = 0 ; \quad x_j = x_{j-1} + 200 - 75 \cos [\pi \cdot (j-1) / 65] \tag{4.18}$$

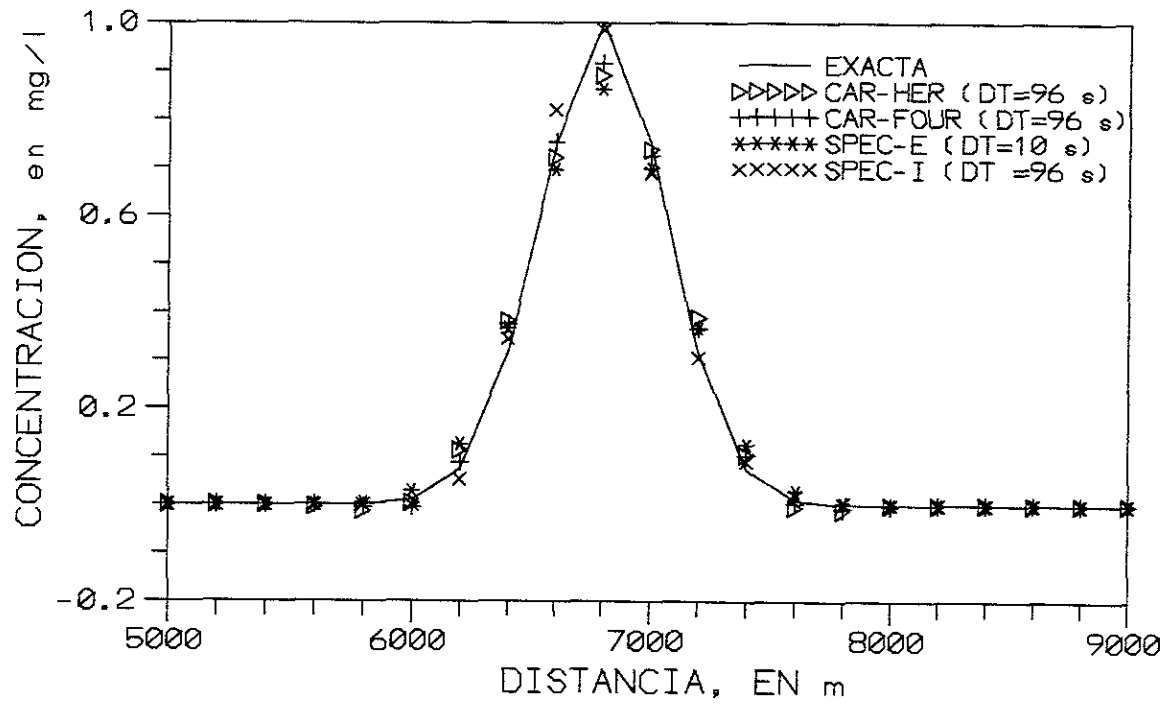


FIG 4.1 TRANSPORTE CONVECTIVO PURO (T= 9600 s) MALLA ESPACIAMIENTO CONSTANTE

es decir, el tamaño de los elementos varía suavemente entre 125 y 275 m. El centro de masa de la distribución inicial de la concentración corresponde al nudo 16.

Aunque en este caso es posible calcular analíticamente el término de la variación de un sistema coordinado con respecto al otro, para dar más generalidad se obtiene con diferencias finitas centradas.

$$(\dot{x}_\xi)_j = (x_{j+1} - x_{j-1}) / 2 \quad (4.19)$$

En la fig 4.2 se muestran los valores calculados con el método **SPEC-XI**; se reportan cálculos con Δt de 20 y 96 s. Los resultados son muy satisfactorios, ver también los renglones 7 y 8 de la tabla 4.1. Se hace notar que incluso la solución exacta no aparece muy bien descrita para los puntos que definen la malla en esa zona. En este caso, existe un ligero error de fase del pico (quinta columna de la tabla) y algo de dispersión global (última columna). Dado que, por un lado, las coordenadas del problema descrito varían muy suavemente, y por el otro, una distribución espacial con la función coseno se emplea en el método espectral de colocación de Chebyshev, convenía estar seguro de la generalidad del método; por ello, se diseñó una malla con espaciamiento aleatorio entre secciones obtenido a partir de

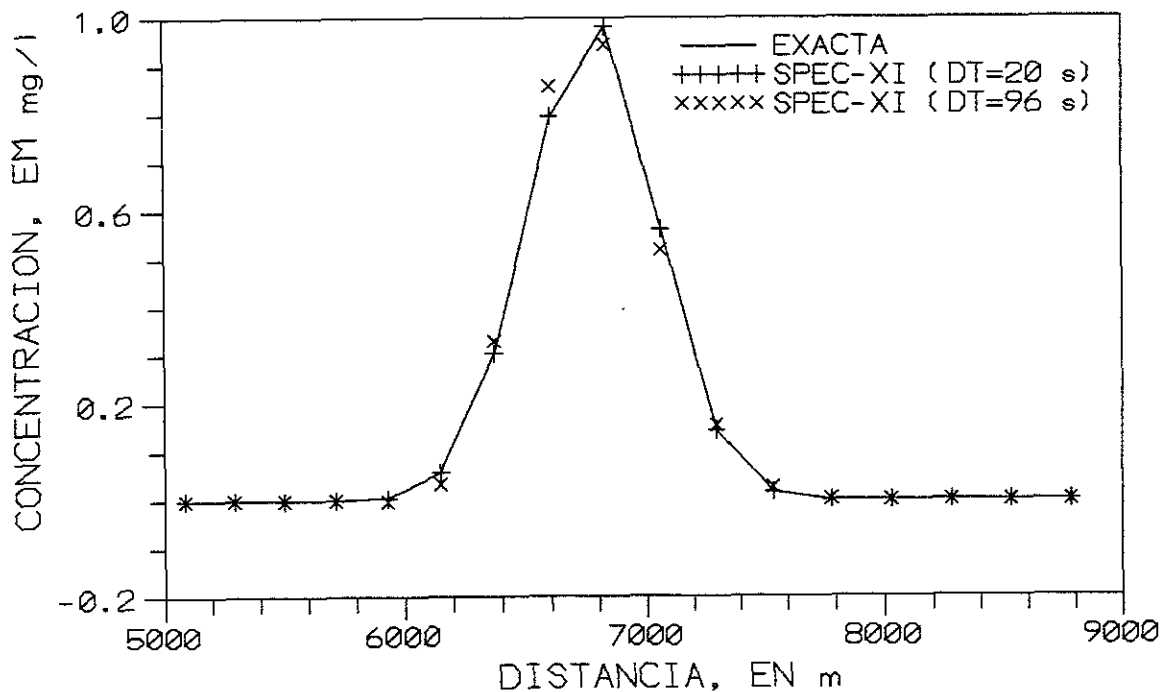


Fig 4.2 TRANSPORTE CONVECTIVO PURO ($T = 9600$ s)
MALLA ESPACIAMIENTO CON FUNCION COSENO

TABLA 4.1 MEDIDAS DE ERROR OBTENIDAS EN EL PROBLEMA DE PRUEBA

	ϕ_D	ϵ	ψ	ξ	μ_0	μ_x	μ_{xx}
EXACTA	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	1.0
CAR-HER	.2417E-3	0.1100	.1229E-1	0.0000	1.0003	.2035E-6	1.0000
CAR-FOUR ($\Delta t=96s$)	.1852E-3	0.0843	.8113E-2	0.0000	1.0002	.6002E-5	0.9996
CAR-FOUR ($\Delta t=10S$)	.4142E-4	0.0177	.7574E-3	0.0000	1.0002	.5249E-4	0.9909
SPEC-E ($\Delta t=10S$)	.2850E-3	0.1376	.2990E-4	0.0000	1.0002	.3927E-4	1.3397
SPEC-I ($\Delta t=96S$)	.1558E-3	0.0152	.6895E-3	0.0000	1.0001	.1137E-3	0.9487
SPEC-XI ($\Delta t=20S$); MALLA COSENO	.7673E-5	.1692E-2	.7515E-3	-0.010	1.0004	-.2417E-3	0.9757
SPEC-XI ($\Delta t=96S$); MALLA COSENO	.1460E-3	0.0388	.1179E-2	-0.010	1.0005	-.2532E-3	1.047
SPEC-XI ($\Delta t=20S$); ΔX ALEATORIO	.1816E-3	-.918E-2	.1987E-1	-.7566E-2	1.0474	-.6356E-1	9.204
SPEC-XI ($\Delta t=96S$); ΔX ALEATORIO	.1921E-3	-0.0190	.2146E-1	-.7566E-2	1.0475	-.6300E-1	9.260

$$x_0 = 0 ; \quad x_j = x_{j-1} + 100 + 200 \text{ RND}(s) \quad (4.20)$$

donde $\text{RND}(s)$ es un número aleatorio $[0, 1]$ con distribución uniforme, y que se obtiene intrínsecamente en el compilador *FORTRAN*. El tamaño de los elementos varía aleatoriamente entre 100 y 300 m. El centro de masa de la distribución inicial corresponde al nudo más cercano a $x = 2000$ m.

En la fig 4.3 se muestran los resultados; se ha dibujado un rango más grande del eje x que en las figuras anteriores. Como puede verse, el espaciamiento entre nudos es muy irregular. Aunque la descripción de la función de Gauss calculada es satisfactoria, se tienen oscilaciones espurias importantes; estas se deben a la influencia del término x_f que, en cierta medida implica que la ec 4.9 sea no lineal. La dispersión global en este caso es importante pues hay valores diferentes de cero en muchos nudos de la malla. Canuto *et al* (1988) comentan que, en el caso de cálculos en una malla uniforme y con U constante, no hay mecanismo para generar términos de alta frecuencia que den lugar a oscilaciones conforme avanza la solución en el tiempo; sin embargo, la simple modificación de considerar velocidad variable (o en este caso, que el espaciamiento de la malla sea variable) implica la interacción de este término con los coeficientes de Fourier. Esto genera componentes de alta frecuencia que dan lugar a oscilaciones en el llamado fenómeno de Gibbs; dichas oscilaciones deben ser controladas para retener la alta precisión del método espectral, lo que se logra con un filtro.

En la literatura se reportan varios filtros; la discusión del tema sale del objetivo del presente trabajo y puede verse por ejemplo en Walker (1991). Los más comunes son los de Cesáro, Hamming, Lanczos y *coseno resaltado*; aquí se probó con el último que tiene la siguiente forma:

$$\sigma_k = \frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{2k\pi}{N} \right) \quad k = -N/2, \dots, N/2 \quad (4.21)$$

que vale uno en el centro del intervalo ($k = 0$). Canuto *et al* (1988) muestran que este filtro equivale a una viscosidad artificial de segundo orden, semejante a la empleada en los esquemas de diferencias finitas.

Existen varios enfoques al problema; los principales son:

1) Filtro de condiciones iniciales; equivale a filtrar o suavizar la función original, ya sea con un filtro como el de la ec 4.21, o con una interfase disipativa como la descrita por Abbott (1979); este se aplica una sola vez.

2) filtro al derivar; la derivada (ecs 2.12 y 2.13) se calcula con:

$$(D_N u)_1 = \sum_{-N/2-1}^{N/2-1} ik \sigma_k \bar{u} \exp^{ik2n1/N} \quad (4.22)$$

3) filtro después de calcular la derivada; equivale a suavizar la solución; conviene aplicar el filtro al calcular la *TRF* para el siguiente intervalo

Estos dos últimos enfoques se aplican cada r intervalos de tiempo.

Cabe aclarar que se hicieron pruebas que permiten concluir que si la malla es menos irregular, (o, lo que es lo mismo, el problema es suavemente no lineal), el método espectral da muy buenos resultados sin necesidad de filtro.

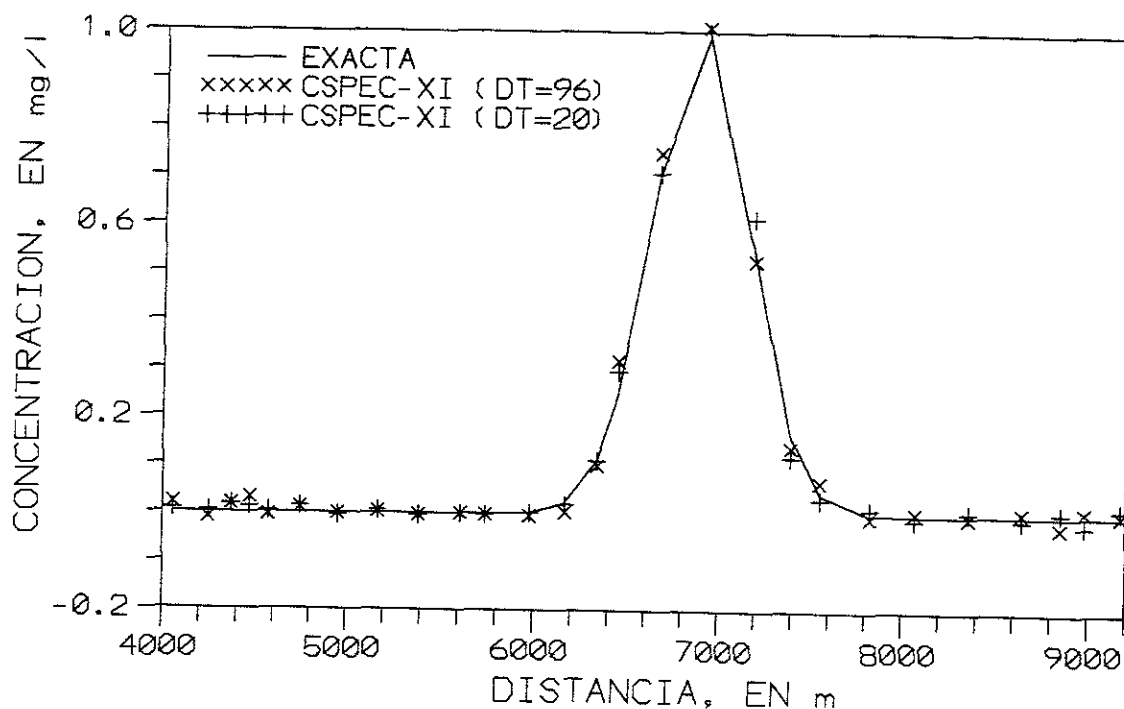


FIG 4.3 TRANSPORTE CONVECTIVO PURO ($T = 9600$ s)
MALLA CON (ESPACIAMIENTO ALEATORIO)

4.5 Segundo paso. Dispersión

Para simplificar la notación, la segunda derivada de la ec 4.10 se escribe aquí como:

$$D^2 C^* = \frac{1}{x_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{A F}{x_\xi} \frac{\partial C^*}{\partial \xi} \right) \quad (4.23)$$

Esta se calcula espectralmente como sigue:

$$D^2 C^* = \frac{1}{x_\xi} \left[D_N \left(\frac{A F}{x_\xi} (D_N C^*) \right) \right] \quad (4.24)$$

Expresado en palabras, la ec 4.24 significa:

1. Se calcula la *TRF* de C^*
2. Se multiplica por el vector complejo ik
3. Se obtiene la *TRF* inversa y se multiplica por el vector $(A F / x_\xi)_j$

Aquí concluye el cálculo de la primera derivada; para obtener la segunda derivada:

4. Se obtiene la *TRF*
5. Se multiplica por el vector complejo ik
6. La *TRF* inversa se multiplica por el vector $(I / x_\xi)_j$

4.5.1 Esquema implícito [Berezowsky (1996b)]

Para el cálculo de la derivada temporal se emplea un esquema implícito iterativo con la estructura del ya discutido. La primera predicción de la concentración al final del intervalo está dada por:

$$[C_j^{n-1}]^1 = C_j^n + \frac{\Delta t}{A_j} [(D^2 C^*)^n] \quad (4.25)$$

Los siguientes valores se obtienen con:

$$[C_j^{n-1}]^{m-1} = C_j^n + \frac{\Delta t}{2A_j} \{ (D^2 C^*)^n + [(D^2 C^*)^{n-1}]^m \} \quad (4.26)$$

donde

$$\bar{A}_j = (A_j^n + A_j^{n-1}) / 2$$

Como en el cálculo del transporte convectivo, tres o cuatro iteraciones son suficientes en la mayoría de los casos.

4.5.2 Pruebas al modelo

La parte de dispersión no tiene tantas dificultades numéricas como la del transporte convectivo puro. Se hicieron tres pruebas para la malla con espaciamiento constante y las mismas características del flujo del cálculo de transporte convectivo puro descritas en el cap 4.4.3; se prueban coeficientes de dispersión $F = 0.2, 2$ y $20 \text{ m}^2/\text{s}$; dado que el flujo es permanente, el área de sección puede tener cualquier valor y aquí se considera unitaria. Se supone que el material es conservativo, por lo que $S = 0$.

En la fig 4.4 se comparan los valores calculados con la solución analítica; la concordancia es excelente. Se destaca que aún un valor muy pequeño del coeficiente de dispersión ($F = 0.2 \text{ m}^2/\text{s}$) es suficiente para cancelar las oscilaciones espurias. Al final de este capítulo se describe una aplicación con malla no uniforme.

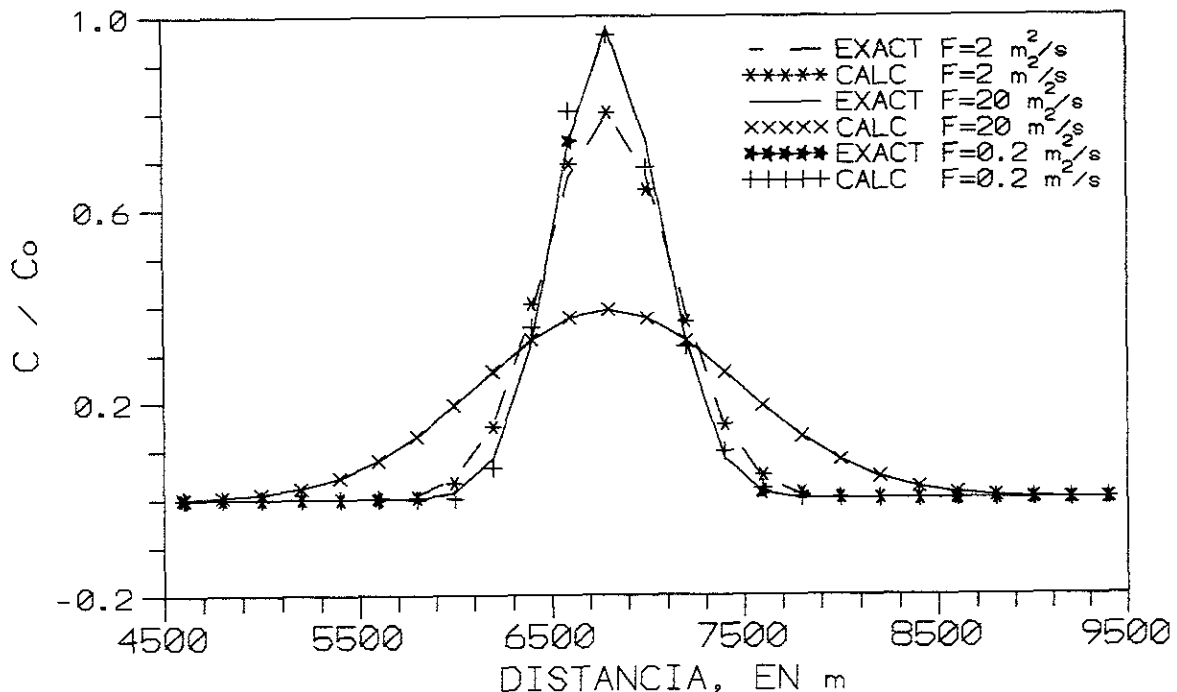


FIG 4.4 TRANSPORTE Y DISPERSION ($T=9600 \text{ s}$)
MALLA UNIFORME

4.6 Secuencia general de cálculo

El procedimiento general de cálculo del transporte y dispersión de especies en un flujo no permanente es el siguiente.

En el instante $n \Delta t$ se conocen en cada nudo (datos iniciales):

- a) cotas del agua y gastos; a partir de estos valores se obtienen tirantes, parámetros geométricos y velocidades medias
- b) concentraciones

En cada instante de tiempo:

- 1) se obtienen los valores de cotas del agua y gastos al final del intervalo, $(n+1) \Delta t$; se obtiene también el área de sección y el ancho de superficie libre
- 2) se calcula el valor del coeficiente de dispersión con la ec 4.4; puede hacerse con los valores medios en el intervalo de tiempo
- 3) se obtiene la concentración C^* calculada en la primera etapa del paso fraccionado (transporte convectivo puro)
- 4) se obtiene la concentración al final del intervalo calculando la dispersión de C^* con la segunda etapa del paso fraccionado (dispersión)
- 5) se continua el ciclo en el paso 1.

Los fenómenos de propagación de ondas en el agua y de transporte y dispersión de especies tienen tiempos característicos diferentes (lo que puede verse en los números de Courant de cada fenómeno); por ello, es posible emplear un incremento de tiempo mayor en el cálculo del transporte y dispersión, por ejemplo, cada tres o cuatro cálculos de la hidrodinámica.

4.7 Aplicación

Se desea calcular el transporte y dispersión de un contaminante en un tramo de 60 km de un río: el tramo está aguas abajo de una hidroeléctrica. Los datos topográficos se tomaron de Berezowsky *et al* (1990).

Se tienen datos de 17 secciones transversales a distancias que varían de 1600 a 6000 m . Las secciones en ese tramo son muy irregulares; por ejemplo, para un gasto de $200 \text{ m}^3/\text{s}$, hay anchos de superficie libre entre 130 y 700 m . Se interpolaron secciones hasta obtener 64 nudos con espaciamiento entre 800 a 1200 m , con una distancia media de 920 m . Se buscó que los espaciamiento entre secciones no sea demasiado variable, pero de manera de conservar lo más posible las características originales del cauce.

Para el rango de gastos de estos cálculos se calibró un coeficiente de Manning para el tramo de 0.025 . En los cálculos de hidrodinámica se empleó un incremento de tiempo $\Delta t = 100 \text{ s}$.

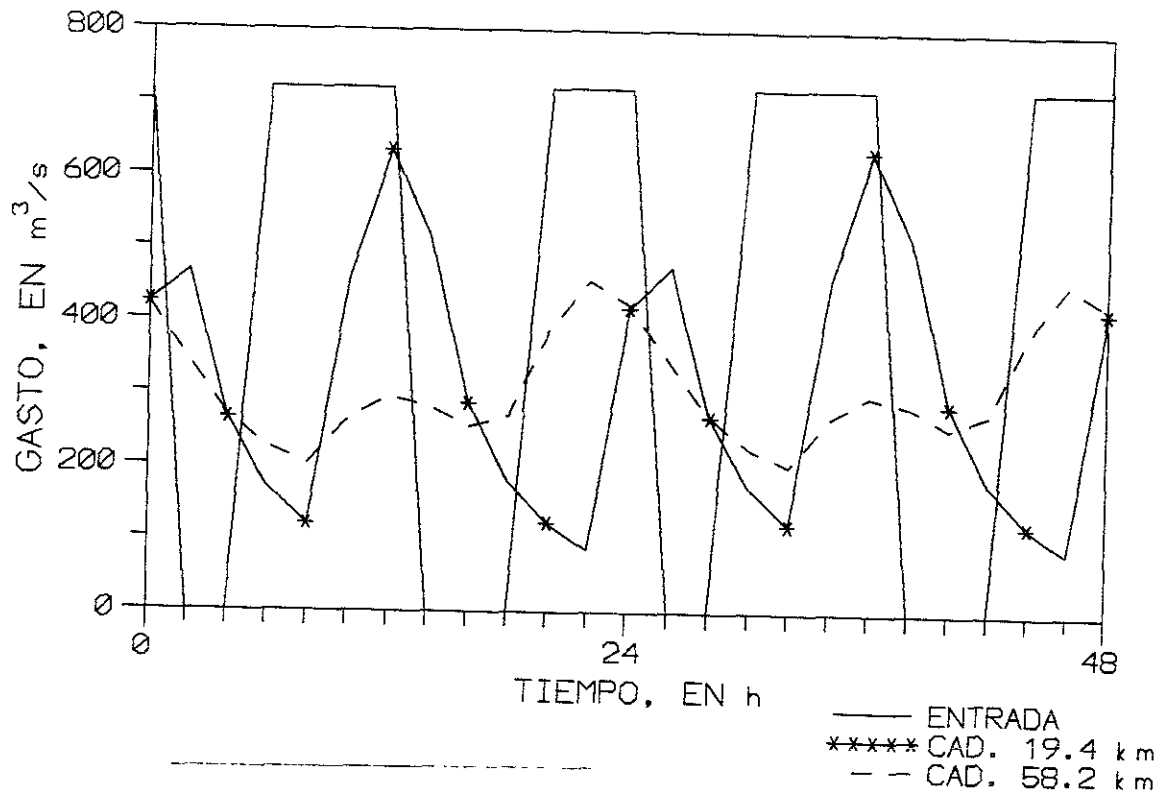


FIG 4.5 HIDROGRAMAS EN DISTINTAS SECCIONES

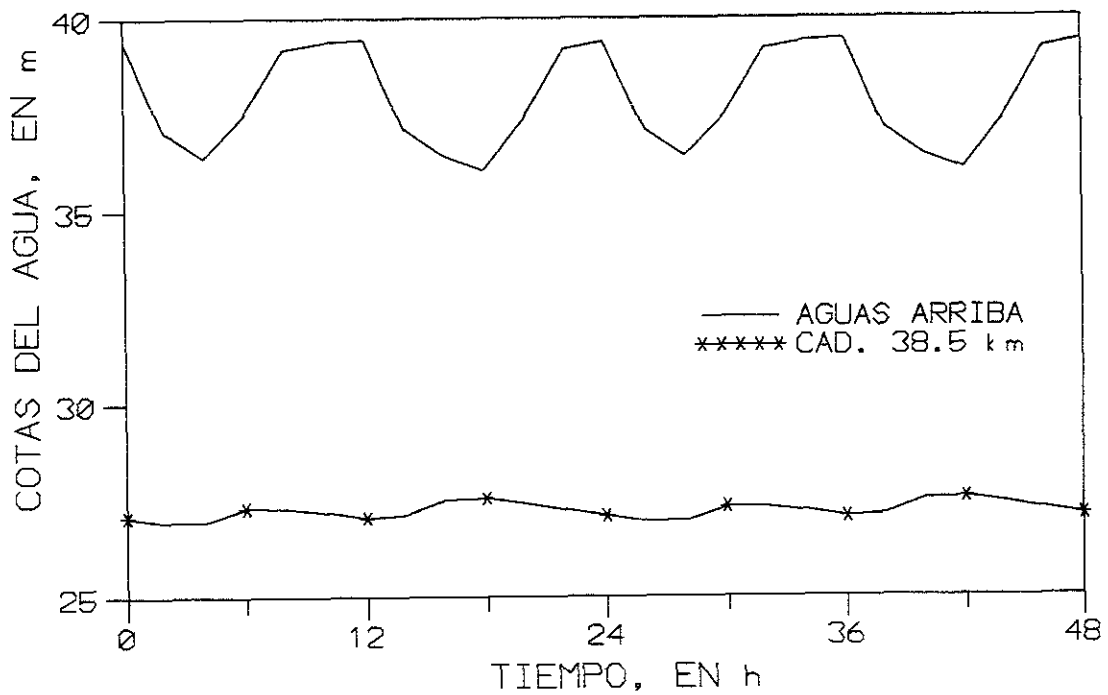


FIG. 4.6 VARIACION DE LA COTA DEL AGUA

La condición de frontera del flujo aguas arriba es un hidrograma cíclico descargado por la hidroeléctrica (ver fig 4.5). La variación del nivel aguas abajo se obtuvo iterativamente: primero se transita el hidrograma suponiendo nivel constante aguas abajo; a partir de la variación del nivel calculada en el penúltimo tramo, se estima la variación del nivel aguas abajo y se repite el cálculo hasta que las condiciones sean consistentes. Después de estos ajustes, se realizaron cálculos por un período de 72 h; los valores obtenidos para este instante se consideraron como condiciones iniciales para el cálculo de transporte y dispersión.

En la fig 4.5 se muestran también los hidrogramas obtenidos a 19.4 y 58.2 km aguas abajo de la hidroeléctrica; en la fig 4.6 puede verse la variación del nivel calculada en la primera sección aguas arriba y a 38.5 km. Nótese el efecto regulador del tramo.

La distribución inicial de concentraciones está dada por la ec 4.15 con $C_o = 3.69 \text{ mg/l}$, $x_c = 8580 \text{ m}$ y $\sigma_o = 900 \text{ m}$. Los cálculos de dispersión se hicieron con un incremento de tiempo $\Delta t = 200 \text{ s}$, es decir, cada dos cálculos de la hidrodinámica. El filtro se aplicó cada 10 intervalos de tiempo.

Se hicieron varios cálculos con distintos valores del coeficiente de dispersión. En el primer caso, F se obtuvo en cada nudo y en cada instante con la ec 4.4 tomando $K = 0.0033$, resultando valores de F entre 30 y 1000 m^2/s . Vale la pena mencionar que si el coeficiente de dispersión se estima con el valor $K = 0.011$ sugerido por Fischer, se obtienen valores de F tan grandes que la nube de contaminante es total y rápidamente dispersada y prácticamente desaparece.

En la fig 4.7 se muestran las concentraciones obtenidas después de 12 h de avance del contaminante; se han incluido resultados para valores del coeficiente $F = 100$ y $150 \text{ m}^2/\text{s}$; cálculos con $F = 200 \text{ m}^2/\text{s}$ (no incluidos en la figura para no empastar más curvas) dan prácticamente los mismos resultados que los obtenidos con coeficiente variable.

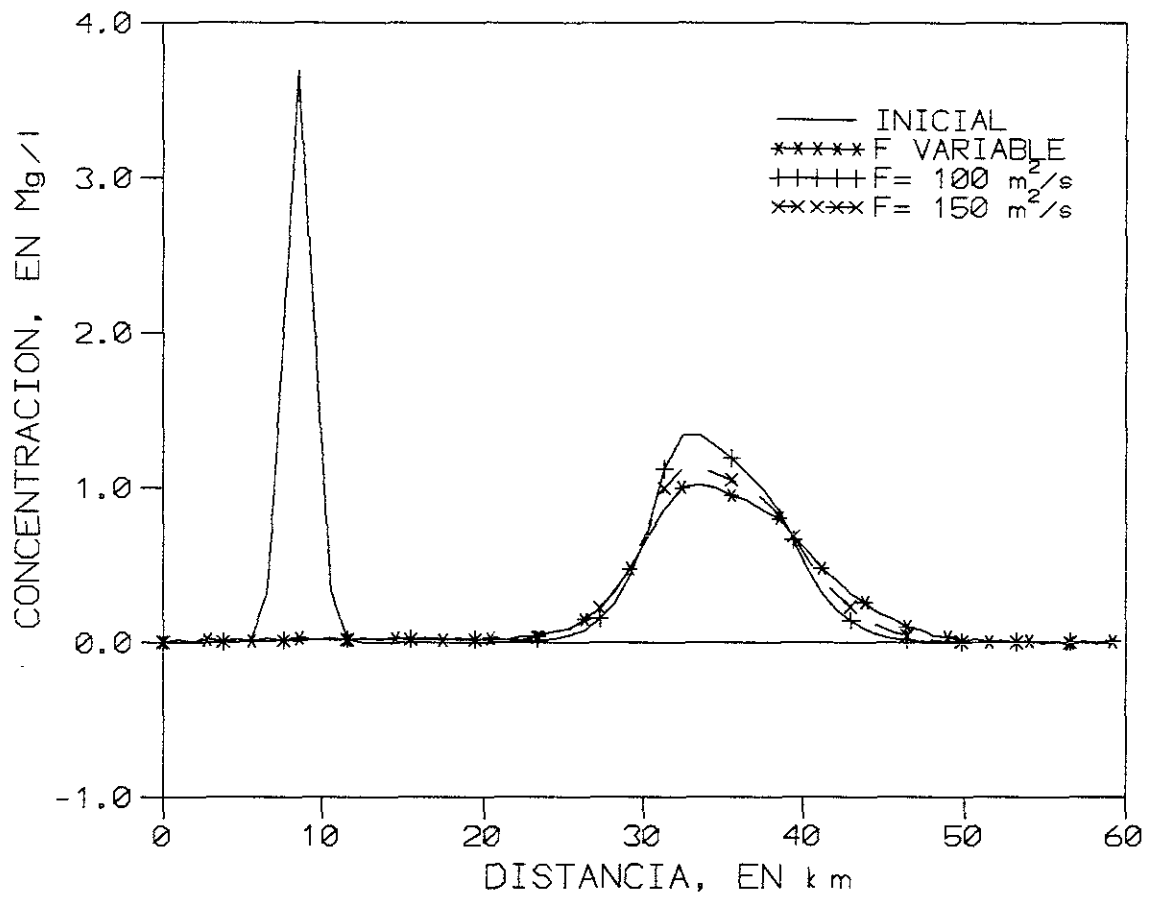


FIG. 4.7 DISTRIBUCION DE CONCENTRACIONES (12 h)

Cuando en algún lugar se pudre la carroña, los buitres vuelan en círculos. Los vivos atacan a los muertos por su propio beneficio. Nada pierden con esto los muertos. Salen ganando, tal vez, cuando de ellos alguien se sirve. O por lo menos, así parece si es que debemos considerar esto en términos de ganar y perder.

Tomás Merton

5. MÉTODO DE COLOCACIÓN DE CHEBYSHEV

Se presenta en este capítulo la forma de aplicar este método de colocación para la solución de una ecuación diferencial cuya solución no es periódica. Se discuten los métodos de solución de problemas de flujo permanente. La discusión se aplica a resolver la ecuación diferencial del flujo gradualmente variado.

Una ecuación diferencial de primero o segundo grado puede escribirse como

$$a \frac{d^2 u}{dx^2} + b \frac{du}{dx} = f \quad (5.1)$$

donde a y b son coeficientes y f es cualquier función; en los métodos de colocación, se aproxima dicha función y las derivadas de la ec 5.1 de manera que se puede establecer el siguiente sistema de ecuaciones:

$$L U = F \quad (5.2)$$

donde U y F son vectores formados con los valores nodales de u y f (incluyendo las condiciones de frontera) y L es una matriz (ver caps 2 y 3). En Boyd (1989) se presenta un código para resolver ecuaciones diferenciales de segundo orden basado en el método de colocación de Chebyshev formando esta matriz; en general dicha matriz es llena. Si por ejemplo se desea resolver el sistema por eliminación de Gauss, se requiere almacenar del orden de N^2 valores y $2/3 N^3$ operaciones (donde N es el rango de la matriz); estas cifras corresponden a problemas en una dimensión, pero crecen radicalmente en el caso

de dos o tres dimensiones. Por esta razón, se prefieren métodos iterativos en los que el número de operaciones es del orden de $N \log_2 N$ por iteración y en los que se almacenan $2N$ valores.

La teoría de los métodos iterativos está muy desarrollada [ver por ejemplo, Press *et al* (1987)]; se resumen los principales resultados para los métodos espectrales. Se incluye el caso de funciones periódicas y no periódicas.

5.1 Métodos iterativos

Existe gran cantidad de métodos; la idea es buscar los valores de U que satisfacen la ecuación diferencial con un error (o residuo) aceptable; sea U^n un valor estimado de la solución de la ecuación diferencial; el residuo de la iteración n es:

$$R^n = F - LU^n \quad (5.3)$$

donde n indica las iteraciones. Si se emplea el método de Richardson, el siguiente valor de la solución sería:

$$U^{n+1} = U^n + \omega R^n \quad (5.4)$$

donde ω es un parámetro de relajación. El método iterativo es convergente si

$$|1 - \omega\lambda| < 1 \quad (5.5)$$

donde λ son los valores característicos de la matriz L . A continuación se discuten algunos casos típicos para problemas periódicos.

Si $b = 0$, todos los valores característicos son positivos y están en el intervalo $\lambda_{\min} = 1$ y $\lambda_{\max} = N^2/4$. La condición 5.5 implica entonces que $0 < \omega < 8/N^2$ y, por tanto, es siempre menor de uno. El valor óptimo es

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{\lambda_{\min} + \lambda_{\max}} = \frac{8}{4 + N^2}$$

La tasa de convergencia del método puede medirse por el factor Q que es una medida del número de iteraciones requeridas para reducir el error por un factor dado; en el caso de la ec 5.1 con $b = 0$, $Q = N^2/4$.

La parte más laboriosa de este procedimiento iterativo es la evaluación de LU^n ; como ya se vio en el cap

2, al usar la TRF se realizan del orden de $5N \log_2 N$ operaciones por iteración.

Se logra mejorar la convergencia del método si se emplea lo que en optimización se llama la matriz de preconditionamiento, H ; la ec 5.4 se escribe como:

$$U^{n+1} = U^n + \omega H^{-1} R^n \quad (5.7)$$

Para no calcular la matriz inversa, en general se resuelve el problema

$$H (U^{n+1} - U^n) = \omega R^n \quad (5.8)$$

Existen varias formas de obtener esta matriz; se busca que tenga pocos elementos pero que acelere la convergencia. En el método de Jacobi, H es la diagonal de la matriz del Jacobiano de la matriz L , J_L , y en Gauss-Seidel es la parte diagonal inferior de J_L .

Un enfoque alternativo propuesto por Orzag es usar una aproximación de diferencias finitas para la matriz H . Para la ec 5.1 se usa la aproximación de segundo orden

$$\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta x^2} = f_j \quad (5.9)$$

que produce una matriz tridiagonal. En el caso que en la ec 5.1 $a = 0$, es decir una ecuación de primer orden, se tienen más dificultades para lograr convergencia; de hecho, si se usa una diferencia centrada en la matriz H , el método diverge. En este caso, existen varias alternativas; una de ellas es anular una parte del espectro de frecuencias; en general se recomienda anular un tercio, es decir,

$$\tilde{u}'_k = ik \tilde{u} \quad \text{si} \quad |k| \leq N/3$$

y cero para los demás valores. Otro enfoque es usar diferencias descentradas, pero los valores característicos de H son números complejos; finalmente, pueden usarse dos mallas: una para calcular espectralmente la derivada y otra para en la que se define la función; estas mallas están desplazadas medio intervalo una con respecto a la otra..

El caso de problemas no periódicos es más complejo. En primer lugar en los términos de la matriz debe tomarse en cuenta que la malla es no uniforme. Las expresiones para H pueden verse en Canuto *et al* (1988). En general, se tiene la misma tasa de convergencia que para el caso periódico discutido arriba, pero las matrices son más llenas y difíciles de construir.

Por la forma de la ec 5.7, las iteraciones pueden también plantearse como un problema de optimización en el que se trata de minimizar el residuo por lo que son muy convenientes los métodos de descenso.

Un enfoque alternativo es usar métodos multimallas; en este caso se itera con el método de Richardson sin preconditionamiento entre una malla gruesa y una más fina. En pocas palabras, el algoritmo es el siguiente: se itera en una malla fina de manera de reducir el residuo significativamente (del orden de tres iteraciones es lo más común); luego se cambia a la malla mas gruesa; aquí hay un proceso de interpolación de valores entre cada malla (lo que suaviza la solución). Se itera en la malla gruesa y luego se interpola para la malla fina y se repite el ciclo. La interpolación y el cambio de malla suaviza las altas frecuencias lográndose mayor convergencia y estabilidad en las iteraciones. Una descripción detallada sale del objetivo de este trabajo; los métodos multimallas pueden verse en Wesseling (1992); en el caso de los métodos espectrales ver Hussaini y Zang (1984) y Canuto *et al* (1988).

5.2 Ecuación del flujo gradualmente variado

Se propone resolver aquí la ecuación del flujo gradualmente variado para un canal prismático de pendiente pequeña; la ecuación diferencial es:

$$\frac{dh}{dx} = \frac{S_o - S_f}{1 - Fr^2} \quad (5.11)$$

donde

h	tirante, en m
S_o	pendiente de la plantilla del canal
S_f	pendiente de la línea del gradiente de energía
Fr	número de Froude

Esta ecuación se resuelve a partir de una condición inicial en una sección dada

$$h(x_o) = h_o \quad (5.12)$$

Si el flujo es subcrítico, la condición inicial se define aguas abajo y el cálculo debe hacerse hacia aguas arriba; si el flujo es supercrítico, la condición inicial se da aguas arriba y el cálculo se hace hacia aguas abajo. Es claro que en los perfiles de flujo gradualmente variado (que son la solución de la ec 5.11) no hay periodicidad. Por ello, se emplea aquí el método de colocación de Chebyshev. Se ha desarrollado un algoritmo en que se itera en cada sección, sin necesidad de trabajar con matrices.

5.3 Procedimiento de solución

Para evitar el problema de indeterminación cuando el flujo es crítico, la ec 5.11 se escribe como:

$$(1 - Fr^2) \frac{dh}{dx} = S_o - S_f \quad (5.13)$$

que tiene la forma de la ec 5.1 con $a = 0$.

Antes de discutir el procedimiento de solución, en la fig 5.1 se muestra la construcción de la malla de los puntos Gauss-Lobato. Las coordenadas de dicha malla corresponden a las proyecciones en el eje horizontal del ángulo θ , nótese que conforme θ se acerca a 90° , la distancia entre puntos aumenta mientras que para ángulos cercanos a cero o 180° la distancia entre puntos disminuye. Esta propiedad de la malla Gauss-Lobato es en algunos casos muy ventajosa pues permite resolver con mayor densidad de puntos cerca de las fronteras, como en zonas donde la ecuación tiene más curvatura. Por ello, se emplea la malla del método pero transformando a la distancia en que se desea calcular el perfil.

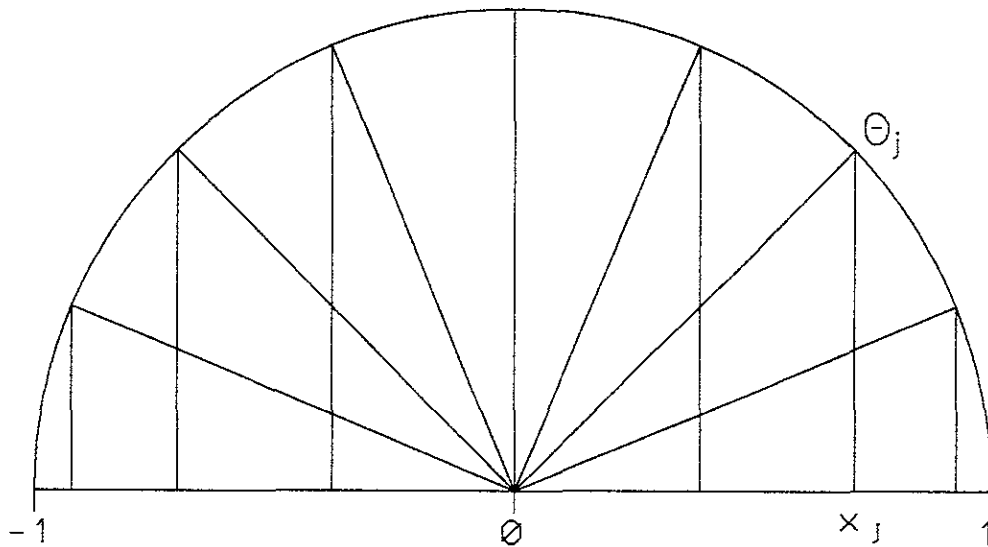


FIG 5.1 COORDENADAS DE LA MALLA GAUSS-LOBATO

Se propone el siguiente procedimiento iterativo para resolver la ecuación.

1) Se sugieren los valores iniciales; corresponden a los valores para $n = 1$; aquí se obtienen como:

$$h_{j-1}^n = h_j^n + s \Delta x_j \quad (5.14)$$

donde $s > 1$ en el perfil $M2$ y $s < -1$ en los perfiles $M1$ y $M3$; Δx_j es la distancia entre dos nudos consecutivos.

2) En cada sección, se calcula el lado derecho de la ecuación, es decir:

$$F_j^n = S_o - S_f^n \quad (5.15)$$

y el término

$$b_j^n = (1 - Fr_j^2) \quad (5.16)$$

estos términos son funciones del tirante h .

3) Se calcula espectralmente la derivada, dh/dx_j . Este cálculo se hace con las ecs 3.35; se define el residuo

$$R_j = b_j \left(\frac{dh}{dx} \right)_j - F_j \quad (5.17)$$

4) El nuevo valor del tirante en cada nudo se obtiene con

$$h_j^{n+1} = h_j^n + \omega R_j \Delta x_j \quad (5.18)$$

Para acelerar la convergencia se usa el método de Newton Raphson [Berezowsky y Jiménez (1993)] de manera que el residuo se divide entre la derivada de la ecuación de la energía valuada en el punto.

5) Dado que, como se vio en el subcap 5.1, los métodos iterativos tienen dificultades de convergencia en ecuaciones diferenciales de primer orden, se suaviza la solución con una interfase disipativa, Abbott (1979)

6) si no se cumple una tolerancia especificada, se regresa al paso 2 y se continua iterando.

El valor del parámetro de relajación se obtuvo por prueba y error; En general funciona adecuadamente el siguiente algoritmo para obtenerlo: si $1 < n < 5$, $\omega = 1.2(n-1)\exp(n)$; después de la quinta iteración, conserva el último valor calculado. El valor de dicho parámetro para $n = 1$ se escoge entre uno y dos.

5.4 Aplicación

Se tiene un canal con sección trapezoidal, con ancho de plantilla de 20 m y un talud de 2 ; la pendiente de plantilla es 0.001 y el coeficiente de rugosidad de Manning es 0.018 . El gasto es de $200\text{ m}^3/\text{s}$. Para estos valores, el tirante normal es 2.70 m y el tirante crítico es 2.02 m .

Estos datos corresponden a los de los perfiles M de la aplicación descrita en Berezowsky y Gómez (1986); en esta publicación se obtienen los perfiles con el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

Perfil $M1$

El tirante aguas abajo es de 4.5 m ; se analizan poco más de 3300 m . Con el método de Runge-Kutta se usaron 26 nudos a una distancia constante de 132 m ; con el método de colocación de Chebyshev se usaron 25 nudos; la distancia mínima es de 25 m y la máxima de 210 m . En la fig 5.2 pueden verse los perfiles calculados. Existe una pequeña diferencia al principio del perfil, pero en general el resultado es aceptable.

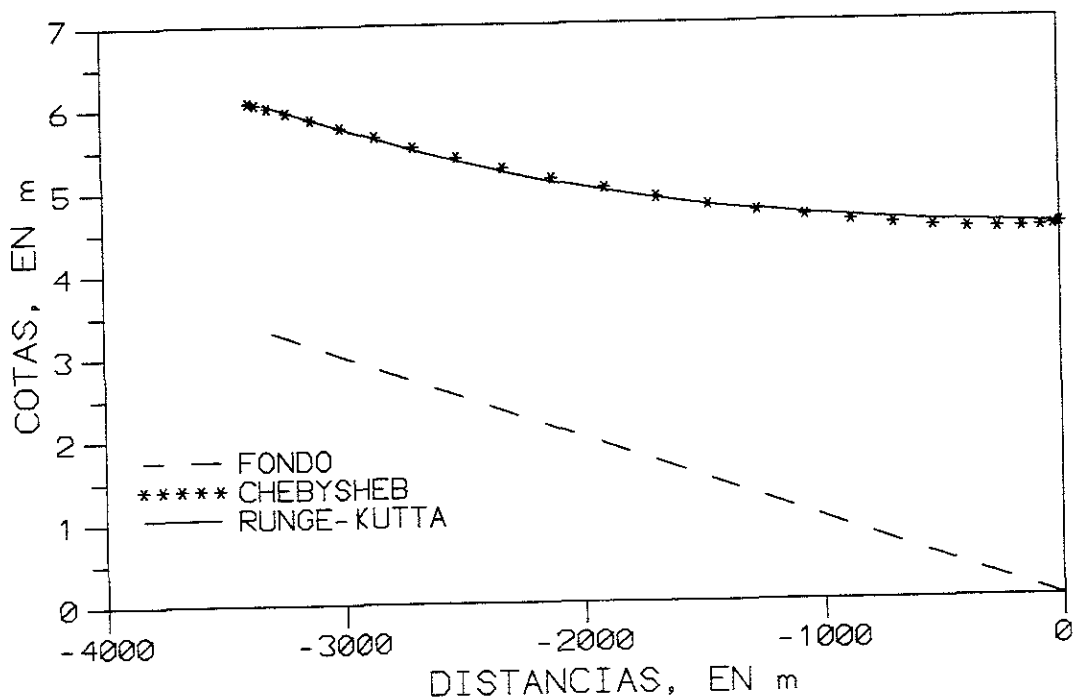


FIG 5.2 PERFIL M1

Perfil M2

Dado que este perfil inicia en el tirante crítico, no es posible calcularlo resolviendo la ec 5.11 con el método de Runge-Kutta pues el denominador se anula. En su lugar, se resolvió la ecuación inversa:

$$\frac{dx}{dh} = \frac{1 - Fr^2}{S_o - S_f} \quad (5.19)$$

es decir, se calculan las distancias a las que se tienen tirantes prefijados. El método de colocación no tiene problema con la ec 5.11 pues simplemente se anula en la frontera el lado izquierdo de la ecuación.

Los cálculos se hicieron en etapas; con Runge-Kutta se avanzó del tirante crítico a un tirante de 2.10 m con 48 valores; con Chebyshev se trabajó con 41 nudos en los primeros tres metros del perfil. En la fig 5.3 se comparan los perfiles en esa zona que es la de más curvatura; la concordancia es muy buena.

En una segunda etapa se continuaron los cálculos hasta una distancia de 30 m (fig 5.4); en Runge-kutta se tienen 49 valores, de un tirante de 2.10 m a uno de 2.27 m ; con el método de colocación se tomaron también 49 nudos. Se nota una pequeña diferencia al principio del perfil.

En la tercera etapa, con Runge-Kutta se emplea la ecuación directa y se calcula de 30 a 330 m con 20 nudos; el método de colocación se calcula con 23 nudos; en la fig 5.5 se muestra todo el perfil. Globalmente, la concordancia es muy buena.

Perfil M3

El tirante inicial aguas arriba es 0.90 m . Con colocación, el perfil se calcula en dos etapas; la primera de 100 m con 50 nudos y la segunda hasta llegar a 220 m con 33 nudos; los cálculos con Runge-Kutta se hicieron con 20 nudos en total (en una sola etapa). En la fig 5.6 puede verse el perfil; este caso es el que más dificultades presentó en cuanto a la convergencia del método de colocación; de hecho, la parte más aguas bajo del perfil, se separa del calculado con Runge-Kutta.

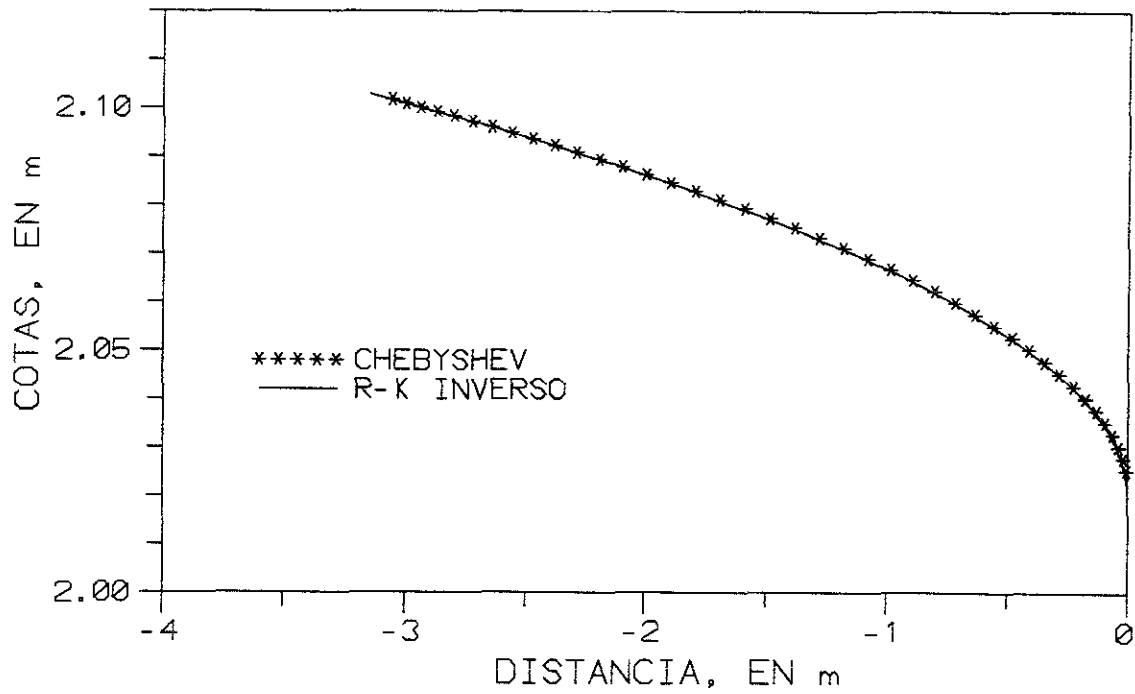


FIG 5.3 PRIMEROS TRES METROS DEL PERFIL M2

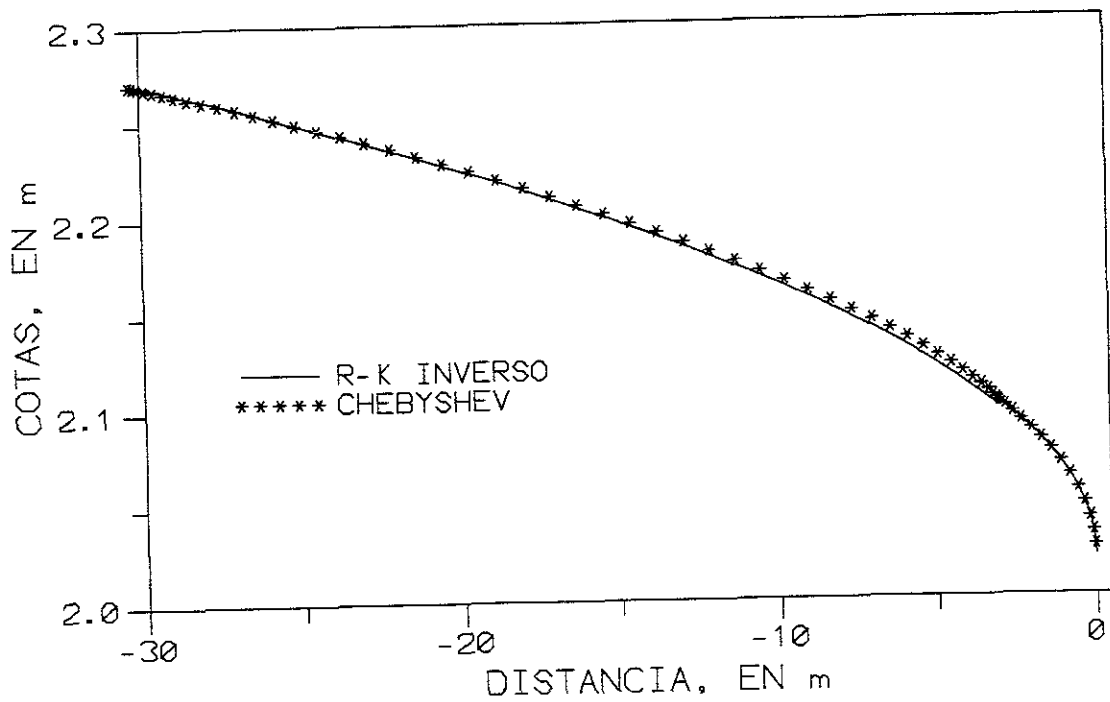


FIG 5.4 PRIMEROS 30 m DEL PERFIL M2

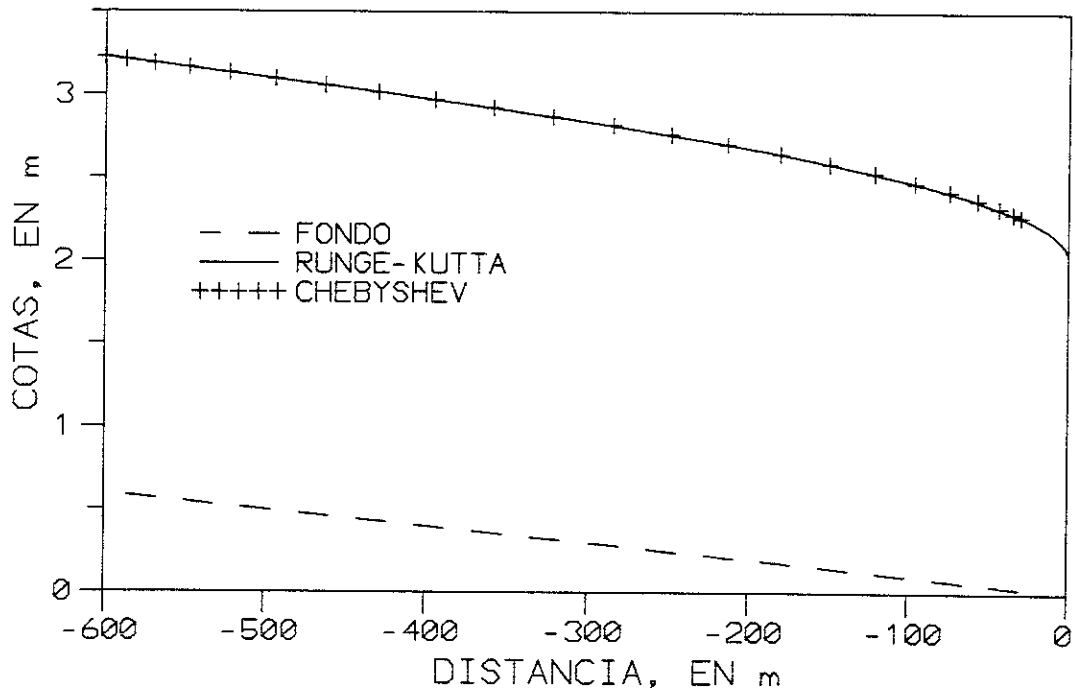


FIG 5.5 DESARROLLO DEL PERFIL M2

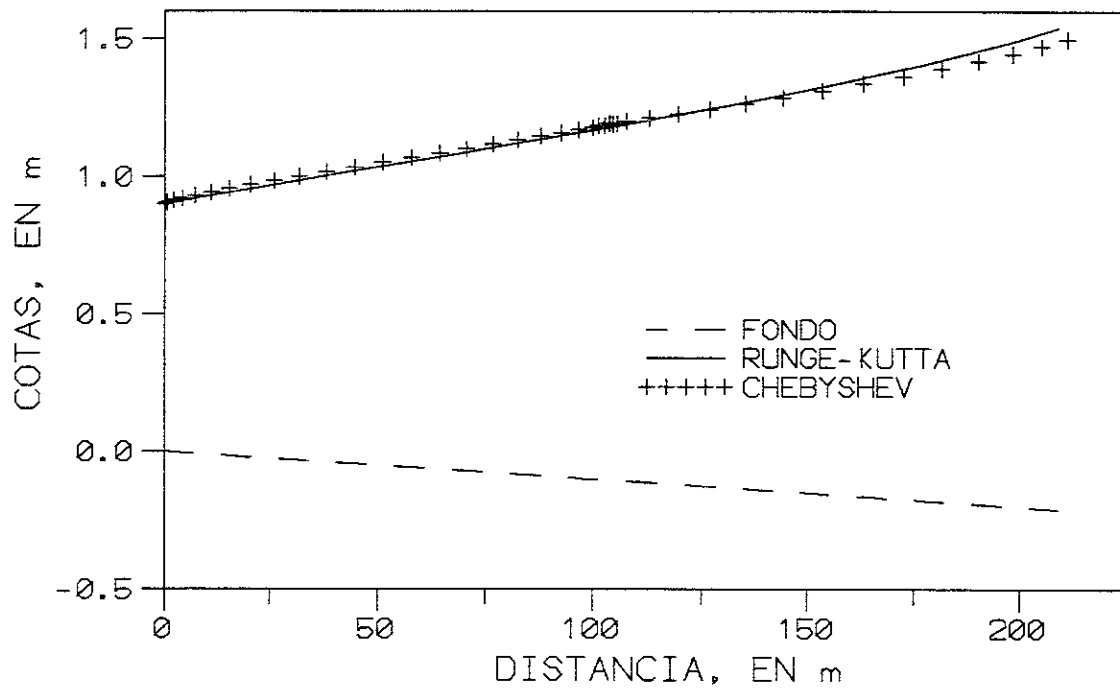


FIG 5.6 DESARROLLO DEL PERFIL M3

Toda gran verdad necesita ser criticada, no idolatrada
Nietzsche

*Hay quienes se cansan de saber y averiguar cosas que
 después de sabidas y averiguadas no importan un ardite
 al conocimiento ni a la memoria*

Quijote, II, XX22

6. CONCLUSIONES

En este trabajo se comprueba la bondad de los métodos espectrales para la solución de algunas ecuaciones diferenciales de la hidráulica. En general, con dichos métodos se obtienen resultados muy precisos; además, si se usa la transformada rápida de Fourier, son elegantes y fáciles de programar. Entre las principales aportaciones de este trabajo están:

Se muestra que es posible construir esquemas implícitos eficientes basados en métodos de colocación -por ejemplo, para resolver la ecuación unidimensional del transporte y dispersión de especies- mucho más precisos que los basados en diferencias finitas o con el método de las características.

Se hace ver que la aparente rigidez de los métodos de colocación al requerir espaciamiento entre nudos prefijados se puede vencer empleando transformaciones a otros sistemas coordenados; sin embargo, si la distribución original de puntos es muy variable, la transformación de coordenadas puede generar ruido numérico. Se vio que es posible eliminar parte de este ruido con un filtro.

Al calcular espectralmente las derivadas, se obtiene la máxima precisión posible para el número de puntos de la malla empleada. Esto hace que los métodos de colocación sean especialmente útiles en aquellos casos donde los procedimientos tradicionales, como diferencias finitas, no producen resultados satisfactorios; por ejemplo, son muy conocidas las dificultades de los métodos tradicionales en el cálculo de los términos convectivos. En la tesis se explora ampliamente este problema; se propone un esquema implícito para el

cálculo de convección pura y se demuestra su alta precisión al compararlo con los esquemas comúnmente empleados.

Finalmente, se propone un algoritmo iterativo para resolver una ecuación diferencial ordinaria, en este caso la del flujo gradualmente variado. Los resultados obtenidos con el método de colocación de Chebyshev son muy satisfactorios. El algoritmo presentado puede generalizarse de manera de resolver problemas con condiciones de frontera no periódicas en flujos no permanentes.

Por otro lado, se observa que los métodos de colocación tienen gran potencial en el cálculo de flujos complejos o de detalle, como la modelación de vórtices, remolinos aguas abajo de obstáculos, zonas de separación, etc. En estos casos, dada la escala de los fenómenos por modelar, se requieren mallas muy finas y esquemas de diferencias finitas de alto orden, pues el ruido numérico puede ser del mismo orden de lo que se quiere calcular. Dado que los métodos espectrales son muy precisos, sería posible emplear mallas menos densas que con diferencias finitas (para el mismo grado de exactitud deseada), o bien con técnicas multimallas: usar métodos espectrales en una malla gruesa y diferencias finitas en una densa.

Los métodos espectrales también tienen desventajas. Su manejo de condiciones de frontera variables en el tiempo y no periódicas es bastante complejo; conviene aclarar que la mayoría de las aplicaciones reportadas, ya sea en flujos permanentes, o no permanentes se hacen con condiciones de frontera constantes (como el cálculo de la evolución de vórtices aguas abajo de obstáculos) o muy alejadas de la zona de cálculo. Queda por explorar cómo vencer esta dificultad; se tienen los antecedentes empleados en diferencias finitas: alargar el dominio de cálculo hasta una zona donde las fronteras no afecten, o donde suponer periodicidad no sea importante, suponer tramos falsos, fronteras de reflexión, etc.

Otra limitación relativa de los métodos espectrales es que consumen más recursos de memoria, pero sobre todo de cálculo que, por ejemplo, diferencias finitas; aunque la precisión es muy alta, en algunos casos prácticos no se justificaría la aplicación de estos métodos. Sin embargo, como ya se comentó, sí serían ventajosos para calcular los términos que no son resueltos satisfactoriamente con diferencias finitas o cuando se busca alta precisión. Una propuesta de investigación sería el uso de esquemas mixtos: diferencias finitas y espectrales, pues ciertos términos se resuelven con un procedimiento y otros términos con otro; o bien, de diferencias finitas como predictor y el espectral como corrector, como puede verse por ejemplo en Taylor (1984).

El autor de este trabajo espera que la experiencia aquí vertida pueda ser de utilidad a los hidráulicos que se dedican a modelación numérica de flujos. Al menos, se conformaría con intentar evitar que alguien que entra al tema repita los errores cometidos y avanzar a partir de lo hecho.

REFERENCIAS

Abbott, MB (1979), Computational Hydraulics. Elements of the theory of free surface flows, Pitman, Londres.

Abbott, MB y Basco, DR (1989), Computational Fluid Dynamics, Longman, Inglaterra.

Avgousti, M, Liu, B y Beris, AN (1993), Spectral methods for the viscoelastic time-dependent flow equations with applications to Taylor-Couette flow, Int J for Num Methods in Fluids, Vol 17, n 1.

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

Berezowsky, M (1993), Modelo matemático de transporte y dispersión unidimensional en ríos, Informe interno, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, España.

Berezowsky, M (1994), Análisis de flujos turbulentos a superficie libre (Modelos de turbulencia), 564, Serie Azul, Instituto de Ingeniería, UNAM, México.

Berezowsky, M, (1996a), A mixed characteristics-spectral method for one-dimensional advection computation, Procc of CIMENICS '96, 10 p, Mérida, Venezuela.

Berezowsky, M, (1996b), Spectral method in a non-uniform grid for advection-dispersion computations in unsteady flow in rivers, **Invited paper**, Procc of the XI International Conference on Computational Methods in Water Resources, Cancun, México, publicado en Comp Methods in Water Resources XI, Vol 2, Comp. Mechanics Publications, Southampton, pp 89-98.

Berezowsky, M, (1996c), Método espectral para cálculo de transporte convectivo puro, Memorias del XVII Congr Latinoamericano de Hidráulica, Vol 1, pp 103-114, Guayaquil.

Berezowsky, M, Camargo, J, Jiménez, AA, Franco, C y Echavarría, B (1990), Apéndice B del Estudio en modelo matemático del fenómeno de arrastre del río Mescalapa Samaria, 230 pp, Instituto de Ingeniería, UNAM, México.

Berezowsky, M y Jiménez, A.A. (1993), Cálculo de perfiles hidráulicos con métodos de fricción de Ingeniería de ríos, 557, Serie Azul, Instituto de Ingeniería, UNAM, México.

Berezowsky, M y Jiménez, AA (1995), Flujo no permanente en ríos, Cap 6 del 'Manual de Ingeniería de Ríos', Comisión Nacional del Agua (CNA) editado también en 574, Serie Azul, Instituto de Ingeniería, UNAM, México.

Berezowsky, M y Gómez, A (1986) Solución numérica de la ecuación diferencial del flujo gradualmente variado, 499, Serie Azul, Instituto de Ingeniería, UNAM, México.

Boyd, JP (1989), Chebyshev & Fourier Spectral Methods, Springer-Verlag, Berlin.

Bracewell, RN (1986), The Fourier Transform and its applications, McGraw-Hill, 2a ed revisada, EUA.

Canuto, C, Hussaini, MY, Quarteroni, A y Zang, TA (1988), Spectral Methods in fluid dynamics, Springer-Verlag, Berlin.

Cunge, JA, Holly, FM y Verwey, A (1982), Practical aspects of computational river hydraulics, Pitman, Londres.

de Fainchtein, R, Zalesak, ST, Lohner, R y Spicer, DS (1995), Finite element simulation of a turbulent MHD system: comparison to a pseudo-spectral simulation, Computer Physics Communications, 86, 25-39

Fischer, HB, List, EJ, Koh, RC, Imberger, J y Brooks, NH (1979), Mixing in inland and coastal waters, Academic Press, EUA.

Gotlieb, D, Hussaini, MY y Orzag, SA (1984), Theory and application of spectral methods, en Voigt, RG, Gottlieb, D and Hussaini, MY (editores), Spectral Methods for partial differential equations, SIAM, EUA.

Hirsch, C (1988), Numerical computation of internal and external flows, Vol I, Wiley, EUA.

Holly, FM y Preissmann, A (1977), Accurate calculation of transport in two dimensions, J. of Hydraulic Eng., ASCE, 103, HY11, pp 1259-1277.

Hussaini, MY y Zang, TA (1984), Iterative spectral methods and spectral solutions to compressive flows, en Voigt, RG, Gottlieb, D and Hussaini, MY (editores), Spectral Methods for partial differential equations, SIAM, EUA.

Kreiss, H-O y Olinger, J (1979), Stability of the Fourier method, SIAM, Jou Numer Analysis, 16,421-433.

Ku, HC, Taylor, TD y Hirsh, RS (1987), Pseudospectral methods for solution of the incompressible Navier-Stokes equations, Computers & Fluids, Vol 15, n 2.

Leonard, BP (1979), A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation, *J of Computer Methods in Applied Mechanics and Eng*, Vol 19, 59-98.

Mejía, MA y Berezowsky, M (1996), Generación numérica de mallas en coordenadas curvilíneas para cálculo de flujos a superficie libre, *Rev Ingeniería Hidráulica en México*, pp 13-24, sep-dic, 1996

Mercier, B (1989), *An introduction to the numerical analysis of spectral methods*, Springer-Verlag, Berlín.

Press, WH, Flannery, BP, Teukolsky, SA y Vetterling, WT (1987), *Numerical recipes*, Cambridge Univ Press, EUA

Richtmyer, RD y Morton, KW (1967) *Difference methods for initial- value problems*, John Wiley & Sons, EUA.

Rodi, W (1984), Examples of turbulence models applications, en *Simulations of turbulence models and their applications*", vol 2, Colección ee la Direction de Études et Recherches, Électricite de France, ed Eyrolles, Francia.

Orzag, SA, Israeli, M y Deville, MO (1986), Boundary Conditions for incompressible flows, *J of Scientific Computing*, V 1, n 1, EUA.

Snyder, MA (1966), *Chebyshev methods in numerical approximation*, Prentice-Hall, EUA.

Tadmor, E. (1986), The exponential accuracy of Fourier and Chebyshev differencing methods, *SIAM J. Numer. Anal.* 23, 1-10.

Taylor, TD (1984), Recente advances in pseudo-spectral methods, en Voigt, RG, Gottlieb, D and Hussaini. MY (editores), *Spectral Methods for partial differential equations*, SIAM, EUA.

Temperton, C (1983), Self-sorting mixed-radix fast Fourier Transform, *J Comp Physics*, 52, 1-23

Thompson, JF, Warsi, ZUA y Mastin, CW, (1985) *Numerical grid generation*, North-Holland, EUA.

Voigt, RG, Gottlieb, D and Hussaini, MY (editores) (1984), *Spectral Methods for partial differential equations*, SIAM, EUA.

Waker, JS (1992), *Fast Fourier Transforms*, CRC Press, EUA.

Wesseling, P (1992), *An introduction to multigrid methods*, Wiley & Sons, EUA.

Yanenko, NN (1979), The method of fractional steps, Springer-Verlag, Berlin.

OTRAS REFERENCIAS CONSULTADAS

Autores varios (1993), Computational fluid dynamics, curso de la Ecole de'te de Physique Theorique, Universite Josph Fourie, Les Houches, Francia.

Berezowsky, M (1991), Discusión al artículo: Yang, J-H y Hsu, E-L (1990), Time-line interpolation for solution of the dispersion equation, J. of Hydraulic Res., 29, 4, 572-573.

Berezowsky, M (1995), Interpolación espacio-temporal para el cálculo de transporte convectivo, XX Congreso, Academia Nacional de Ing., ANIAC, pp 167-172, Veracruz, México.

Brigham, EO (1974), The fast Fourier Transform, Prentice Hall, EUA.

Daily, JW y Harleman, DRF (1975), Dinámica de los fluidos, Ed Trillas, México

Fonberg, B (1975), On a Fourier method for the integration of hyperbolic equations, SIAM J Num Anal, Vol 12, n 4

Fuentes, O y Domínguez, R (1988), Análisis espectral de oleaje, CFE, México.

Hanna, JR y Rowland, JH (1990), Fourier series, transforms and boundary value problems, 2a ed, Wiley, EUA

Holly, FM y Usseglio-Polaterra, JM (1984), Dispersion simulation in two-dimensional tidal flow, J. of Hydraulic Eng., ASCE, 110, HY7, pp 905-926.

Kopriva, DA (1987), A practical Assesment of spectral accuracy for hyperbolic problems with discontinuities, J of Scientific Computing, V 2, n 3, EUA.

Kossloff, DD y Baysall, E (1982), Forward modeling by Fourier method, Geophysics, Vol 47, n 10.

Kreiss HO, y Olinger, J (1972), Comparison of accurate methods for the integration of hyperbolic equations, Tellus XXIV, 3.

- Ku, HC, Hirsh, RS y Taylor, TD (1987), A pseudospectral method for solution of the three-dimensional incompressible Navier-Stokes equations, *J. of Computational Physics*, Vol 79, 439-462.
- Maisel, L (1971), *Probability, Statistics and Random Processes*, Simon & Schuster, EUA.
- Sauvaget, P (1985), Dispersion in rivers and coastal waters - 2. Numerical computation of dispersion, en 'Vol 3. Developments in Hydraulic Engineering', ed. por Novak, Elsevier.
- Schohl, A y Holly, FM (1991), Cubic-spline interpolation in Lagrangian advection computation, *J. of Hydraulic Eng.*, ASCE, 117, HY2, pp 248-253.
- Verway, A (1978), Discusión al artículo de Holly, FM y Preissmann, A (1977), Accurate calculation of transport in two dimensions, *J. of Hydraulic Eng.*, ASCE, 104, HY7, pp 1116-1118.
- Vichnevetsky, R y Bowles, JB (1982), *Fourier analysis of numerical approximation of hyperbolic equations*, SIAM, EUA.

APÉNDICE A. TRANSFORMADA DE FOURIER CONTINUA

A.1 DEFINICIONES

Se define la transformada de Fourier de $f(x)$ como

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ixk} dx \quad (\text{a.1})$$

donde k es la frecuencia, esto es, el número de ciclos por unidad de x . En la ec a.1 se relaciona f con una secuencia de números complejos llamados la transformada de Fourier (continua) de f . Si $f(x)$ es una función par, esto es, si $f(x) = f(-x)$, la transformada inversa da de nuevo la función original:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k) e^{ixk} dk \quad (\text{a.2})$$

Si $f(x)$ es impar [esto es, si $f(x) = -f(-x)$], entonces dos aplicaciones sucesivas de la transformada de Fourier dan $f(-x)$.

Conviene aclarar que existen otras definiciones equivalentes de la pareja de ecuaciones a.1 y a.2, según donde se incluya el factor 2π ; por ejemplo:

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ixk} dx \quad (\text{a.3})$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k) e^{ixk} dk \quad (\text{a.4})$$

o también

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi xk} dx \quad (\text{a.5})$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k) e^{i2\pi xk} dk \quad (\text{a.6})$$

Aquí escogemos la primera de estas definiciones (ecs a.1 y a.2); si $f(x)$ es continua y existe la integral de $|f(x)|$ de $-\infty$ a ∞ , entonces el teorema integral de Fourier se expresa como:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ixk} dx \right] e^{ixk} dk \quad (\text{a.7})$$

Si $f(x)$ es discontinua pero dichas discontinuidades están acotadas, la integral de Fourier es igual al promedio de los valores de la función a ambos lados de la discontinuidad, esto es, es igual a $\frac{1}{2}[f(x_+) + f(x_-)]$.

Toda función $f(x)$ puede dividirse de manera única en la suma de dos funciones, una par y otra impar; mientras que una función par es simétrica, esto es $E(-x) = E(x)$, la impar es antisimétrica, o sea $O(-x) = -O(x)$. La parte par es la suma de la función más su reflexión en el eje vertical

$$E(x) = \frac{1}{2} [f(x) + f(-x)] \quad (\text{a.8})$$

mientras que la parte impar es la media de la función más su reflejo negativo

$$O(x) = \frac{1}{2} [f(x) - f(-x)] \quad (\text{a.9})$$

La transformada coseno de $f(x)$ es

$$\hat{f}_c = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} f(x) \cos(kx) dx \quad (\text{a.10})$$

que es una función par, su transformada inversa es

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \hat{f}_c \cos(kx) dk \quad (\text{a.11})$$

La transformada seno es

$$\hat{f}_s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} f(x) \operatorname{sen}(kx) dx \quad (\text{a.12})$$

que es una función impar; su transformada inversa es

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \hat{f}_s \operatorname{sen}(kx) dk \quad (\text{a.13})$$

La transformada de la función $f(x)$ puede obtenerse también como

$$\hat{f}(x) = \hat{f}_c - i \hat{f}_s \quad (\text{a.14})$$

que es totalmente equivalente a la ec a.1.

Se define como el espectro de energía de $f(x)$ al módulo al cuadrado de su transformada de Fourier; en general, se grafica dicho módulo contra la frecuencia. No existe una relación uno a uno entre $f(x)$ y su espectro de energía: es necesario tener, además del módulo de la transformada, una función del ángulo de fase (que corresponde a su parte compleja) para reconstruir la función $f(x)$.

A.2 TEOREMAS DE LA TRANSFORMADA DE FOURIER

a.1. Semejanza o similaridad. Si $f(x)$ tiene por transformada de Fourier a $\hat{f}(k)$, entonces la

transformada de Fourier de $f(ax)$ es $\frac{1}{|a|} \hat{f}\left(\frac{k}{a}\right)$.

Si se escala la abscisa de la función, la transformada no solo se contrae horizontalmente (en la escala de la frecuencia) sino que crece verticalmente, de manera que el área bajo la curva es constante.

a.2. Adición. Si $f(x)$ y $g(x)$ tienen por transformada de Fourier a $\hat{f}(k)$ y $\hat{g}(k)$, respectivamente,

entonces la transformada de $f(x) + g(x)$ es $\hat{f}(k) + \hat{g}(k)$.

El teorema implica la linealidad de la transformada de Fourier; una consecuencia del teorema de adición es que

$a f(x)$ tiene por transformada de Fourier a $a \hat{f}(k)$.

a.3 *Desplazamiento.* Si $f(x)$ tiene por transformada de Fourier a $\hat{f}(k)$, entonces la transformada de $f(x-a)$ resulta ser $e^{-2\pi i a k} \hat{f}(k)$.

Si se desplaza una función en la dirección positiva del eje x por una cantidad a , sus componentes de Fourier no cambian en amplitud; únicamente en la fase.

a.4 *Convolución.* Sean dos funciones $f(x)$ y $g(x)$; su convolución resulta en la función $h(x)$ definida como:

$$h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(u) g(x-u) du \quad (\text{a.23})$$

Para simplificar la notación la convolución se abrevia aquí como $h(x) = f(x) * g(x)$.

Si $f(x)$ y $g(x)$ tienen por transformada de Fourier a $\hat{f}(k)$ y $\hat{g}(k)$, respectivamente, entonces la transformada de $f(x) * g(x)$ es $\hat{f}(k) \hat{g}(k)$; esto es, la convolución de dos funciones significa el producto de sus transformadas.

a.5 *Autocorrelación.* Si $f(x)$ tiene por transformada de Fourier a $\hat{f}(k)$, y sea $f^*(x)$ el conjugado complejo de $f(x)$; entonces su función de autocorrelación $f(x) * f^*(-x) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(u) f(u+x) du$ tiene por transformada a $|\hat{f}(k)|^2$.

a.6 *Derivada.* Si $f(x)$ tiene por transformada de Fourier a $\hat{f}(k)$, entonces la transformada de $f(x)'$ es igual a $2\pi i k \hat{f}(k)$. La n -ésima derivada es $(2\pi i k)^n \hat{f}(k)$.

Dado que para obtener la derivada de una función se multiplica su transformada por $2\pi i k$, en esta se resaltan las altas frecuencias, se atenúan las bajas y se cancelan las componentes con frecuencia nula.

a.7 *Derivada de la convolución.*

$$\frac{d}{dx} [f(x) * g(x)] = f'(x) * g(x) = f(x) * g'(x)$$

a.8. *Teorema de Raleigh.* La integral del módulo al cuadrado de una función es igual a la integral del módulo al cuadrado de su espectro de energía, esto es:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{f}(k)|^2 dk \quad (\text{a.15})$$

Equivale al teorema (comunmente llamado identidad) de Parseval en series de Fourier.

A.3 SERIES DE FOURIER

Para los fines de los métodos espectrales, sea una función u integrable en el intervalo $[0, 2\pi]$, que va a ser la variable de la ecuación diferencial a resolver; se definen los coeficientes de Fourier (ver ec a.1) como:

$$\hat{u}_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) e^{-ikx} dx \quad (\text{a.16})$$

donde \hat{u}_k son los coeficientes de Fourier. La serie de Fourier de una función u se define como:

$$Su = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{u}_k e^{ikx} \quad (\text{a.17})$$

Dado que en la práctica no es posible calcular la suma hasta los límites de la serie definidos en esta ecuación, en su lugar se emplea el siguiente polinomio trigonométrico:

$$P_N u(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \hat{u}_k e^{ikx} \quad (\text{a.18})$$

que converge a Su conforme N tiende a infinito. Puede demostrarse que: a) si u es periódica, continua y varía de manera acotada en el intervalo $[0, 2\pi]$, entonces la serie Su converge de manera uniforme a u ; b) si u no es continua pero su variación en el intervalo está acotada, entonces $P_N u(x)$ converge puntualmente a $(u(x_+) + u(x_-)) / 2$ para cualquier x en el intervalo (ver definición de integral de Fourier, ec a.7); c) si u es continua y periódica, su serie de Fourier no necesariamente converge en todos los puntos del intervalo

A pesar de la restricción del inciso (c) de que no es posible demostrar la convergencia de la serie en todos los puntos del intervalo, sí es posible definir la convergencia para la norma L^2 . Así, se dice que la serie Su converge a u si

$$\int_0^{2\pi} |u(x) - P_N u(x)|^2 dx \rightarrow 0, \quad (\text{a.19})$$

conforme $N \rightarrow \infty$; por otro lado, teniendo en cuenta la identidad de Parseval (ver teorema de Raleigh, ec a.15)

$$\|u\|^2 = 2\pi \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\hat{u}_k|^2 \quad (\text{a.20})$$

es posible deducir que

$$\|u - P_N u\|^2 = 2\pi \sum_{|k| \geq N/2} |\hat{u}_k|^2 \quad (\text{a.21})$$

Además, si u es suficientemente suave, entonces

$$\max_{0 \leq x \leq 2\pi} |u(x) - P_N u(x)| \leq \sum_{|k| \geq N/2} |\hat{u}_k| \quad (\text{a.22})$$

de donde se deduce que el tamaño del error al reemplazar u con su serie de Fourier truncada en el grado N depende de que tan rápido decaen (o dicho de otra manera, tienden a cero) los coeficientes de Fourier. Esto a su vez depende de la periodicidad y regularidad de u en el intervalo. Así, si u tiene derivadas continuas en el intervalo (y se exceptúa $k=0$), entonces

$$\begin{aligned} 2\pi \hat{u}_k &= \int_0^{2\pi} u(x) e^{-ikx} dx \\ &= -\frac{1}{ik} [u(2\pi) - u(0)] + \frac{1}{ik} \int_0^{2\pi} u'(x) e^{ikx} dx \end{aligned} \quad (\text{a.23})$$

de donde se obtiene que

$$\hat{u}_k = O(k^{-1})$$

Es posible probar que si u es m veces continuamente diferenciable en $[0, 2\pi]$, ($m \geq 1$) y si la derivada j -ésima de u , $u^{(j)}$, es a su vez periódica para toda $j \leq m-2$, entonces

$$\hat{u}_k = O(k^{-m}) \quad k = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{a.24})$$

esto es, el k -ésimo coeficiente de Fourier de una función que es infinitamente diferenciable con todas sus derivadas periódicas en el intervalo decae más rápido que cualquier potencia negativa de k . Por otro lado, aunque este resultado es muy importante, no dice nada con relación a los errores en la aproximación de la función; si la serie tiene una tasa finita de decaimiento, esta opera a partir de cierto k_0 . Si se trunca la serie debajo de este valor, la aproximación sería pobre. Esto es válido para cualquier función: aún para aquellas infinitamente diferenciables, hay un componente de Fourier mínimo aceptable, k_0 , debajo del cual, la aproximación con la serie sería inadecuada.

El error entre u y su serie de Fourier de orden N , según los estimadores dados en las relaciones a.21 y a.22, decae más que algebraicamente con $1/N$ cuando u y todas sus derivadas son infinitamente suaves y periódicas. A esta propiedad se le conoce como precisión espectral o convergencia exponencial.

A.4 DERIVACIÓN DE LA SERIE DE FOURIER

A partir del teorema a.6, la serie de la derivada de u es:

$$S u' = \sum_{k=-\infty}^{\infty} i k \hat{u} e^{i k x} \quad (\text{a.25})$$

Puede demostrarse que

$$(P_N u)' = P_N u' \quad (\text{a.26})$$

es decir, la derivada de la serie truncada es igual a la serie truncada de la derivada de u (o dicho de otra forma, estas operaciones son conmutativas).

A.5 REFERENCIAS

Bracewell, R.N. (1986), The Fourier transform and its applications, (2a ed) Mc Graw Hill, EUA.

Canuto, C. , Hussaini, M. Y., Quarteroni, A y Zang, Th., A., (1988), Spectral methods in fluid dynamics, Springer Verlag, Berlin

Hanna, J.R. y Rowland, J.H. (1990), Fourier series, transforms, and boundary value problems (2a ed), Wiley, EUA.

APÉNDICE B. POLINOMIOS ORTOGONALES

Además de las series de Fourier, una función puede representarse también con polinomios; aquí se discuten los polinomios ortogonales que son los más empleados en los métodos de colocación; esto es debido a que la propiedad de ortogonalidad obliga a que se respete la función original en los puntos de colocación. Los principales polinomios ortogonales son los de Legendre, Chebyshev y Jacobi. Esta discusión se resume de Canuto *et al* (1988) y Boyd (1989).

B.1 ORTOGONALIDAD

Se dice que un conjunto de funciones base son ortogonales con respecto al producto interior si

$$(\phi_m, \phi_n) = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \quad (\text{b.1})$$

Sea (p_k) , $k=0,1,\dots$ un sistema de polinomios de grado $k \leq N$ que son ortogonales en el intervalo $[-1,1]$ con respecto a una función de peso w ; se define el sistema de polinomios ortogonales como aquel que cumple que

$$\int_{-1}^1 p_k(x) p_m(x) w(x) dx = 0 \quad \text{si } m \neq k \quad (\text{b.2})$$

El peso $w(x)$ se introduce de manera de forzar la integral b.2

B.2 SERIE

La serie de una función u en el intervalo $[-1,1]$, en término del sistema de polinomios (p_k) es

$$Su = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{u}_k P_k \quad (\text{b.3})$$

donde

$$\hat{u}_k = \frac{1}{\|P_k\|^2} \int_{-1}^1 u(x) P_k(x) w(x) dx \quad (\text{b.4})$$

son los coeficientes de la expansión de la serie; la serie truncada correspondiente hasta el término N sería

$$P_N u = \sum_{k=0}^N \hat{u}_k P_k \quad (\text{b.5})$$

Siguiendo los argumentos del Apéndice A puede demostrarse que la serie truncada es convergente, es decir, que conforme $N \rightarrow \infty$

$$\|u - P_N u\| \rightarrow 0 \quad (\text{b.6})$$

B.3 INTEGRACIÓN NUMÉRICA. CUADRATURA

Se discute la relación entre los polinomios ortogonales y las fórmulas pertinentes de integración numérica. Los puntos de colocación, es decir las abscisas para la integración se dan en el cap 3.1

La fórmula de integración de Gauss es de las más empleadas y puede verse en cualquier texto de métodos numéricos [por ejemplo, Press *et al* (1987)]. Sean $x_0 \dots x_N$ las $N+1$ raíces del polinomio ortogonal p_{N+1} y sea la variable w la solución del siguiente sistema lineal de ecuaciones

$$\sum_{j=0}^N (x_j)^k w_j = \int_{-1}^1 x^k w(x) dx \quad (\text{b.7})$$

donde $0 \leq k \leq N$; entonces los pesos son positivos, esto es, $w_j > 0$, $j=1, \dots, N$ y la integral puede ser

**ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

reemplazada por la suma, esto es

$$\sum_{j=0}^N p(x_j) w_j = \int_{-1}^1 p(x) w(x) dx \quad (\text{b.8})$$

Los puntos de colocación x_j están todos en el interior del intervalo; excluyen los límites del intervalo.

Otras fórmulas de integración incluyen las fronteras; los resultados para otras fórmulas de integración son [Canuto *et al* (1988)]:

Gauss-Radau: se incluye la frontera izquierda (o la derecha). La ecuación b.8 es válida pero ahora en la malla definida por las $N+1$ raíces del polinomio ortogonal definido como

$$q(x) = p_{N+1}(x) + ap_N(x) \quad (\text{b.9})$$

donde $a = p_{N+1}/p_N$, de manera de que $q(-1) = 0$

Gauss-Lobato: se incluyen las dos fronteras. La malla se define para el polinomio

$$q(x) = p_{N+1}(x) + ap_N(x) + bp_{N-1}(x) \quad (\text{b.10})$$

donde a y b se escogen de manera de que $q(-1) = q(1) = 0$.

REFERENCIAS

Boyd, JP (1989), Chebyshev & Fourier Spectral Methods, Springer-Verlag, Berlin.

Canuto, C, Hussaini, MY, Quarteroni, A y Zang, TA (1988), Spectral Methods in fluid dynamics, Springer-Verlag, Berlin.

APÉNDICE C. TÉRMINOS FUENTE O SUMIDERO EN LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE

La discusión siguiente se resume de Berezowsky (1993). Se hace notar que dado que en la ec 4.5 aparece el área de sección, el término S debe expresarse en unidades de concentración por $[L^2/T]$.

6.1 Materiales conservativos

Distintas sustancias son conservativas, por lo que no tienen ni decaimiento ni crecimiento propios. Un ejemplo de este tipo de sustancias es la salinidad. En estos casos, el último término de la ec 4.5 es nulo.

6.2 Balance térmico agua-atmósfera

La ecuación de transporte y dispersión unidimensional de especies del cap 4 puede emplearse también para determinar la evolución de la temperatura en un cuerpo de agua. La temperatura y la concentración de calor se relacionan con la siguiente expresión:

$$C = \rho C_p (T - T_o) \quad (c.1)$$

donde:

- ρ densidad del agua, en kg/m^3
- C_p calor específico del agua, en $J/kg \text{ } ^\circ C$

T	temperatura del agua, en °C
T_o	temperatura de referencia del agua, en °C

En el rango de temperaturas que se encuentran en ríos y embalses ρ y C_p se consideran constantes, por lo que si solo se trabaja la ec 4.5 con temperaturas, es indistinto escribirla con las variables C ó T .

Se sabe que un cuerpo de agua modifica su temperatura debido a que continuamente recibe energía (básicamente del sol y del ambiente) y pierde energía por efectos de radiación, evaporación y conducción. Este tema está bastante estudiado y sale del objetivo de este Apéndice. Aquí se presentan las ecuaciones necesarias para incluir el efecto de dicho balance en la predicción de cambios de temperatura en ríos. Se supone que el río es somero y bien mezclado por lo que toda la sección transversal tiene la misma temperatura y no hay estratificación.

Al establecer un balance de energía agua-atmósfera [ver Lara *et al* (1986), Hiriart y Pereyra (1980)], se obtiene que el flujo neto de calor en la interfase aire-agua está dado por:

$$\phi_n = \phi_{sol} + \phi_{atm} - (\phi_{agua} + \phi_{eva} + \phi_{con}) \quad (c.2)$$

donde

ϕ_n	flujo neto de calor
ϕ_{sol}	radiación de onda corta recibida del Sol
ϕ_{atm}	radiación de onda larga recibida del Sol
ϕ_{agua}	radiación de onda larga emitida por el agua
ϕ_{eva}	calor perdido por evaporación
ϕ_{con}	calor perdido por conducción atmósfera-agua

Todos los términos tienen unidades de potencia calórica por unidad de superficie del agua expuesta a la atmósfera, expresada por ejemplo en W/m^2 [o lo que es lo mismo, en $J/(s m^2)$]. Una discusión detallada del cálculo de los términos de las ecs c.2 y c.3 puede verse en Lara *et al* (1986). Aquí se incluyen las ecuaciones de estos autores y las de Dolz y Puertas (1990).

La radiación de onda corta recibida del Sol depende de la latitud del lugar y época del año. Puede obtenerse a partir de mediciones o con fórmulas empíricas; por ello, es en general un dato. Debe tenerse en cuenta que no toda la energía recibida en un dispositivo de medición es recibida por el agua pues en función del ángulo de incidencia de los rayos solares, parte de la energía es reflejada por el agua; se estima del orden de 6 por ciento de pérdida por reflexión.

La radiación de onda larga recibida del sol se determina como:

$$\phi_{atm} = 5.114 \times 10^{-13} (T_A + 273)^6 \quad (c.3)$$

donde T_A es la temperatura del aire, en grados centígrados; en caso de que la nubosidad sea importante es necesario multiplicar al valor dado por la ec c.3 por $N = 1 + 0.17 C^2$, donde C es la fracción de cielo cubierto por las nubes.

La radiación de onda larga emitida por el agua es de los términos más importantes en el balance de energía; se determina a partir de la ley de Stefan-Boltzmann:

$$\phi_{agua} = 5.49 \times 10^{-8} (T_S + 273)^4 \quad (c.4)$$

donde T_S es la temperatura en la superficie del agua, en grados centígrados.

Para determinar el calor perdido por evaporación, Dolz y Puertas presentan la siguiente expresión:

$$\phi_{eva} = 1.49 (e_s - e_d) u_w^{0.76} \quad (c.5)$$

donde

e_s presión (tensión) de vapor de saturación del aire a la temperatura del agua, en mm de Hg:

$$e_s = 25.4 (0.00738 T_S + 0.8072)^8 \quad (c.6)$$

e_d presión de vapor del aire, en mm de Hg

u_w velocidad del viento en m/s

La velocidad del viento se mide en general a 10 m de altura.

El calor intercambiado por conducción o convección se obtiene como:

$$\phi_{con} = 0.6917 (T_S - T_A) u_w^{0.76} \quad (c.7)$$

por lo que el agua gana energía si $T_A > T_S$, y viceversa.

Conviene hacer notar que ni en ϕ_{sol} ni en ϕ_{atm} aparece la temperatura del agua (estos términos dependen de aspectos meteorológicos, de la hora del día, etc); sus valores son, por tanto, independientes del cálculo de la variación de la temperatura en el río.

Finalmente, el término sumidero S en la ec 4.5 queda en este caso como:

$$S = \frac{\phi_n B}{\rho C_p} \quad (c.8)$$

donde B es el ancho de la superficie libre.

c.3 Decaimiento de primer orden

Muchas sustancias, como las concentración de coliformes en agua, tienen lo que se conoce como decaimiento de primer orden, Fischer *et al* (1979). En este caso, el último término sumidero tendría la forma

$$S = -A k C \quad (c.9)$$

donde k es un coeficiente de decaimiento de primer orden, con unidades $[T^{-1}]$. El coeficiente k toma valores entre 5×10^{-7} y $5 \times 10^{-5} s^{-1}$, ver Brown y Barnwell (1987). En sentido estricto, este coeficiente depende de la temperatura. En el modelo QUAL2E se sugiere la siguiente corrección por temperatura:

$$k_T = k_{20} \omega^{(T-20)} \quad (c.10)$$

donde k_{20} es el valor del coeficiente a $20^\circ C$, que tendría los valores dados en el párrafo anterior; k_T es el valor del coeficiente a la temperatura local, T (en $^\circ C$); ω es un coeficiente empírico. En dicho modelo se sugiere el valor $\omega = 1.045$.

En la mayoría de los modelos matemático se considera la ec c.10 sin corrección por temperatura. Para incluir la corrección por temperatura sería necesario calcular simultáneamente la variación de temperatura y el decaimiento de primer orden.

Se hace ver que en el caso ideal de que el área de sección transversal, el caudal en el río y la descarga de contaminante sean constantes, y el coeficiente de dispersión longitudinal sea muy pequeño o despreciable,

al considerar la ec c.10 en la ec 4. se obtiene la solución analítica siguiente:

$$C = \frac{M}{Q} \exp\left(-\frac{kx}{U}\right) \quad (\text{c.11})$$

donde M es la masa de contaminante descargado al río, por unidad de tiempo.

c.4 Otras sustancias

Existen muchos casos posibles por analizar. Son ejemplos los ciclos de algas, del nitrógeno, del fósforo, oxígeno disuelto, etc. Como puede verse en el modelo QUAL2E [Brown y Barnwell (1987)], en general en estos ciclos es necesario considerar varias ecuaciones simultáneas.

REFERENCIAS

Berezowsky, M (1993), Modelo matemático para el cálculo unidimensional del transporte y dispersión de especies en ríos, Informe interno del Departamento de Ingeniería Hidráulica, Marítima y Ambiental, ETSICCP, Universidad de Politécnica de Cataluña, Barcelona, España.

Brown, LC y Barnwell, TO (1987), The enhanced stream water quality models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and user manual, EPA, EUA.

Dolz, J y Puertas, J (1990), Estudio del comportamiento térmico del río Ebro en verano en el tramo CN Ascó-Pas de L'Ase, Informe Interno, Departamento de Ingeniería Hidráulica, Marítima y Ambiental, ETSICCP, Universidad de Politécnica de Cataluña, Barcelona, España.

Fischer, HB, List, EJ, Koh, RC, Imberger, J y Brooks, NH (1979), Mixing in inland and coastal waters, Academic Press, EUA.

Hiriart, G y Pereyra, Dd (1980), Balance de energía agua-atmosfera y algunas aplicaciones, IX Congreso Latinoamericano de Hidráulica, Merida, Venezuela.

Lara, J, Almanza, R, Auvinet, G y Hiriart, G (1986), Estanque de enfriamiento de río Escondido, Publ. 501, Series del Instituto de Ingeniería, UNAM, México.

APÉNDICE D. MEDIDAS DE ERROR DE MÉTODOS NUMÉRICOS DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE Y DISPERSIÓN.

Sean las siguientes variables:

$m(t)$	masa total; equivale al área bajo la curva de la distribución y se obtiene a partir de la solución analítica
$C^{ex}(x, t)$	concentración en el punto x al tiempo t , obtenida a partir de la solución analítica
$C^{nu}(x, t)$	concentración en el punto x al tiempo t , obtenida con el método numérico
U	velocidad media
Ω	dominio de integración en x

Se definen las siguientes medidas de error (Baptista et al, 1988):

1. Norma discreta del error L-2 (adimensionalizada con la masa total):

$$\Phi_D(t) = \frac{1}{m(t)} \left\{ \left(\sum_i [C_i^{nu}(t) - C^{ex}(x_i, t)]^2 \right)^{1/2} \right\} \quad (d.1)$$

Es una medida discreta del error global de la solución numérica; debe valer cero.

2. Error en la concentración de pico (adimensionalizada con la concentración en el pico de la solución analítica):

$$\varepsilon(t) = \frac{C_{\max}^{ex}(t) - C_{\max}^{nu}(t)}{C_{\max}^{ex}(t)} \quad (d.2)$$

Es una medida del amortiguamiento del método numérico; debe valer cero.

3. Valor absoluto máximo negativo del método numérico (adimensionalizado con la concentración en el pico de la solución analítica):

$$\Psi(t) = \left| \frac{C_{\max, neg}^{nu}(t)}{C_{\max}^{ex}(t)} \right| \quad (d.3)$$

Es una medida puntual de las oscilaciones espurias (*wiggles*) de la solución numérica; debe valer cero.

4. Error en la posición de la concentración de pico (adimensionalizada con la distancia exacta de viaje del pico):

$$\xi(t) = \frac{x_{\max}^{ex}(t) - x_{\max}^{nu}(t)}{Ut} \quad (d.4)$$

Mide puntualmente el desplazamiento o fase de la solución numérica; debe valer cero.

5. Momento de orden cero del perfil de concentraciones (adimensionalizado

con el valor exacto, es decir, con la masa total):

$$\mu_o(t) = \frac{1}{m(t)} \int_{\Omega} C^{nu}(x, t) dx \quad (d.5)$$

Es una medida integral de la conservación de masa; debe valer uno.

6. Sea el valor esperado (primer momento) de la distribución en un instante dado:

$$E(C, t) = \frac{1}{m(t)} \int_{\Omega} xC(x, t) dx \quad (d.6)$$

El error en el primer momento del perfil de concentraciones (adimensionalizado con la distancia exacta de viaje):

$$\mu_x(t) = \frac{E^{ex}(C, t) - E^{nu}(C, t)}{Ut} \quad (d.7)$$

Es una medida integral del error de fase de la solución numérica; debe valer cero.

7. Segundo momento del perfil de concentraciones (adimensionalizado con el valor de la solución analítica):

$$\mu_{xx}(C, t) = \frac{\int_{\Omega} [x - E^{nu}(C, t)]^2 C^{nu}(x, t) dx}{\int_{\Omega} [x - E^{ex}(C, t)]^2 C^{ex}(x, t) dx} \quad (d.8)$$

Es una medida integral de la dispersión de la solución numérica; debe valer uno.

REFERENCIA

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