

ANALISIS NUMERICO DEL ALGORITMO QUICKEST

Alfredo E. Trento

*Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Universidad Nacional del Litoral, C.C. 217 - 3000 Santa Fe, Argentina*

RESUMEN

El algoritmo QUICKEST es un esquema numérico explícito de cuatro puntos, aplicable a la ecuación unidireccional de advección-dispersión. Se analiza la estabilidad y dispersión numérica del esquema. Se demuestra que el error de truncamiento es de tercer orden, se calcula su magnitud dentro del dominio de estabilidad, y se le compara con los errores de truncamiento de otros bien conocidos esquemas numéricos explícitos e implícitos.

Finalmente, se realiza una aplicación para el transporte de sustancias pasivas en condiciones no estacionarias y se comparan los resultados obtenidos con una solución analítica y con los resultados generados por el modelo de transporte QUAL2E. Se pone así de manifiesto la excelente capacidad del algoritmo QUICKEST para la simulación unidireccional del transporte de poluentes en canales naturales.

ABSTRACT

The QUICKEST algorithm, which is a four-point explicit numerical scheme, is applied to the unidirectional advection-dispersion equation. In this work, the stability and numeric dispersion of the scheme is analyzed. It is demonstrated that the truncation error is of third order. Then, the magnitude of the truncation error is calculated inside the domain of stability, and is compared to other truncation errors of well-known explicit and implicit schemes.

Finally, the QUICKEST algorithm is used to model the transport of a passive substance under non stationary conditions. The results obtained are compared with an analytic solution as well as with the results generated by the transport model QUAL2E. The excellent capabilities of the algorithm QUICKEST for the unidirectional simulation of pollutant transport in streams is then established.

INTRODUCCIÓN

El transporte de sustancias en cursos de aguas superficiales está gobernado por diferentes procesos, siendo en general los más importantes la advección y la dispersión. Estos procesos, sumados a otros de naturaleza química y bioquímica de las sustancias transportadas, determinan su dinámica ambiental. El creciente deterioro de la calidad de las aguas de numerosos ríos y arroyos de nuestro país, originada por la sistemática descarga de efluentes de diverso origen, impone la necesidad de contar con modelos matemáticos capaces de simular las distribuciones espaciales y temporales de los contaminantes. Casi todos los fenómenos de transporte de poluentes en cursos de agua son difíciles de abordar teórica y prácticamente, por las características esencialmente tridimensionales del escurrimiento, turbulento y no estacionario. No obstante, para determinadas situaciones es posible introducir hipótesis adicionales que reducen, con un aceptable grado de precisión, la tridimensionalidad del problema. Por ejemplo, en cuencas con ríos y arroyos relativamente extensos, se pueden implementar métodos numéricos que resuelven la ecuación unidireccional de transporte en las escalas espaciales y temporales adecuadas, aproximación válida en la medida que la escala de tiempo de los procesos estudiados en la dirección longitudinal del escurrimiento es sustancialmente mayor que la escala de tiempo de los procesos de mezcla a lo ancho de la sección transversal del escurrimiento (Fischer y otros¹).

En la actualidad existen numerosos códigos computacionales capaces de resolver la ecuación de advección-dispersión unidireccional, y por lo tanto, aptos para predecir eventuales situaciones hidroambientales o para ser empleados como herramientas en la gestión de los recursos hídricos superficiales a nivel de cuenca. Si bien algunos de estos códigos cuentan con un sólido reconocimiento en la comunidad técnico-científica internacional, como por ejemplo el modelo QUAL2E (Brown y Barnwell²), presentan ciertas limitaciones cuando el término advectivo predomina sobre el dispersivo, situación que frecuentemente ocurre en escurrimientos fluviales. Esas limitaciones suelen traducirse en oscilaciones, propias de la ocurrencia de dispersión numérica, o en amortiguación de la solución, propia de la ocurrencia de disipación numérica (Anderson, Tannehill y Pletcher³).

La solución numérica de la ecuación de advección-dispersión (EAD) ha sido abordada ampliamente en la Mecánica de Fluidos Computacional, demostrándose fehacientemente las dificultades que se presentan para obtener una solución próxima a la exacta cuando el término advectivo es importante. Las ventajas y desventajas de los diferentes métodos numéricos disponibles para resolver la EAD (ecuación 1) en forma aproximada han sido descritas minuciosamente en los trabajos de Roache⁴, Rood⁵, Koutitas⁶, entre otros.

$$E_t + U E_x = D_L E_{xx} \quad (1)$$

donde los subíndices t o x representan una derivada parcial, E representa la concentración media de la sustancia en la sección transversal del cauce [ML^{-3}], U es la velocidad media [LT^{-1}] del escurrimiento considerada positiva, usualmente conocida o calculada en forma independiente, D_L es el coeficiente de dispersión [L^2T^{-1}], t es el tiempo [T], y x es la coordenada espacial [L], considerada positiva en la dirección del escurrimiento.

Entre los métodos Eulereanos no convencionales se destaca el esquema QUICKEST propuesto por Leonard⁷ que presenta un error de truncamiento de tercer orden espacial y temporal, y que está libre de las oscilaciones propias de los esquemas centrados y de la disipación numérica característica de los esquemas regresivos aún para condiciones altamente advectivas.

En este trabajo se analiza la estabilidad y dispersión numérica del esquema QUICKEST, su error de truncamiento y se comparan los resultados de dos aplicaciones del esquema con los obtenidos con la solución analítica y otros esquemas.

ANALISIS DEL ESQUEMA QUICKEST

El algoritmo QUICKEST (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms), introducido por Leonard^{7,8}, es un esquema Eulereano explícito de cuatro puntos, que posee una precisión espacial y temporal de tercer orden. Leonard⁷ desarrolla un esquema de interpolación, cuya expresión final se obtiene a partir de la ecuación (1) con las siguientes premisas

- a) despreciando todas las derivadas espaciales de orden superior a tres.
- b) convirtiendo las derivadas temporales a espaciales mediante la ecuación (1).
- c) despreciando todas las derivadas temporales de orden superior a tres.

Mediante desarrollos en serie de Taylor y operaciones algebraicas (Trento⁹), la expresión numérica resultante, es la siguiente

$$\begin{aligned} \zeta_j^{n+1} = & \zeta_j^n + \left(\gamma(1-c) - \frac{c}{6}(c^2 - 3c + 2) \right) \zeta_{j+1}^n - \left(\gamma(2-3c) - \frac{c}{2}(c^2 - 2c - 1) \right) \zeta_j^n + \\ & + \left(\gamma(1-3c) - \frac{c}{2}(c^2 - c - 2) \right) \zeta_{j-1}^n + \left(\gamma c + \frac{c}{6}(c^2 - 1) \right) \zeta_{j-2}^n \end{aligned} \quad (2)$$

Con $\gamma = D_L \Delta t / \Delta x^2$ un coeficiente de dispersión adimensional y $c = U \Delta t / \Delta x$ el número de Courant, Δx es el incremento espacial y Δt es el incremento temporal. La variable ζ es la solución exacta del sistema de ecuaciones algebraicas resultante de la discretización de la ecuación (1), el vector error, denotado por e , está definido al tiempo t_n en el punto x_j por $e_j^n = E(x_j, t_n) - \zeta_j^n$; cabe destacar que E es una variable continua mientras ζ es una variable discreta.

Condiciones de Borde

En el primer nodo ($j=1$) ubicado en $x=0$ se adopta $\zeta_1^t = \zeta_0$, siendo ζ_0 un valor conocido de la función en el origen. Cuando se resuelve el esquema QUICKEST para el segundo nodo, ($j=2$), se necesita un valor de ζ_{j-2}^t , se adopta entonces $\zeta_{j-2}^t = \zeta_0$. Para calcular el valor de la función en el último nodo $j=J$, se adopta la siguiente condición de borde

$$\left. \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right|_J^n = \frac{\zeta_J^n - \zeta_{J-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (3)$$

y luego se adopta

$$\zeta_J^n = \zeta_{J-1}^n \quad (4)$$

Para el caso de advección pura ($\gamma=0$) es posible demostrar que el QUICKEST es un método particular de la familia de métodos Eulereanos-Lagrangianos que se obtiene a partir de una interpolación cúbica, a diferencia de la idea originalmente adelantada por Leonard. Al igual que para el caso del esquema en Diferencias Regresivo Explícito (DRE), cuando $c=1$ el esquema anterior se simplifica a $\zeta_j^{n+1} = \zeta_{j-1}^n$.

Análisis de Estabilidad

El factor de amplificación g obtenido para este esquema se obtiene a partir de la aplicación del método de Von Neumann (Roache⁴),

$$g = \frac{\zeta_j^{n+1}}{\zeta_j^n} = e^{-ik\alpha\Delta t} e^{k\beta\Delta t} \quad (5)$$

con α la celeridad numérica de la solución, β un coeficiente de amplificación o atenuación exponencial que determina la inestabilidad o estabilidad del esquema numérico utilizado si $\beta > 0$ o $\beta < 0$ respectivamente, $k=2\pi/\lambda$ es un número de onda, λ es la longitud de onda de un armónico de la condición inicial, $\theta = 2\pi\lambda / \Delta x$ es el número de onda de celda o de grilla y finalmente $i = \sqrt{-1}$.

(6)

$$g = \text{Re}(g) + i \text{Im}(g) = 1 + (2\gamma + c^2)(\cos\theta - 1) + \left[\frac{c}{6}(4\cos\theta - \cos 2\theta - 3)(1 - c^2 - 6\gamma) \right] - i \left\{ c \sin\theta + \left[\frac{c}{6}(1 - c^2 - 6\gamma)(2\sin\theta - \sin 2\theta) \right] \right\}$$

con $\text{Re}(g)$ e $\text{Im}(g)$ las componentes real e imaginaria respectivamente del factor de amplificación. El diagrama polar correspondiente para el caso de advección pura se muestra en la Figura 1.

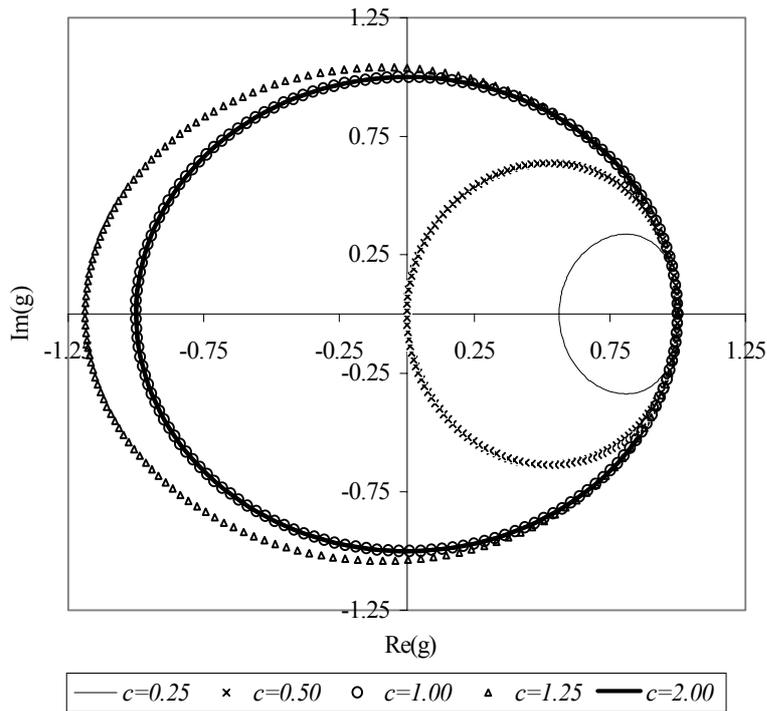


Figura 1: Diagrama polar del esquema QUICKEST para el caso de advección pura.

En la Figura 1 se aprecia cómo las curvas correspondientes a $c=1$ y $c=2$ coinciden en un círculo unitario centrado en el origen, poniendo en evidencia, de tal modo, la estabilidad numérica del esquema para esos números de Courant. El esquema es estable también en el intervalo $0 < c < 1$, tal como muestran las curvas para $c=0.25$ y $c=0.50$, en cambio, a modo de ejemplo, para $c=1.25$ el esquema es inestable.

Por otra parte, la relación de dispersión se calcula con ayuda de la ecuación

$$\frac{\alpha}{U} = -\frac{1}{c\theta} \arctan \left(\frac{-\left\{ c \sin\theta + \left[\frac{c}{6}(1 - c^2 - 6\gamma)(2\sin\theta - \sin 2\theta) \right] \right\}}{A + B} \right) \quad (6)$$

con

(7)

$$A = 1 + (2\gamma + c^2)(\cos\theta - 1)$$

$$B = \left[\frac{c}{6} (4\cos\theta - \cos 2\theta - 3)(1 - c^2 - 6\gamma) \right] \tag{8}$$

En las Figuras 2 y 3 se graficaron, para $c = 0.25$, los resultados obtenidos para el módulo de amplificación ($|g|$) y la relación de dispersión α/U respectivamente. Esta relación representa el cociente entre la celeridad numérica y la celeridad física característica del fenómeno, significa entonces que un armónico caracterizado por un cierto número de onda de grilla θ y por un cierto número de Courant, y que representa una razón α/U mayor o menor que uno, estará adelantándose o rezagándose, respectivamente de la señal física.

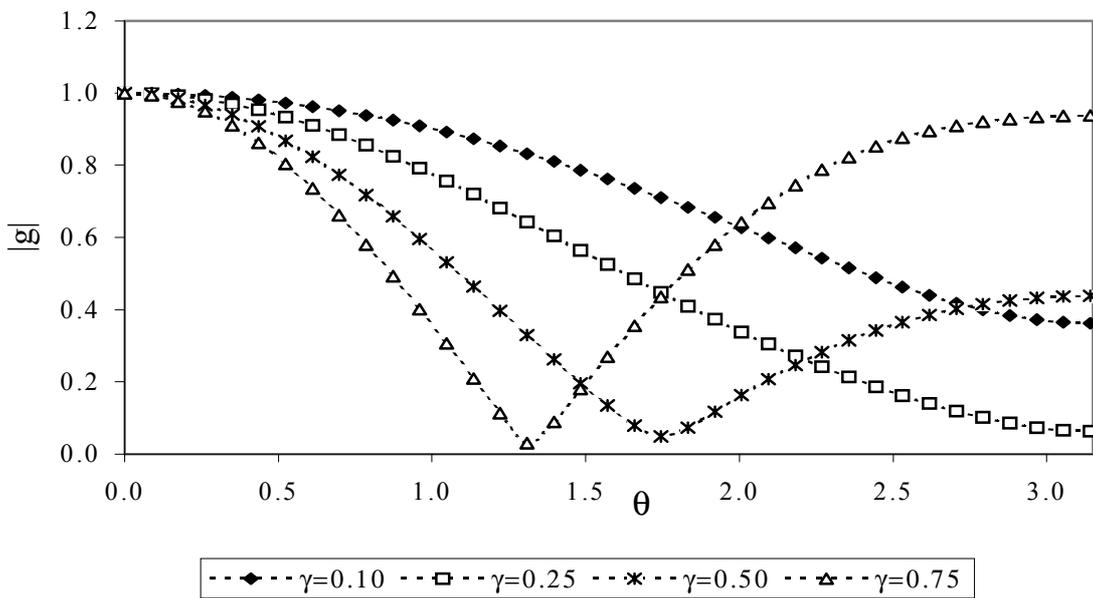


Figura 2: Módulo de amplificación ($|g|$) para $c = 0.25$.

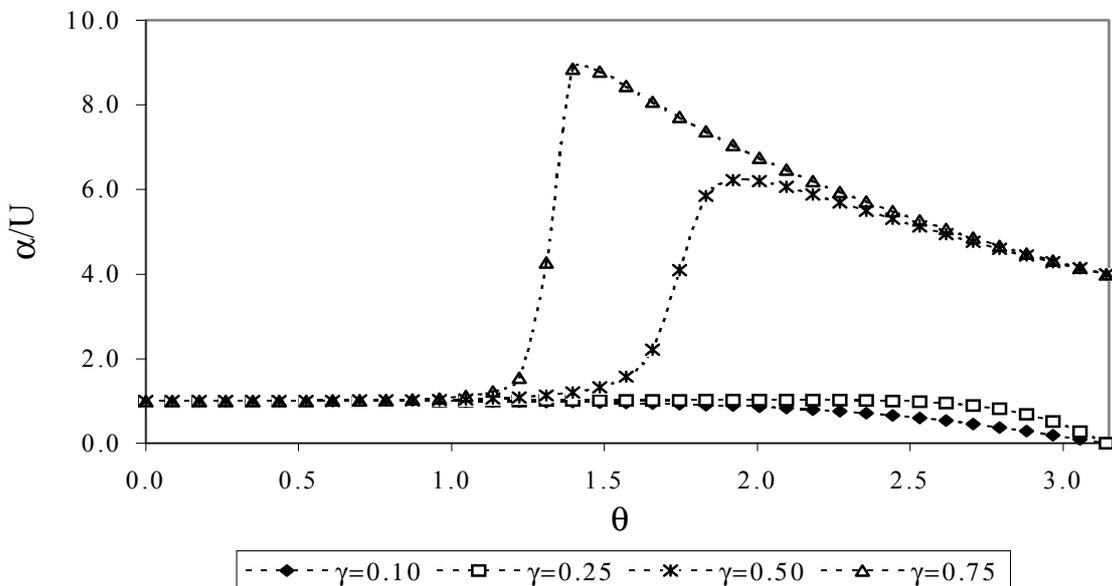


Figura 3: Relación de dispersión para $c = 0.25$.

Error de Truncamiento

El error de truncamiento, ET , representa una medida de la discrepancia entre la solución exacta y la solución aproximada, o en otras palabras, cuan lejos está E de satisfacer la ecuación en diferencias. Claramente para que el esquema sea consistente, es necesario imponer que $ET_j^n \rightarrow 0$ a medida que $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$. A partir de la ecuación (1) se pueden obtener las derivadas temporales de mayor orden derivando y reemplazando sucesivamente (Trento⁹)

$$E_{tt} = U^2 E_{xx} - 2UD_L E_{xxx} + D_L^2 E_{xxxx} \quad (9)$$

$$E_{ttt} = -U^3 E_{xxx} + 3U^2 D_L E_{xxxx} - 2UD_L^2 E_{xxxxx} \quad (10)$$

$$E_{tttt} = U^4 E_{xxxx} - 4U^3 D_L E_{xxxxx} + 3U^2 D_L^2 E_{xxxxxx} \quad (11)$$

Los ET resultantes para el esquema QUICKEST, los esquemas explícitos centrado (DCE) y regresivo (DRE), y regresivo implícito (DRI) se muestran en la Tabla 1

Esquema	Error de Truncamiento	Orden del Error
DCE	$E_{tt} \frac{\Delta t}{2} + E_{xxx} U \Delta x^2 \left(\frac{1}{6} - \gamma \right)$	$(\Delta x^2, \Delta t)$
DRE	$E_{xx} \left[\frac{U \Delta x}{2} \right] (c - 1)$	$(\Delta x, \Delta t)$
DRI	$E_{xx} \left[-c D_L + \frac{U \Delta x}{2} (c + 1) \right]$	$(\Delta x, \Delta t)$
QUICKEST	$E_{xxxx} \frac{\Delta x^4}{\Delta t} \left\{ \frac{1}{2} \gamma \left[\frac{1}{6} + c - c^2 - \gamma \right] + c \left[-\frac{5}{36} + \frac{1}{24} c + \frac{5}{36} c^2 \right] \right\} - E_{ttt} \frac{\Delta t^3}{24}$	$(\Delta x^3, \Delta t^3)$

Tabla 1: Error de Truncamiento para los esquemas DCE, DRE, DRI y QUICKEST.

Un análisis del error de truncamiento calculado para el dominio de estabilidad numérica en coordenadas (γ, c) permite demostrar que el máximo ET en valor absoluto es $ET = -0.44806 E_{xxxx}$ para las coordenadas $(1.14, 0.53)$, el máximo positivo es $ET = 0.33333 E_{xxxx}$ para las coordenadas $(0.01, 2.00)$, y que el esquema es exacto en el punto de coordenadas $(0.00, 1.00)$. A partir del orden del error, es posible deducir la mayor precisión del esquema QUICKEST respecto de los otros esquemas explícitos, tal como han puesto de manifiesto por ejemplo Abbot y Basco¹⁰. El diagrama de estabilidad resultante en coordenadas (γ, c) y la magnitud del error de truncamiento dentro de ese dominio, se muestra en la Figura 4.

EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Se efectuaron dos experimentos numéricos con el propósito de comparar los resultados obtenidos con el QUICKEST con los de la solución analítica de la EAD (Harlemann¹¹) y de otros esquemas numéricos. Las condiciones iniciales y de contorno propuestas fueron

$$\zeta(x,0) = 0 \quad \text{para} \quad x \geq 0 \quad (12)$$

$$\zeta(0,t) = \zeta_0 \quad \text{para} \quad t \geq 0 \quad (13)$$

$$\zeta(\infty,t) = 0 \quad \text{para} \quad t \geq 0 \quad (14)$$

En la Figura 4 se graficaron los perfiles de concentración exactos y calculados para una sustancia conservativa. Se adoptó un intervalo espacial $\Delta x=0.01$, un intervalo temporal $\Delta t=0.01$, una velocidad $U=1$, una longitud característica $L=1$ y un coeficiente de dispersión adimensional $\gamma=1/8.8$, con lo cual se obtuvo $c=1.00$ y Peclet de celda $P_\Delta=U\Delta x/D_L=8.8$. El esquema QUICKEST exhibió muy buena precisión mientras que el QUAL2E produjo una inadecuada aproximación en la vecindad del frente abrupto como efecto de su disipación numérica.

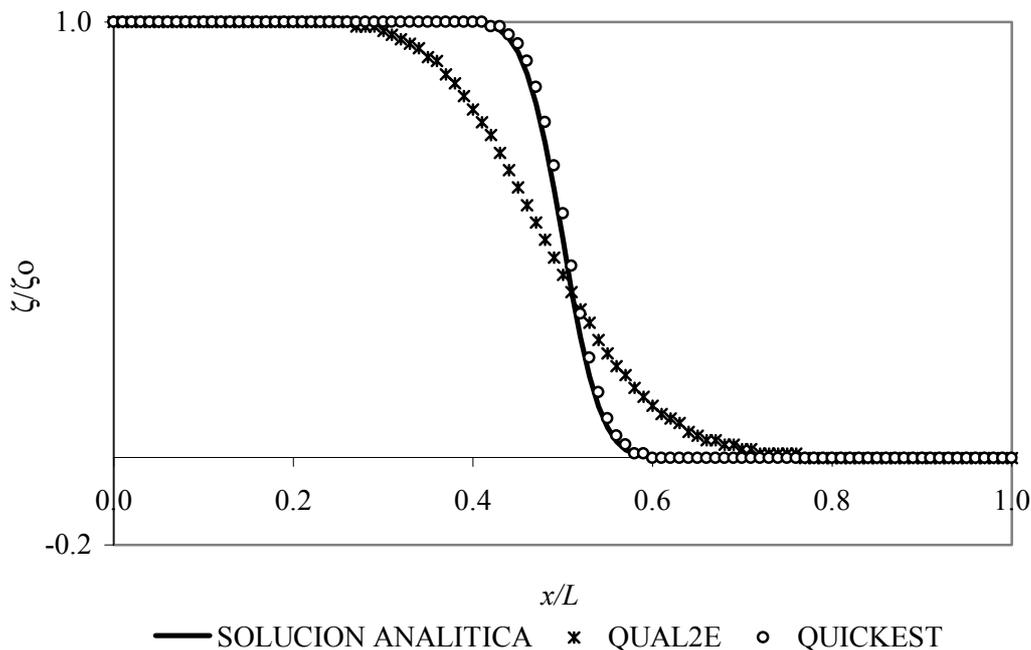


Figura 5: Resultados obtenidos con la Solución Analítica, el esquema QUICKEST y el QUAL2E, para una inyección continua de una sustancia conservativa.

El segundo experimento consistió en la simulación de una inyección discontinua de una sustancia conservativa durante 8 horas en la cabecera de un canal. El experimento consistió en calcular el perfil de concentraciones a las 8

hs de haber cesado el suministro. Los resultados se muestran en la Figura 6, en donde se comparan los de la solución analítica con los obtenidos por el esquema QUICKEST. Se adoptó un intervalo espacial $\Delta x = 500$ metros, un intervalo temporal $\Delta t = 180$ segundos, $c = 0.181$ y $P_{\Delta} = 12.58$. Los resultados muestran un muy buen comportamiento numérico del esquema QUICKEST.

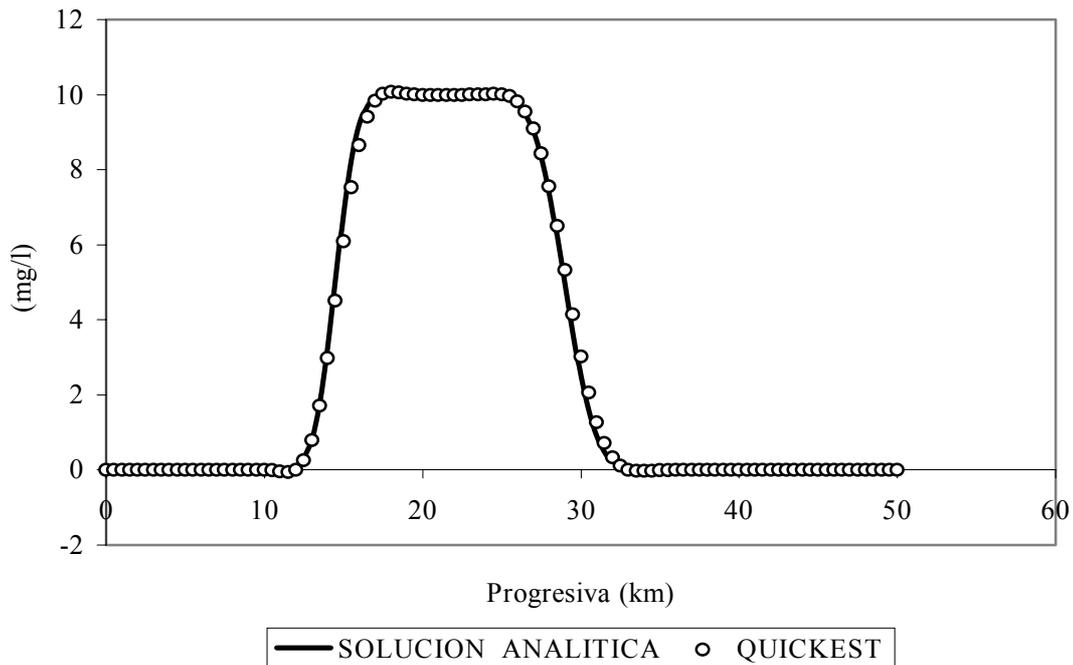


Figura 6: Resultados obtenidos con la Solución Analítica y el esquema QUICKEST para una inyección discontinua de una sustancia conservativa.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos con el esquema QUICKEST para el transporte de una Sustancia Conservativa muestran una excelente concordancia general con la Solución Analítica para las dos situaciones planteadas, aporte continuo y discontinuo, para distintos números de Peclet de celda.

El modelo QUAL2E pone de manifiesto en sus resultados un comportamiento fuertemente disipativo, no atribuible al Peclet sino a la difusión numérica inherente al esquema regresivo cuando es utilizado para situaciones no estacionarias.

El esquema QUICKEST provee una solución libre de oscilaciones en un amplio rango de problemas de advección-dispersión y alta precisión para distintos números de Peclet.

Si bien el esquema QUICKEST presenta, tal como se termina de puntualizar, pequeñas oscilaciones en determinadas condiciones del escurrimiento, se lo considera como un esquema sumamente apto para propósitos ingenieriles.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue desarrollado en el marco del Proyecto “**Modelación Matemática del Transporte de Poluentes en Cursos de Agua de la Cuenca Inferior del Río Salado**” de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas de la UNL, y como parte de la Tesis de Maestría en Ingeniería de los Recursos Hídricos del Ingeniero Alfredo E. Trento finalizada en diciembre de 1998. El Proyecto de Investigación está subvencionado por el Programa Cursos de Acción para la Investigación y el Desarrollo año 1996 (CAI+D '96) de la Universidad Nacional del Litoral.

REFERENCIAS

- [1] H. B. Fischer, E. J. List, R. C. Y. Koh, J. Imberger, and N. H. Brooks, *Mixing in Inland and Coastal Waters*, Academic Press, New York, 1979.
- [2] L. C. Brown and T. O. Barnwell Jr., *The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and Users Manual*, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA, Report EPA/600/3-87/007, 1987.
- [3] D. A. Anderson, J. C. Tannehill, y R. H. Pletcher, *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Mc. Graw Hill, 1984.
- [4] P. Roache, *Computational Fluid Dynamics*, Hermosa Publ., New Mexico, 1972.
- [5] R. B. Rood, *Numerical Advection Algorithms and their Role in Atmospheric Transport and Chemistry Models*, pp 71-100, *Reviews of Geophysics*, 25(1), 1987.
- [6] C. G. Koutitas, *Mathematical Models Coastal Engineering*, Pentech, London, 1988.
- [7] B. P. Leonard, *A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation*, pp 59-98 *Comp. Methods in Applied Mech. and Eng.*, 19, 1979.
- [8] B. P. Leonard, *The ULTIMATE Conservative Difference Scheme Applied to Unsteady One-dimensional Advection*, pp17-74, *Comp. Methods in Applied Mech. and Eng.*, 88, 1991.
- [9] Alfredo Trento, *Tesis de Maestría en Ingeniería de los Recursos Hídricos*, Universidad Nacional del Litoral, 1998.
- [10] M. B. Abbot y D. Basco, *Computational Fluid Dynamics an Introduction for Engineers*, Longman S&T, 1989.
- [11] D. R. F. Harleman, *Transport Processes in Environmental Engineering*, Lecture Notes, Parsons Hydrodynamics Laboratory, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, 1988.