

94  
Zej

DISPERSION DE CONTAMINANTES  
EN DOS DIMENSIONES  
ANALISIS DE SENSIBILIDAD

TESIS PROFESIONAL  
RICARDO MARTINEZ GUDINO

ING. CIVIL

1988



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.

## INDICE

<b>1. INTRODUCCION</b>	<b>1</b>
<b>2. DISPERSION EN UNA DIMENSION</b>	<b>6</b>
2.1 Esquemas en diferencias finitas	
2.2 Ecuación de Fourier en una dimensión	
2.3 Representación matricial del esquema general en diferencias finitas	
2.4 Ejemplos de aplicación	
<b>3. DISPERSION EN DOS DIMENSIONES</b>	<b>21</b>
3.1 Generalidades	
3.2 Análisis de estabilidad lineal del esquema general de solución	
3.3 Método de direcciones alternantes	

3.4	Condiciones de frontera	
3.4.1	<i>Fronteras de flujo</i>	
3.4.2	<i>Fronteras impermeables</i>	
3.5	Pruebas al modelo	
4.	COEFICIENTE DE DISPERSION	49
4.1	Difusión molecular	
4.1.1	<i>Difusión molecular en un fluido en reposo</i>	
4.1.2	<i>Difusión molecular en un fluido en movimiento</i>	
4.2	Dispersión	
4.3	Coefficiente de dispersión	
4.3.1	<i>Mezclado vertical</i>	
4.3.2	<i>Mezclado transversal</i>	
4.3.3	<i>Mezclado longitudinal</i>	
4.4	Obtención del tensor de dispersión K	
4.5	Influencia del ángulo teta en el tensor de dispersión K	
5.	ANALISIS DE SENSIBILIDAD	71
5.1	Descripción del problema	
5.2	Simulaciones	
5.2.1	<i>Obtención del campo de temperaturas considerando advección pura</i>	
5.2.2	<i>Coefficiente de dispersión variable</i>	
5.2.3	<i>Coefficiente de dispersión unico en ambas direcciones</i>	
5.2.4	<i>Influencia del ángulo <math>\theta</math> que forma el vector velocidad con respecto al sistema coordinado de cálculo</i>	
5.2.5	<i>Coefficiente de dispersión constante en cada dirección</i>	
6.	CONCLUSIONES	84
6.1	Esquema en diferencias finitas	
6.2	Coefficiente de dispersión	
6.3	Análisis de sensibilidad	

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

## 1. INTRODUCCION

Durante mucho tiempo el ser humano ha disfrutado de la bondad de la naturaleza, de sus recursos naturales: suelo, vegetación clima, agua etc. No existía la preocupación firme de administrar esos recursos de una manera adecuada.

Actualmente, la sociedad sufre las consecuencias de los excesos que se han cometido contra el medio ambiente, y es ahora cuando se preocupa por la preservación del mismo.

Uno de los principales recursos, el agua, esta siendo agotado ya sea por el crecimiento desmedido de la sociedad o por la contaminación. Es común escuchar amplias discusiones acerca de la contaminación del agua, pero en realidad no hay suficiente información sobre cuál es el comportamiento del fenómeno, dependiendo de la clase de especie con que esté contaminada, de las cuales se pueden citar: sales, combustible, productos químicos, calor, etc.

Ecologistas, especialistas en campos como la biología, la botánica, la zoología, están especificando los niveles de concentración de contaminantes y duración que los organismos acuáticos son capaces de soportar, sin sufrir alteraciones.

El ingeniero debe entonces diseñar las obras tomando en cuenta las especificaciones que determinan los ecologistas, o en su caso los sistemas de descontaminación o de purificación de agua, etc. Por otro lado, cuando se enfrente a situaciones de contaminación accidental debe cuantificar el nivel de contaminación para poder realizar acciones que minimicen los daños al medio ambiente. Si es necesario descargar un contaminante deberá diseñar la obra de descarga de tal manera que el efecto sobre el medio ambiente se reduzca.

Para tratar de resolver estos problemas, es necesario el entendimiento de tres procesos generales:

- Dilución inicial a la salida del chorro
- Físicoquímica y biología de contaminantes no conservativos
- Mezclado turbulento

En esta tesis se estudia únicamente el proceso de mezclado turbulento y de manera particular, el análisis se hace en dos dimensiones (en planta). El mezclado turbulento en zonas acuáticas está formado por dos procesos, que son advección o transporte, y dispersión. En esta tesis se da especial atención a este último. Se aclara aquí que es común usar indistintamente los términos difusión y dispersión, aunque denotan procesos diferentes.

Según Holley (ver ref 1) difusión es el transporte de masa ya sea por difusión molecular o por desviaciones de las fluctuaciones instantáneas de la velocidad turbulenta con respecto a la velocidad media local. Dispersión, por otro lado, es el extendimiento de la masa de contaminante causada por desviaciones de las velocidades medias promediadas en el tiempo con respecto a la velocidad media en una sección, esto es, debida a la convección diferencial.

En el capítulo 4 se establece la ecuación de difusión de una especie en un campo turbulento de velocidades (ec 4.19). Si esta ecuación se promedia en la profundidad, se obtiene la llamada ecuación de transporte y dispersión (ver ref 1) en dos dimensiones

$$\frac{\partial}{\partial t}(h C) + \frac{\partial}{\partial x}(h u C) + \frac{\partial}{\partial y}(h v C) = \frac{\partial}{\partial x}\left(h k_{11} \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(h k_{12} \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(h k_{21} \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(h k_{22} \frac{\partial C}{\partial y}\right) \quad (1.1)$$

donde

x,y	coordenadas cartesianas en un plano horizontal		
t	tiempo		
h(x,y,t)	profundidad		
C(x,y,t)	concentración de la especie promediada en la profundidad		
u(x,y,t),v(x,y,t)	velocidades de la corriente en direcciones X y Y, respectivamente, promediadas en la profundidad		
k <sub>11</sub> (x,y,t),k <sub>12</sub> (x,y,t),k <sub>21</sub> (x,y,t),k <sub>22</sub> (x,y,t)	componentes	del tensor de dispersión K	

La ec 1.1 está formada por dos partes. Al segundo y tercer términos del lado izquierdo se les denomina términos CONVECTIVOS (o ADVECTIVOS), ya que en ellos intervienen las velocidades medias u y v. Este término representa el transporte de la especie. Cuando el lado izquierdo de la ec 1.1 se iguala a cero, se puede calcular la evolución de la concentración de la especie y a la ecuación que resulta se le denomina CONVECCION PURA

$$\frac{\partial h C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(h u C) + \frac{\partial}{\partial y}(h v C) = 0 \quad (1.2)$$

De la misma manera, si los términos convectivos se desprecian, en la ec 1.1 quedan únicamente los elementos difusivos, por lo que la ecuación se denomina de DIFUSION PURA

$$\frac{\partial}{\partial t} (h C) = \frac{\partial}{\partial x} \left( h k_{11} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( h k_{12} \frac{\partial C}{\partial y} \right) +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial y} \left( h k_{21} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( h k_{22} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \quad (1.3)$$

Al tratar de resolver la ec 1.1 globalmente, se ha encontrado que se generan errores numéricos que son del orden de la dispersión física. Esto es debido a que es difícil en un método numérico separar los procesos físicos que se incluyen en la ecuación. Por ello se han propuesto métodos en que se utiliza un método numérico adecuado a cada proceso físico.

Dentro de este orden de ideas, el objetivo de esta tesis es precisamente el colaborar con la idea de tratar los términos CONVECTIVO y DIFUSIVO separadamente, esto es, obtener resultados de cada uno de los fenómenos y posteriormente interactuar los procesos.

Se ha visto que es conveniente resolver primeramente el término convectivo, (ver ref 2), y posteriormente relacionar los fenómenos utilizando los resultados de la convección pura como condiciones iniciales, para la solución del término que representa la parte difusiva. Por tanto la ecuación que se resuelve en este trabajo es la 1.3.

La técnica a emplear para resolver la ec 1.3 consiste en la utilización de esquemas en diferencias finitas, ya que es la más empleada para el cálculo del flujo no permanente en hidráulica.

En el capítulo 2 se definen algunos tipos de esquemas en diferencias finitas utilizados para la solución de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Por sencillez el análisis se hace en una dimensión. Se representa la ecuación de calor (ecuación de Fourier) por medio del esquema seleccionado y se hacen algunos ejemplos de aplicación para probar su precisión.

En el capítulo 3, se trabaja con un esquema en dos dimensiones, conservando constante el coeficiente de dispersión. Se plantea la ecuación de Fourier en dos dimensiones con el esquema propuesto. Se describe el planteamiento correcto de las condiciones de frontera para el esquema en particular, además se realizan varias pruebas para probar la bondad del método.

En el capítulo 4, se explica el concepto de dispersión asociada al de difusión molecular y turbulenta. Se describen métodos para obtener los coeficientes de dispersión, y a partir de ellos, se obtiene el tensor de dispersión  $K$  y se aplica el método visto en el capítulo 3 para plantear el esquema en diferencias finitas.

En el capítulo 5, se muestra la aplicación de la ecuación de dispersión pura en una descarga de agua caliente. En el capítulo 6 se dan las conclusiones del trabajo.

## 2. DISPERSION EN UNA DIMENSION

En este capítulo se analizan métodos para resolver la ecuación de calor, enfocándose a métodos de diferencias finitas. Por sencillez, el análisis se hace en una dimensión.

### 2.1 ESQUEMAS EN DIFERENCIAS FINITAS

Un método numérico universal para resolver ecuaciones diferenciales parciales es el de diferencias finitas.

Con el fin de obtener una ecuación en diferencias en lugar de la ecuación diferencial es necesario:

- sustituir el dominio de variación continua del argumento por un conjunto discreto de puntos, esto es, por valores en una red o malla

- sustituir (aproximar en la red) la ecuación diferencial por una ecuación en diferencias

Un esquema es una ecuación en diferencias; existen varios métodos para la construcción de éstos, ver refs 3 y 4. Los esquemas son principalmente de dos tipos :

Esquema explícito. Es una fórmula en la cual se expresa un valor desconocido directamente en términos de valores conocidos. En el subcap 2.2 se ve un ejemplo de este tipo de esquema.

El inconveniente de este tipo de esquemas es que el paso  $\Delta t$  en el tiempo debe ser muy pequeño para obtener resultados estables. Además en la dirección  $x$  el paso  $\Delta x$  también debe ser pequeño para obtener una precisión razonable.

Esquema implícito. Es un método en donde el cálculo de valores desconocidos necesita la solución de un sistema de ecuaciones simultáneas. En el subcap 2.2 se ve un ejemplo.

En este tipo de esquemas, en general el tamaño del paso en el tiempo se limita por razones de precisión y no por la estabilidad.

## 2.2 ECUACION DE FOURIER EN UNA DIMENSION

La ecuación de Fourier (ecuación de calor), representa el flujo no permanente de una especie definida con la concentración

$$\frac{\partial C}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

donde

- a coeficiente de dispersión
- C concentración

Si se aproxima el primer miembro de la ecuación anterior con incrementos, fig 2.1, se tiene

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} \quad (2.2)$$

donde

i subíndice para indicar discretización en el espacio  
n superíndice para indicar discretización en el tiempo

Si el paso  $\Delta x$  es constante (malla uniforme) se puede aproximar el segundo miembro de la ec 2.1 como sigue

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx \frac{\left[ \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i+1/2}^n - \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i-1/2}^n \right]}{\Delta x} \approx \frac{\left[ \frac{C_{i+1}^n - C_i^n}{\Delta x} \right] - \left[ \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x} \right]}{\Delta x}$$

simplificando

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx \frac{C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n}{\Delta x^2} \quad (2.3)$$

Nótese que esta derivada se ha aproximado para el instante  $n\Delta t$ .

Igualando los dos términos de la ecuación diferencial de calor representados por su aproximación en diferencias finitas, se tiene

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = a^2 \frac{C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n}{\Delta x^2} \quad (2.4)$$

que por definición es un esquema explícito; es decir, el valor de  $C_i^{n+1}$  se puede calcular a partir de valores conocidos en el tiempo  $n\Delta t$

$$C_i^{n+1} = r \left( C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n \right) + C_i^n$$

donde

$$r = \frac{a^2 \Delta t}{\Delta x^2}$$

En este esquema a la constante  $r$  se le define como número de Courant.

Si en el segundo miembro de la ec 2.1 se hace una combinación lineal entre los tiempos  $t=n\Delta t$  y  $t=(n+1)\Delta t$  se tendrá que

$$a^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \left( C_{i-1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1} + C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n \right) \frac{a^2}{\Delta x^2}$$

Es usual encontrar el esquema así presentado de la siguiente manera

$$C_i^{n+1} - C_i^n = r \left\{ \theta \left( C_{i-1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1} \right) + (1-\theta) \left( C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n \right) \right\}$$

en donde al lado derecho se le afecta por un factor de peso en el tiempo  $\theta$ . Así si  $\theta = 0$ , se obtiene el esquema explícito (ec 2.4); si  $\theta > 0$ , se utilizan valores de los tiempos  $n$  y  $n+1$ .

Se puede demostrar que cuando  $1/2 \leq \theta \leq 1$  el esquema es incondicionalmente estable. Esto quiere decir que en ese rango de  $\theta$ , para cualquier valor de  $r$  (número de Courant) el esquema proporciona resultados válidos para la ecuación diferencial, ver ref 4.

El esquema será condicionalmente estable para  $0 \leq \theta \leq 1/2$ , esto es, para este rango el valor de  $r$  esta limitado.

### 2.3 REPRESENTACION MATRICIAL DEL ESQUEMA GENERAL EN DIFERENCIAS FINITAS

Sea

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} = a^2 \left\{ \theta \left( \frac{c_{i-1}^{n+1} - 2c_i^{n+1} + c_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) + (1-\theta) \left( \frac{c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n}{\Delta x^2} \right) \right\}$$

Desarrollando el segundo miembro y multiplicando por  $\Delta t$  se tiene

$$c_i^{n+1} - c_i^n = r \left[ \theta c_{i-1}^{n+1} - \theta 2c_i^{n+1} + \theta c_{i+1}^{n+1} + (1-\theta) c_{i-1}^n - (1-\theta) 2c_i^n + (1-\theta) c_{i+1}^n \right]$$

agrupando las variables en el tiempo  $t = (n+1)\Delta t$

$$c_i^{n+1} - r \theta \left[ c_{i-1}^{n+1} - 2c_i^{n+1} + c_{i+1}^{n+1} \right] = c_i^n + r (1-\theta) \left[ c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n \right]$$

agrupando términos

$$-r\theta C_{i-1}^{n+1} + (1+2r\theta)C_i^{n+1} - r\theta C_{i+1}^{n+1} = r(1-\theta)C_{i-1}^n + (1-2r(1-\theta))C_i^n + r(1-\theta)C_{i+1}^n$$

Se acostumbra escribir la ecuación anterior utilizando operadores de la siguiente manera

$$\boxed{-r\theta \quad \left[ 1 + 2r\theta \right] \quad -r\theta} C_i^{n+1} = \boxed{r(1-\theta) \quad \left[ 1 - 2r(1-\theta) \right] \quad r(1-\theta)} C_i^n$$

Se puede demostrar que el esquema es más preciso cuando  $\theta = 1/2$  ver refs 3 y 4. Sustituyendo este valor de  $\theta$  se tiene

$$\boxed{-r/2 \quad \left[ 1 + r \right] \quad -r/2} C_i^{n+1} = \boxed{r/2 \quad \left[ 1 - r \right] \quad r/2} C_i^n$$

En este caso el esquema recibe el nombre de Esquema de Crank-Nicholson, y es implícito simétrico, con un molde de seis puntos en la malla.

Utilizando el esquema de Crank-Nicholson se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones simultáneas para cada valor de  $i$  en el tiempo  $t=(n+1)\Delta t$ . Si  $i=1, 2, \dots, ii-1$

$$\begin{aligned} -r/2 C_0^{n+1} + (1+r) C_1^{n+1} - r/2 C_2^{n+1} &= r/2 C_0^n + (1-r) C_1^n + r/2 C_2^n \\ -r/2 C_1^{n+1} + (1+r) C_2^{n+1} - r/2 C_3^{n+1} &= r/2 C_1^n + (1-r) C_2^n + r/2 C_3^n \\ \vdots & \vdots \\ -r/2 C_{ii-2}^{n+1} + (1+r) C_{ii-1}^{n+1} - r/2 C_{ii}^{n+1} &= r/2 C_{ii-2}^n + (1-r) C_{ii-1}^n + r/2 C_{ii}^n \end{aligned}$$

Como se puede observar en la malla de la fig 2.2, los valores de  $C_0^{n+1}$   $C_{ii}^{n+1}$  son valores de frontera, luego entonces se pueden sumar en ambos miembros de las ecuaciones a las que correspondan y el sistema queda como sigue

$$\begin{aligned}
 (1+r)C_1^{n+1} - r/2C_2^{n+1} &= r/2C_0^n + (1-r)C_1^n + r/2C_2^n + r/2C_0^{n+1} \\
 -r/2C_1^{n+1} + (1+r)C_2^{n+1} - r/2C_3^{n+1} &= r/2C_1^n + (1-r)C_2^n + r/2C_3^n \\
 &\vdots \\
 -r/2C_{ii-2}^{n+1} + (1+r)C_{ii-1}^{n+1} &= r/2C_{ii-2}^n + (1-r)C_{ii-1}^n + r/2C_{ii}^n + r/2C_{ii}^{n+1}
 \end{aligned}$$

y utilizando la forma matricial

$$\begin{bmatrix} 1+r & -r/2 & & & \\ -r/2 & 1+r & -r/2 & & \\ & -r/2 & 1+r & -r/2 & \\ & & -r/2 & 1+r & -r/2 \\ & & & \ddots & \\ & & & -r/2 & 1+r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^{n+1} \\ C_2^{n+1} \\ C_3^{n+1} \\ C_4^{n+1} \\ \vdots \\ C_5^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-r & r/2 & & & \\ r/2 & 1-r & r/2 & & \\ & r/2 & 1-r & r/2 & \\ & & r/2 & 1-r & r/2 \\ & & & \ddots & \\ & & & r/2 & 1-r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^n \\ C_2^n \\ C_3^n \\ C_4^n \\ \vdots \\ C_{ii}^n \end{bmatrix} + r/2 \begin{bmatrix} C_0^{n+1} + C_0^n \\ \\ \\ \\ \\ C_{ii}^{n+1} + C_{ii}^n \end{bmatrix}$$

## 2.4 APLICACION DEL ESQUEMA

Se utilizó el esquema ya visto para resolver distintos ejemplos. En el primero, las condiciones iniciales están dadas por

$$C(x, t = 0) = \sin(\pi x)$$

donde  $0 \leq x \leq 1$  y las condiciones de frontera son  $C(x=0,t)=C(x=1,t)=0$ . En este caso, la ecuación de Fourier tiene solución analítica por lo que es posible comparar la solución obtenida con el esquema, con la exacta. La solución analítica, si el coeficiente  $a$  de la ec 2.1 se toma como 1.0 esta dada por

$$C(x,t=0) = \text{sen}(\pi x) \text{EXP} \left[ -\frac{\pi^2}{t} \right]$$

En el esquema, suponiendo  $a=1.0$  se toma  $\Delta x=0.1$  y se prueban dos valores de  $\Delta t$ , 0.001 s y 0.005 s.

En las tablas 2.1 y 2.2 se comparan los valores obtenidos con el esquema con la solución analítica; en la fig 2.3 se pueden ver los resultados para  $\Delta t=0.001$  s. Se puede observar además, que las diferencias máximas son 0.65% y 0.63% respectivamente.

En el siguiente ejemplo las condiciones iniciales están dadas por

$$C(x,t=0) = 2x, \quad 0 \leq x \leq 1/2$$

$$C(x,t=0) = 2(1-x), \quad 1/2 \leq x \leq 1$$

con condiciones de frontera  $C(x=0,t)=C(x=1,t)=0$  y el coeficiente  $a=1.0$ . La ecuación de Fourier para este caso tiene solución analítica por lo que también es posible comparar la solución obtenida con el esquema con la exacta. La solución analítica para  $a=1.0$  es

$$C(x,t) = \frac{8}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \left( \text{sen} \frac{1}{2} n \pi \right) \left( \text{sen} n \pi x \right) \text{EXP} \left[ -n^2 \pi^2 t \right]$$

Se resuelve el esquema para dos valores de  $\Delta t$ , con  $\Delta x=0.1$ . En las tablas 2.3 y 2.4 se comparan los valores obtenidos con el esquema con los de la solución analítica. En la fig 2.4 se representan los resultados para  $\Delta t=0.001$  s.

En este último ejemplo de aplicación se utiliza la función de Gauss. Las condiciones iniciales están dadas por

$$C(x, t = 0) = \text{EXP} \left[ -0.5 \left( \frac{x - x_c}{\sigma_{x0}} \right)^2 \right]$$

donde el dominio de  $x$  es  $0 \leq x \leq 2800$  y las condiciones de frontera al igual que en los ejemplos anteriores es  $C(x=0,t)=C(x=2800,t)=0$

Para la condición inicial de este ejemplo la ecuación de Fourier tiene solución analítica y esta representada por

$$C(x,t) = \frac{\sigma_{x0}}{\sigma} \text{EXP} \left[ -0.5 \left( \frac{x - x_c}{\sigma} \right)^2 \right]$$

donde 
$$\sigma = \sqrt{\sigma_{x0}^2 + a(t)}$$

En la tabla 2.5 se presentan los errores en el valor de pico (en por ciento) para cuatro valores de  $\sigma_{x0}$  y cuatro valores del número de Courant, manteniendo  $a=2.0$ ,  $x_c=6400$ .

Se puede ver que para valores grandes de  $\sigma_{x0}$  y valores pequeños del número de Courant, el error de aproximación es pequeño debido a que se define mejor la gaussiana.

En conclusión, el esquema implícito da resultados muy precisos, es decir, la dispersión numérica es pequeña comparada con la dispersión física. Por tal motivo se escogió un esquema implícito para el desarrollo del modelo de dispersión en dos dimensiones.

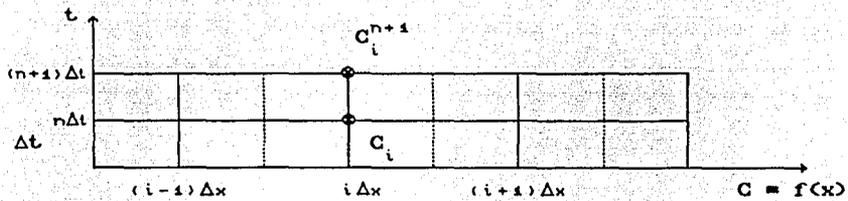


fig 2.1

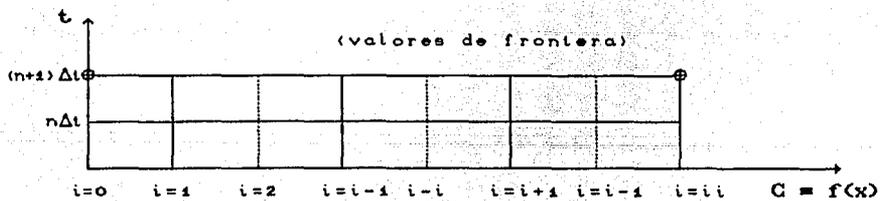


fig 2.2

x (m)	resultado	tiempo en s $\Delta t = 0.001$ s					
		0.005	0.01	0.02	0.05	0.08	0.1
0.1	esquema	0.2949	0.2802	0.2541	0.1894	0.1412	0.1161
	analítico	0.2941	0.2800	0.2537	0.1887	0.1408	0.1152
0.2	esquema	0.5597	0.5380	0.4833	0.3603	0.2686	0.2208
	analítico	0.5595	0.5325	0.4825	0.3600	0.2670	0.2190
0.3	esquema	0.7704	0.7336	0.6652	0.4959	0.3697	0.3040
	analítico	0.7700	0.7330	0.6641	0.4940	0.3673	0.3015
0.4	esquema	0.9056	0.8624	0.7820	0.5830	0.4346	0.3573
	analítico	0.9053	0.8617	0.7807	0.5806	0.4318	0.3545
0.5	esquema	0.9522	0.9068	0.8222	0.6130	0.4570	0.3757
	analítico	0.9518	0.9060	0.8209	0.6105	0.4540	0.3727

tabla 2.1

x (m)	resultado	tiempo en s $\Delta t = 0.005$ s					
		0.005	0.01	0.02	0.05	0.08	0.1
0.1	esquema	0.2949	0.2802	0.2541	0.1894	0.1412	0.1161
	analítico	0.2941	0.2800	0.2537	0.1887	0.1408	0.1152
0.2	esquema	0.5597	0.5380	0.4833	0.3603	0.2686	0.2208
	analítico	0.5595	0.5325	0.4825	0.3600	0.2670	0.2190
0.3	esquema	0.7704	0.7336	0.6652	0.4959	0.3697	0.3039
	analítico	0.7700	0.7330	0.6641	0.4940	0.3673	0.3015
0.4	esquema	0.9056	0.8624	0.7819	0.5829	0.4346	0.3573
	analítico	0.9053	0.8617	0.7807	0.5806	0.4318	0.3545
0.5	esquema	0.9522	0.9067	0.8222	0.6129	0.4569	0.3757
	analítico	0.9518	0.9060	0.8209	0.6105	0.4540	0.3727

tabla 2.2

x (m)	resultado	tiempo en s $\Delta t = 0.001$ s					
		0.005	0.01	0.02	0.05	0.08	0.1
0.1	esquema	0.1999	0.1998	0.1989	0.1535	0.1153	0.0949
	analítico	0.1999	0.1996	0.1935	0.1520	0.1197	0.0939
0.2	esquema	0.3995	0.3959	0.3778	0.2990	0.2194	0.1805
	analítico	0.3998	0.3966	0.3766	0.2899	0.2169	0.1776
0.3	esquema	0.5958	0.5810	0.5371	0.4048	0.3021	0.2484
	analítico	0.5966	0.5799	0.5334	0.4000	0.2977	0.2444
0.4	esquema	0.7722	0.7288	0.6500	0.4774	0.3559	0.2921
	analítico	0.7667	0.7201	0.6418	0.4719	0.3501	0.2879
0.5	esquema	0.8651	0.7904	0.6914	0.5025	0.3736	0.3071
	analítico	0.8404	0.7743	0.6808	0.4959	0.3681	0.3021

tabla 2.3

x (m)	resultado	tiempo en s $\Delta t = 0.005$ s					
		0.005	0.01	0.02	0.05	0.08	0.1
0.1	esquema	0.1999	0.1992	0.1934	0.1536	0.1153	0.0949
	analítico	0.1999	0.1996	0.1935	0.1520	0.1197	0.0939
0.2	esquema	0.3993	0.3959	0.3776	0.2990	0.2194	0.1804
	analítico	0.3998	0.3966	0.3766	0.2899	0.2169	0.1776
0.3	esquema	0.5958	0.5820	0.5375	0.4048	0.3021	0.2484
	analítico	0.5966	0.5799	0.5334	0.4000	0.2977	0.2444
0.4	esquema	0.7757	0.7293	0.6497	0.4773	0.3552	0.2920
	analítico	0.7667	0.7201	0.6418	0.4719	0.3501	0.2879
0.5	esquema	0.8586	0.7879	0.6906	0.5024	0.3735	0.3070
	analítico	0.8404	0.7743	0.6808	0.4959	0.3681	0.3021

tabla 2.4

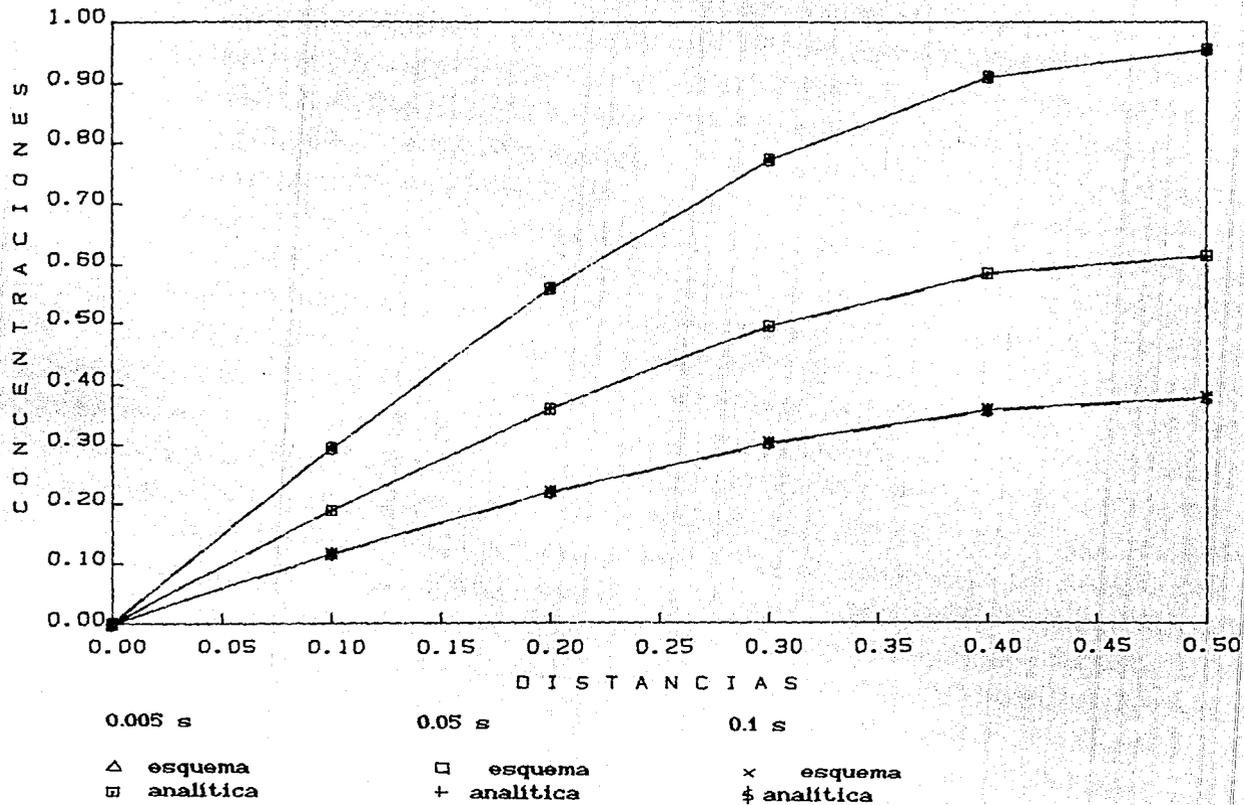


fig 2.3

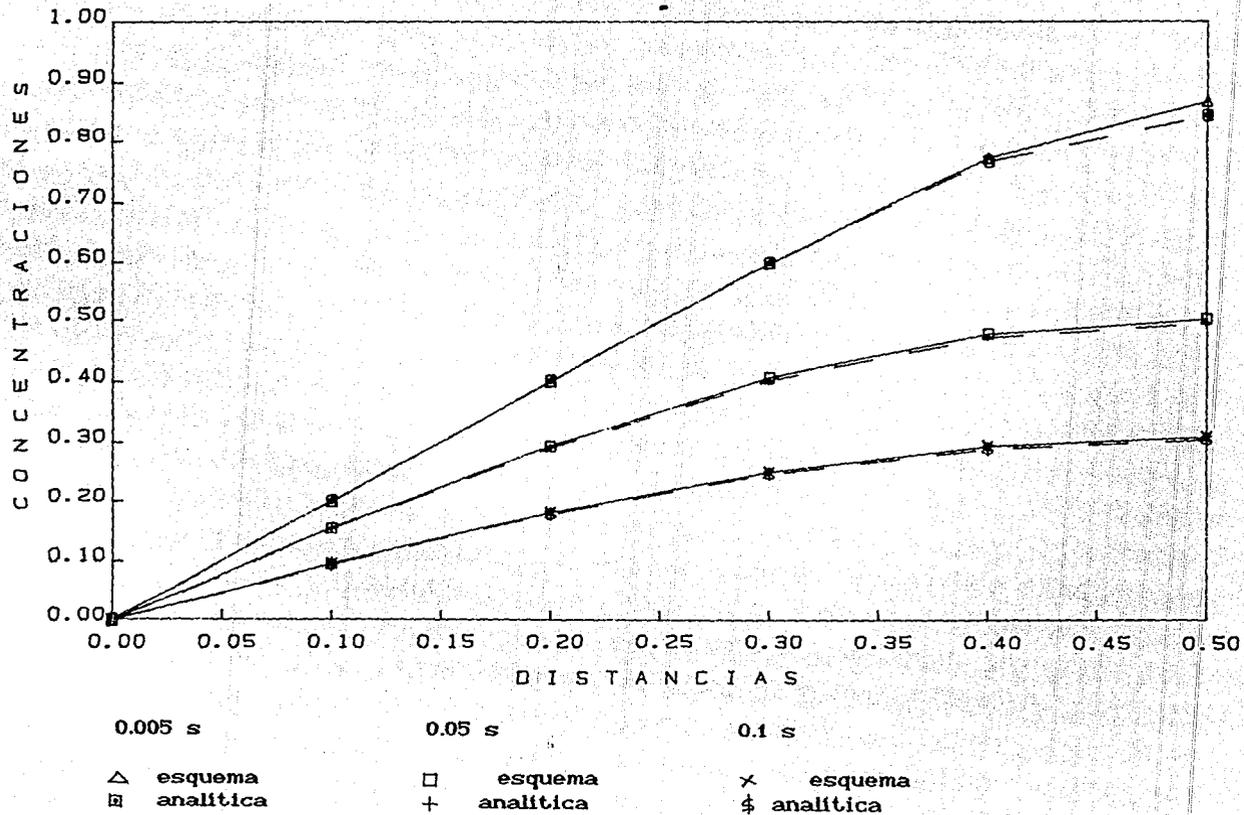


fig 2.4

a= 2	Comparación de los resultados obtenidos del esquema y de la función analítica.			
	ERROR EN POR CIENTO			
( $\sigma_x, r$ )	l=4992 s	l=9984 s	l=10000 s	l=20000 s
200 0.0048	6.07	10.98		
200,0.1			10.44	15.82
200,0.5			11.82	16.79
200,1.0				21.80
264 0.0048	4.57	8.01		
264,0.1			8.04	12.79
264,0.5			8.56	13.24
264,1.0				15.29
400 0.0048	2.52	4.65		
400,0.1			4.66	8.07
400,0.5			4.75	8.18
400,1.0				8.59
600 0.0048	1.26	2.41		
600,0.1			2.41	4.46
600,0.5			2.42	4.47
600,1.0				4.54

tabla 2.5

### **3. DISPERSION EN DOS DIMENSIONES**

#### **3.1 GENERALIDADES**

Una vez que se ha estudiado el comportamiento del esquema seleccionado para resolver la ecuación diferencial de Fourier en una dimensión, se analiza en este capítulo un esquema en diferencias finitas para obtener la solución aproximada de la ecuación de Fourier en dos dimensiones.

Como se mencionó anteriormente, esta ecuación representa la dispersión de una especie contaminante, pero ahora bidimensionalmente a través del tiempo.

La ecuación de Fourier en dos dimensiones es la siguiente:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + b^2 \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (3.1)$$

donde a y b, reales positivos

De acuerdo a lo visto en el cap 2, la ec 3.1 puede representarse con el siguiente esquema en diferencias finitas

$$\frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} = \theta \Lambda C_{i,j}^{n+1} + (1-\theta) \Lambda C_{i,j}^n \quad (3.2)$$

donde  $\theta$  es un factor de peso en el tiempo,  $0 \leq \theta \leq 1$  y el operador  $\Lambda$  sobre la variable C significa

$$\Lambda C_{i,j}^n = \frac{a^2}{\Delta x^2} \left[ C_{i-1,j} - 2C_{i,j} + C_{i+1,j} \right]^n + \frac{b^2}{\Delta y^2} \left[ C_{i,j-1} - 2C_{i,j} + C_{i,j+1} \right]^n \quad (3.3)$$

### 3.2 ANALISIS DE ESTABILIDAD LINEAL DEL ESQUEMA GENERAL DE SOLUCION (EC 3.2)

La variable C puede representarse por una serie de Fourier de la forma

$$C_{i,j}^n = \zeta^n e^{ik(m_1 i \Delta x + m_2 j \Delta y)} \quad (3.4)$$

Si  $\varphi = k(m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)$  la función  $e^{i\varphi}$  se puede representar en un diagrama de Argand como las coordenadas de un punto moviéndose con velocidad angular uniforme, trasladándose a lo largo del eje con velocidad rectilínea uniforme, fig 3.1.

Cuando el punto viaja en la dirección A de la figura en el plano real se ve la función  $\cos\varphi$ , mientras que en la dirección B, en el plano imaginario se ve la función  $\sin\varphi$ ; esto es,  $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$ .

Si se representa la longitud total del dominio en el eje real ( $l = \Delta x$ ) igual con  $l$ , se puede escribir  $m = l/\Delta x$ . En la fig 3.2 se puede ver para diferentes valores de  $k$  la variación de  $\xi$ .

En general, para un dominio de  $n$  puntos, se pueden utilizar  $n$  puntos para pasar la curva resultante por cada uno de los puntos de la malla en un tiempo determinado. Sustituyendo 3.4 en 3.1, para  $\theta = 0$

$$\frac{\xi^{n+1} e^{i(m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)} - \xi^n e^{i(m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)}}{\Delta t} =$$

$$\frac{a^2}{\Delta x^2} \left\{ \xi^n e^{i(m_1 \Delta x + m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)} - 2\xi^n e^{i(m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)} + \xi^n e^{i(m_1 \Delta x - m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)} \right\}$$

$$+ \frac{b^2}{\Delta y^2} \left\{ \xi^n e^{i(m_1 \Delta x + m_2 \Delta y + m_2 j \Delta y)} - 2\xi^n e^{i(m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)} + \xi^n e^{i(m_1 \Delta x - m_2 \Delta y + m_2 j \Delta y)} \right\}$$

factorizando

$$e^{i(m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)} \left\{ \frac{\xi^{n+1} - \xi^n}{\Delta t} \right\} =$$

$$e^{i(m_1 \Delta x + m_2 j \Delta y)} \left\{ \frac{a^2}{\Delta x^2} \left\{ \xi^n e^{-m_1 \Delta x} - 2\xi^n + \xi^n e^{m_1 \Delta x} \right\} + \frac{b^2}{\Delta y^2} \left\{ \xi^n e^{-m_2 \Delta y} - 2\xi^n + \xi^n e^{m_2 \Delta y} \right\} \right\}$$

Dividiendo entre  $e^{i(m_1 \Delta x + m_2 \Delta y)}$

$$\frac{\xi^{n+1} - \xi^n}{\Delta t} = \frac{a^2}{\Delta x^2} \left\{ \xi^n e^{m_1 \Delta x} 2\xi^n + \xi^n e^{-m_1 \Delta x} \right\} + \frac{b^2}{\Delta y^2} \left\{ \xi^n e^{m_2 \Delta y} 2\xi^n + \xi^n e^{-m_2 \Delta y} \right\}$$

$$\xi^{n+1} - \xi^n = \left[ \frac{a^2}{\Delta x^2} \left\{ e^{m_1 \Delta x} + e^{-m_1 \Delta x} - 2 \right\} + \frac{b^2}{\Delta y^2} \left\{ e^{m_2 \Delta y} + e^{-m_2 \Delta y} - 2 \right\} \right] \Delta t \xi^n$$

Se sabe que  $e^{m \Delta x} - e^{-m \Delta x} = 2 \operatorname{sen} m \Delta x$

tambi3n que  $e^{m \Delta x} + e^{-m \Delta x} = 2 \cos m \Delta x$

Sustituyendo

$$\xi^{n+1} - \xi^n = \left\{ \frac{a^2}{\Delta x^2} \left[ 2 \cos m_1 \Delta x - 2 \right] + \frac{b^2}{\Delta y^2} \left[ 2 \cos m_2 \Delta y - 2 \right] \right\} \Delta t \xi^n$$

factorizando (-2)

$$\xi^{n+1} - \xi^n = - \left\{ \frac{2a^2}{\Delta x^2} \left[ 1 - \cos m_1 \Delta x \right] + \frac{2b^2}{\Delta y^2} \left[ 1 - \cos m_2 \Delta y \right] \right\} \Delta t \xi^n$$

Si se define

$$\psi = - \left\{ \frac{2a^2}{\Delta x^2} \left[ 1 - \cos m_1 \Delta x \right] + \frac{2b^2}{\Delta y^2} \left[ 1 - \cos m_2 \Delta y \right] \right\} \Delta t \quad (3.5)$$

Entonces

$$\xi^{n+1} - \xi^n = \psi \xi^n$$

Generalizando, para cualquier valor de  $\theta$ , se puede demostrar que

$$\xi^{n+1} - \xi^n = \theta \psi \xi^{n+1} + (1-\theta) \psi \xi^n$$

El factor de amplificación  $A$  esta dado por

$$\xi^{n+1} - \theta \psi \xi^{n+1} = \xi^n + (1-\theta) \psi \xi^n$$

$$\xi^{n+1} (1-\theta \psi) = \xi^n [1+(1-\theta) \psi]$$

$$\xi^{n+1} = \frac{(1+(1-\theta) \psi)}{(1-\theta \psi)} \xi^n$$

Si se define

$$A = \frac{(1+(1-\theta) \psi)}{(1-\theta \psi)} \quad (3.6)$$

entonces

$$\xi^{n+1} = A \xi^n$$

Para saber si  $A$  toma el valor de la unidad se necesita conocer el rango de  $\psi$ .

Derivando parcialmente la ec 3.5 e igualando a cero sus derivadas para encontrar los valores máximos y mínimos se tiene que

$$\frac{\partial \psi}{\partial (m_1 \Delta x)} = \frac{\partial \psi}{\partial (m_2 \Delta y)} = 0$$

entonces

$$\frac{\partial \psi}{\partial (m_1 \Delta x)} = - \frac{\partial (2a^2 / \Delta x^2 (1 - \cos m_1 \Delta x) + 2b^2 / \Delta y^2 (1 - \cos m_2 \Delta y))}{\partial (m_1 \Delta x)}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial (m_1 \Delta x)} = - \frac{2 a^2}{\Delta x^2} \text{sen } m_1 \Delta x$$

análogamente

$$\frac{\partial \psi}{\partial (m_2 \Delta y)} = - \frac{2 b^2}{\Delta y^2} \text{sen } m_2 \Delta y$$

igualando las derivadas a 0

$$\text{sen } m_1 \Delta x = \text{sen } m_2 \Delta y = 0$$

por lo que  $m_1 \Delta x = m_2 \Delta y = 0, \pi, 2\pi, \dots$ , y entonces

$$\text{cos } m_1 \Delta x = \text{cos } m_2 \Delta y = \pm 1$$

Sustituyendo en 3.5  $\text{cos } m_1 \Delta x = \text{cos } m_2 \Delta y = + 1$

resulta

$$\psi = - \left[ \frac{2a^2}{\Delta x^2} (1-1) + \frac{2b^2}{\Delta y^2} (1-1) \right] \Delta t$$

$$\psi = 0$$

si se sustituye en 3.5  $\cos \Delta x_1 = \cos \Delta y_2 = -1$

resulta

$$\psi = - \left[ \frac{2a^2}{\Delta x^2} (1+1) + \frac{2b^2}{\Delta y^2} (1+1) \right] \Delta t$$

$$\psi = - \left[ \frac{4a^2}{\Delta x^2} + \frac{4b^2}{\Delta y^2} \right] \Delta t$$

por lo que

$$-4 \left[ \frac{a^2 \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{b^2 \Delta t}{\Delta y^2} \right] \leq \psi \leq 0 \quad (3.7)$$

como la suma dentro del paréntesis es siempre positiva,  $\psi \leq 0$

En la ec 3.6, si  $\theta \geq 1/2$  y se sustituye valores de  $\psi$  negativos, se obtiene que  $-1 < A \leq -1$ .

Si  $0 \leq \theta < 1/2$  la condición de von Newman  $|A| \leq 1$  queda  $A \geq -1$  sustituyendo el valor de esta desigualdad en la ec 3.6 se tiene

$$\frac{1+(1-\theta)\psi}{1-\theta\psi} \geq -1$$

$$1+(1-\theta)\psi \geq \theta\psi - 1$$

$$1+\psi - \theta\psi - \theta\psi + 1 \geq 0$$

simplificando

$$2+\psi(1-2\theta) \geq 0$$

despejando se tiene que

$$\psi \geq \frac{-2}{1-2\theta}$$

sustituyendo en 3.7 se tiene que

$$-4 \left( \frac{a^2 \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{b^2 \Delta t}{\Delta y^2} \right) \geq \frac{-2}{1-2\theta}$$

$$\left( \frac{a^2 \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{b^2 \Delta t}{\Delta y^2} \right) \leq \frac{2}{4(1-2\theta)}$$

$$\left[ \frac{a^2 \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{b^2 \Delta t}{\Delta y^2} \right] \leq \frac{1}{(2-4\theta)} \quad 0 \leq \theta < 1/2$$

Se puede calcular el error de truncado que es  $\mathcal{O}(\Delta t, \Delta x^2, \Delta y^2)$ ; y si  $\theta = 1/2$  es  $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^2, \Delta y^2)$ , se puede demostrar al mismo tiempo la consistencia incondicional, ver ref 4.

En el caso de  $\theta = 0$ , la ec 3.2 se reduce a un esquema explícito con un molde de 5 puntos en la malla, ver fig 3.3; si  $a^2 = b^2$  y se escoge  $\Delta x = \Delta y = \Delta s$ , en el límite de estabilidad se tiene

$$\left[ \frac{a^2 \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{b^2 \Delta t}{\Delta y^2} \right] \leq \frac{1}{(2-0)} \quad \theta = 0$$

$$2 \frac{a^2 \Delta t}{\Delta s^2} = 1/2$$

$$\frac{a^2 \Delta t}{\Delta s^2} = 1/4$$

y se puede ver que la ec 3.2 se reduce a

$$\frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{a^2}{\Delta s^2} \left[ C_{i-1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i+1,j}^n \right] + \frac{a^2}{\Delta s^2} \left[ C_{i,j-1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j+1}^n \right]$$

$$C_{i,j}^{n+1} = 1/4 \left[ C_{i-1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i+1,j}^n + C_{i,j-1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j+1}^n + 4C_{i,j}^n \right]$$

$$C_{i,j}^{n+1} = 1/4 \left[ C_{i-1,j}^n + C_{i+1,j}^n + C_{i,j-1}^n + C_{i,j+1}^n \right]$$

el cual se puede representar como

$$C_{i,j}^{n+1} = 1/4 \begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & & 1 \\ & 1 & \end{bmatrix} C_{i,j}^n$$

para cuando  $\theta > 0$  se tiene un esquema implícito.

### 3.3 METODO DE DIRECCIONES ALTERNANTES

Considérese un esquema de tres niveles en el tiempo como el que se muestra a continuación

$$\frac{C_i^{n+1/2} - C_j^n}{\Delta t} = 1/2 \left[ \Lambda_1 C_i^{n+1/2} + \Lambda_2 C_j^n \right] \quad (3.8)$$

$$\frac{C_j^{n+1} - C_i^{n+1/2}}{\Delta t} = 1/2 \left[ \Lambda_1 C_i^{n+1/2} + \Lambda_2 C_j^{n+1} \right] \quad (3.9)$$

con los operadores  $\Lambda_1$  y  $\Lambda_2$ , sobre C definidos como

$$\Lambda_1 C^n = \frac{C_{i-1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} \quad \Lambda_2 C^n = \frac{C_{i,j-1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j+1}^n}{\Delta y^2}$$

Este esquema tiene las siguientes ventajas: en la ec 3.2 para  $\theta > 0$ , aparecen cinco incógnitas por nudo; en el esquema propuesto se tienen tres incógnitas en la ec 3.8 y tres en la 3.9 pero que se resuelven separadamente. Se ha comprobado que es más económico resolver 3 sistemas tridiagonales que uno con cinco diagonales.

La diferencia entre este esquema y el de la ec 3.2 es un término de segundo orden  $\Delta t^2$  que se obtiene a continuación

Trabajando con la ec 3.8 se tiene

$$C_i^{n+1/2} - C_j^n = \frac{\Delta t}{2} \left[ \Lambda_1 C_i^{n+1/2} + \Lambda_2 C_j^n \right]$$

factorizando términos

$$\left[ 1 - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_1 \right] C_i^{n+1/2} - \left[ 1 + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_2 \right] C_j^n = 0$$

si se define

$$A_1 = 1 - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_1 \quad B_1 = 1 + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_2$$

se tiene

$$A_1 C_i^{n+1/2} - B_1 C_j^n = 0 \quad (3.10)$$

Análogamente, trabajando con la ec 3.9

$$A_2 C_j^{n+1} - B_2 C_i^{n+1/2} = 0 \quad (3.11)$$

multiplicando 3.10 por  $B_2$  y 3.11 por  $A_1$

$$B_2 A_1 C_i^{n+1/2} - B_2 B_1 C_j^n = 0$$

$$A_1 A_2 C_j^{n+1} - A_1 B_2 C_i^{n+1/2} = 0$$

Sumando las ecuaciones

$$\left[ B_2 A_1 - A_1 B_2 \right] C_i^{n+1/2} + A_1 A_2 C_j^{n+1} - B_2 B_1 C_j^n = 0$$

es claro que

$$B_2 A_1 = A_1 B_2$$

por lo que se tiene un esquema de dos niveles

$$A_1 A_2 C_j^{n+1} - B_2 B_1 C_j^n = 0$$

sustituyendo los operadores originales

$$\left\{ \left[ 1 - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_1 \right] \left[ 1 - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_2 \right] \right\} C_j^{n+1} - \left\{ \left[ 1 + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_1 \right] \left[ 1 + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_2 \right] \right\} C_j^n = 0$$

desarrollando

$$\left[ 1 - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_2 - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_1 + \frac{\Delta t^2}{4} \Lambda_1 \Lambda_2 \right] C_j^{n+1} - \left[ 1 + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_2 + \frac{\Delta t}{2} \Lambda_1 + \frac{\Delta t^2}{4} \Lambda_1 \Lambda_2 \right] C_j^n = 0$$

factorizando

$$C_j^{n+1} - C_j^n - \frac{\Delta t}{2} (\Lambda_1 + \Lambda_2) (C_j^{n+1} + C_j^n) + \frac{\Delta t^2}{4} (\Lambda_1 \Lambda_2) (C_j^{n+1} - C_j^n) = 0$$

$$C_j^{n+1} - C_j^n - \frac{\Delta t}{2} (\Lambda_1 + \Lambda_2) (C_j^{n+1} + C_j^n) = - \frac{\Delta t^2}{4} (\Lambda_1 \Lambda_2) (C_j^{n+1} - C_j^n)$$

dividiendo entre  $\Delta t$

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} - \frac{\Lambda_1 + \Lambda_2}{2} (C_j^{n+1} + C_j^n) = - \frac{\Delta t}{4} (\Lambda_1 \Lambda_2) \frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t}$$

El término de la derecha es de orden  $\Delta t^2$ , además el producto  $\Lambda_1 \Lambda_2$  equivale a

$$\Lambda_1 \Lambda_2 \approx \left[ \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right]_i \left[ \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right]_j$$

que es un número pequeño comparado con los términos de la ec 3.1; luego entonces se puede despreciar dicho término y se tendrá finalmente

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} = \frac{\Lambda_2 + \Lambda_1}{2} (C_j^{n+1} + C_j^n)$$

$$\text{si } \Lambda = \Lambda_1 + \Lambda_2$$

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} = \frac{\Lambda}{2} [C_j^{n+1} + C_j^n]$$

por lo que para toda  $i$  se tiene

$$\frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} = 1/2 \Lambda C_{i,j}^{n+1} + 1/2 \Lambda C_{i,j}^n$$

que es la ec 3.2 con  $\theta = 1/2$ .

Para resolver el esquema se procede como sigue. Se utiliza el método de doble barrido en la dirección  $x$ , para calcular  $C^{n+1/2}$  para toda  $i$  donde  $C_{i,j}^n$  son conocidos (datos iniciales) en la ec 3.8 y después se resuelve la ec 3.9 desde  $(n+1/2)\Delta t$  hasta  $(n+1)\Delta t$  por doble barrido en la dirección  $y$  para calcular  $C^{n+1}$  para toda  $j$  donde  $C^{n+1/2}$  ya es conocido.

### 3.4 CONDICIONES DE FRONTERA

El manejo de las condiciones de frontera requiere cuidado, dado que estas son determinantes en los resultados. Muchas veces en problemas reales se tratan de imponer condiciones que originan que el esquema utilizado no proporcione los resultados correctos.

Casi siempre se eligen valores en la frontera de zonas que se encuentran alejadas del problema, porque en el mejor de los casos se sabe que no tienen influencia.

En definitiva, es claro que la mejor información será aquella que se origine en base a un mayor número de datos. La información calculada para intervalos pequeños de tiempo, conducirá a la obtención de mejores resultados.

Para tener un concepto más claro de la importancia que se le debe dar al manejo de las condiciones de frontera en los esquemas en diferencias finitas, se mostrarán en el subcapítulo siguiente algunos casos en los que se puede observar, como estas condiciones influyen en la precisión de los resultados obtenidos.

El esquema presentado en la fig 3.4 muestra el funcionamiento del modelo matemático que se elaboró para resolver el esquema descrito por las ecs 3.8 y 3.9.

### 3.4.1 Fronteras de flujo

El manejo correcto de las condiciones de frontera para el esquema es el siguiente:

Es necesario contar con las concentraciones en el tiempo  $t=n\Delta t$  (datos iniciales)  $C_{i,j}^n$  para toda  $i$  y para toda  $j$ . Cuando se efectúa el barrido en dirección del eje  $x$  se requiere como condición de frontera las concentraciones en el tiempo  $t=(n+1/2)\Delta t$  en las fronteras izquierda y derecha de la malla, esto es,  $C_{i,j}^{n+1/2}$ ,  $C_{i+1,j}^{n+1/2}$  para toda  $j$ ; las concentraciones calculadas con la ec 3.8 serán las representativas del tiempo  $t=(n+1/2)\Delta t$ , o sea  $C_{i,j}^{n+1/2}$  para toda  $i$  y para toda  $j$ .

Para el barrido en la dirección del eje  $y$  con las concentraciones calculadas anteriormente  $C_{i,j}^{n+1/2}$  para toda  $i$  y para toda  $j$ , se requieren los valores de frontera de las concentraciones calculadas en el tiempo  $t=(n+1)\Delta t$  en las fronteras superior e inferior de la malla, esto es,  $C_{i,i}^{n+1}$ ,  $C_{i,j+1}^{n+1}$  para toda  $i$  y las concentraciones obtenidas con la ec 3.9 serán las del tiempo  $t=(n+1)\Delta t$ ,  $C_{i,j}^{n+1}$  para toda  $i$  y para toda  $j$ .

### 3.4.2 Fronteras impermeables

El manejo de este tipo de frontera requiere de mucho cuidado, ya que se tienen que hacer ciertas consideraciones que resultan difíciles de modelar matemáticamente.

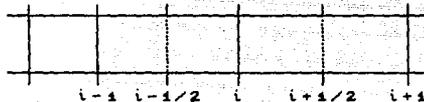
Sea la ecuación diferencial para difusión pura

$$h \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( h k_{11} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \left( h k_{12} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( h k_{21} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \left( h k_{22} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right]$$

si se desprecian, para facilitar el álgebra las difusividades cruzadas se tiene que

$$h \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ h k_{11} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ h k_{22} \frac{\partial C}{\partial y} \right] \quad (3.12)$$

Considérese la siguiente malla, en donde  $\Delta x \neq cte.$



entonces, aplicando un operador incremental a un elemento de la ec 3.12

$$\Delta_1^* h K C^n = \frac{\partial}{\partial x} h K \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\left[ h k \right]_{i+1/2} \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i+1/2} - \left[ h k \right]_{i-1/2} \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i-1/2}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}}$$

Además

$$\left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i+1/2} = \frac{C_{i+1} - C_i}{x_{i+1} - x_i} \quad \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i-1/2} = \frac{C_i - C_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

Sustituyendo

$$\Delta_1^* h K C^n = \frac{1}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \left[ (hk)_{i+1/2} \frac{C_{i+1} - C_i}{x_{i+1} - x_i} - (hk)_{i+1/2} \frac{C_i - C_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right] \quad (3.13)$$

De la malla se obtiene

$$x_{i+1/2} = \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \qquad x_{i-1/2} = \frac{x_i + x_{i-1}}{2}$$

De igual manera para las profundidades los coeficientes de dispersión

$$h_{i+1/2} = \frac{h_{i+1} + h_i}{2} \qquad h_{i-1/2} = \frac{h_i + h_{i-1}}{2}$$

$$K_{i+1/2} = \frac{K_{i+1} + K_i}{2} \qquad K_{i-1/2} = \frac{K_i + K_{i-1}}{2}$$

si se definen

$$h^+ = h_{i+1/2} \qquad K^+ = K_{i+1/2}$$

$$h^- = h_{i-1/2} \qquad K^- = K_{i-1/2}$$

y se sustituyen en la ec 3.13

$$\Delta_1^* h K C^n = \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \left[ h_i^+ k_i^+ \frac{C_{i+1} - C_i}{x_{i+1} - x_i} - h_i^- k_i^- \frac{C_i - C_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right]$$

analogamente, en la dirección y

$$\Delta_z^* h K C^n = \frac{2}{y_{j+1} - y_{j-1}} \left[ h_j^+ k_j^+ \frac{C_{j+1}^n - C_j^n}{y_{j+1} - y_j} - h_j^- k_j^- \frac{C_j^n - C_{j-1}^n}{y_j - y_{j-1}} \right]$$

Sustituyendo en la ec 3.8

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^{n+1/2} - C_{i,j}^n}{\Delta t} = & \frac{1}{2} \left[ \frac{2}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} \left[ h_{i+1,j}^+ k_{i+1,j}^+ \frac{C_{i+1,j}^{n+1/2} - C_{i,j}^{n+1/2}}{x_{i+1,j} - x_{i,j}} - h_{i,j}^- k_{i,j}^- \frac{C_{i,j}^{n+1/2} - C_{i-1,j}^{n+1/2}}{x_{i,j} - x_{i-1,j}} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{2}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} \left[ h_{i,j+1}^+ k_{i,j+1}^+ \frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{y_{i,j+1} - y_{i,j}} - h_{i,j}^- k_{i,j}^- \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{y_{i,j} - y_{i,j-1}} \right] \right] \end{aligned}$$

Simplificando y agrupando términos

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{n+1/2} - C_{i,j}^n = & \frac{\Delta t}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} \left[ h_{i+1,j}^+ k_{i+1,j}^+ \frac{C_{i+1,j}^{n+1/2} - C_{i,j}^{n+1/2}}{x_{i+1,j} - x_{i,j}} - h_{i,j}^- k_{i,j}^- \frac{C_{i,j}^{n+1/2} - C_{i-1,j}^{n+1/2}}{x_{i,j} - x_{i-1,j}} \right] = \\ & \frac{\Delta t}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} \left[ h_{i,j+1}^+ k_{i,j+1}^+ \frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{y_{i,j+1} - y_{i,j}} - h_{i,j}^- k_{i,j}^- \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{y_{i,j} - y_{i,j-1}} \right] \quad (3.14) \end{aligned}$$

Si se definen las siguientes variables

$$r_{x_{i,j}}^+ = \frac{h_{i+1,j}^+ k_{i+1,j}^+ \Delta t}{x_{i+1,j} - x_{i,j}}$$

$$r_{x_{i-1,j}}^- = \frac{h_{i,j}^- k_{i,j}^- \Delta t}{x_{i,j} - x_{i-1,j}}$$

$$r_{y_{i,j}}^+ = \frac{h_{i,j+1}^+ k_{i,j+1}^+ \Delta t}{y_{i,j+1} - y_{i,j}}$$

$$r_{y_{i,j-1}}^- = \frac{h_{i,j}^- k_{i,j}^- \Delta t}{y_{i,j} - y_{i,j-1}}$$

y utilizando operadores, la ec 3.14 estará representada por

$$\frac{-r_{x_{i-1,j}}}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} \left[ 1 + \frac{r_{x_{i,j}} + r_{x_{i-1,j}}}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} \right] \frac{-r_{x_{i,j}}}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} C_{i,j}^{n+1/2} =$$

$$\frac{r_{y_{i,j-1}}}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} \left[ 1 - \frac{r_{y_{i,j}} + r_{y_{i,j-1}}}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} \right] \frac{r_{y_{i,j}}}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} C_{i,j}^n \quad (3.15)$$

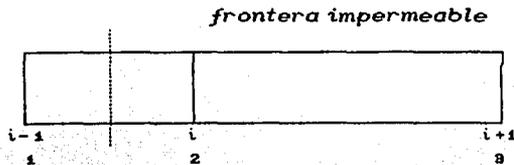
Con esto se ha llegado a representar a la ecuación diferencial de difusión pura por medio de diferencias finitas, despreciando los términos cruzados, para una malla irregular.

De acuerdo a la ley de Fick, la condición de flujo en la frontera impermeable es

$$q = -D \frac{\partial C}{\partial x} = 0$$

es decir, no existe gradiente de la concentración entre un punto y otro de la malla.

La ec 3.15 es de la forma general, por lo que el análisis de frontera impermeable solamente se hace para cuando la frontera está a la izquierda de la malla



Para que en la frontera el gradiente sea cero, se requiere por tanto que  $C_{i,j}^{n+1/2} = C_{i-1,j}^{n+1/2}$ ; la ec 3.14 resulta

$$C_{i,j}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} \left[ h_i^+ k_i^+ \frac{C_{i+1,j}^{n+1/2} - C_{i,j}^{n+1/2}}{x_{i+1,j} - x_{i,j}} - 0 \right] =$$

$$\frac{\Delta t}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} \left[ h_j^+ k_j^+ \frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{y_{i,j+1} - y_{i,j}} - h_j^- k_j^- \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{y_{i,j} - y_{i,j-1}} \right]$$

Definiendo los coeficientes de igual manera que para la ec 3.14 y escribiendo la ecuación anterior en forma de operadores se tiene

$$\left[ 1 + \frac{rx_{i,j} + rx_{i-1,j}}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} \right] \frac{-rx_{i,j}}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} C_{i,j}^{n+1/2} =$$

$$\frac{ry_{i,j-1}}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} \left[ 1 - \frac{ry_{i,j} + ry_{i,j-1}}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} \right] \frac{ry_{i,j}}{y_{i,j+1} - y_{i,j-1}} C_{i,j}^n \quad (3.16)$$

Comparando la ec 3.15 con la 3.16 se puede ver que el término de la izquierda del primer miembro de la ec 3.15 se anula y además en la diagonal principal no participa.

De esta manera, se puede generalizar el análisis de condiciones de frontera impermeable de la siguiente manera:

1. Cuando la frontera está a la izquierda de la malla, desaparece el coeficiente de la diagonal inferior, y no participa en el coeficiente de la diagonal principal, de la misma manera se trabaja cuando la frontera se localiza en la parte derecha de la malla.

2. Si la frontera se encuentra arriba o abajo, se puede aplicar el análisis anterior de la misma forma.

### 3.5 PRUEBAS DEL ESQUEMA

Se llevaron a cabo cuatro pruebas con el esquema propuesto en el subcap 3.3, las cuales son:

a) Gaussiana en dirección  $x$ , sobre una malla de  $15 \times 3$  nudos, fig 3.5

Los datos iniciales se generaron con una función de Gauss, con  $x_c=1400$  y  $\sigma_x=264$ ;  $a=2.0$  y  $\Delta x=200$  m.

Las concentraciones en la dirección  $y$ , para  $i=1$  e  $i=15$  se suponen iguales a cero como condición de frontera, en particular para  $t=(n+1/2)\Delta t$ , ver fig 3.5.

Para el barrido en  $y$  se necesita la función valuada para  $t=(n+1)\Delta t$  en  $j=1$  y  $j=3$ .

En la fig 3.6 se dibujó el perfil de la Gaussiana para  $j=2$  calculada en forma analítica y con el esquema para un incremento de tiempo  $\Delta t=20000$  s y un tiempo máximo de 20000 s. El error en el valor de pico es de 7.64%

b) Gaussiana en dirección  $y$  sobre una malla de  $3 \times 15$ , fig 3.7

Sobre las fronteras  $j=1$  y  $j=15$  se impusieron concentraciones nulas ver fig 3.7. Para el barrido en  $x$  se genera en  $i=1$  e  $i=3$ , para todas las  $j$ , la Gaussiana en el tiempo  $t=(n+1/2)\Delta t$ .

En la fig 3.8 se muestra un corte de la función gaussiana en  $i=2$ , para todas las  $j$ , construida con el esquema y un corte de la generada analíticamente, para el mismo  $\Delta t$  y tiempo máximo que en el caso del inciso anterior. El error en el valor de pico es de 4.66%

Si se observan las figs 3.5 y 3.7 se puede ver que la 3.7 es una rotación de la 3.5.

Los resultados obtenidos en este inciso son mejores que los calculados en (a), ya que para un  $\Delta t$  la información que se toma como condición de frontera en  $i=1$  e  $i=3$  es la función analítica evaluada en el tiempo  $t=(n+1/2)\Delta t$ ; mientras que en (a), para el mismo tiempo  $t=(n+1/2)\Delta t$ , los valores en la frontera son nulos; es decir, no se proporciona información adicional al cálculo, mientras que en el inciso (b), sí se hace. Sin embargo, cuando se hacen nn iteraciones en el tiempo, las concentraciones de pico tienden a un mismo valor. Si tomamos  $\Delta t=10000$  s hasta un tiempo máximo de 20000 s en ambos casos se obtienen las siguientes concentraciones de pico:

#### ERRORES A 20000 s

	FUNCION ANALITICA 0.7971	$\Delta t=20000$ s	FUNCION ANALITICA 0.7971	$\Delta t=10000$ s
Ejemplo a)	0.7362	7.64%	0.7479	6.17%
Ejemplo b)	0.7600	4.66%	0.7526	5.58%

En conclusión, si se hacen muchas iteraciones en el tiempo, no importa la orientación de la malla, siempre y cuando se proporcionen las condiciones de frontera en forma correcta.

c) Gaussiana generada en dirección del eje  $x$  sobre una malla de  $15 \times 11$ .

Las condiciones iniciales y de frontera son iguales que para el inciso (a), en este caso, en la concentración de pico se tienen, para un tiempo máximo de 20000 s, errores de 15.23 % y 13.21 %, para  $j=8$ , con  $\Delta t=20000$  s y 10000 s respectivamente. Como se ve, los errores son mayores que los del inciso (a). Esto es debido a que en este inciso, las fronteras están alejadas y dan menos información que en el inciso (a); los resultados tienden a los obtenidos en el cap 2.

d) Gaussiana en dos dimensiones, generada en dos direcciones sobre una malla de  $15 \times 15$ .

La distribución de la concentración inicial esta dada por

$$C(x, t=0) = \text{EXP} \left[ -0.5 \left[ \left( \frac{x - x_c}{\sigma_{x0}} \right)^2 + \left( \frac{y - y_c}{\sigma_{y0}} \right)^2 \right] \right]$$

Los datos son los siguientes:  $\Delta t=10000$  s,  $\Delta x=200$  m,  $\Delta y=200$  m;  $t_{max}=10000$  s;  $x_c=1400$  m,  $y_c=1400$  m;  $a=2$ ,  $b=2$ . Se hicieron dos simulaciones; una con  $\sigma_x=600$  y otra con  $\sigma_x=264$ ;  $\sigma_y=600$  en ambos casos.

En la fig 3.9 se muestran los valores calculados con el esquema comparados con la solución analítica. Como  $\sigma_x=\sigma_y=600$  se muestra solo un cuadrante en planta pues la función es simétrica. El error de pico para este caso es de 4.78 %

Para el caso  $\sigma_x=264$ , el error de pico es de 10.78 %, en la fig 3.10 se muestra un cuadrante para observar los resultados.

imaginario

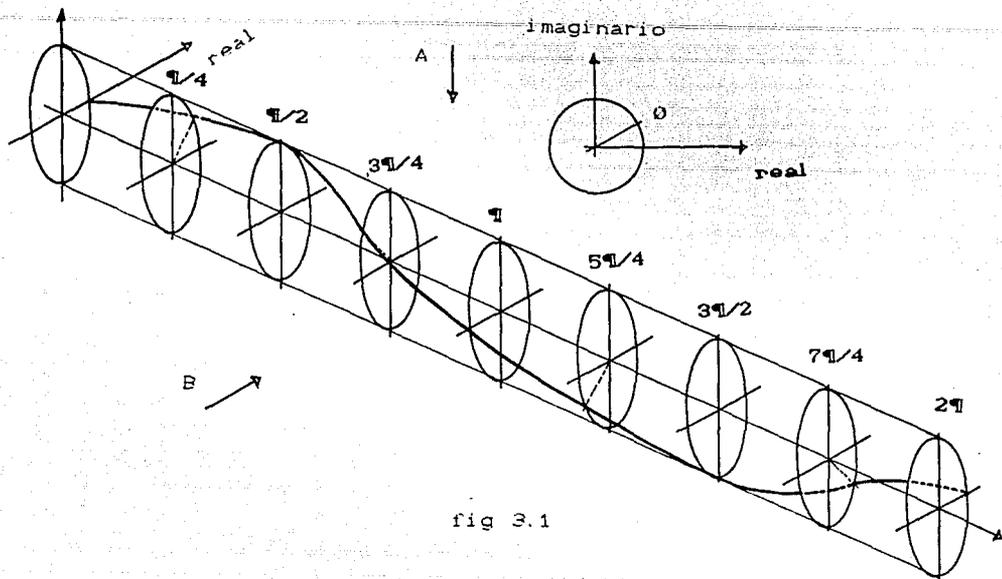


fig 3.1

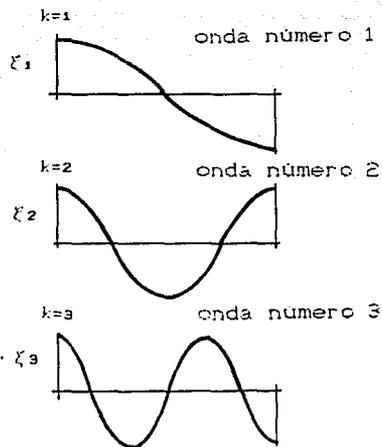


fig 3.2

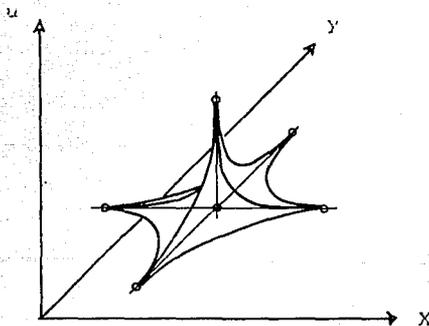
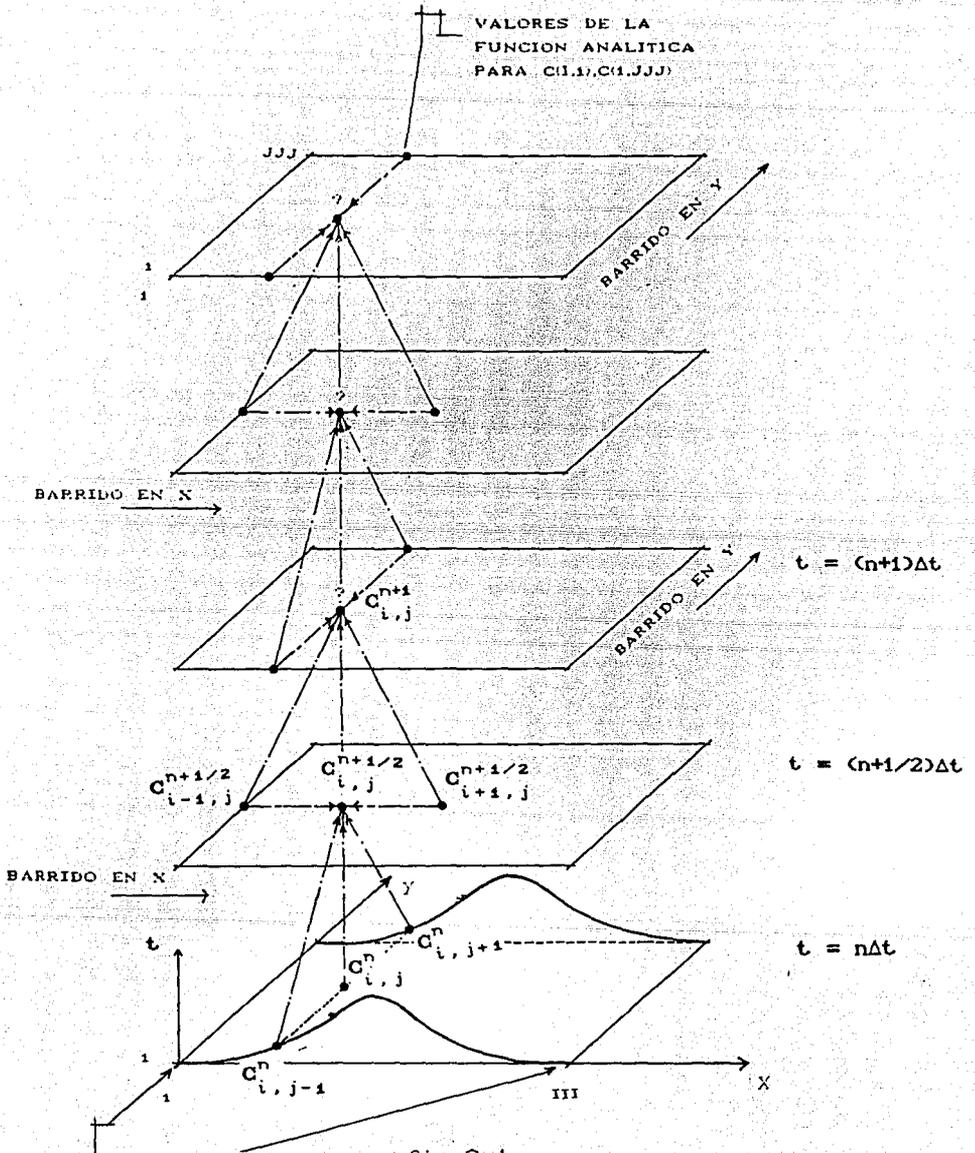


fig 3.3



CONDICION DE  
FRONTERA  $C(I,J)=C(III,J)=0$

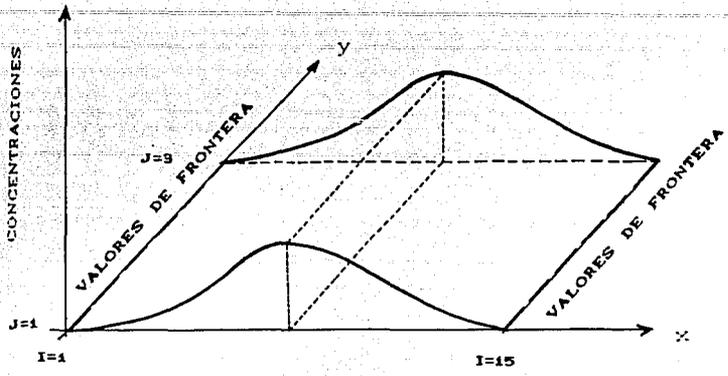
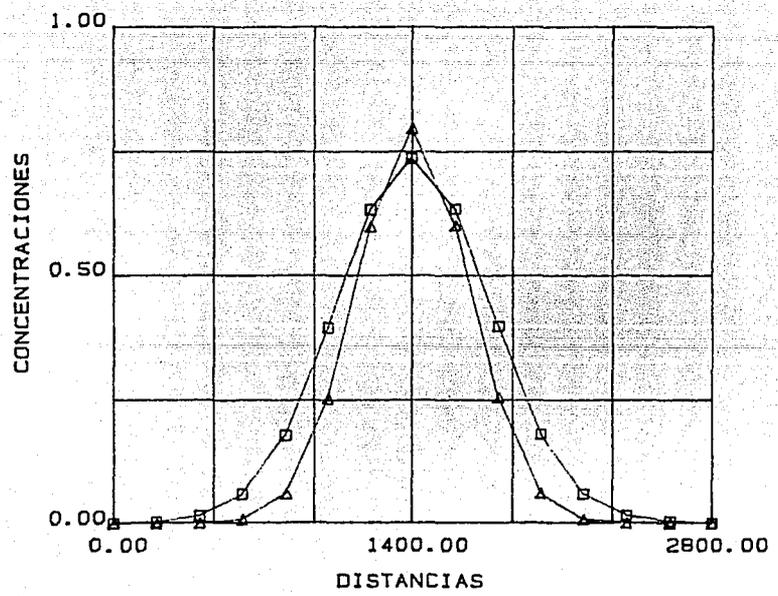


fig 3.5



□ ESQUEMA      fig 3.6  
 + ANALITICO

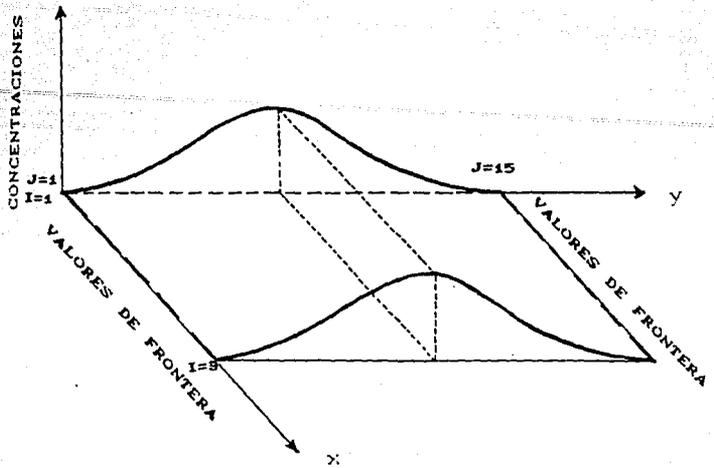


fig 3.7

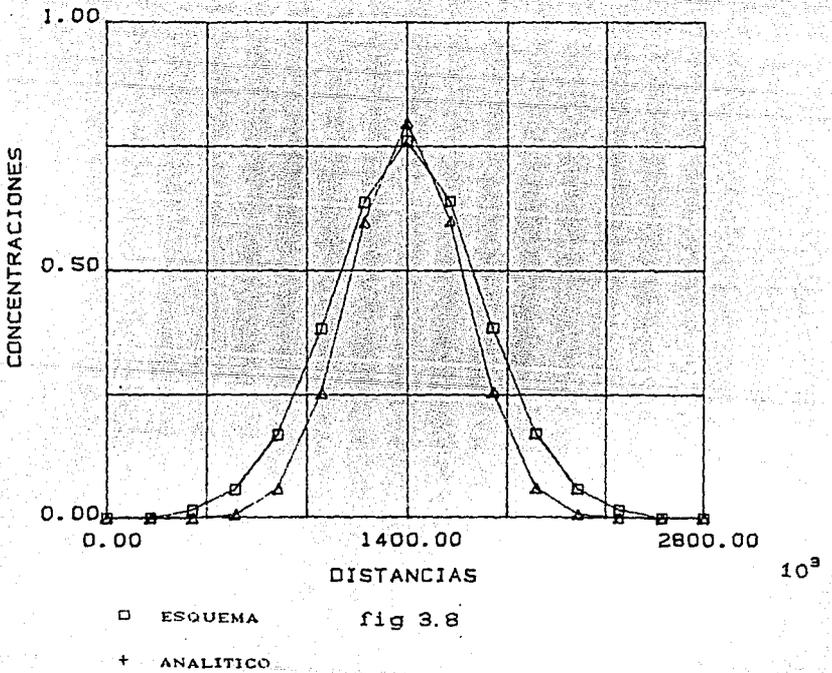


fig 3.8

8	0.0000	0.1246	0.2585	0.4095	0.5741	0.7879	0.8578	0.9020
	0.0000	0.4424	0.2541	0.4081	0.5899	0.7675	0.8987	0.9478
7	0.0000	0.1185	0.2410	0.3898	0.5460	0.7017	0.8158	0.8578
	0.0000	0.3851	0.2411	0.3872	0.5596	0.7281	0.8527	0.8987
6	0.0000	0.1019	0.2078	0.3801	0.4696	0.6056	0.7017	0.7879
	0.0000	0.1154	0.2058	0.3906	0.4779	0.6218	0.7281	0.7675
5	0.0000	0.0798	0.1618	0.2568	0.3654	0.4696	0.5460	0.5741
	0.0000	0.0887	0.1582	0.2541	0.3678	0.4779	0.5596	0.5899
4	0.0000	0.0557	0.1184	0.1805	0.2568	0.3801	0.3898	0.4095
	0.0000	0.0618	0.1094	0.1758	0.2541	0.3906	0.3872	0.4081
3	0.0000	0.0350	0.0712	0.1134	0.1618	0.2078	0.2410	0.2585
	0.0000	0.0382	0.0681	0.1094	0.1582	0.2058	0.2411	0.2541
2	0.0000	0.0172	0.0350	0.0557	0.0798	0.1019	0.1185	0.1246
	0.0000	0.0214	0.0382	0.0618	0.0887	0.1154	0.1351	0.1424
1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	1	2	3	4	5	6	7	8

ESQUEMA  
ANALITICA

fig 3.9

8	0.0000	0.0016	0.0089	0.0405	0.1426	0.3606	0.6380	0.7654
	0.0000	0.0002	0.0082	0.0242	0.1159	0.3516	0.6864	0.8579
7	0.0000	0.0015	0.0084	0.0386	0.1356	0.3490	0.6028	0.7280
	0.0000	0.0002	0.0090	0.0229	0.1094	0.3396	0.6518	0.8199
6	0.0000	0.0013	0.0078	0.0382	0.1167	0.2950	0.5185	0.6262
	0.0000	0.0002	0.0026	0.0196	0.0994	0.2849	0.5561	0.6950
5	0.0000	0.0010	0.0057	0.0258	0.0908	0.2295	0.4084	0.4872
	0.0000	0.0001	0.0020	0.0150	0.0718	0.2189	0.4274	0.5942
4	0.0000	0.0007	0.0040	0.0181	0.0880	0.1618	0.2896	0.3425
	0.0000	0.0001	0.0014	0.0104	0.0496	0.1514	0.2957	0.3696
3	0.0000	0.0005	0.0025	0.0114	0.0401	0.1018	0.1781	0.2151
	0.0000	0.0000	0.0008	0.0064	0.0309	0.0948	0.1841	0.2301
2	0.0000	0.0002	0.0012	0.0056	0.0197	0.0498	0.0875	0.1057
	0.0000	0.0000	0.0004	0.0036	0.0178	0.0528	0.1092	0.1290
1	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	1	2	3	4	5	6	7	8

ESQUEMA  
ANALITICA

fig 3.10

#### 4. COEFICIENTE DE DISPERSION

##### 4.1 DIFUSION MOLECULAR

###### 4.1.1 *Difusión Molecular en un fluido en reposo*

La difusión molecular por sí misma no representa grandes consecuencias en problemas del medio ambiente, excepto a nivel microscópico en reacciones químicas y biológicas.

En 1855 el fisiólogo alemán Adolfo Fick publicó sus trabajos sobre flujo de masa. Estableció lo que hoy se conoce como la ley de Fick que establece que la masa de un soluto que atraviesa una área unitaria, por unidad de tiempo, en una dirección dada es proporcional al gradiente de la concentración del soluto en esa dirección.

Para el proceso de difusión en una dimensión, la ley de Fick se puede establecer matemáticamente como

$$q = - D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4.1)$$

donde

q	flujo
C	concentración de masa
D	coeficiente de proporcionalidad

El signo menos indica que el transporte se realiza de zonas de grandes concentraciones a zonas de menor concentración. El coeficiente D tiene dimensiones de  $L^2/T$  y se le llama coeficiente de difusión molecular.

Por otro lado, si se considera la conservación de masa se obtiene una segunda relación, la cual es independiente del proceso de transporte. Al combinar estas ecuaciones se obtiene una ecuación diferencial en derivadas parciales, que describe el proceso de difusión.

En la fig 4.1 se ilustra el proceso de transporte de masa en una dimensión. Se han dibujado dos superficies paralelas, de área unitaria, perpendiculares al eje x y separadas una distancia  $\Delta x$ .

Sea  $C(x,t)$  la masa de soluto por unidad de volumen en el punto x y en el tiempo t. Dado que las moléculas entran y salen del volumen de control, existe una razón de cambio de la masa en el tiempo dentro del volumen igual a  $(\partial C/\partial t)\Delta x$ . Esta razón de cambio debe ser igual al flujo neto de masa que pasa por las superficies que limitan al volumen de control.

Sea  $q(x,t)$  el flujo de masa que atraviesa la superficie localizada en x. La diferencia entre el flujo que entra y el que sale es  $(\partial q(x,t)/\partial x)\Delta x$ . Esta diferencia debe ser igual a la razón de cambio de la masa en el volumen, para que se satisfaga conservación de masa

$$\frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad (4.2)$$

De esta manera, se tiene una relación entre el flujo  $q(x,t)$  y la concentración  $C(x,t)$ , que es válida, independientemente del mecanismo de transporte molecular.

Sustituyendo la ec 4.1 (ley de Fick), en la ec 4.2 se obtiene

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left[ \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right] \quad (4.3)$$

Alternativamente, si se deriva la ec 4.2 con respecto a  $x$  y se sustituye  $-q/D$  por  $\partial C/\partial x$  resulta

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D \left[ \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \right] \quad (4.4)$$

Las ecs 4.3 y 4.4 se conocen como ecuaciones de difusión y describen la transferencia de masa por procesos de difusión del tipo de Fick. Estas ecuaciones describen un gran número de problemas. Por ejemplo, si  $C$  es temperatura la ec 4.2 representaría la ecuación de calor. Hay una analogía directa y completa entre el flujo de calor y la difusión molecular.

Si se desea obtener una versión de la ec 4.3 para más de una dimensión, conviene utilizar la notación vectorial. Considérese un volumen de control fijo  $V$ , con una superficie  $S$ . La concentración de masa es ahora una función del vector de posición  $x$ , y del tiempo  $t$ , la masa total en el volumen es

$$M = \int_V C(x,t) dV$$

Si el flujo de masa es  $q(x,t)$  entonces la conservación de masa requiere que

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V C(x,t) dV + \int_S (q(x,t) \cdot n) dS = 0$$

donde  $n$  es el vector unitario normal al elemento diferencial de superficie  $dS$ .

Usando el teorema de Green y considerando que V es un volumen fijo, se tiene que

$$\int_V \left[ \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} \right] dV = 0$$

Si el volumen es arbitrario

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \nabla \cdot \mathbf{q} \quad (4.5)$$

Para procesos moleculares, el flujo está especificado por la ley de Fick, que en tres dimensiones es

$$\mathbf{q} = - D \nabla C$$

que sustituida en la ec 4.5 da la ecuación de difusión

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C$$

En coordenadas cartesianas, se tiene

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left[ \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (4.6)$$

La ec 4.6 describe la forma en que se dispersa una masa en un fluido en reposo.

Otra manera de ver el fenómeno y de obtener la ley de Fick, es considerar el movimiento aleatorio de un gran número de partículas al mismo tiempo.

Supóngase que en un medio se tiene una solución diluida de moléculas con una distribución de concentración  $C(x,t)$  y con un gradiente de concentración a lo largo de una línea, como la esquematizada en la fig 4.2. Cada una de las moléculas tiene movimientos aleatorios. Si se considera nuevamente una superficie perpendicular a la línea, la probabilidad de que una molécula pase a través de la superficie debe ser proporcional al número promedio de moléculas cerca de ella.

Además, la probabilidad de que una molécula pase del lado derecho al lado izquierdo de la superficie sería proporcional al número promedio de moléculas en el lado derecho, y la probabilidad de que pase del lado izquierdo al derecho será proporcional al número promedio de moléculas en el lado izquierdo.

Supóngase que se realiza un experimento, con dos cajas, fig 4.3. En la caja derecha se tienen 20 moléculas y en la izquierda 10. Si la probabilidad de que una molécula atraviese la línea durante el tiempo  $\Delta t$  es 0.2, entonces al final del  $\Delta t$  se espera tener en promedio en la caja izquierda 8 moléculas de las originales más 4 moléculas nuevas, haciendo un total de 12 moléculas; en la caja derecha se espera tener 18 moléculas. Nótese que la concentración promedio de cada caja cambió. Este es precisamente el aspecto fundamental de la difusión; la diferencia en la concentración media entre las cajas siempre se reduce, nunca se incrementa.

Se puede definir el flujo de masa que circula a través de la superficie que limita las dos cajas, que será la razón neta con la cual la masa se intercambia por unidad de tiempo y de área. Por simplicidad, se toma un área unitaria perpendicular a la línea. El flujo de masa que circula de la izquierda a la derecha es igual al número de moléculas en la caja de la izquierda por la masa de cada partícula por la probabilidad de cambiar a la otra caja. Si  $M_i$  es la masa del trazador de la caja izquierda, el flujo de izquierda a derecha será  $kM_i$ , donde  $k$  es la probabilidad de transferencia. De manera semejante, si  $M_d$  es la masa en la caja derecha, el flujo de derecha a izquierda es  $kM_d$ . El flujo neto será entonces

$$q = k \left[ M_i - M_d \right] \quad (4.7)$$

Si se define  $C_i = \bar{M}_i / \Delta x$  y  $C_d = \bar{M}_d / \Delta x$  donde  $\bar{M}_i$  y  $\bar{M}_d$  son las masas promedio en las cajas izquierda y derecha, respectivamente, después de muchas repeticiones del experimento, y haciendo  $\Delta x$  muy pequeño, se puede escribir

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_d - C_i}{\Delta t}$$

por lo que se tiene

$$q = -k \left[ \Delta x \right]^2 \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4.8)$$

Esta ecuación muestra que el transporte neto está siempre a favor del gradiente de concentraciones, esto es, el flujo se realiza desde una zona de mayor concentración hacia una de menor concentración.

La probabilidad de transferencia es una función del movimiento molecular y del tamaño de la caja puesto que entre mayor es la caja menos partículas están cerca de la frontera. La transferencia de masa no dependerá, desde luego, de una definición arbitraria del tamaño de la caja. Para evitar que  $q$  dependa de  $\Delta x$  se asocia  $k(\Delta x)^2$  a una constante, o sea el coeficiente de difusión.

#### 4.1.2 Difusión Molecular en un fluido en movimiento

Sea un fluido en movimiento con velocidad  $u$ , cuyas componentes en direcciones  $x, y$  y  $z$  son  $u, v, w$ , respectivamente. Se llama movimiento por transporte al que se origina por el movimiento medio del fluido (advección) y se supone que el transporte por advección y por difusión son procesos aditivos separados. Esto es equivalente a decir que la difusión dentro del fluido en movimiento es idéntica a la que se tiene cuando el fluido está en reposo. Se supone también que se trata de difusión molecular en flujo laminar, y por ello el coeficiente de difusión tiene un valor constante  $D$  en todas direcciones.

La razón del transporte de masa a través de una área unitaria en el plano  $yz$  por la componente de velocidad en la dirección  $x$  esta dada por  $uC$ , porque esta es la razón a la cual el volumen de fluido circula a través del área ( $u \times$  área unitaria = volumen/tiempo unitario) multiplicada por la concentración de masa en ese volumen.

La razón total de transporte de masa es el flujo advectivo más el flujo difusivo

$$q = uC + \left[ -D \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad (4.9)$$

Quando se sustituye la ec 4.9 en la ecuación de conservación de masa en una dimensión 4.2, se obtiene la ecuación de difusión con el término advectivo adicional

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [uC] = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (4.10)$$

La ecuación en tres dimensiones se obtiene de manera similar que la 4.6

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot [C\mathbf{u}] = D \nabla^2 C \quad (4.11)$$

o haciendo uso de la ecuación de conservación del fluido en el volumen,  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , se tiene que

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C \quad (4.12)$$

escribiéndola en coordenadas cartesianas

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = D \left[ \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (4.13)$$

Esta ecuación es llamada a menudo ecuación de advección-difusión, pero como la advección es una característica de los problemas de ingeniería, se denotará simplemente por ecuación de difusión.

#### 4.2 DISPERSION (FLUJO TURBULENTO)

Como se acaba de mencionar en el subcapítulo anterior el coeficiente de difusión es constante. Sin embargo si el flujo es turbulento la difusión varía con la dirección.

La difusión de una concentración media puede ser descrita por una ecuación de difusión de la forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \epsilon_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \epsilon_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \epsilon_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (4.14)$$

donde  $\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z$  son las difusividades turbulentas

Esta ecuación está escrita para flujo con velocidad media cero; si el fluido tiene una velocidad media, es necesario adicionar los términos advectivos.

La analogía con la difusión molecular puede hacerse de la siguiente manera. La ecuación de conservación de materia en flujo turbulento, olvidando por el momento la difusión molecular, y definiendo a C como la concentración en un punto que varía con el tiempo es

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (4.15)$$

donde  $u, v$  y  $w$  son velocidades que varían aleatoriamente. Si esta ecuación se promedia en un tiempo suficientemente largo, para promediar las fluctuaciones turbulentas de concentración, y si los promedios en el tiempo de  $u, v$  y  $w$  son cero, se tiene

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \overline{uC} - \frac{\partial}{\partial y} \overline{vC} - \frac{\partial}{\partial z} \overline{wC} \quad (4.16)$$

Las testas indican el promedio en el tiempo.  $\overline{uC}, \overline{vC}$  y  $\overline{wC}$  son los flujos turbulentos promediados en el tiempo en las direcciones  $x, y$  y  $z$ , y por comparación con la ec 4.14 se tiene que

$$\overline{uC} = - \epsilon_x \frac{\partial C}{\partial x}, \quad \overline{vC} = - \epsilon_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad \overline{wC} = - \epsilon_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (4.17)$$

Comparando con la ley de Fick de difusión molecular  $q = -D (\partial c / \partial x)$ , ec 4.1, se puede decir que  $\epsilon_x, \epsilon_y$  y  $\epsilon_z$  son los equivalentes turbulentos de los coeficientes de difusión molecular; se puede ver entonces que el flujo es proporcional al gradiente de concentración.

Por esta razón  $\epsilon_x, \epsilon_y$  y  $\epsilon_z$  son a menudo llamados coeficientes de difusión turbulenta, los cuales resultan de un proceso que involucra movimientos aleatorios a gran escala. Estos coeficientes también son llamados difusividades de remolino.

Taylor encontró que para que las ecs 4.17 sean aplicables es necesario que el tiempo de recorrido de una partícula desde el origen debe ser mayor que una escala de tiempo Lagrangiana; es decir, para poder aplicar la ec 4.14 es necesario que el tiempo transcurrido sea mayor que  $T_L$ , donde

$$T_L = 1/3 \left[ T_x + T_y + T_z \right]$$

siendo

$$T_x = \int_0^{\infty} R_x(s) ds$$

$R_x$  es llamada, función de autocorrelación Lagrangiana y es igual a

$$R_x \left[ \tau_2 - \tau_1 \right] = \langle U(\tau_1) U(\tau_2) \rangle / \langle U^2 \rangle$$

donde el promedio de la muestra  $U(\tau_1)U(\tau_2)$  significa el promedio sobre un gran número de pruebas del producto de la velocidad de una partícula en el tiempo  $\tau_1$  multiplicada por la velocidad de la misma partícula en el tiempo  $\tau_2$ .

Además la raíz cuadrada de  $\langle U^2 \rangle$  es conocida como la intensidad de la turbulencia. En estas ecuaciones, el  $\langle F \rangle$  es el valor esperado de la variable  $F$ . En muchos casos, sin embargo, el tiempo en que se originó la nube de concentración no se puede conocer, por lo que es necesario definir la validez de la ec 4.14 en términos del tamaño de la nube ya dispersada.

La escala de longitudes Lagrangiana esta dada por

$$L^2 = \langle U^2 \rangle T_L^2$$

La escala proporciona el orden de magnitud de la distancia que una partícula del fluido viaja antes de perder su velocidad inicial. Análogamente se puede obtener la condición para la utilización de la ec 4.14, ver ref 6

$$L^2 > 2L^2 \quad L \text{ tamaño de la nube}$$

En la práctica, la turbulencia es no homogénea por lo que la ecuación de difusión se escribe con coeficientes que varían espacialmente, en la forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} =$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \epsilon_x \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \epsilon_y \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \epsilon_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] \quad (4.18)$$

donde  $u, v, w$  son velocidades medias

El fundamento teórico para la utilización de la ec 4.18 fue dado por Kolmogorov en 1931 y 1933. En efecto, para que una concentración en el punto  $x$  y en el tiempo  $t$  dependa solamente de las condiciones iniciales y del tiempo en el cual fue descargada, es necesario que la probabilidad de que una partícula descargada en el punto  $\xi$  en el tiempo  $t_0$  y que se dirija a un punto  $x$  en el tiempo  $t$ , sea igual a la probabilidad que la partícula alcance un punto intermedio  $x_1$  en el tiempo  $t_1$  por la probabilidad que la partícula vaya desde el punto  $x_1$  al punto  $x$  en el tiempo  $t-t_1$ , integrada sobre todos los puntos intermedios posibles; esto es,

$$p(x, \xi, t, t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p(x, x_1, t, t_1) p(x_1, \xi, t_1, t_0) dx_1 dy_1 dz_1$$

Esto puede ser cierto solamente si el movimiento de la partícula consiste de una serie de pasos aleatorios independientes, los cuales ocurren si  $t > T_L$ . Kolmogorov mostró que esta propiedad de independencia es crítica para la validez de la ecuación de difusión, y no la homogeneidad o permanencia del campo de velocidades. Además fue capaz de generalizar que la difusión de materia en un campo turbulento de velocidades con propiedades independientes, se rige por la ecuación

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + U \cdot \nabla C = & \frac{\partial}{\partial x} \left[ \epsilon_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \epsilon_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \epsilon_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \epsilon_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \epsilon_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \text{otros términos} \\ & \text{de segundo orden} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Si los ejes coordenados se escogen de tal manera que coincidan con los ejes principales del flujo, las varianzas cruzadas son cero y la ec 4.19 se simplifica a la ec 4.18

En suma, el análisis dado muestra que existe un coeficiente de mezclado turbulento, que es análogo al coeficiente de difusión molecular, y que se puede utilizar en una ecuación de difusión turbulenta, de la cual la forma más usual es la ec 4.18 y que solamente se puede aplicar después de que las partículas que se difunden en el flujo han permanecido un tiempo mayor que el tiempo de escala Lagrangiano o que tenga una difusión tal para cubrir una distancia más grande que la longitud de escala Lagrangiana.

### 4.3 COEFICIENTES DE DISPERSION

En este subcapítulo se describe la obtención de los coeficientes de difusión, basados en experimentos hechos en canales y tubos, por lo que las expresiones son en dos dimensiones. En la ec 4.19 los coeficientes de dispersión son independientes del sistema de referencia utilizado.

#### 4.3.1 Mezclado Vertical

En el subcapítulo anterior se mencionó la existencia de un coeficiente de mezclado turbulento. Según el análisis realizado por Elder (ver ref 6) se puede derivar un coeficiente de mezclado vertical a partir del perfil de velocidades de una sección.

Para una distribución logarítmica del perfil de velocidades se obtiene un coeficiente de mezclado vertical para la cantidad de movimiento

$$\epsilon_v = k d u^* \left[ z/d \right] \left[ 1 - (z/d) \right] \quad (4.20)$$

donde       $k$       constante de Von Karman  
             $d$       tirante  
             $z$       profundidad  
             $u^*$     velocidad al cortante

Si se considera la analogía de Reynolds, el mismo coeficiente se puede utilizar para transporte de masa; este resultado ha sido verificado por Jobson y Sayre en 1978 por medio de un estudio experimental de mezclado vertical de tinta en un canal. Promediando sobre la profundidad y tomando la constante de Von Karman  $k = 0.4$  se llega a

$$\bar{\epsilon}_v = 0.067 d u^* \quad (4.21)$$

Se han encontrado resultados semejantes para distintos tipos de flujos; por ejemplo, Gsanady (1976) estudiando la capa límite atmosférica, obtuvo

$$\bar{\epsilon}_v = 0.05 d u^*$$

En este caso  $d$  es el espesor de la capa límite y  $u^*$  la velocidad al cortante en la superficie de la tierra, donde

$$u^* = \sqrt{\tau/\rho}$$

donde

$\tau$  esfuerzo cortante en la superficie  
 $\rho$  densidad del fluido

#### 4.3.2 Mezclado Transversal

En un canal de ancho infinito, no hay perfil de velocidad transversal así que no es posible establecer una analogía de la ec 4.20 para determinar el coeficiente de mezclado transversal.

Se han realizado un gran número de experimentos sobre mezclado transversal, en canales rectangulares rectos en laboratorio y en canales naturales.

Los resultados de aproximadamente 75 experimentos en canales rectangulares rectos se resumen en la tabla 4.1, ref 6. En casi todos los casos el coeficiente de mezclado transversal adimensional  $\epsilon_t/du^*$  está entre 0.1 a 0.2, y los valores de 0.24 y 0.25 se obtuvieron en canales de irrigación. Se ha tomado como valor medio de los resultados

$$\epsilon_t \cong 0.15 d u^* \quad (4.22)$$

En la tabla 4.2 se muestran los resultados de mediciones en canales naturales irregulares.

### 4.3.3 Mezclado Longitudinal

Se supone que la turbulencia provoca mezclado longitudinal aproximadamente de la misma forma que el mezclado transversal porque tampoco se tienen fronteras para impedir el movimiento. Sayre y Chang en 1968 encontraron que el coeficiente de difusión longitudinal de partículas de polietileno sobre la superficie del agua fue aproximadamente tres veces mayor que el transversal; parte de la difusión longitudinal pudo haber sido debido a una velocidad al cortante transversal originada por una circulación secundaria. De cualquier forma, el mezclado longitudinal por los remolinos turbulentos es en general poco importante, porque el coeficiente de dispersión del flujo causado por el gradiente de velocidad es mucho mayor que los coeficientes de mezclado causados por la turbulencia.

Elder obtuvo para una distribución de velocidades logarítmica un coeficiente de dispersión

$$\epsilon_L = 5.93 d u^* \quad (4.23)$$

que es aproximadamente 40 veces la magnitud esperada del coeficiente de mezclado turbulento dado por la ec 4.22.

No ha habido mediciones de mezclado turbulento longitudinal por la dificultad para separar los efectos de las fluctuaciones turbulentas longitudinales de los resultados del flujo cortante.

### 4.4 OBTENCIÓN DEL TENSOR DE DISPERSIÓN K

Si se integra la ec 4.19 con respecto a la profundidad (ver ref 1) se obtiene la ecuación de difusión en dos dimensiones, ec 1.1

$$\frac{\partial}{\partial t} (h C) + \frac{\partial}{\partial x} (h u C) + \frac{\partial}{\partial y} (h v C) =$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( h k_{11} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( h k_{12} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( h k_{21} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( h k_{22} \frac{\partial C}{\partial y} \right)$$

donde u y v son las velocidades promediadas en la profundidad

Las componentes del tensor K se obtienen a partir de una transformación de coordenadas de la dirección de la línea de chorro sobre el sistema coordenado x-y.

Si se designa la coordenada longitudinal del flujo como  $\xi$  y la coordenada perpendicular a la longitudinal como  $\eta$  y si además por ser flujo en dos dimensiones se considera que la difusión tiene unicamente componentes longitudinal y transversal, las componentes del tensor K se pueden escribir como

$$K_{11} = \epsilon_{\xi} \cos^2 \theta + \epsilon_{\eta} \sin^2 \theta \quad (4.24)$$

$$K_{12} = \left[ \epsilon_{\xi} - \epsilon_{\eta} \right] \sin \theta \cos \theta \quad (4.25)$$

$$K_{22} = \epsilon_{\xi} \sin^2 \theta + \epsilon_{\eta} \cos^2 \theta \quad (4.26)$$

donde  $\epsilon_{\xi}(x,y,t)$  y  $\epsilon_{\eta}(x,y,t)$  son las difusividades longitudinal y transversal, y  $\theta$  es el ángulo medido (positivo, en contra de las manecillas del reloj) del eje x hacia el eje  $\xi$ .

Como se mencionó anteriormente, el término cruzado  $K_{12}$  desaparece cuando la línea de chorro (eje  $\xi$ ), esta alineada con el eje x ó y. Los coeficientes de mezclado longitudinal y transversal  $\epsilon_{\xi}$  y  $\epsilon_{\eta}$  describen las propiedades de flujo medio y se obtienen con las fórmulas de Elder

$$\epsilon_{\xi} = e_L u^* h \quad (4.27)$$

$$\epsilon_{\eta} = e_T u^* h \quad (4.28)$$

donde  $e_L$  y  $e_T$  son los coeficientes adimensionales determinados en laboratorio, ver subcap 4.3. En la práctica se recomienda tomar  $e_L = 5.93$  y  $e_T = 0.23$ , ref 5.

#### 4.5 INFLUENCIA DEL ANGULO TETA SOBRE EL VALOR DEL TENSOR DISPERSION K

Para observar la influencia que el ángulo  $\theta$  ejerce en el tensor dispersión  $k$ , se hicieron cálculos para obtener los valores adimensionales del tensor considerando una velocidad de flujo unitaria, ver tabla 4.3.

En la fig 4.4 se puede ver que cuando  $\theta=45^\circ$  las dispersiones en  $x$  y en  $y$  son iguales, mientras que la dispersión cruzada en  $xy$  es ligeramente menor. Puede verse además, que para valores de  $\theta$  menores de  $45^\circ$  la dispersión en  $x$  es más significativa que las otras, mientras que cuando  $\theta < 45^\circ$ , es más significativa la dispersión en  $y$ .

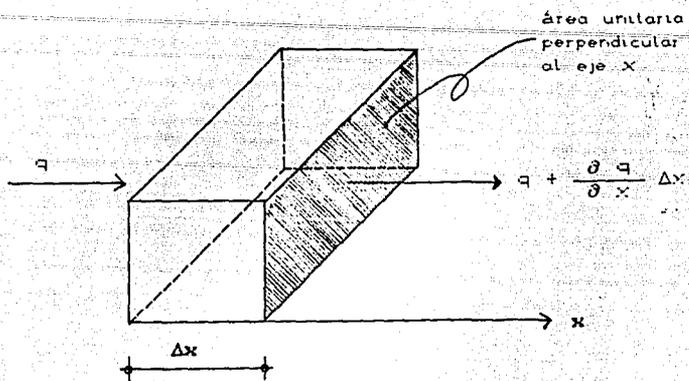


fig 4.1

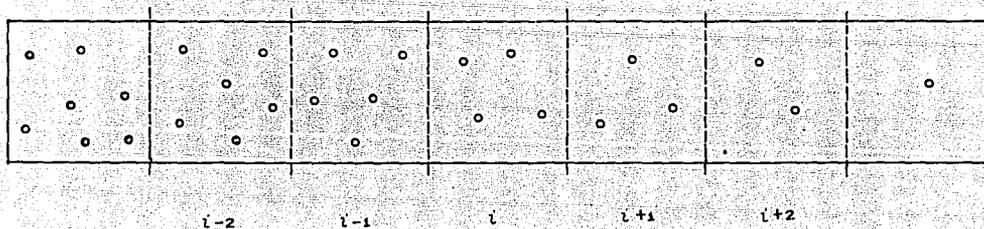
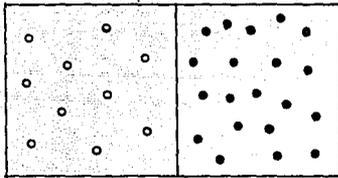
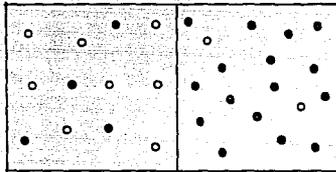


fig 4.2

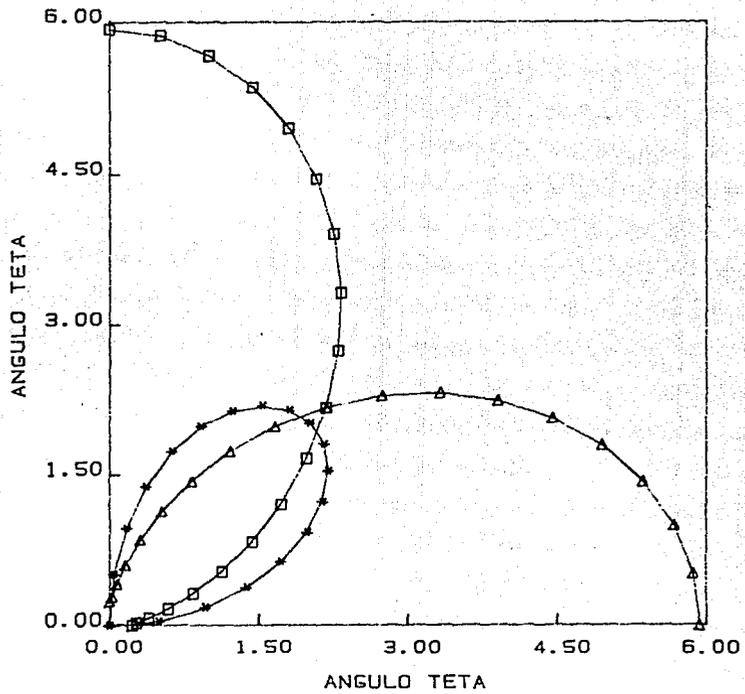


10 x moléculas    20 x moléculas



8 x moléculas    2 x moléculas  
4 y moléculas    16 y moléculas

fig 4.3



Valores de los elementos del tensor dispersion K  
divididos entre  $u^*h$

fig 4.4

MEDICIONES EXPERIMENTALES DE MEZCLADO TRANSVERSAL EN CANALES RECTANGULARES CON PAREDES UNIFORMES

REFERENCIA	TIPO DE CANAL	TIPO DE RUGOSIDAD	ANCHO DEL CANAL W (cm)	PROFUNDIDAD MEDIA DEL FLUJO d (cm)	VELOCIDAD MEDIA $\bar{U}$ (cm/s)	VELOCIDAD AL CORTANTE $u^*$ (cm/s)	COEFICIENTE DE MEZCLADO TRANSVERSAL $E_t$ (cm <sup>2</sup> /s)	$E_t/du^*$
ELDER (1959)	LABORATORIO	SUAVE	36	1.2	21.6	1.59	-----	0.16
SAYRE Y CHANG (1968)	LABORATORIO	CON ABRAZADERA DE MADERA	283	14.8-37.1	23.5-37.1	3.81-6.04	9.6-34.9	0.14-0.174
SULLIVAN (1968)	LABORATORIO	SUAVE	76	7.3-10.2	15.3-22.9	0.83-1.29	0.90-1.18	0.107-0.133
OKOYE (1970)	LABORATORIO	SUAVE	85	1.5-17.3	27.1-42.8	1.6-2.2	0.64-2.9	0.09-0.20
OKOYE (1970)	LABORATORIO	SUAVE	110	1.7-22.0	30.0-50.4	1.4-2.6	0.79-3.3	0.11-0.24
OKOYE (1970)	LABORATORIO	EMPEDRADO	110	6.8-17.1	35.3-42.8	3.6-5.2	4.8-7.5	0.11-0.14
PRYCH (1970)	LABORATORIO	SUAVE	110	4.0-11.1	35.4-46.0	1.9-2.0	1.1-3.6	0.14-0.16
PRYCH (1970)	LABORATORIO	METALICO	110	3.9-6.4	37.3-45.9	3.7-4.0	2.0-3.5	0.14
MILLER Y RICHARDSON (1974)	LABORATORIO	BLOQUES RECTANGULARES	59.7	12.5-13.2	30.5-81.4	3.0-16.3	3.7-36.3	0.10-0.18
LAU Y KRISHNAPPAN (1977)	LABORATORIO	SUAVE	60	3.9-5.0	15.5-33.7	0.9-2.0	0.74-1.4	0.16-0.20
		ARENA DE 0.4 mm	45-60	1.4-4.0	19.7-20.3	1.6-2.1	0.34-0.88	0.11-0.14
		ARENA DE 2.0 mm	30	1.6-3.4	20.0-20.4	1.9-2.4	0.74-0.92	0.14-0.20
		ARENA DE 2.7 mm	45-60	1.3-3.9	19.5-20.4	1.8-2.8	0.59-1.16	0.13-0.26
FISCHER (1967)	CANAL DE IRRIGACION	DUNAS DE ARENA	1830	66.7-68.3	63.0-66.0	6.1-6.3	102	0.24-0.25

tabla 4.1

MEDICIONES EXPERIMENTALES DE MEZCLADO TRANSVERSAL EN CANALES CON CURVAS Y LADOS IRREGULARES

REFERENCIA	CANAL	GEOMETRIA DEL CANAL	ANCHO DEL CANAL W(m)	PROFUNDIDAD MEDIA DEL FLUJO d(m)	VELOCIDAD MEDIA $\bar{u}$ (m/s)	VELOCIDAD AL CORTANTE $u^*$ (m/s)	COEFICIENTE DE MEZCLADO TRANSVERSAL $E_t$ (m <sup>2</sup> /s)	$E_t/du^*$
YOTSUKURA et AL (1970)	RIO MISSOURI NEBRASKA	RIO CON MEANDROS	200	2.7	1.75	0.074	0.12	0.6
HOLLEY Y ABRAHAM (1973)	LABORATORIO	LADOS Y LECHOS SUAVES, ESPIGONES DE 0.15 EN AMBOS LADOS	2.2	0.097	0.11	-----	-----	0.36-0.49
HOLLEY Y ABRAHAM (1973)	LABORATORIO	ESPIGONES Y CURVATURA SUAVE	2.2	0.097	0.11	-----	-----	0.3-0.4
HOLLEY Y ABRAHAM (1973)	MODELO DE LAB RIO IJSSEL	ESPIGONES Y CURVATURA SUAVE	1.22	0.9	0.13	0.0078	-----	0.45-0.77
HOLLEY Y ABRAHAM (1973)	RIO IJSSEL	"	69.5	4.0	0.96	0.075	-----	0.51
MACKAY (1970)	RIO MACKENZIE	RECTO CON CURVATURA SUAVE, CON NUMEROSAS ISLAS Y BARRAS DE ARENA	1240	6.7	1.77	0.152	0.67	0.66
YOTSUKURA Y SAYRE (1976) Y SAYRE Y YEH (1973)	RIO MISSOURI AGUAS ABAJO ESTAC COOPER	TRAMO CON CURVA A 90 Y A 180	210-270	4	5.4	0.08	1.1	3.4
JACKMAN Y YOTSUKURA (1977)	RIO POTOMAC TRAMO (29Km) AGUAS ABAJO DE LA PLANTA DICKERSON	RIO SUAVEMENTE MEANDROSO CON CURVAS HASTA DE 60	350	0.73-1.74	0.29-0.58	0.033-0.051	-----	0.52-0.65

tabla 4.2

Profundidad (m)	CHEZY = 25					
	$\theta = 0^\circ$			$\theta = 45^\circ$		
	COEFICIENTE DE DISPERSION			COEFICIENTE DE DISPERSION		
	x	y	xy	x	y	xy
1.0	0.748	0.029	0.000	0.986	0.986	0.957
2.0	1.486	0.058	0.000	0.772	0.772	0.714
5.0	3.715	0.144	0.000	1.929	1.929	1.795
10.0	7.429	0.288	0.000	3.859	3.859	3.571
20.0	14.859	0.576	0.000	7.717	7.717	7.141
50.0	37.147	1.441	0.000	19.294	19.294	17.859
100.0	74.293	2.882	0.000	38.587	38.587	35.706

TABLA 4.3

## 5. ANALISIS DE SENSIBILIDAD

### 5.1 DESCRIPCION DEL PROBLEMA

El análisis de sensibilidad se hará resolviendo un problema típico que es el determinar la zona afectada por la descarga de una termoeléctrica localizada en una zona costera.

El análisis se realiza para el campo lejano, es decir, para la zona donde la descarga de agua caliente ha perdido el impulso original y pasa a ser una mancha de agua relativamente caliente, que es arrastrada por las corrientes advectivas del lugar.

Se acepta que tanto la hidrodinámica como la difusión pueden describirse considerando los fenómenos bidimensionalmente en planta.

En la fig 5.1 se muestra la batimetría del lugar. Para atacar el problema de la termoeléctrica en la zona de influencia de la descarga se construyó una malla, que sobre el eje  $x$  tiene 1680 m, con un  $\Delta x=120$  m, y en la dirección  $y$  tiene una longitud de 2160 m con un  $\Delta y=180$  m. La localización de la descarga se puede ver en la fig 5.1.

El campo de velocidades de la zona se obtuvo con ayuda de un modelo matemático de hidrodinámica, y se da en la fig 5.2. El campo de flujos así como la dispersión se calcularon haciendo las siguientes consideraciones:

- el flujo va de izquierda a derecha y se mantiene constante un tiempo considerable
- el gasto unitario promedio en la frontera izquierda es de  $0.348 \frac{m^3}{s/m}$
- se considera que en la frontera derecha el nivel es cero
- las características de la descarga de agua caliente y del flujo son tales que permiten un mezclado homogéneo lento, por lo que se puede considerar un análisis bidimensional, en donde a lo largo de la profundidad las características del flujo son constantes (velocidad, temperatura, concentración, densidad, etc.)
- no se toma en cuenta la dilución inicial, es decir, las características del campo cercano
- el intercambio de temperatura entre la atmósfera y el mar se considera nulo

Después de unas 5 horas de simulación se obtuvo una condición estable en el campo de velocidades que son las que se utilizan en esta aplicación, fig 5.2.

Las condiciones iniciales para el análisis de dispersión son:

- el campo inicial de temperaturas es nulo, es decir, el agua está a la temperatura ambiente
- se cuenta con un campo de velocidades

Las condiciones de frontera son:

- la descarga proporciona un incremento de temperatura  $\Delta t=10^{\circ}C$
- en la frontera izquierda el incremento de temperatura es cero, es decir, el agua que entra por esa frontera está a la temperatura ambiente
- en la frontera derecha, ya que el flujo sale, puede haber un incremento de temperatura
- las playas (arriba de la malla) son impermeables, es decir, no hay flujo de calor

Las condiciones de cálculo son las siguientes:

El incremento de tiempo es  $\Delta t=360$  s ya que aunque para el modelo de dispersión pura se puede utilizar un  $\Delta t$  mayor y dar resultados aceptables, para este valor el modelo de advección da resultados más precisos. La simulación se hizo hasta 20 horas; la discusión de resultados se hace para este tiempo.

## 5.2 SIMULACIONES

### 5.2.1 Obtención del campo de temperaturas considerando advección pura

Este campo se obtuvo con el modelo matemático de advección pura descrito en la ref 6.

### 5.2.2 Coeficiente de dispersión variable

En este caso, se considera que en cada punto de la malla se obtiene un coeficiente de dispersión que es función de la profundidad, de la velocidad al cortante y del ángulo teta, según lo discutido en el cap 4. Los coeficientes adimensionales que se utilizan son los encontrados por Elder, subcap 4.3.

### 5.2.3 Coeficiente de dispersión único en ambas direcciones

Se consideraron como coeficientes de dispersión  $K_{11}=K_{22}=0.05$  y  $K_{12}=K_{21}=0.0$ . No se considera la influencia del ángulo teta.

### 5.2.4 Influencia del ángulo $\theta$ que forma el vector velocidad con respecto al sistema coordenado de cálculo

Se consideraron las difusividades turbulentas iguales, es decir,  $\epsilon_{\xi}=\epsilon_{\eta}=0.05$ , y el tensor dispersión  $K$  se calculó con las ecs 4.24-4.26.

### 5.2.5 Coeficiente de dispersión constante en cada dirección

a) Se considera un coeficiente de dispersión en la dirección  $x$ ,  $K_{11}=0.1$ , y en la dirección  $y$ ,  $K_{22}=0.05$ . Además, se tiene una dispersión cruzada  $K_{12}=K_{21}=0.001$ .

b) En la dirección  $x$  el coeficiente  $K_{11}=0.05$  y en la dirección  $y$  el coeficiente  $K_{22}=0.1$ ; de la misma manera  $K_{12}=K_{21}=0.001$ .

## 5.3 DISCUSION DE RESULTADOS

### 5.3.1 Advección pura

En la fig 5.5a, se ve el campo de concentraciones obtenido por advección pura. Existe una zona amplia con un incremento de temperatura de  $9.5^{\circ}\text{C}$ , localizada en las cercanías de la descarga. Este se considera el caso base.

### 5.3.2 Coeficiente de dispersión variable

En la fig 5.3 se dan los coeficientes  $\epsilon_{\xi}$  y  $\epsilon_{\eta}$  calculados tomando en cuenta la hidrodinámica, con las ecs 4.27 y 4.28. Los valores de  $\epsilon_{\xi}$  están entre 0 y 2. Como es de esperarse, los valores aumentan con la profundidad, dado que las velocidades son prácticamente iguales en la parte inferior de la malla.  $\epsilon_{\eta}$  varía entre 0 y 0.08.

En la fig 5.4 se dan los valores de los coeficientes de dispersión en dirección  $x$  ( $K_{11}$ ) y dirección  $y$  ( $K_{22}$ ), calculados tomando en cuenta el ángulo  $\theta$ , ecs 4.24 y 4.26. Los valores de la dispersión en  $x$  varían entre 0 y 2 y como son directamente proporcionales a  $\epsilon_{\xi}$  y  $\epsilon_{\eta}$ , también su valor aumenta con la profundidad. El coeficiente en dirección  $y$  es casi 10 veces menor que en dirección  $x$  y varía entre 0 y 0.2.

Se puede observar en la misma figura, que en dirección  $x$  el valor del coeficiente de dispersión que predomina en la zona cercana a la descarga es  $K_{11}=0.05$ , mientras que en dirección  $y$  es  $K_{22}=0.01$ , aunque en la descarga misma  $K_{22}$  llega hasta 0.2.  $K_{12}$  varía entre 0 y 0.2, y en la zona cercana a la descarga predomina 0.02.

Cuando se hace el cálculo incluyendo la dispersión, fig 5.5b, la zona de  $9.5^{\circ}\text{C}$  se reduce ligeramente, de la misma manera la curva de  $0.1^{\circ}\text{C}$  tiene un aumento en su área de influencia, todo esto se debe precisamente al fenómeno de la dispersión. Se puede notar que la curva de  $5^{\circ}\text{C}$  esta prácticamente igual debido a que se origina un pequeño enfriamiento que repercute en gran medida, en el aumento del área de influencia de la curva de  $0.1^{\circ}\text{C}$ . Como en esta zona el coeficiente en  $x$  es mayor que en  $y$ , se origina una dispersión principal en  $x$ , es decir, por dispersión las temperaturas avanzan más hacia la derecha que hacia abajo.

### 5.3.3 Coeficiente de dispersión único en ambas direcciones

Para esta simulación, fig 5.6a, se obtuvo una fuerte diferencia en los resultados al comparar el caso 5.2.3 con el caso base y con el 5.2.2. Es decir, al escoger valores constantes únicos en ambas direcciones se obtienen diferencias sustanciales en los resultados.

### 5.3.4 Influencia del ángulo $\theta$ que forma el vector velocidad con respecto al sistema coordenado de cálculo

En la fig 5.6b se ven los resultados de esta simulación; las zonas de influencia de las curvas de  $5^{\circ}\text{C}$  y  $0.1^{\circ}\text{C}$  permanecen prácticamente iguales al comparar el caso 5.2.4 con el 5.2.3, y se nota que en la zona cercana a la descarga el área de influencia de la curva de  $9.5^{\circ}\text{C}$  se reduce. Esto resulta razonable, si se observa que en la zona de la descarga la dispersión en  $x$  es mayor con respecto al resto de la malla,  $K_{11}=0.05$ .

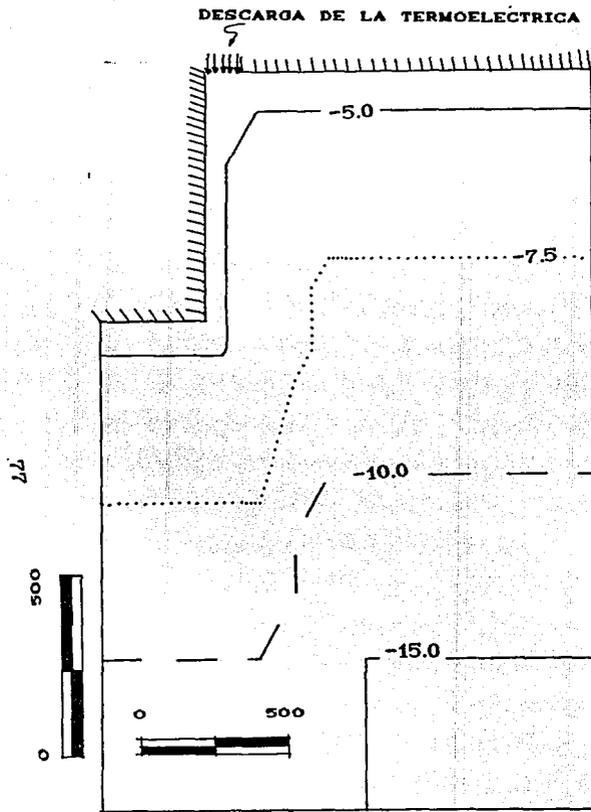
Se puede decir, que el ángulo  $\theta$  no afecta en mucho los resultados, siempre y cuando los valores que se tomen de los coeficientes de dispersión sean aceptables.

### 5.3.5 Coeficiente de dispersión constante en cada dirección

a) En la fig 5.7a, el área de influencia de la curva de  $9.5^{\circ}\text{C}$  se reduce todavía más con respecto al caso base. Al comparar el caso de la fig 5.6a con éste, se puede ver que las curvas de  $5^{\circ}\text{C}$  y  $0.1^{\circ}\text{C}$  son muy parecidas, no así la de  $9.5^{\circ}\text{C}$ . Al considerar una mayor dispersión en  $x$  (doble) se origina una concentración mayor de calor en la zona cercana a la descarga y un enfriamiento en el resto de la malla. Por otro lado, en esta simulación se considera un coeficiente de dispersión cruzado  $K_{12}=K_{21}=0.001$ , que en realidad no influye en los resultados obtenidos.

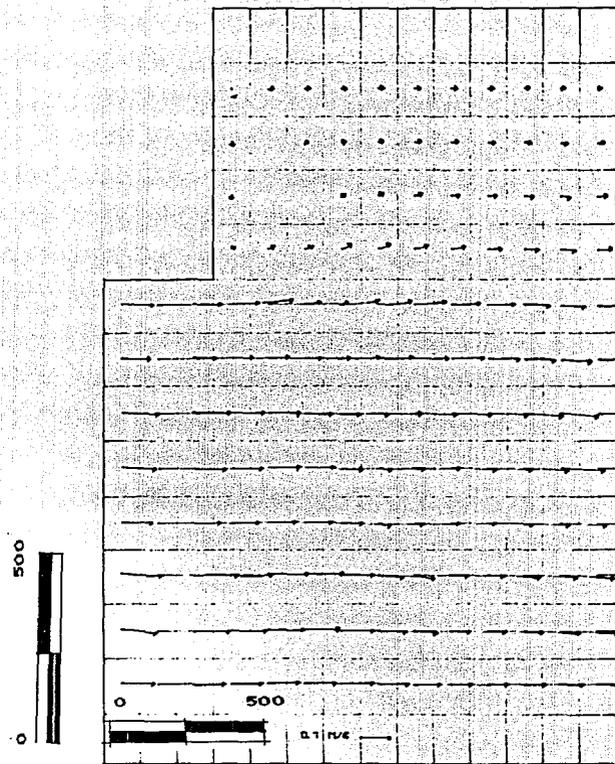
b) En la fig 5.7b, la curva de  $9.5^{\circ}\text{C}$  se reduce más con respecto a la del inciso (a) de este caso. Se observa una igualdad en las curvas de  $5^{\circ}\text{C}$  y  $0.1^{\circ}\text{C}$ . Al comparar el inciso (a) con (b) los resultados en la zona cercana presentan diferencias, por lo que es importante el tomar los valores correctos del coeficiente de dispersión en cada dirección.

En la fig 5.8, se muestra la evolución de los campos de temperaturas, considerando la dispersión, caso 5.2.2. En la fig 5.8a la curva de  $0.1^{\circ}\text{C}$  todavía sale por la playa y el calor está concentrado en la zona cercana a la descarga. En la fig 5.8b el calor se ha dispersado y la curva de  $0.1^{\circ}\text{C}$  sale de la malla.



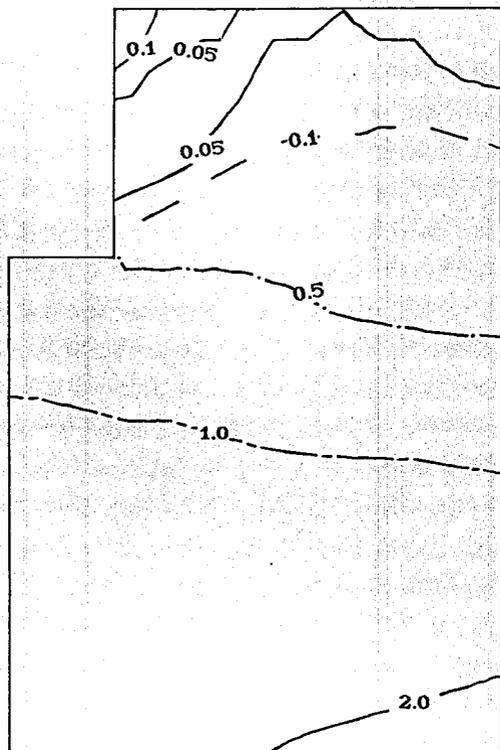
BATIMETRIA

fig 5.1



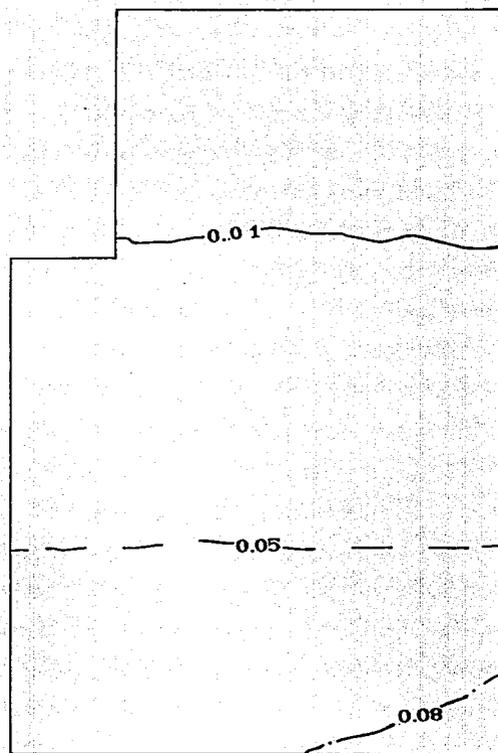
CAMPO DE VELOCIDADES

fig 5.2



CURVAS DE IGUAL

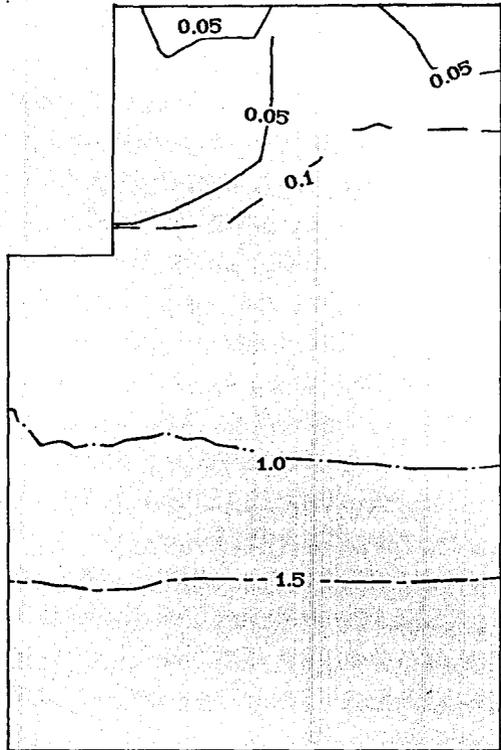
$\epsilon_{\xi}$  (EC 4.27)



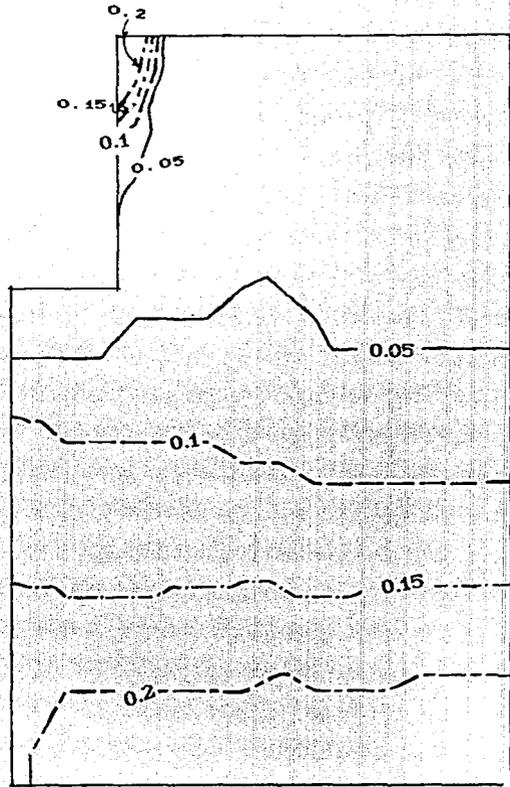
CURVAS DE IGUAL

$\epsilon_{\eta}$  (EC 4.28)

fig 5.3



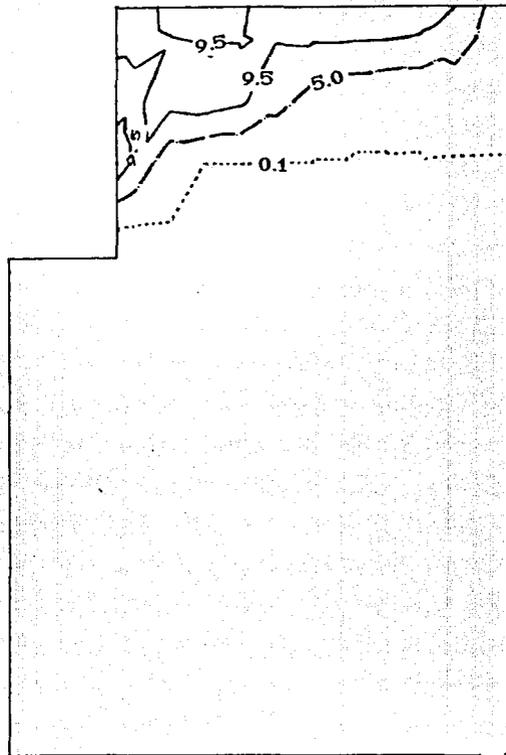
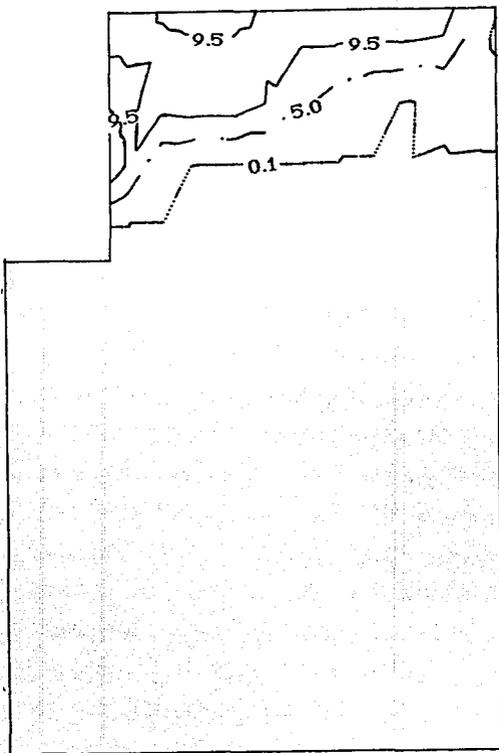
CURVAS DE IGUAL  
DISPERSION EN X



CURVAS DE IGUAL  
DISPERSION EN Y

fig 5.4

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

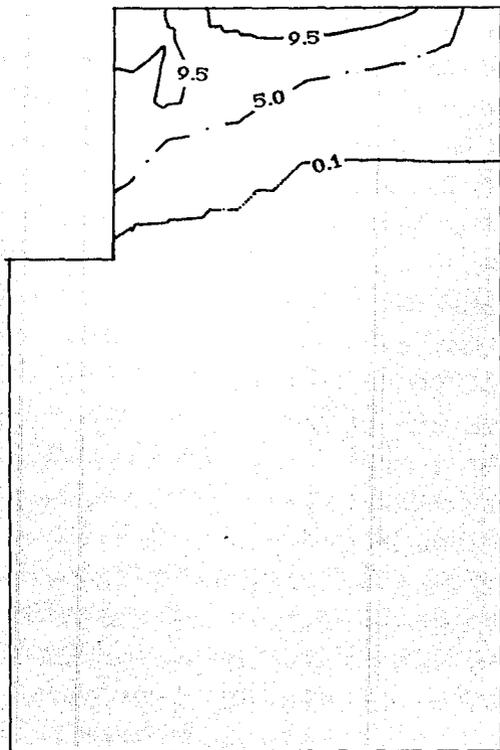


a) Advección pura

CURVAS DE IGUAL CONCENTRACION

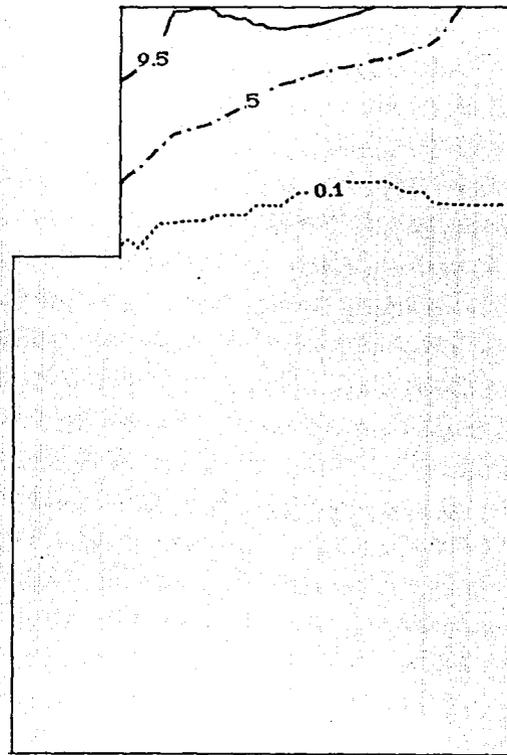
b) Advección-Difusión

fig 5.5



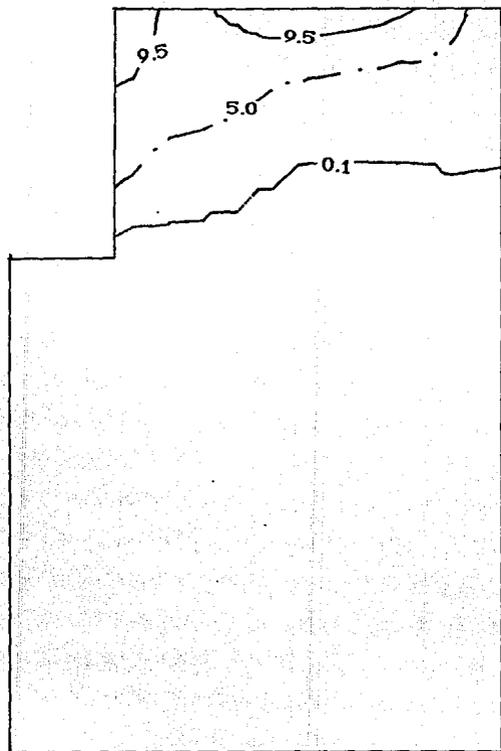
a)  $K_{11}=K_{22}=0.05$   
 $K_{12}=K_{21}=0.0$

CURVAS DE IGUAL CONCENTRACION



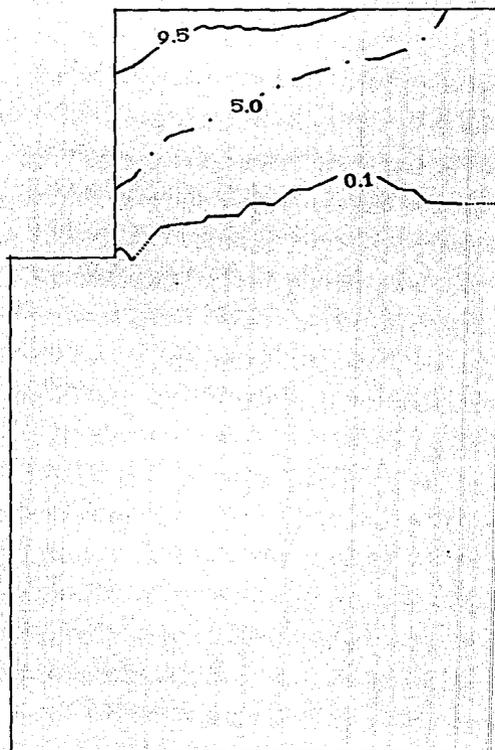
b)  $\epsilon_{\xi} = 0.05$ ,  $\epsilon_{\eta} = 0.1$   
 el tensor dispersión K  
 se obtuvo con las ecs 4.24-4.26

fig 5.6



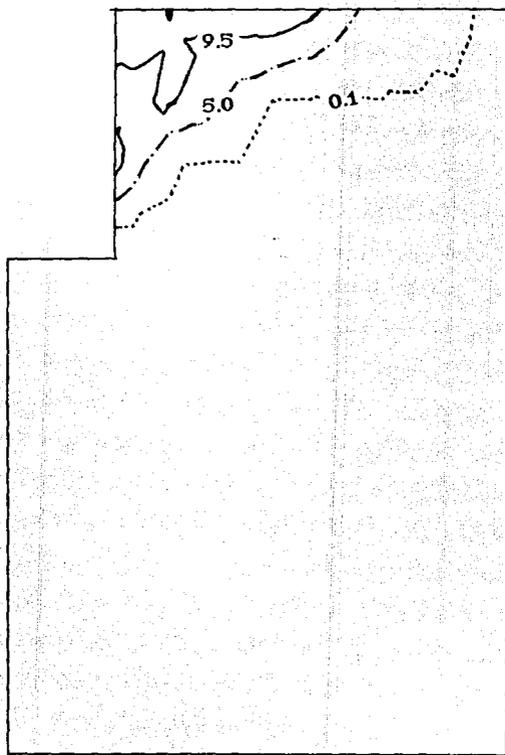
a)  $K_{11}=0.1$   
 $K_{22}=0.05$   
 $K_{12}=K_{21}=0.001$

CURVAS DE IGUAL CONCENTRACION



b)  $K_{11}=0.05$   
 $K_{22}=0.1$   
 $K_{12}=K_{21}=0.001$

fig 5.7

a)  $T = 10$  h

CURVAS DE IGUAL CONCENTRACION

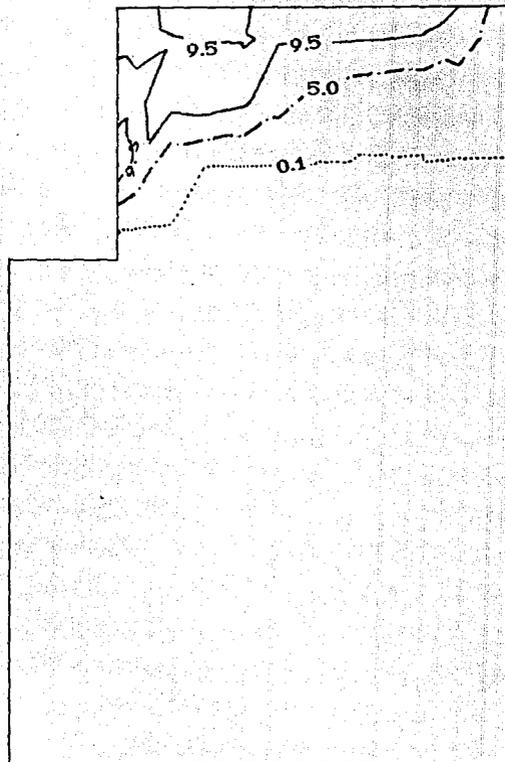
b)  $T = 20$  h

fig 5.8

## 6. CONCLUSIONES

### 6.1 ESQUEMA EN DIFERENCIAS FINITAS

Para el cálculo de dispersión en dos dimensiones se propuso un esquema en diferencias finitas, implícito de direcciones alternantes. El esquema proporciona la confiabilidad necesaria para su aplicación, ya que en primera instancia, la dispersión numérica es menor que la dispersión física, como se comprueba en los caps 2 y 3. Conocida la hidrodinámica, el modelo de transporte de masa aquí descrito se acopla a un modelo de advección pura, con un manejo adecuado de las condiciones de frontera para cada modelo.

### 6.2 COEFICIENTE DE DISPERSION

Como se ve en el cap 4, todas las mediciones para la obtención del tensor dispersión  $K$  se han realizado en canales y ríos, debido a que se puede considerar un flujo unidimensional. Los resultados obtenidos por diferentes investigadores difieren hasta en un 100% en los valores del tensor. En la práctica se ha visto que los coeficientes dados por Elder dan resultados aceptables.

No hay mediciones del tensor dispersión en dos dimensiones, por lo que para la modelización matemática de la dispersión bidimensional que se trata aquí, diversos autores recomiendan utilizar los coeficientes dados por las ecs 4.24-4.28.

### 6.3 ANALISIS DE SENSIBILIDAD

De las simulaciones hechas, se concluye que el tomar coeficientes de dispersión equivocados origina resultados muy diferentes de los obtenidos con las ecuaciones de Elder, que en definitiva se recomiendan en este trabajo.

El objetivo de la tesis se origina de la necesidad de poder cuantificar el valor del coeficiente de dispersión en zonas térmicas donde no se tienen mediciones. Además, observar que sucede cuando se estiman erróneamente los coeficientes. En las gráficas pueden observarse los resultados, cuando se toman valores aproximados.

En definitiva, es claro que el fenómeno de la dispersión se debe tomar en cuenta en los problemas con flujo turbulento, básicamente en descargas de contaminantes, ya que una buena cuantificación del fenómeno puede repercutir en una óptima selección de proyectos.

## REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

1. FORREST M HOLLY , "TWO DIMENSIONAL MASS DISPERSION IN RIVERS"  
HYDROLOGY PAPERS, COLORADO STATE UNIVERSITY.
2. FORREST M HOLLY, MASCE AND JEAN-MARC USSEGLIO-POLATERRA,  
"DISPERSION SIMULATION IN TWO-DIMENSIONAL TIDAL FLOW".
3. A A SAMARSKI, "INTRODUCCION A LOS METODOS NUMERICOS"  
ED MIR MOSCU.
4. M B ABOUETT, "NUMERICAL METHODS"  
INTERNATIONAL COURSES IN HYDRAULIC AND SANITARY ENGINEERING,  
DELFT NETHERLANDS 1974.
5. HUGO B FISCHER, E JOHN LIST, ROBERT CY KOH, JÖRG IMBERGER,  
NORMAN H BROOKS, "MIXING IN INLAND AND COASTAL WATERS"  
ACADEMIC PRESS, A SUBSIDIARY OF HARCOURT BRACE  
JOVANOVIČ PUBLISHERS 1979.
6. M ANGELES, D J, "MODELACION DE CONTAMINANTES EN DOS DIMENSIONES"  
FACULTAD DE INGENIERIA, UNAM 1988.
7. CSANADY, G T (1963), "TURBULENT DIFFUSION IN LAKE HURON"
8. ELDER, J W (1959), "THE DISPERSION OF MARKED FLUID IN TURBULENT"  
SHEAR FLOW.
9. JOHNSON, H E, AND SAYRE, W W (1970), "VERTICAL TRANSFER IN OPEN  
CHANNEL FLOW".
10. SAYRE, W W, AND CHANG, F M (1968), "A LABORATORY INVESTIGATION OF  
THE OPEN CHANNEL DISPERSION PROCESS FOR DISSOLVED, SUSPENDED, AND  
FLOATING DISPENSANTS.