



01/62
2
2ej

DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería

DISPERSION DE CONTAMINANTES EN CANALES,
MODELACION NUMERICA

LUIS FRANCISCO LEON VIZCAINO

T E S I S

PRESENTADA A LA DIVISION DE ESTUDIOS DE
POSGRADO DE LA

FACULTAD DE INGENIERIA
DE LA
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

COMO REQUISITO PARA OBTENER
EL GRADO DE

**MAESTRO EN INGENIERIA
HIDRAULICA**

CIUDAD UNIVERSITARIA
1990

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



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.

**DISPERSION DE CONTAMINANTES EN CANALES,
MODELACION NUMERICA**

C o n t e n i d o

<u>Tema:</u>	<u>Pag.</u>
1.- Introducción	1
2.- Fundamentos de los procesos de difusión	5
2.1.- Descripción y definiciones	5
2.1.1.- Conceptos básicos	6
2.1.2.- 1a. ley de Fick de la difusión	7
2.1.3.- Ecuación de conservación de masa en procesos difusivos	10
2.2.- Ecuaciones de difusión	14
2.3.- Difusión turbulenta	16
2.3.1.- Dispersión por efectos cortantes en flujo laminar	19
2.3.2.- Dispersión en flujo turbulento	24
3.- Soluciones analíticas	28
3.1.- Difusión pura	28
3.2.- Convección-difusión	32
4.- Soluciones numéricas de la ecuación de dispersión longitudinal y análisis de estabilidad	39
4.1.- Diferencias finitas	40
4.2.- Esquemas explícitos	43
4.2.1.- Esquemas de primer orden	43
4.2.2.- Esquema de Adams-Bashforth	44
4.3.- Análisis de estabilidad	46
4.3.1.- Análisis en esquemas de primer orden	51
4.3.2.- Análisis en el esquema de Adams-Bashforth	60
4.3.3.- Resumen de los análisis	65

C o n t e n i d o (Cont.)

<u>Tema:</u>	<u>Pag.</u>
5.- Comparación de resultados de los esquemas	69
5.1.- Comparación con soluciones analíticas	69
5.2.- Comparación con mediciones experimentales reportadas	77
6.- Conclusiones y recomendaciones	82
Notación utilizada	88
Apéndices	91
Referencias	94

1- INTRODUCCIÓN

Debido al crecimiento demográfico en nuestro país y a los cada vez más complejos sistemas para el abasto de agua potable, se hace imprescindible no sólo contemplar un uso eficiente del vital líquido en cuanto a cantidad, sino también en los aspectos relacionados con su calidad. Por esto en años recientes se ha despertado un interés creciente dentro de la comunidad hidráulica por analizar y poder predecir la evolución de los contaminantes al ser descargados en el interior de cuerpos de agua.

Históricamente, el ser humano ha dispuesto de sus desechos de la manera más simple, es decir, desalojando las aguas contaminadas a cuerpos de agua cuyo destino final generalmente son los mares y grandes lagos. En su trayecto por corrientes superficiales o subterráneas, los contaminantes se diluyen y dispersan provocando que en dichos cauces se presenten concentraciones que impidan la utilización del recurso y aún peor, que produzcan desequilibrios importantes en los ecosistemas locales.

Dada la gran variedad de contaminantes que acompañan a las aguas negras, que oscilan desde inocuos contenidos orgánicos hasta metales y químicos de alto riesgo, se impone la necesidad de conocer los procesos involucrados en el fenómeno de la dispersión, con el objeto de establecer estrategias y políticas de manejo de los contaminantes a descargar.

La idea generalizada de que "la dilución es la solución a la contaminación" es, además de simplista, sólo aplicable en ciertos casos de desechos orgánicos reasimilables sin perjuicio en un ecosistema global.

Se pueden distinguir tres grandes categorías en los estudios relativos a los procesos de transferencia de masa: los enfocados a proporcionar las bases teóricas de la mecánica del proceso, los dedicados a modelar numéricamente el fenómeno y aquellos en donde el esfuerzo se centra en la validación de los anteriores a través de mediciones de campo o en modelos físicos.

El presente trabajo es una aportación dentro del segundo rubro dedicado al cálculo numérico del fenómeno de dispersión. La hidrodinámica del fenómeno, representada por la ecuación unidimensional de convección-difusión, será desarrollada en el segundo capítulo, donde se presentan los conceptos básicos de los procesos de transferencia de masa, las definiciones principales del fenómeno así como las ecuaciones fundamentales en su forma diferencial y las simplificaciones e hipótesis formuladas.

En el tercer capítulo se presentan las soluciones analíticas más comunes y se profundiza en aquellas usadas para probar los modelos numéricos planteados en el cuarto capítulo.

Las soluciones numéricas, desarrolladas por diversos autores para resolver la ecuación de convección-difusión son numerosas y a veces muy refinadas, con la idea de evitar la difusión numérica y el comportamiento oscilatorio en la solución. Es muy común la práctica de separar efectos y resolver primero la parte convectiva y posteriormente la difusiva.

Esta forma de seccionar la ecuación se extiende fácilmente a los análisis de estabilidad, costumbre que, como se demuestra en el

cuarto capítulo, no es siempre la mejor manera de resolver los problemas de convección-difusión.

En ese mismo capítulo se desarrolla un nuevo criterio de estabilidad, haciendo uso del método de la analogía con la ecuación diferencial ordinaria (Aldama, 1985), para esquemas en diferencias finitas explícitos de primero y segundo orden.

Se obtienen los criterios de estabilidad como funciones limitantes de los números de Courant y Péclet de malla, que a su vez restringen a los incrementos de distancia y tiempo a utilizar en los esquemas.

En el quinto capítulo se presentan ejemplos de los resultados que se obtienen de aplicar los esquemas explícitos con las condiciones de estabilidad presentadas. Se comparan, en un primera parte con las soluciones analíticas y en una segunda sección, contra las mediciones experimentales reportadas por Fischer en 1967.

Al final del trabajo se presentan las conclusiones y recomendaciones que se desprenden del mismo, así como los apéndices y referencias utilizadas para el desarrollo de la presente tesis.

2.- FUNDAMENTOS DE LOS PROCESOS DE DIFUSIÓN

En éste capítulo se presentan los conceptos básicos de los procesos de transferencia de masa, las definiciones principales del fenómeno de difusión, así como las ecuaciones fundamentales en su forma diferencial y las simplificaciones e hipótesis formuladas en su obtención.

2.1.- Descripción y definiciones

El fenómeno de la difusión es un problema de transferencia de masa, definido como el movimiento de un constituyente cualquiera dentro de un disolvente, desde una región de mayor a una de menor concentración. Dicho movimiento ocurre de dos maneras: molecular (microscópicamente por el movimiento propio de las moléculas) y convectivo (transferencia asociada a las características dinámicas del flujo, como velocidad y turbulencia).

La difusión molecular por si sola en general no provoca consecuencias directas en problemas ambientales, salvo en cuestiones relacionadas con escalas microscópicas de reacciones químicas o biológicas. Por otro lado, los procesos de dispersión y difusión de contaminantes en flujos de agua son fuertemente análogos a los de difusión molecular, pero a una escala mayor. Debido a lo anterior, es conveniente conocer los conceptos básicos de la transferencia de masa a nivel molecular.

2.1.1.- Conceptos básicos y definiciones

Previamente al estudio de procesos difusivos, es conveniente establecer y definir ciertos conceptos asociados a los problemas ambientales. En forma general, estos conceptos se refieren a los procesos físicos del flujo en cuerpos de agua que provocan un transporte y mezclado de contaminantes, llamados procesos de transporte, entre los cuales se pueden mencionar los siguientes (Fischer et al., 1979):

Convección. - Transporte debido a la hidrodinámica del cuerpo de agua, también conocido como 'advección'.

Difusión (molecular). - Transporte dilutivo de partículas provocado por movimientos e interacciones a nivel molecular.

Difusión (turbulenta). - Transporte de partículas generado por movimientos turbulentos, análogo a la difusión molecular pero a una mayor escala.

Dispersión. - Transporte de partículas, como en el caso del crecimiento de una nube de contaminante, debido a efectos combinados de convección y difusión.

Mezclado. - Proceso que provoca un efecto de combinación entre las moléculas de soluto y disolvente.

En torno a conceptos básicos se pueden definir en un sistema binario de componentes A,B (Welty et al., 1959), las siguientes propiedades:

$$\text{Densidad: } \rho_A = \frac{m_A}{V_0} \quad ; \quad \rho_B = \frac{m_B}{V_0} \quad ; \quad \rho_A + \rho_B = \rho \quad (2.1)$$

$$\text{Concentración: } C_A = \frac{\rho_A}{\rho} \quad ; \quad C_B = \frac{\rho_B}{\rho} \quad ; \quad C_A + C_B = 1 \quad (2.2)$$

$$\text{Vector de flujo de masa: } \bar{N}_A = \rho_A \bar{v}_A \quad (2.3)$$

donde \bar{v}_A es el vector de velocidad media de las moléculas del componente A

Velocidad hidrodinámica local:

$$\bar{V} = \frac{\bar{N}_A + \bar{N}_B}{\rho_A + \rho_B} = \frac{\rho_A \bar{v}_A + \rho_B \bar{v}_B}{\rho} = C_A \bar{v}_A + C_B \bar{v}_B \quad (2.4)$$

Vector de flujo de masa con respecto a la velocidad hidrodinámica:

$$\bar{q} = \rho_A (\bar{v}_A - \bar{V}) \quad (2.5)$$

2.1.2.- 1a. Ley de Fick de la difusión

Como en muchos procesos físicos, la observación conduce a una descripción empírica seguida de una validación teórica basada en argumentos físicos y matemáticos. Un ejemplo es la ley de Fourier de intercambio de calor¹, que fué usada como la base para el desarrollo de la teoría de transferencia de calor mucho antes de que el proceso termodinámico del fenómeno fuera entendido.

Los procesos difusivos entre fluidos no homogéneos guardan una analogía con los procesos térmicos. Para difusión, Adolph Fick, fisiólogo alemán, publica en 1855 bajo el título "Über Diffusion" el concepto de cómo la ley de Fourier puede conducir a una hipótesis para describir el proceso de difusión molecular. Citando la fuente original (Welty et.al., 1969): "Es natural el suponer que esta ley de difusión de sal en su disolvente debe ser idéntica a la difusión del calor; de esta relación Fourier estableció su teoría de calor, y en la misma forma Ohm la aplicó con éxito a la difusión de la electricidad en un conductor".

La ley de Fick se basó originalmente en evidencias físicas y es utilizada ampliamente como dogma. Con la finalidad de aclarar cómo el movimiento aleatorio de partículas (por difusión molecular o turbulenta) a través de una frontera conduce a la ley de Fick, supóngase una frontera que divide dos regiones (A,B) de partículas

¹El flujo de calor por unidad de área en cualquier dirección es proporcional al gradiente de temperatura en dicha dirección.

(X y D), donde se define a la concentración en cada región como el cociente del número de partículas marcadas X entre el número total de partículas en la región. El gradiente será entonces la diferencia entre las concentraciones de las dos regiones.

Si se obliga a un intercambio a una razón de transferencia entre partículas de las dos regiones (partículas/segundo), se puede simular numéricamente cómo el paso al azar de partículas por la frontera conduce a un gradiente de concentraciones.

La simulación se realizó con un programa que divide dos regiones con 10,000 partículas en cada una. En la zona A se marcaron en forma uniforme las partículas X variando el porcentaje de concentración inicial y se realizaron pruebas con distintas velocidades de transferencia. A manera de ejemplo, se muestra la figura 2.1 donde puede verse que efectivamente los resultados conducen a gradientes de concentraciones tendientes a un valor de equilibrio en el infinito.

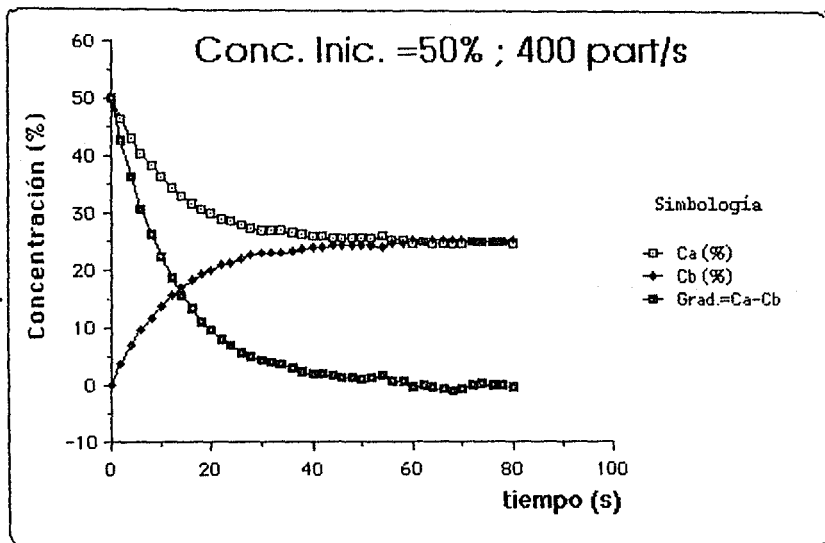


Figura 2.1. - Simulación numérica de la 1ª. ley de Fick.

Observando la difusión de dos o más especies identificables en un fluido no homogéneo, el principio de conservación de la materia debe satisfacerse por cada componente o especie de la mezcla. El comportamiento de los procesos de transferencia se debe a una "fuerza de intercambio" proporcional a un gradiente de concentraciones, es decir, de la existencia de regiones con diferentes grados de concentración de la sustancia.

Se puede plantear una expresión que relacione la rapidez de transferencia de una sustancia de masa M con la magnitud del gradiente, de la forma:

$$\frac{dM/dt}{\text{Área}} \cong \frac{dM/V_0}{ds} \quad (2.6)$$

donde:

V_0	Volumen.
s	Dirección de transferencia.
$\frac{dM/dt}{\text{Área}}$	Transferencia, por unidad de tiempo, de M por unidad de área normal a la dirección s .
$\frac{dM/V_0}{ds}$	Gradiente de M , por unidad de volumen en la dirección de transferencia.

Si M es la cantidad de masa disuelta $M = \Delta m C$, donde C es la concentración definida como la masa de sustancia disuelta por unidad de masa del fluido (ecs. 2.2). Para transformar la proporcionalidad (2.6) por una igualdad, se puede introducir una constante del proceso D (difusividad de masa, con unidades $L^2 T^{-1}$), conocido como coeficiente de difusión molecular. Con esto, la ecuación (2.6) se transforma en:

$$\frac{d(\Delta m C)}{dt} \frac{1}{\Delta x \Delta y} = q_x = -D \frac{d}{dx} \left[\frac{\Delta m C}{\Delta V_0} \right] = -D \frac{d}{dx} [\rho C] \quad (2.7)$$

Donde q_x es el flujo de transferencia de masa y el signo (-) indica que el transporte es de zonas de mayor a menor concentración. Si la densidad del fluido es constante, como es razonable suponer, $\rho = \Delta m / \Delta V_0$; con lo cual $d(\rho C) / dx = \rho dC / dx$,

entonces, la ecuación (2.7) puede escribirse:

$$q_x = - \rho D \frac{dC}{dx}$$

Similarmente para las direcciones y, z ; considerando que el coeficiente D se mantiene constante:

$$q_y = - \rho D \frac{dC}{dy}$$

$$q_z = - \rho D \frac{dC}{dz}$$

así, usando notación vectorial se puede escribir:

$$\bar{q} = - \rho D \nabla C \quad (2.8)$$

La ecuación (2.8), conocida como 1a. ley de Fick, establece que el flujo de masa por unidad de área y tiempo ($ML^{-2}T^{-1}$), es proporcional al gradiente de la concentración del soluto en la dirección de transferencia.

2.1.3.- Ecuación de conservación de masa en procesos difusivos

Combinando el flujo de masa con relación a la velocidad hidrodinámica, ecuaciones (2.3) y (2.5) se puede escribir:

$$\bar{q}_A = \rho_A \left[\frac{\bar{N}_A}{\rho_A} - \bar{v} \right] \quad (2.9)$$

Despejando el flujo de masa \bar{N}_A tenemos:

$$\bar{N}_A = \left[\frac{\bar{q}_A}{\rho_A} + \bar{v} \right] \rho_A = \bar{q}_A + \rho_A \bar{v} \quad (2.10)$$

Utilizando la primera ley de Fick (2.8) y como $\rho_A = \rho C_A$, la ecuación (2.10) se transforma en:

$$\bar{N}_A = -\rho D \nabla C_A + \rho C_A \bar{v} \quad (2.11)$$

La expresión (2.11) representa el vector de flujo de masa de la especie A y el operador $\nabla_{\mathbf{A}}$ es el gradiente de la concentración en direcciones triortogonales (ver apéndice A).

Partiendo del principio de conservación de la materia en un volumen de control diferencial (ver figura 2.2), se puede plantear:

$$\left[\begin{array}{l} \text{El flujo neto de masa} \\ \text{a través de la S.C.} \\ \text{(Entrada - Salida)} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{Rapidez de producción} \\ \text{de masa de especie A.} \\ r_{\mathbf{A}} (dx \, dy \, dz) \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Acumulación de} \\ \text{masa en el V.C.} \\ (\partial \rho_{\mathbf{A}} / \partial t) \end{array} \right]$$

es decir:

$$(\bar{N}_{\mathbf{A}(\text{ent})} - \bar{N}_{\mathbf{A}(\text{sal})}) + r_{\mathbf{A}} (dx \, dy \, dz) = (\partial \rho_{\mathbf{A}} / \partial t) \quad (2.12)$$

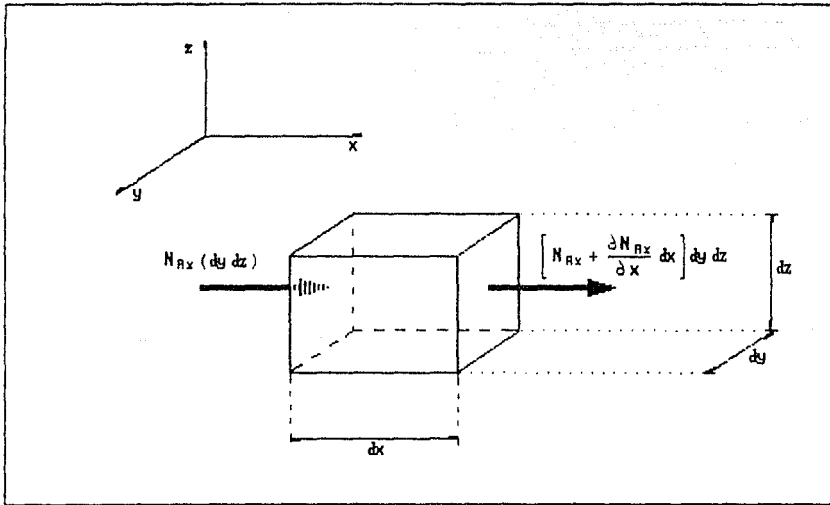


Figura 2.2. - Flujo de masa y principio de conservación.

Analizando en la dirección x :

$$(\text{Ent.} - \text{Sal.}) = N_{\mathbf{A}x} (dy \, dz) - \left[N_{\mathbf{A}x} + \frac{\partial N_{\mathbf{A}x}}{\partial x} dx \right] dy \, dz = - \frac{\partial N_{\mathbf{A}x}}{\partial x} dx \, dy \, dz$$

Con ecuaciones análogas para las otras direcciones, y sustituyendo estas en (2.12) se tiene:

$$-\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x} dx dy dz - \frac{\partial N_{Ay}}{\partial y} dx dy dz - \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} dx dy dz + r_A dx dy dz = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dx dy dz$$

es decir:

$$-(dx dy dz) \left[\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial N_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} \right] + r_A dx dy dz = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dx dy dz \quad (2.13)$$

Dividiendo entre el volumen (dx dy dz) y agrupando términos en forma vectorial

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{N}_A = r_A \quad (2.14.a)$$

En forma análoga para la sustancia B se tiene:

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{N}_B = r_B \quad (2.14.b)$$

En un sistema binario y conservativo, suponiendo que la producción de A solo ocurre a expensas de B, y que la masa total del sistema debe conservarse, implica que $r_A = -r_B$, por lo que sumando las ecuaciones (2.14):

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{N}_A + \nabla \cdot \bar{N}_B = 0 \quad (2.15)$$

Y haciendo uso de (2.1) y (2.4) se tiene que para un sistema conservativo de cualquier número de componentes, siempre y cuando se cumpla que $\sum \rho_i = \rho$; $\sum C_i = 1$, se puede escribir:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V}) = 0 \quad (2.16)$$

La ecuación (2.16) es la ecuación general de continuidad para la mezcla y es completamente análoga a la de un fluido homogéneo.

Considerando solo el comportamiento del soluto o contaminante en el disolvente y retomando las ecuaciones (2.11) y (2.14.a) con $\rho_A = \rho C_A$ se llega a:

$$\frac{\partial (\rho C_A)}{\partial t} + \nabla \cdot (-\rho D \nabla C_A + \rho C_A \bar{V}) = r_A \quad (2.17)$$

Desarrollando vectorialmente, eliminando el subíndice A por sencillez notacional y agrupando términos se tiene, :

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \rho C \nabla \cdot \vec{V} + \vec{V} \cdot \nabla \rho C = \rho D \nabla^2 C + \nabla C \cdot (\nabla \rho D) + r \quad (2.18)$$

Si se considera que el flujo es prácticamente incompresible, de la ecuación (2.16) con $\rho = \text{cte}$ resulta que $\nabla \cdot \vec{V} = 0$; aceptando que D es constante, es decir que la difusión molecular es la misma en cualquier dirección, y dividiendo entre ρ la ecuación (2.18) se reduce a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C + \frac{r}{\rho} \quad (2.19)$$

Si además se supone flujo conservativo, es decir en el que no existen reacciones (generación o desaparición de masa) $r/\rho = 0$, finalmente se llega a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C \quad (2.20)$$

La ecuación (2.20) es conocida como la de conservación de masa de un contaminante en un volumen de control sujeto a convección y difusión, también llamada ecuación de la difusión convectiva.

Resumiendo las hipótesis que se aceptan en la ecuación (2.20), se puede decir: que se considera un flujo incompresible, se adopta la ley de Fick de simple proporcionalidad entre la difusión del contaminante y el gradiente de las concentraciones, el coeficiente de difusión molecular se toma como propiedad exclusiva entre el tipo de contaminante y el flujo, flujo conservativo sin reacciones químicas ni biológicas en el medio. Todas estas simplificaciones son suficientemente cercanas al comportamiento de mezclas en la realidad en un grupo amplio de cuerpos de agua, salvo por el coeficiente de difusión del cual se hablará mas adelante.

2.2. - Ecuaciones de difusión

Hasta ahora se ha planteado la ecuación de conservación de masa de una sustancia en un cuerpo de agua a través de la ley de Fick. A partir de la ecuación (2.20) es posible encontrar simplificaciones que permitan reproducir los casos más comunes en la práctica, iniciando la presentación en flujo laminar con difusión molecular.

Flujo en reposo (Difusión pura). - Suponiendo que el cuerpo de agua en estudio esté estacionario o en reposo, entonces $\bar{V}(x,y,z,t)=0$, y la ecuación (2.20) se reduce a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C \quad (2.21)$$

que expresada en forma extendida en coordenadas cartesianas:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (2.22)$$

Si D se considera constante, el proceso es lineal; analizando la dirección x se puede encontrar una solución fundamental al proceso descrito por la ecuación (2.22), que representa la evolución del contaminante por difusión de una cantidad de masa M introducida en el origen. Unidimensionalmente la ecuación se simplifica a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \quad (2.23)$$

Como puede verse, la ecuación anterior es lineal, y su solución puede ser usada como base para construir soluciones a problemas con condiciones iniciales y de frontera más complejos (ver capítulo 3). La solución fundamental de (2.23) se puede obtener con diversas técnicas matemáticas (Crank, 1956). Una de las más sencillas es la que utiliza el análisis dimensional (Fischer et al, 1979) y que se presenta a continuación el resultado:

$$C(x,t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left(-x^2/4Dt \right) \quad (2.24)$$

La concentración se representa por una distribución Gaussiana o

normal cuando la masa es unitaria, $M=1$, para un tiempo dado. En la figura 2.3 se muestra la distribución de concentraciones ante una condición inicial de impulso.

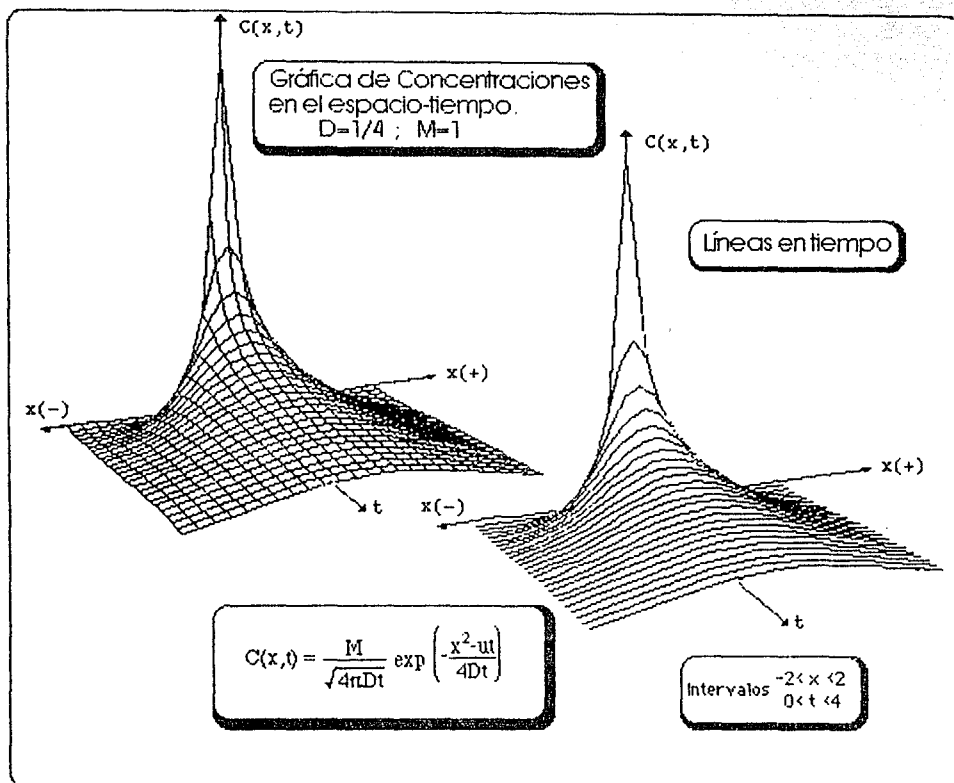


Figura 2.3. - Difusión unidimensional, ecuación (2.24)

En dos dimensiones, la ecuación (2.22) se puede escribir como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (2.25)$$

Las soluciones para dos y tres dimensiones se presentarán en el capítulo 3 en donde además se analizará la forma de las soluciones

analíticas para problemas con condiciones de frontera e iniciales más complicadas.

Fluido en movimiento (Convección-Difusión)..- En la sección anterior se ha supuesto que el fluido es estacionario y que el transporte de masa es exclusivamente por efectos difusivos moleculares. Si el fluido está en movimiento con vector de velocidad \bar{V} , con componentes u, v, w en las direcciones x, y, z respectivamente, la ecuación (2.20) se expresa en su forma completa, y extendida en coordenadas cartesianas es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (2.26)$$

Suponiendo flujo unidimensional con velocidad constante u en la dirección x , se obtiene la siguiente expresión simplificada:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.27)$$

indicando que los gradientes en y, z son despreciables o que se desarrolló completamente el mezclado transversal y vertical. La ecuación (2.27), una vez modificada para tomar en cuenta la difusión turbulenta, será la que permita representar el comportamiento dispersivo de un contaminante en una corriente con flujo uniforme.

2.3. - Difusión turbulenta

En la sección anterior se trabajó con difusión molecular e implícitamente en flujo laminar. En la práctica la mayoría de los escurrimientos son turbulentos. Es difícil definir un movimiento turbulento, pero éste puede identificarse por las siguientes características:

a) La masa introducida en el escurrimiento se dispersará mucho más

rápido en flujo turbulento que en laminar. Un ejemplo clásico es el experimento de Reynolds, donde la inyección de tinta en un flujo laminar genera un trazo recto lentamente dispersivo al centro de una tubería, mientras en flujo turbulento se dispersa en forma casi instantánea y transversal a la inyección de la tinta.

b) Las velocidades y presiones medidas en un punto en el flujo son oscilantes con un componente aleatorio importante. Es este comportamiento aleatorio el que permite pensar en que el flujo turbulento ocurre en un rango de tamaños o "escalas" de movimiento (escalas de turbulencia asociadas al escurrimiento).

El primer análisis de difusión en flujos turbulentos es el de Taylor en 1921 titulado "*Difusión por movimientos continuos*"; este extraordinario análisis ha subsistido por casi 7 décadas sin mejoras o cambios importantes aún cuando contempla un tipo muy particular de turbulencia, como es el caso de la turbulencia homogénea estacionaria. Como ejemplo de dicho campo, puede citarse el flujo turbulento en una tubería infinitamente larga con difusión exclusivamente en el sentido axial.

Adicionalmente, el análisis de Taylor (1921), requiere que la velocidad media sea nula, lo que para el caso de la tubería puede lograrse moviendo el sistema de referencia a la velocidad media del flujo. Finalmente Taylor establece que después de un cierto tiempo inicial, la varianza de la dispersión de las partículas en un flujo homogéneamente turbulento crece linealmente con el tiempo, sugiriendo la posibilidad de definir un coeficiente de mezclado turbulento, análogo al coeficiente de difusión molecular a través de una relación estadística de la forma:

$$\sigma_x \approx \{U^2\} T_x \quad (2.28)$$

Donde $\{U^2\}$ representa la varianza de la nube dispersante y T_x el tiempo de mezclado en la dirección x . La analogía con la difusión molecular surge de inmediato (Fischer et al, 1979); al considerar a los flujos turbulentos de masa (\overline{UC} , \overline{VC} , \overline{WC}) que promediados en

el tiempo en las direcciones x, y, z resultan ser iguales a:

$$\overline{DC} = -\epsilon_x \frac{\partial C}{\partial x} ; \quad \overline{VC} = -\epsilon_y \frac{\partial C}{\partial y} ; \quad \overline{WC} = -\epsilon_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.29)$$

que si son comparados con la ley de Fick para difusión molecular (2.8), se observa que $\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z$ son los equivalentes turbulentos al coeficiente de difusión molecular, generalmente llamados coeficientes de difusión turbulenta o difusividades turbulentas.

Posteriormente, Kolmogorov en 1931 y 1933 presentó los fundamentos teóricos para el uso de la ecuación de difusión con coeficientes difusivos espacialmente variados y que en su forma más general puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \bar{V} \cdot \nabla C = & \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \text{términos} \\ & \text{similares} \end{aligned} \quad (2.30)$$

En donde si los comportamientos secundarios ($\epsilon_{xy}, \epsilon_{xz},$ etc.) se consideran despreciables, es decir las trayectorias difusivas en direcciones combinadas son pequeñas en comparación con las direcciones principales, se reduce a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (2.31)$$

La forma de la ecuación (2.31) aun cuando representa en forma completa el mezclado turbulento en rios, es lo suficientemente compleja como para resolverse con algún método numérico conocido.

La proporcionalidad que establece la ecuación (2.28) no fue analizada a profundidad sino hasta 1953 por el mismo Taylor que presenta un análisis completamente diferente (Taylor 1953, 1954) para la dispersión en flujos turbulentos. Como base del análisis destaca que la dispersión en la dirección del flujo es generada principalmente por la distribución longitudinal de velocidades en el sentido transversal al escurrimiento.

2.3.1.- Dispersión por efectos cortantes en flujo laminar

Debido a la importancia de fundamentar los mecanismos de dispersión se analizará, usando la metodología de Taylor, un plano x-y con distribución de velocidades en y con flujo solamente en la dirección x como se muestra en la figura 2.4. El flujo está confinado entre paredes paralelas separadas una distancia h , por lo que las líneas de corriente son paralelas.

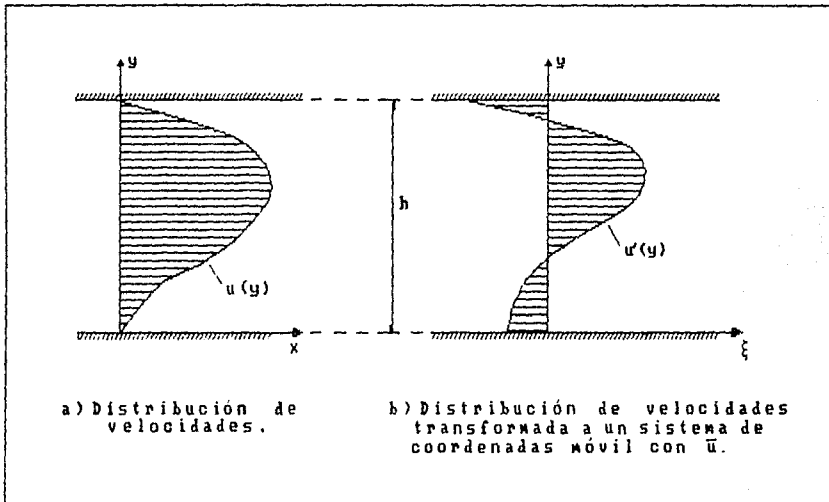


Figura 2.4.- Flujo para el análisis de Taylor, vista en planta.

La variación de velocidades está dada en función de y por $u(y)$, y la velocidad media \bar{u} para cualquier tipo de distribución de velocidades se obtiene por:

$$\bar{u} = \frac{1}{h} \int_0^h u(y) dy \quad (2.32)$$

Y la desviación de la velocidad $u'(y)$ con respecto a la media por:

$$u'(y) = u(y) - \bar{u} \quad (2.33)$$

Sea $C(x,y)$ la concentración del soluto en el escurrimiento y que

se propaga a razón de un coeficiente de difusión molecular D . La concentración media en cualquier sección del flujo es:

$$\bar{C} = \frac{1}{h} \int_0^h C(y) dy \quad (2.34)$$

Igual que para la velocidad, la desviación de la concentración con respecto a la media es:

$$C'(y) = C(y) - \bar{C} \quad (2.35)$$

Si el flujo se considera solamente en la dirección x , la ecuación de difusión (2.26) se transforma en:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{C} + C') + (\bar{u} + u') \frac{\partial}{\partial x} (\bar{C} + C') = D \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\bar{C} + C') + \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \right] \quad (2.36)$$

En primer lugar se analizará esta ecuación para flujo laminar, para posteriormente aplicarla en flujos turbulentos reemplazando D por el respectivo coeficiente de difusividad turbulenta. La ecuación (2.36) se puede transformar a un sistema coordenado cuyos ejes se desplazan con la velocidad media del flujo:

$$\xi = x - \bar{u} t \quad ; \quad \tau = t \quad (2.37)$$

Y aplicando la regla de la cadena:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \tau}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (2.38.a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tau} = -\bar{u} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \tau} \quad (2.38.b)$$

Por lo que (2.36) se transforma en:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\bar{C} + C') + \bar{u}' \frac{\partial}{\partial \xi} (\bar{C} + C') = D \left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} (\bar{C} + C') + \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \right] \quad (2.39)$$

La transformación que conduce a la ecuación (2.39) en el sistema (ξ, τ) permite ver el flujo desde un punto moviéndose a su velocidad media. Si se acepta que la dispersión longitudinal por convección es mucho mayor que la provocada por difusión molecular, se elimina el término de la difusión longitudinal llegando a:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} + \frac{\partial C'}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} + u' \frac{\partial C'}{\partial \xi} = D \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \quad (2.40)$$

Como se puede observar, u' varía con y , por lo que (2.40) es una ecuación diferencial con coeficientes variables difícilmente manejable con los métodos de solución conocidos. Taylor obtuvo su solución con un despliegue admirable de ingenio, descartando tres de los cuatro primeros términos incluyendo $\partial \bar{C} / \partial \tau$ que es precisamente lo que se desea encontrar, llegando a una sencilla ecuación para $C'(y)$:

$$u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} = D \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \quad , \quad \text{con} \quad \frac{\partial C'}{\partial y} = 0 \quad \text{en} \quad y=0, h \quad (2.41)$$

La justificación a la cirugía mayor ejecutada sobre (2.40) se basa en los órdenes de magnitud de los términos descartados de la ecuación. En efecto, si aplicamos el operador integral (media) $\bar{\rho} = \frac{1}{h} \int_0^h (\rho) dy$ a cada término de (2.40) tenemos:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} + \overline{u' \frac{\partial C'}{\partial \xi}} = 0 \quad (2.42)$$

Donde el segundo término representa el promedio en la sección. Restando (2.42) de (2.40) se obtiene:

$$\frac{\partial C'}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} + u' \frac{\partial C'}{\partial \xi} - \overline{u' \frac{\partial C'}{\partial \xi}} = D \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \quad (2.43)$$

Si, como se mencionó al inicio del análisis bajo ciertas circunstancias (campo lejano), se espera el suficiente tiempo para lograr difusión transversal completa, \bar{C} y C' varían lentamente, por lo que $\partial \bar{C} / \partial \xi$ es prácticamente constante. Además C' será mucho menor que \bar{C} , por lo que el tercer y cuarto términos son del mismo orden de magnitud y su diferencia es despreciable, por lo que eliminándolos se llega a:

$$\frac{\partial C'}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} = D \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \quad (2.44)$$

Donde $(u' \partial \bar{C} / \partial \xi)$ toma el papel de un término "fuente" de magnitud

variable. El incremento neto proporcionado por dicha fuente es nulo, dado que la media de u' es cero. Si además la $\frac{\partial \bar{C}}{\partial x}$ es constante, la solución a la ecuación reducida (2.44) se obtiene al resolver (2.41). En otras palabras, la eliminación efectuada por Taylor de los tres primeros términos en la ecuación (2.40) queda justificada.

Continuando con el análisis, la ecuación (2.41) tiene como solución:

$$C'(y) = \frac{1}{D} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \int_0^y \int_0^y u' dy dy + C'(0) \quad (2.45)$$

La ecuación (2.45) implica que la variación de la concentración con respecto a la media en la sección transversal, $C'(y)$, se establece por simple balance entre el transporte longitudinal por convección y la difusión transversal (ver figura 2.5), asumiendo que el balance se dará después de cierto tiempo inicial².

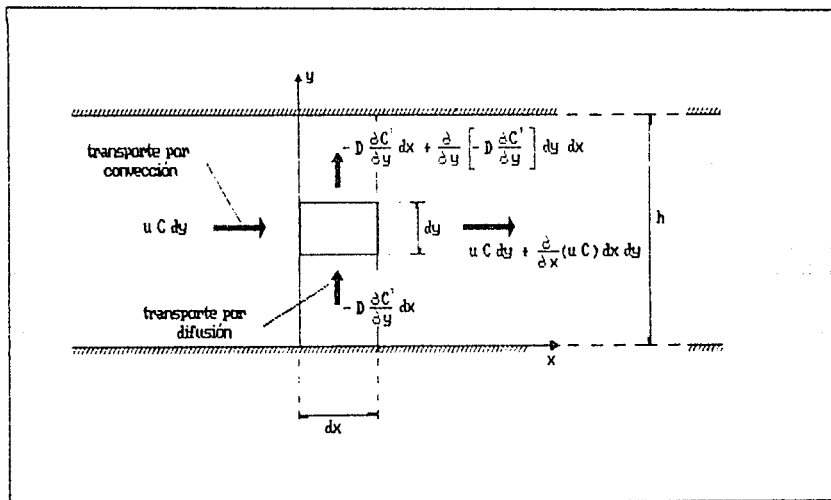


Figura 2.5. - Balance entre transporte por convección y difusión.

² Chatwin, 1970 y Fischer, 1979 establecen que el tiempo necesario para alcanzar el balance es aproximadamente $(10.4 h^2/D)$.

Considerando que la variación de masa en la dirección del escurrimiento es:

$$\dot{M} = \int_0^h u' C' dy = \frac{1}{D} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \int_0^h u' \int_0^y \int_0^y u' dy dy dy \quad (2.46)$$

De la ecuación (2.46) se deduce que en forma idéntica a la difusión molecular *el transporte de masa en la dirección del flujo es proporcional al gradiente de la concentración en el sentido del transporte*. A partir de este resultado, se puede definir un coeficiente de proporcionalidad análogo al coeficiente de difusión molecular dado por la relación:

$$\dot{M} = -h K \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \quad (2.47)$$

En donde K se conoce como el coeficiente de dispersión longitudinal; igualando (2.46) y (2.47) y despejando el valor de K se obtiene:

$$K = -\frac{1}{hD} \int_0^h u' \int_0^y \int_0^y u' dy dy dy \quad (2.48)$$

K juega el mismo papel que D pero en una escala macroscópica. De aquí, se puede escribir la ecuación unidimensional de difusión para valores medios en la sección y en el sistema móvil de coordenadas como:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} = K \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \bar{x}^2} \quad (2.49)$$

Introduciendo el término convectivo para regresar al sistema coordenado fijo, se tiene finalmente:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + u \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.50)$$

La expresión (2.50) es conocida como la "ecuación unidimensional de dispersión longitudinal".

2.3.2. - Dispersión en flujo turbulento

La extensión del análisis de Taylor para flujo turbulento es directa: la distribución de velocidades variará de magnitud con respecto al flujo laminar y el coeficiente de mezclado transversal tomará el papel del coeficiente de difusión molecular. Por lo demás no hay diferencias y las conclusiones hasta ahora obtenidas para la ecuación de dispersión unidimensional son igualmente válidas y se aplican sin cambios.

La única diferencia significativa en la ecuación está en la inclusión del coeficiente de mezclado transversal $\epsilon(y)$. Al introducir la variación del coeficiente de mezclado transversal como una función de y , las ecuaciones (2.41) y (2.48) se transforman en:

$$u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \epsilon(y) \frac{\partial C}{\partial y} \quad (2.51)$$

$$K = - \frac{1}{h} \int_0^h u \cdot \int_0^y \frac{1}{\epsilon} \int_0^y u' dy dy dy \quad (2.52)$$

La extensión del análisis para flujo turbulento fué hecha por primera vez por Taylor en 1954 para el caso de una tubería de radio a , en donde la distribución de velocidades para flujo turbulento es:

$$u = u_0 - \sqrt{\tau_0/\rho} f(Z) = u_0 - u^* f(Z) \quad (2.53)$$

En esta expresión, τ_0 es el esfuerzo cortante en el contacto del fluido y tubería, u_0 es la velocidad máxima al centro del tubo, $f(Z)$ es una función empírica de la distribución de velocidades (Taylor, 1954) y $u^* = \sqrt{\tau_0/\rho}$ se conoce como la velocidad de cortante.

A través de un balance de esfuerzos locales, Taylor integra

numéricamente la ecuación (2.51) obteniendo para coordenadas radiales que:

$$u \frac{\partial C}{\partial r} = \epsilon \left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right] \quad (2.54)$$

e integrando nuevamente para encontrar el valor de K, obtiene su conocida relación para tuberías:

$$K = 10.1 \text{ a } u^* \quad (2.55)$$

Posteriormente Elder en 1959 analiza un flujo infinitamente ancho en un plano inclinado y toma el perfil logarítmico de von Karman para la distribución de velocidades de la forma:

$$u' = (u^*/k) (1 + \ln y') \quad (2.56)$$

donde k es la constante de von Karman, que generalmente es igual a 0.4; $y' = y/d$, donde d es el tirante del escurrimiento. Efectuando un balance de fuerzas similar al del flujo en la tubería se obtiene:

$$\tau = \rho \epsilon \frac{du}{dy} = \tau_0 (1 - y') \quad (2.57)$$

de donde se encuentra que:

$$\epsilon = ky' (1 - y') d u^* \quad (2.58)$$

El valor de K se obtiene de sustituir (2.56) y (2.58) en (2.52) e integrar, obteniéndose:

$$K = \frac{0.404}{k^3} d u^* \quad (2.59)$$

Elder tomó $k=0.41$ y llegó a su conocida relación:

$$K = 5.93 d u^* \quad (2.60)$$

En forma general, el coeficiente de dispersión longitudinal en flujos unidireccionales turbulentos se puede plantear introduciendo las variables adimensionales $y' = y/h$; $u'' = u' / \sqrt{u'^2}$; $\epsilon' = \epsilon/E$ en (2.52). Siendo E el promedio en la sección

transversal de ϵ ; $\sqrt{u^{-2}}$ es la intensidad de la desviación de la velocidad. Se puede escribir entonces que (Fischer et al, 1979):

$$K = \frac{h^2 u^{-2}}{E} I \quad (2.61)$$

En donde I es la integral adimensional definida por:

$$I = - \int_0^1 u'' \int_0^{y'} \frac{1}{\epsilon} \int_0^{y''} u'''' dy'' dy' dy \quad (2.62)$$

Las ecuaciones (2.61) y (2.62) se integran numéricamente y se usan en cauces naturales para predecir K a partir de mediciones de velocidad.

3.- SOLUCIONES ANALÍTICAS

Existe una amplia gama de soluciones analíticas que resuelven el problema de difusión para distintas condiciones iniciales y de frontera. Dada la analogía entre los procesos de transferencia de masa y de calor, la descripción matemática de los procesos es muy similar. Dos textos clásicos que presentan las soluciones fundamentales de la difusión de calor son los de Carslaw y Jaeger (1959) y Crank (1956), y la solución a los problemas más comunes de difusión puede encontrarse en dichos volúmenes.

En este capítulo se presentarán las soluciones analíticas más comunes y se profundizará en aquellas usadas para probar los modelos numéricos planteados en el cuarto capítulo.

3.1.- Difusión pura

En la sección 2.2 se obtuvo la ecuación de difusión unidimensional (2.23) y su solución (2.24). En la figura 2.2 se muestra dicha solución. En la misma sección se indicó que esta solución puede ser utilizada como base para construir otras para condiciones de frontera e iniciales más complejas. Es importante mencionar que la mayoría de las soluciones tienen como base las propiedades de una distribución Gaussiana (Crank, 1956) con parámetros $\mu = 0$ y $\sigma = \sqrt{2Dt}$ (media y desviación estándar).

Generalmente la desviación estándar se toma como una medida de la dispersión o crecimiento de la nube de contaminante. En problemas prácticos una adecuada estimación de la magnitud de la masa dispersante es 4σ y para la cuantificación del coeficiente de difusión frecuentemente se utiliza la derivada de la varianza $d\sigma^2/dt = 2D$ (Fischer, 1979).

A continuación se presentan algunas de las soluciones analíticas más comunes para distintas condiciones iniciales y de frontera para flujo unidimensional.

La ecuación (2.23) a resolver es:

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

con las condiciones siguientes:

Condición inicial escalón. Las condiciones iniciales dadas por:

$$C(x,0) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ C_0, & x > 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

Con estas condiciones, la solución es:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right) \right] \quad (3.2)$$

donde erf es la "función error" (ver apéndice B, en donde se indica la función utilizada como aproximación para evaluar la función error), definida como:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\xi^2) d\xi \quad (3.3)$$

En la figura 3.1 se presenta gráficamente la ecuación (3.2), considerando en el eje de las abscisas la relación x/σ .

SOLUCION ANALITICA, EC. (3.2)

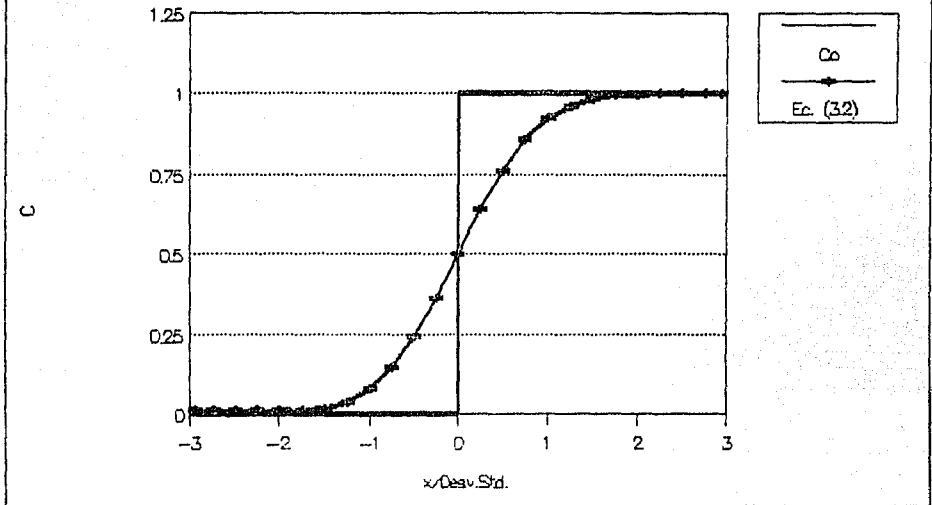


Figura 3.1. - difusión de una función escalón, ecuación (3.2).

Concentración inicial constante. Las condiciones iniciales y de frontera son:

$$\begin{cases} C(0,t)=C_0 & ; & 0 < t < \infty \\ C(x,0)=0 & ; & 0 < x < \infty \end{cases} \quad (3.4)$$

La solución a la ecuación (2.23) con dichas condiciones es:

$$C(x,t) = C_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right) \quad (3.5)$$

Donde erfc es el complemento de la función error definido por:

$$\operatorname{erfc}(Z) = 1 - \operatorname{erf}(Z) \quad (3.6)$$

En la figura 3.2 se encuentra la gráfica de la ecuación (3.5) para distintos valores en el tiempo.

SOLUCION ANALITICA, EC. (3.5)

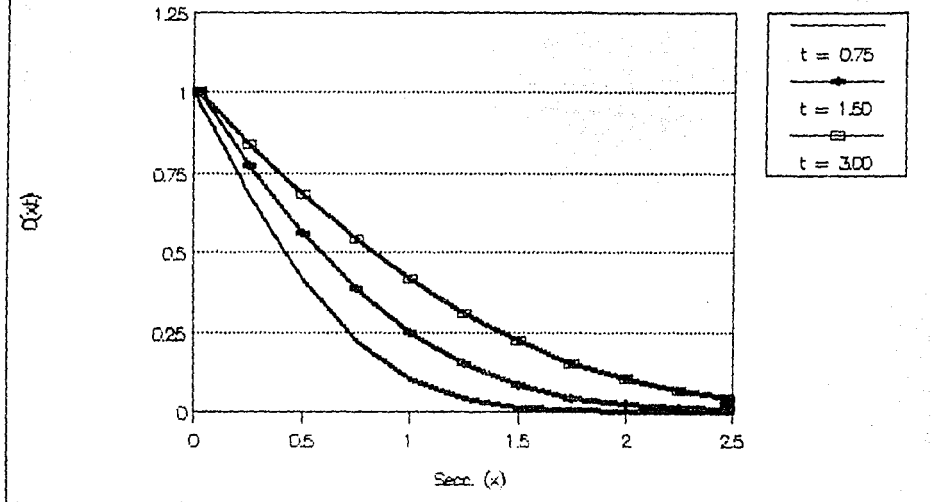


Figura 3.2. - Distribución de la concentración, ecuación (3.5)

Solución en dos dimensiones. De la ecuación (2.22) para dos dimensiones:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right] \quad (3.7)$$

Con una descarga instantánea de masa M , la solución está dada por:

$$C(x,y,t) = \frac{M}{4\pi Dt} \exp \left[-\frac{x^2 + y^2}{4Dt} \right] \quad (3.8)$$

En la figura 3.3 se presenta la gráfica de la ecuación (3.8), a manera de ejemplo, con $M=1$ y $D=1/4$ para distintos tiempos en el intervalo $(-5 < x < 5)$; $(-5 < y < 5)$.

La gráfica presenta el efecto de decaimiento del contaminante con

el paso del tiempo, ante una descarga instantánea y puntual en el origen del sistema coordenado.

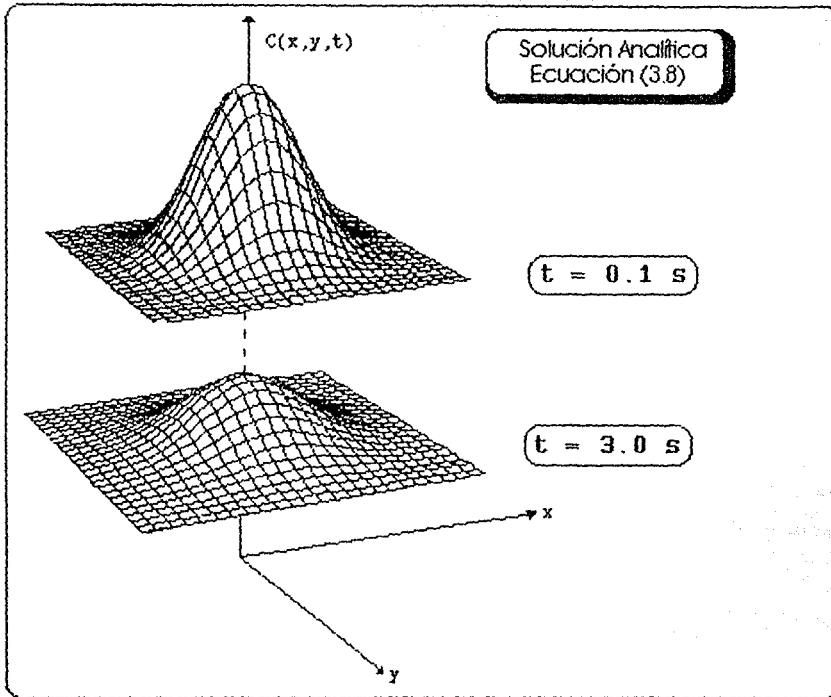


Figura 3.3. - Difusión de masa en dos direcciones, ecuación (3.8)

3.2 Convección-difusión

La ecuación a resolver para canales prismáticos de sección rectangular y en flujo uniforme, considerando turbulencia estacionaria, es la ecuación de dispersión longitudinal (2.50) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Utilizando la solución fundamental (2.24) y modificándola para tomar en cuenta el término convectivo, se pueden plantear las

siguientes soluciones (Fischer, 1979):

-Condición inicial de pulso. Al introducir una masa puntual M en el origen de un escurrimiento y después del tiempo necesario de mezclado (sección 2.3.1), con condiciones iniciales y de frontera:

$$\begin{cases} C(0,0)=C_0 \\ C(0,t)=0 ; C(x,0)=0 \end{cases}$$

para $x \geq 0 ; t \geq 0$, la solución es:

$$C(x,t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Kt}} \exp \left[-\frac{(x-ut)^2}{4Kt} \right] \quad (3.9)$$

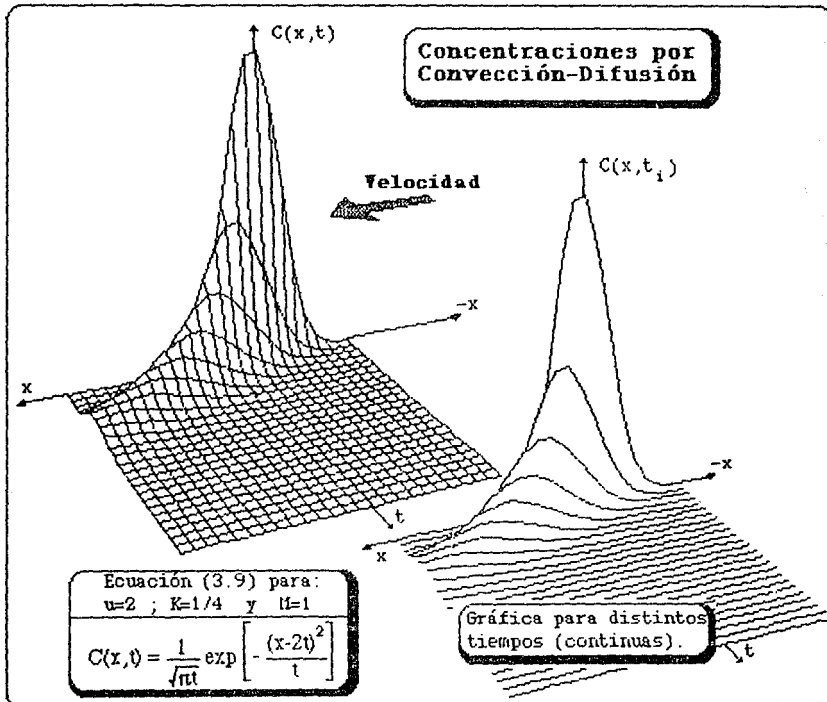


Figura 3.4. - Dispersión por convección-difusión, ecuación (3.9)

En la figura 3.4 se presenta la solución (3.9) con las siguientes condiciones: $M=1$; $K=1/4$; $u = 2$, reduciéndose para estos valores a:

$$C(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp \left[- \frac{(x - 2t)^2}{t} \right] \quad (3.10)$$

Comparando las figuras 2.2 y 3.4 se puede observar el efecto producido por la parte convectiva (dispersión por velocidad del flujo), introducido en la dispersión del contaminante.

-Concentración inicial constante. Una condición que impone un problema más complejo a analizar, es el de la descarga constante del contaminante en una determinada sección. Este tipo de solución es la más frecuentemente utilizada para comparar los resultados de los métodos numéricos (Taigbenu y Liggett, 1986), por lo que se desarrollará con mayor detalle.

Las condiciones del problema son:

$$\text{Ecuación:} \quad \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.50)$$

Condiciones iniciales y de frontera:

$$\begin{cases} C(x,0) = 0 & ; & 0 \leq x \leq \infty \\ C(0,t) = C_0 & ; & 0 \leq t \leq \infty \end{cases}$$

Cuando $t \rightarrow \infty$, la concentración para $x \rightarrow \infty$ se aproxima a C_0 : la solución analítica del problema es:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x-ut}{\sqrt{4Kt}} \right) + \operatorname{erfc} \left(\frac{x+ut}{\sqrt{4Kt}} \right) \exp \left(\frac{ux}{K} \right) \right] \quad (3.11)$$

Al ser la solución (3.11) la que se utiliza con mayor frecuencia para comparar los resultados arrojados por los métodos numéricos,

se planteará la solución a un problema con valores fijos.

Sea un canal rectangular de ancho unitario con concentración inicial y continua $C_0=1$ en toda la sección transversal que denominaremos origen ($x=0$), con los siguientes datos del escurrimiento:

Velocidad media a flujo uniforme: $U = 1.33 \text{ m/s}$

Coefficiente de dispersión longitudinal: $K = 666 \text{ m}^2/\text{s}$

Verificando (3.11) para las condiciones iniciales y de frontera:

+ En $x=0$; se debe tener $C=C_0=1$ para $0 \leq t \leq \infty$

sea $t_1 = 187.97\text{s}$

$$Ut_1 = 250 \text{ m} \quad ; \quad \sqrt{4Kt_1} = 707.64 \text{ m}$$

Definamos Z_1 y Z_2 como los argumentos del complemento de la función error (ver apéndice B, donde se presentan las propiedades de la función error y su complemento), por lo que para Z_1 se obtiene:

$$Z_1 = \frac{x - Ut_1}{\sqrt{4Kt_1}} = -0.353 \quad \therefore \text{erf}(-0.353) = -\text{erf}(0.353) = -0.3823$$

es decir que:

$$\text{erfc}(Z_1) = 1.3823$$

Ahora para el valor de Z_2 , se tiene:

$$Z_2 = \frac{x + Ut_1}{\sqrt{4Kt_1}} = +0.353 \quad \therefore \text{erf}(0.353) = 0.3823$$

$$\text{erfc}(Z_2) = 0.64671$$

finalmente:

$$\frac{Ux}{K} = 0 ; e^0 = 1 \quad \therefore \quad C(0, t_1) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc}(Z_1) + \operatorname{erfc}(Z_2) \right] = 1$$

Se puede probar que (3.11) cumple para cualquier combinación de condición inicial o de frontera.

En las figuras 3.5 y 3.6 se presentan las soluciones analíticas (ecuación 3.11) para 6 diferentes tiempos.

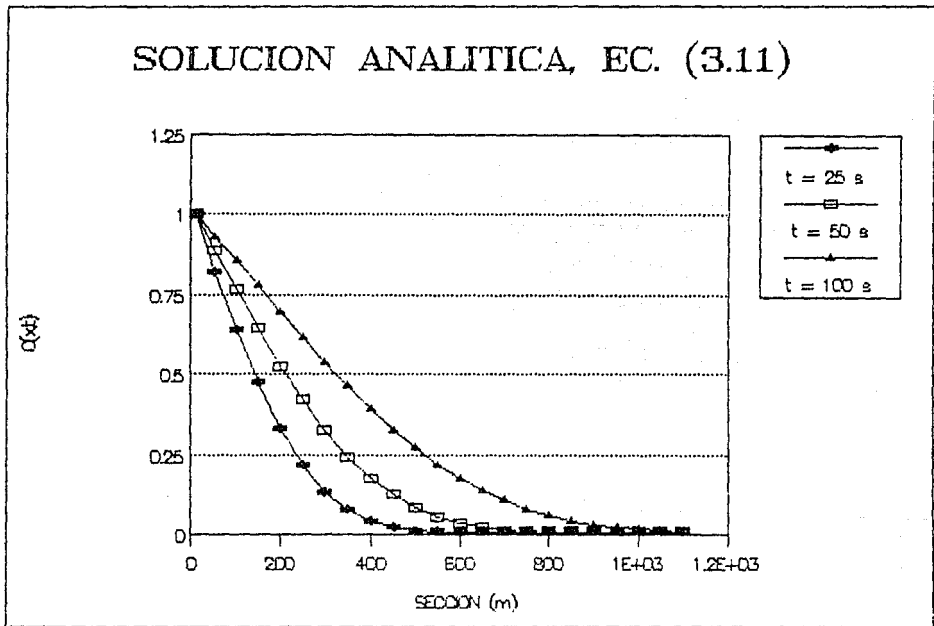


Figura 3.5. - Solución analítica para descarga continua (a)

SOLUCION ANALITICA, EC. (3.11)

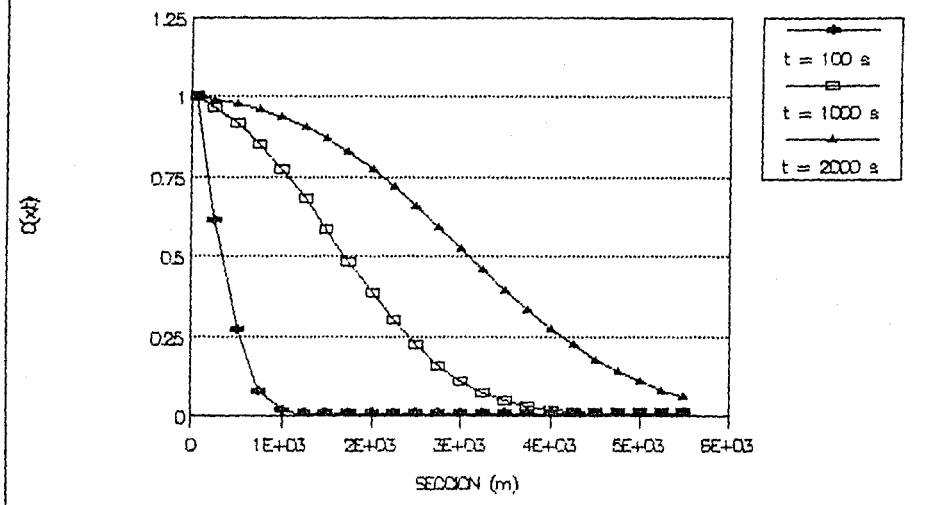


Figura 3.6. - solución analítica para descarga continua (b)

4.- SOLUCIONES NUMERICAS DE LA ECUACION DE DISPERSION LONGITUDINAL Y ANALISIS DE ESTABILIDAD

En los capítulos anteriores se han planteado la teoría y los conceptos básicos que describen el fenómeno de la transferencia de masa, al mismo tiempo que se presentan las ecuaciones de difusión y dispersión y algunas de sus soluciones analíticas, con la idea de predecir la concentración de contaminantes como función del espacio y del tiempo.

El uso de las soluciones analíticas queda restringido a condiciones iniciales y de frontera sencillas. Obtener resultados para condiciones iniciales y de frontera más complicadas (p.ej. condición inicial variada en el tiempo), requiere el uso de métodos numéricos para la solución de las ecuaciones.

Es necesario mencionar que tradicionalmente se han llevado a cabo esfuerzos importantes para la solución de la ecuación de dispersión mediante la separación de efectos (convección y difusión) y que, como hace notar Smith (1977), es fácil construir esquemas que conduzcan a errores en la solución.

En este capítulo se presenta la solución numérica de la ecuación de dispersión longitudinal sin separar efectos, con el método de diferencias finitas a través de esquemas explícitos y al final se introduce un análisis de estabilidad para dichos esquemas.

Es importante aclarar que el tipo de enfoque en el análisis de estabilidad no es el común (método matricial o por series de Fourier), sino es en gran medida original y utiliza un método propuesto recientemente por Aldama (1985), llamado "método de la analogía con la ecuación diferencial ordinaria". Es de destacar que en la revisión bibliográfica realizada, no se encontró ningún criterio de estabilidad para la ecuación conjunta de convección-difusión resuelta con esquemas en diferencias finitas explícitos.

4.1 Diferencias finitas

Las ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden lineales, en su forma más general, son de la forma (Smith, 1977):

$$a \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \phi}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial y} + f \phi + g = 0$$

y pueden ser de tipo elíptica, parabólica o hiperbólica cuando el discriminante ($b^2 - 4ac$) es menor, igual o mayor que cero respectivamente.

La ecuación de dispersión longitudinal para canal rectangular de ancho unitario con flujo uniforme unidimensional es (2.50):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Matemáticamente hablando, ésta es una ecuación diferencial parcial de segundo orden. Al calcular su discriminante resulta ($b^2 - 4ac = 0$), por lo que es una ecuación de tipo parabólica y susceptible de ser resuelta usando un esquema de diferencias finitas.

Las diferencias finitas, que son cocientes de diferencias como aproximación a derivadas, provienen de la serie de Taylor con cierto error de truncado.

Desarrollando funciones incrementales en series de Taylor:

$$C(x, t+\Delta t) = C(x, t) + \Delta t C'(x, t) + \frac{\Delta t^2}{2!} C''(x, t) + \frac{\Delta t^3}{3!} C'''(x, t) + \dots \quad (4.1)$$

$$C(x+\Delta x, t) = C(x, t) + \Delta x C'(x, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} C''(x, t) + \frac{\Delta x^3}{3!} C'''(x, t) + \dots \quad (4.2)$$

$$C(x-\Delta x, t) = C(x, t) - \Delta x C'(x, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} C''(x, t) - \frac{\Delta x^3}{3!} C'''(x, t) + \dots \quad (4.3)$$

Despreciando las derivadas de orden mayor a dos y despejando la primera derivada de la ecuación (4.1) se tiene que:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C(x, t+\Delta t) - C(x, t)}{\Delta t} \quad (4.4)$$

Restando (4.3) de (4.2) y despreciando términos mayores de tercer orden, se puede despejar la derivada en la dirección x como:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C(x+\Delta x, t) - C(x-\Delta x, t)}{2\Delta x} \quad (4.5)$$

Sumando (4.2) con (4.3) y despreciando derivadas mayores de cuarto orden, se despeja la segunda derivada en la dirección x :

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{C(x+\Delta x, t) - 2C(x, t) + C(x-\Delta x, t)}{\Delta x^2} \quad (4.6)$$

Cambiando la notación por sencillez: $C_j^n = C(x, t)$; $C_{j+1}^n = C(x+\Delta x, t)$
 $C_{j-1}^{n+1} = C(x-\Delta x, t+\Delta t)$, etc., donde el subíndice representa la sección en el espacio y el superíndice el nivel en el tiempo, y sustituyendo los cocientes de diferencias (4.4), (4.5) y (4.6) en la ecuación (2.50) se tiene:

$$\frac{1}{\Delta t} \left[C_j^{n+1} - C_j^n \right] + \frac{u}{2\Delta x} \left[C_{j+1}^n - C_{j-1}^n \right] = \frac{K}{\Delta x^2} \left[C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n \right] \quad (4.7)$$

Despejando para el siguiente nivel en el tiempo:

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} \left[C_{j+1}^n - C_{j-1}^n \right] + \frac{K\Delta t}{\Delta x^2} \left[C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n \right] \quad (4.8)$$

La ecuación (4.8) es un esquema de diferencias finitas explícito en el tiempo y centrado simétricamente en el espacio. La representación de (4.8) conduce a contar con una malla en (x,t) como se muestra en la figura 4.1, llamada "malla de diferencias finitas".

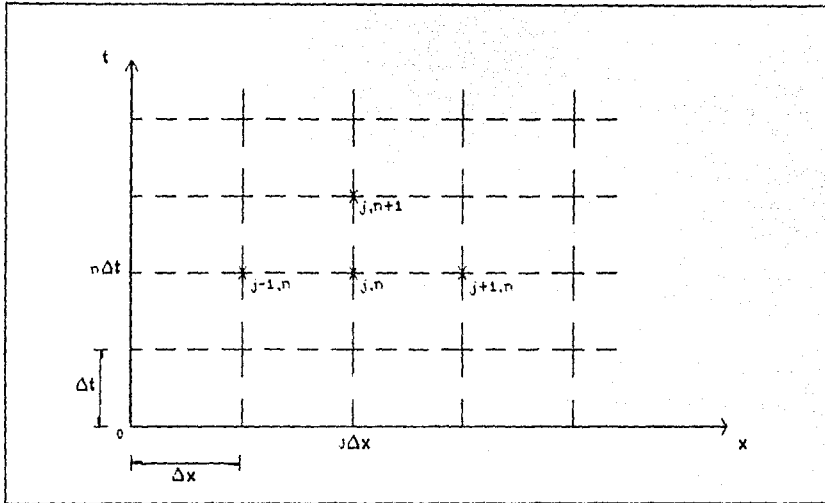


Figura 4.1. - Malla de diferencias finitas.

Se puede observar que es necesario conocer ciertos valores previos al cálculo de los valores en la malla, es decir para $t=0$ todos los valores en x ; y para $x=0$, $x=\infty$, los valores para toda t ; siendo los primeros la condición inicial y los segundos las condiciones de frontera del problema, que matemáticamente se expresan como:

$$C(x,0) \Rightarrow \text{Condición inicial}$$

$$\left. \begin{array}{l} C(0,t) \\ C(\infty,t) \end{array} \right\} \Rightarrow \text{Condiciones de frontera ; } t > 0$$

Con esta metodología es posible armar diferentes esquemas; explícitos (independientes en el tiempo) o implícitos

(dependientes de la solución en el mismo nivel de tiempo para las distintas secciones en el espacio).

4.2. - Esquemas explícitos

Los esquemas explícitos son cálculos independientes (se puede despejar la variable de interés) en el tiempo para una determinada sección en un intervalo superior. Esquemas de esta índole surgen de tomar cocientes de diferencias hacia adelante en el tiempo. Generalmente son esquemas que no requieren algoritmo alguno, ya que implican "moléculas de cálculo" a partir de valores conocidos, siendo necesario por otra parte conocer las condiciones iniciales y de frontera del problema.

4.2.1. - Esquemas de primer orden

De la ecuación (4.8) y definiendo los valores siguientes:

$$C = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad ; \quad \lambda = \frac{k\Delta t}{\Delta x^2} \quad ; \quad P = \frac{u\Delta x}{k} \quad \therefore \quad \lambda = \frac{C}{P}$$

Donde C es el número de Courant, P es el número de Péclét de malla y λ el cociente de ambos, dicha ecuación se puede escribir como:

$$C_j^{n+1} = C_{j-1}^n \left[\lambda + \frac{C}{2} \right] + C_j^n \left[1 - 2\lambda \right] + C_{j+1}^n \left[\lambda - \frac{C}{2} \right] \quad (4.9)$$

Si los cocientes de diferencias considerados son hacia atrás y adelante en el espacio para el tiempo $t=n\Delta t$:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_j^n - C_{j-1}^n}{\Delta x} \quad ; \quad \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_{j+1}^n - C_j^n}{\Delta x} \quad (4.10)$$

se pueden generalizar los esquemas explícitos de primer orden:

$$C_j^{n+1} = A_0 C_j^n + A_1 C_{j-1}^n + A_2 C_{j+1}^n \quad (4.11)$$

El esquema y los coeficientes se resumen en la tabla siguiente:

Esquema Explícito (4.11)	$C_j^{n+1} = A_0 C_{j-1}^n + A_1 C_j^n + A_2 C_{j+1}^n$		
	A_0	A_1	A_2
Dif. hacia atrás	$\lambda + C$	$1 - 2\lambda - C$	λ
Diferencia centrada	$\lambda + \frac{C}{2}$	$1 - 2\lambda$	$\lambda - \frac{C}{2}$
Dif. hacia adelante	λ	$1 - 2\lambda + C$	$\lambda - C$
$\lambda = \frac{K\Delta t}{\Delta x} = \frac{C}{P} \quad ; \quad C = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad ; \quad P = \frac{u\Delta x}{K}$			

Los esquemas representados por (4.11) se pueden plantear en forma de molécula de cálculo como se muestra en la figura 4.2.

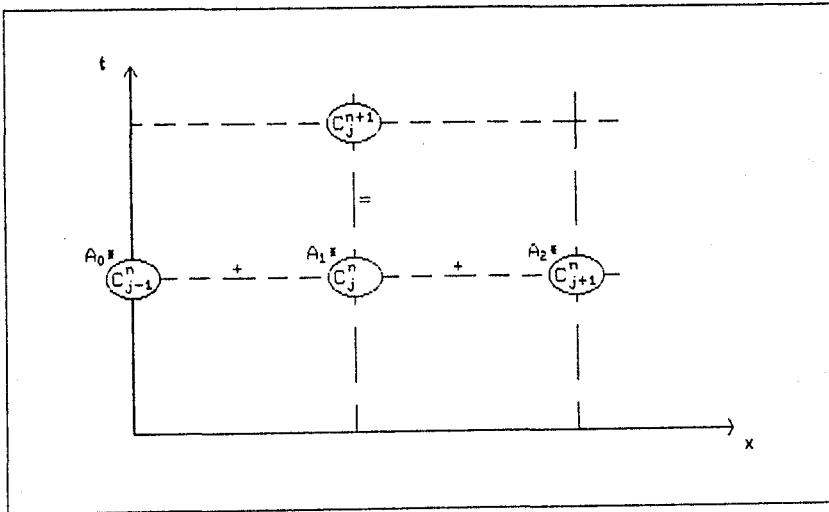


Figura 4.2. - Molécula de cálculo de esquemas explícitos (4.11)

4.2.2. Esquema de Adams-Bashforth

Otra forma de obtener los cocientes de diferencias es con base en promedios entre pasos, ya sea en el espacio o tiempo. Un claro

ejemplo de este tipo de discretización es el esquema de Adams-Bashforth de orden dos en diferencias centradas, que sustituido en la ecuación (2.50) conduce a:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left[C_j^{n+1} - C_j^n \right] + u \left[\frac{3}{2} \frac{C_{j+1}^n - C_{j-1}^n}{2\Delta x} - \frac{1}{2} \frac{C_{j+1}^{n-1} - C_{j-1}^{n-1}}{2\Delta x} \right] = \\ = K \left[\frac{3}{2} \frac{C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n}{\Delta x^2} - \frac{1}{2} \frac{C_{j+1}^{n-1} - 2C_j^{n-1} + C_{j-1}^{n-1}}{\Delta x^2} \right] \end{aligned} \quad (4.12)$$

Al despejar y agrupar el esquema en función de C y P se tiene

$$C_j^{n+1} = \frac{3}{2} \left(\lambda + \frac{C}{2} \right) C_{j-1}^n + (1-3\lambda) C_j^n + \frac{3}{2} \left(\lambda - \frac{C}{2} \right) C_{j+1}^n - \frac{1}{2} \left(\lambda + \frac{C}{2} \right) C_{j-1}^{n-1} + \lambda C_j^{n-1} - \frac{1}{2} \left(\lambda - \frac{C}{2} \right) C_{j+1}^{n-1} \quad (4.13)$$

La molécula de cálculo de (4.13) se muestra en la figura 4.3.

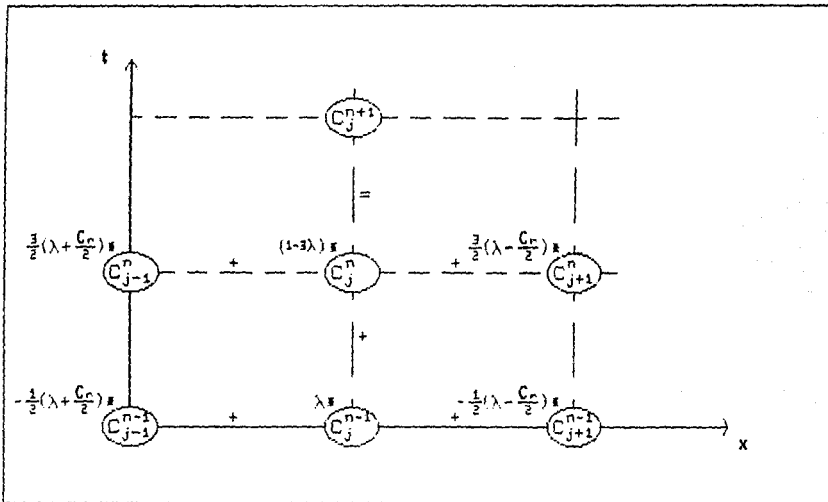


Figura 4.3. -Molécula de cálculo. Esquema de Adams-Bashforth.

Se puede observar que para el cálculo en el nivel $n+1$, es

necesario conocer dos niveles inferiores en el tiempo $(n-1, n)$. Como generalmente sólo se conoce la condición inicial, se debe utilizar un esquema diferente para calcular un primer paso, al inicio del cálculo siguiente al nivel inicial y posteriormente arrancar el esquema de 2o. orden.

Por ejemplo, se pueden combinar el esquema explícito central de 1er. orden simétrico como arrancador y a partir de $n=3$ utilizar el esquema de Adams-Bashforth/Central para los restantes cálculos.

4.3. Análisis de estabilidad

Uno de los inconvenientes al utilizar esquemas en diferencias finitas, sobre todo en su forma explícita, como aproximación a las ecuaciones diferenciales parciales, es el riesgo de que las aproximaciones presenten problemas de estabilidad, compatibilidad y convergencia.

La inestabilidad puede definirse como el comportamiento oscilatorio y creciente de errores de redondeo en la solución generada por el esquema. Para que un esquema sea compatible, éste deberá resolver la ecuación diferencial originalmente planteada. La convergencia se define como la tendencia a disminuir los errores numéricos de los de la solución exacta, al tender los incrementos de tiempo y distancia a cero.

Los errores de redondeo, a diferencia de los de truncado, son los generados por la solución numérica del esquema, mientras que el truncado se refiere al orden de aproximación por despreciar términos de cierto orden en el desarrollo de la serie de Taylor.

Como se mencionó al principio del capítulo, una técnica comúnmente utilizada para resolver la ecuación (2.50) es separar en dos partes la ecuación. Esta técnica no siempre conduce a resultados satisfactorios y en lo que sigue se tratará de exponer el porqué de esta situación.

Al separar en dos partes la ecuación de dispersión longitudinal, se tiene que para la parte puramente convectiva la ecuación es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (4.14)$$

Y para la parte difusiva:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (4.15)$$

La técnica de solución sería resolver primero la parte convectiva (4.14), es decir, el transporte del contaminante por efecto de la velocidad del flujo, y posteriormente difundirlo resolviendo (4.15) que es la parte difusiva. Como (4.14) y (4.15) tienen una naturaleza matemática diferente, es fácil esperar que las condiciones de estabilidad no sean las mismas para ambas. Para ilustrar esta situación se analizará por separado la estabilidad para convección pura y posteriormente para difusión pura.

Para convección pura. Se pueden plantear distintas combinaciones de las diferencias que aproximan las ecuaciones, algunas incluso inestables por principio. Por ejemplo con diferencias centradas en la distancia y hacia adelante en el tiempo, el esquema que aproxima a la ecuación (4.14) es:

$$C_j^{n+1} = \frac{C}{2} C_{j-1}^n + C_j^n - \frac{C}{2} C_{j+1}^n \quad (4.16)$$

Donde C es el número de Courant de malla. Utilizando directamente el método de von Neumann, en donde se define el error de redondeo como una serie compleja de Fourier de la forma:

$$R_j^n = e^{i\theta_j \Delta x} \zeta^n \quad (4.17)$$

Donde $i = \sqrt{-1}$; con el exponente variando entre $0 \leq \theta_j \Delta x \leq 2\pi$ y ζ la función compleja cuyo módulo debe cumplir con la condición de estabilidad de Cauchy $|\zeta| \leq 1$ (el $|\zeta|$ indica módulo de ζ).

Expresando el esquema (4.16) en función de los errores de redondeo (4.17) se puede escribir:

$$e^{i\theta_j \Delta x} \zeta^{n+1} = \frac{C}{2} e^{i\theta_{(j-1)} \Delta x} \zeta^n + e^{i\theta_j \Delta x} \zeta^n - \frac{C}{2} e^{i\theta_{(j+1)} \Delta x} \zeta^n \quad (4.18)$$

Dividiendo entre R_j^n a la ecuación (4.18) se tiene:

$$\zeta = \frac{C}{2} e^{-i\beta} + 1 - \frac{C}{2} e^{i\beta} \quad (4.19)$$

Donde por sencillez de notación se sustituye $\beta = \theta \Delta x$; $0 \leq \beta \leq 2\pi$ y agrupando se llega a:

$$\zeta = 1 - C \left[\frac{e^{i\beta} - e^{-i\beta}}{2} \right] \quad (4.20)$$

Por la identidad de Euler (ver apéndice 3) se transforma en:

$$\zeta = 1 - iC \operatorname{sen} \beta \quad (4.21)$$

Al obtener el módulo de (4.21) se observa que $1 + C^2 \operatorname{sen}^2 \beta$ es real y siempre mayor o igual a la unidad (ver Liggett et al, 1975), por lo que el esquema es inestable por principio al no cumplir con la condición de Cauchy, $|\zeta| \leq 1$.

Varios autores (Abbott, 1979 ; Cunge y Holly, 1980 ; Sauvaget, 1985 entre otros), han demostrado que los esquemas asimétricos de 1er. orden con diferencias hacia adelante, tanto en tiempo como en distancia, son estables y libres de difusión numérica para $C \leq 1$.

Dicho esquema asimétrico de 1er. orden, que aproxima a (4.14) es:

$$c_{j+1}^{n+1} = c_{j+1}^n - C \left[c_{j+1}^n - c_j^n \right] \quad (4.22)$$

Aplicando de nuevo el método de von Neumann se llega a:

$$\zeta = 1 + C \left[e^{-i\beta} - 1 \right] \quad (4.23)$$

Como se mencionó, en las referencias arriba citadas, se puede

demostrar (ver Abbott, 1979) que a partir de (4.34) con diagramas de Argand, se cumple con el criterio de estabilidad de Cauchy, $|\zeta| \leq 1$, cuando se tiene que:

$$C > 0 \quad ; \quad C \leq 1 \quad (4.24)$$

Para difusión pura. Aplicando el mismo procedimiento se plantea el esquema con diferencias hacia adelante en el tiempo y con la aproximación de la 2a. derivada dada por la ecuación (4.6), que sustituidas en (4.15) conducen a:

$$C_j^{n+1} = \lambda C_{j-1}^n + (1-2\lambda)C_j^n + \lambda C_{j+1}^n \quad (4.25)$$

Donde $\lambda = K\Delta t/\Delta x^2$ y utilizando de nuevo el método de von Neumann con el criterio de estabilidad de Cauchy, se llega a:

$$\zeta = 2\lambda(\cos \beta - 1) + 1 \quad (4.26)$$

o sea: $-1 \leq 2\lambda(\cos \beta - 1) + 1 \leq 1$ y lo más desfavorable se presenta cuando $\cos \beta = -1$, por lo que se llega a:

$$\lambda \geq 0 \quad ; \quad \lambda \leq \frac{1}{2} \quad (4.27)$$

Con estos resultados se prueba el esquema (4.11) para las siguientes condiciones:

u = 1.50 m/s			; K = 300 m ² /s	
C	λ	Δt (s)	$\Delta x = 400$ m	
1.0	0.50	266.6	t = 1600 s	
0.5	0.25	133.3		

En la figura 4.4 se presentan las gráficas en donde comparando la solución analítica con las del esquema, puede observarse que para los casos escogidos que cumplen las condiciones (4.24) y (4.27) el esquema presenta un comportamiento oscilante y alejado de la solución.

Resultados con esquema (D.Adel)

$u=1.5\text{m/s}$; $K=300\text{m}^2/\text{s}$; tiempo=1600s

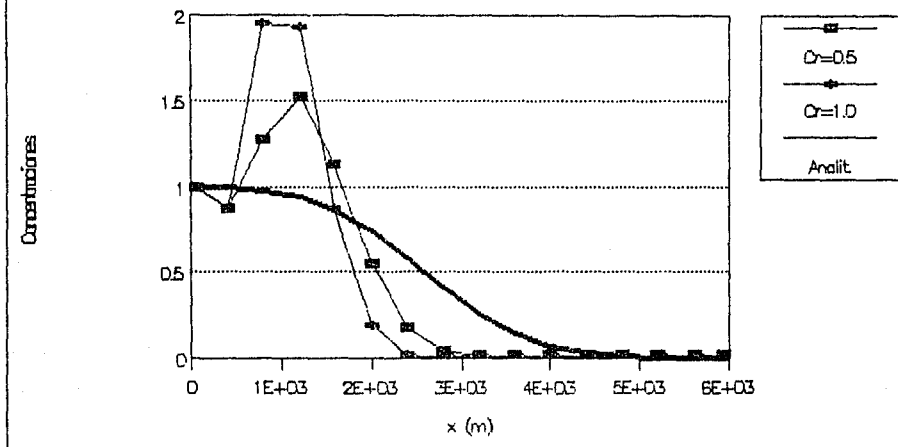


Figura 4.4. -comparación con esquema asimétrico de ter orden.

Al tratar de explicar el porqué de esta situación, lo que se ocurre es que no es tan buena la costumbre de dividir efectos para luego combinarlos en un esquema que representa a la ecuación conjunta, es decir, aún cuando por separado los esquemas son estables y no difusivos, ya combinados presentan comportamientos oscilatorios en su solución.

Con la idea de no descartar aún los esquemas explícitos, a continuación se presenta un nuevo análisis de estabilidad del esquema para la ecuación completa haciendo uso del método de la "analogía de la ecuación diferencial ordinaria", propuesto por Aldama, 1985.

4.3.1. Análisis en esquemas de primer orden

Partiendo de la formulación general de esquemas explícitos:

$$C_j^{n+1} = A_0 C_{j-1}^n + A_1 C_j^n + A_2 C_{j+1}^n \quad (4.11)$$

Y aplicando directamente el método de von Neumann:

$$R_j^{n+1} = A_0 R_{j-1}^n + A_1 R_j^n + A_2 R_{j+1}^n \quad (4.28)$$

Sustituyendo los errores por series de Fourier y despejando ζ :

$$\zeta = A_0 e^{-i\beta} + A_2 e^{i\beta} + A_1 \quad (4.29)$$

Si se sustituye en (4.29) los valores de A_0 , A_1 y A_2 para el esquema central y se desarrolla con identidades de Euler, se llega a la expresión:

$$\zeta = 1 + 2\lambda(\cos \beta - 1) - iC \sin \beta \quad (4.30)$$

Intentar resolver (4.30) para la condición de Cauchy $|\zeta| \leq 1$, para encontrar los valores del rango de estabilidad, resulta ser un proceso bastante complicado, desde el punto de vista algebraico, para ser resuelto por la forma tradicional.

Es en este punto donde el método de la "Analogía de la ecuación diferencial ordinaria" (Aldama 1985, 87) es aplicable para salvar este obstáculo. Si se sustituye $\lambda = C/P$ y de (4.30) factorizamos C , se llega a:

$$\zeta = 1 + C \left[\frac{2(\cos \beta - 1)}{P} - i \sin \beta \right] \quad (4.31)$$

Agrupando en una variable compleja μ , se puede escribir:

$$\zeta = 1 + \mu \quad (4.32)$$

donde

$$\mu = C \left[\frac{2(\cos \beta - 1)}{P} - i \sin \beta \right] \quad (4.33)$$

En forma general puede escribirse (4.33) en función de sus componentes real e imaginaria de la forma:

$$\mu = \mu_R + i\mu_I \quad (4.34)$$

siendo

$$\left. \begin{aligned} \mu_R &= 2(\cos\beta - 1) \frac{K\Delta t}{\Delta x^2} \\ \mu_I &= C \sin\beta \end{aligned} \right\} \quad (4.35)$$

Para validar (4.34) y (4.35) tómesese el caso de difusión pura, es decir $u=0$, por lo que $C=0$ y de (4.34) $\mu=\mu_R$. Sustituyendo en (4.32) y aplicando el criterio de Cauchy:

$$-1 \leq 1 + \mu_R \leq 1$$

$$-2 \leq \mu_R \leq 0$$

$$-2 \leq 2(\cos\beta - 1) \frac{K\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$(\cos\beta - 1) \frac{K\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1$$

entonces si $\lambda = \frac{C}{P} = \frac{K\Delta t}{\Delta x^2}$, se tiene que $\lambda \leq \frac{1}{\cos\beta - 1}$; la condición más desfavorable es cuando $\beta = \pi$, por lo tanto $\lambda \leq 1/2$, idéntico a la condición (4.27) obtenida para difusión pura.

Retomando el problema completo de convección-difusión y aplicando el método de Aldama: sea una ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{dy}{dt} = \delta y \quad (4.36)$$

Donde δ es un coeficiente complejo y tomando diferencias hacia adelante en el tiempo, el esquema que aproxima a (4.36) es:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = \delta y_n \quad (4.37)$$

Utilizando la serie de Fourier para los errores de redondeo:

$$(\zeta^{n+1} - \zeta^n) = \delta \Delta t \zeta^n \quad (4.38)$$

Si se hace $\mu_0 = \delta \Delta t$ y se divide entre ζ^n llegamos a:

$$\zeta = \mu_0 + 1 \quad (4.39)$$

que es completamente análogo a ζ del esquema central (4.32). Por otro lado ζ es de la forma:

$$\zeta = e^{i\theta} \quad ; \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi \quad (4.40)$$

Sustituyendo (4.40) en (4.39) y despejando μ_0 se tiene que:

$$\mu_0 = e^{i\theta} - 1 \quad (4.41)$$

La ecuación (4.41) también puede expresarse en sus componentes real e imaginaria como:

$$\mu_0 = (\cos\theta - 1) + i \operatorname{sen}\theta \quad ; \quad \left. \begin{array}{l} \mu_{0R} = \cos\theta - 1 \\ \mu_{0I} = \operatorname{sen}\theta \end{array} \right\} \quad (4.42)$$

Para la frontera de estabilidad neutra $|\zeta| \leq 1$, la figura 4.5 presenta la región donde el esquema es estable y cuya frontera está dada por (4.41).

Al establecerse la analogía entre los esquemas a través de las funciones complejas μ y μ_0 , los valores de la función μ del esquema original en donde ésta es estable, deben satisfacer la condición:

$$\mu = |\mu_0| e^{i\phi_0} \quad (4.43)$$

Donde ϕ_0 es el argumento angular del plano complejo. De (4.33) y (4.43) se obtienen las siguientes relaciones:

$$|\mu_0| = C \left[\frac{4(\cos\beta - 1)^2}{P^2} + \operatorname{sen}^2\beta \right]^{1/2} \quad (4.44)$$

$$\phi_0 = \tan^{-1} \frac{P \operatorname{sen}\beta}{2(\cos\beta - 1)} \quad (4.45)$$

Donde $|\mu_0|$ y ϕ_0 son conocidos de la relación (4.41), es decir son el módulo y el argumento de la figura 4.5 que es la frontera de estabilidad neutra.

Frontera de Estabilidad Neutra Esquemas Explícitos

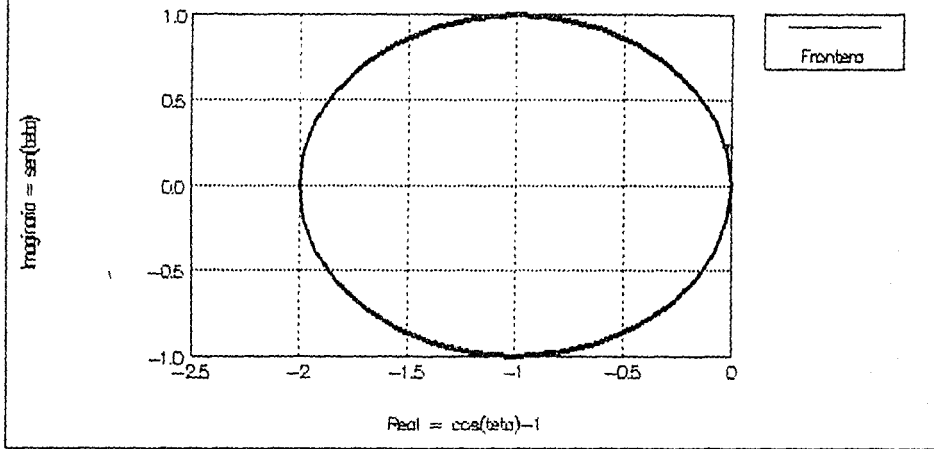


Figura 4.5.- Frontera de estabilidad neutra.

Al despejar de (4.44) el número de Courant, el problema se convierte en una optimización del C mínimo para cualquier combinación de β y Péciét:

$$C = \min_{\beta} \frac{|\mu_0|}{\left[\frac{4(\cos\beta - 1)^2}{p^2} + \sin^2\beta \right]^{1/2}} \quad (4.46)$$

El problema de minimización que impone (4.46) sujeto a (4.44) y (4.45) se resolvió numéricamente, con los resultados mostrados en las figuras 4.6 y 4.7.

COMPORTAMIENTO DE #COURANT Esquema Central

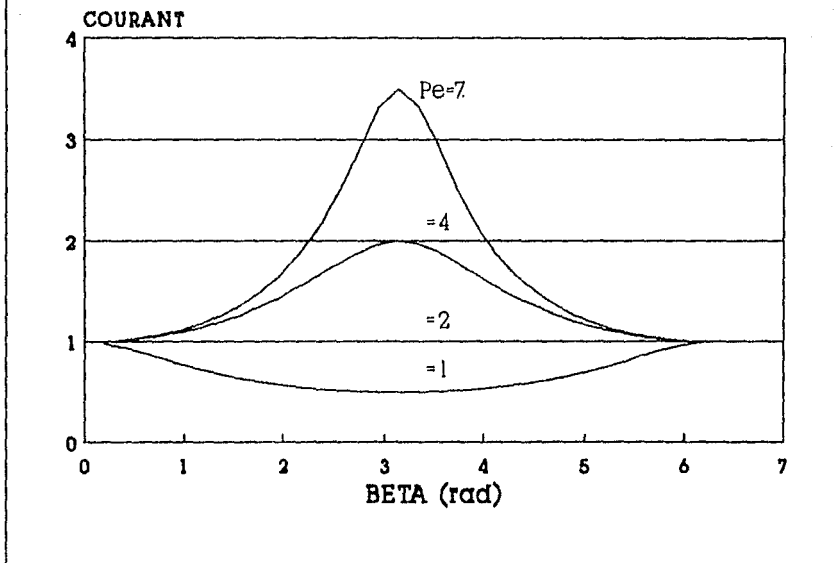


Figura 4.6. - Comportamiento de C con β y P .

Al analizar los resultados de la figura 4.6 se puede observar que el número de Courant tiene sus mínimos en $\beta=\pi$ para $P \leq 2$, mientras que para valores mayores de Péclet el Courant mínimo se presenta cuando $\beta=0$ o $\beta=2\pi$; y para $\beta=\pi$ se tiene un valor máximo de C .

Si se toman los valores críticos del número de Courant para distintos números de Péclet, se obtienen los resultados mostrados en la figura 4.7, es decir, el rango de estabilidad neutra para el esquema central es para $\beta=\pi$, o sea $P \leq 2$ y finalmente se puede establecer que para que el esquema central sea estable debe cumplirse que:

$$\left. \begin{array}{l} C \leq \frac{1}{2} P \\ P \leq 2 \end{array} \right\} \quad (4.47)$$

ESTABILIDAD CENTRAL COURANT - PECLLET

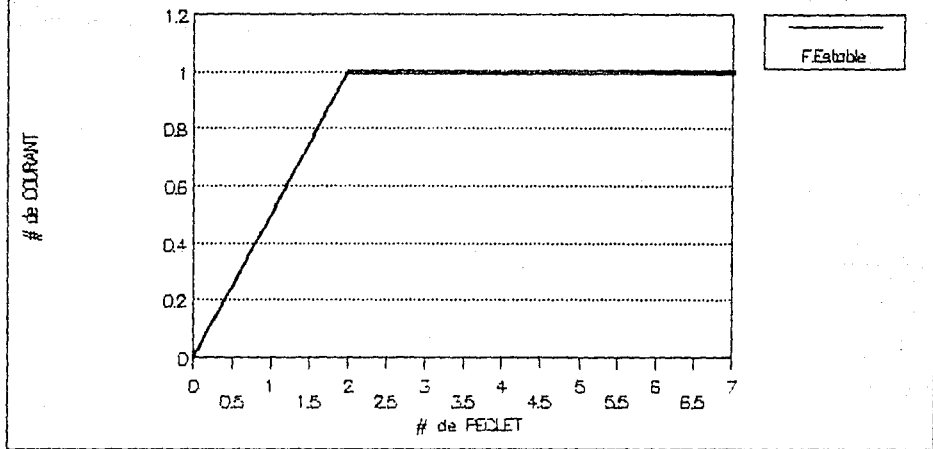


Figura 4.7. - Estabilidad C en función de P

La condición (4.47) restringe la solución y a los valores de Δt y Δx en función de valores de C y P. Si se desarrolla un procedimiento análogo para las diferencias hacia atrás y hacia adelante se llega a soluciones semejantes a la establecida por la ecuación (4.33):

$$\left. \begin{aligned}
 \text{Atrás} \quad \mu &= C \left[(\cos\beta - 1) \left(\frac{2}{P} + 1 \right) - i \sin\beta \right] \\
 \text{Adelante} \quad \mu &= C \left[(\cos\beta - 1) \left(\frac{2}{P} - 1 \right) - i \sin\beta \right]
 \end{aligned} \right\} \quad (4.48)$$

Las figuras 4.8 y 4.9 muestran los resultados equivalentes para el esquema tomando diferencias hacia atrás y las figuras 4.10 y 4.11, para diferencias hacia adelante. El resumen de los criterios de estabilidad se presentan en la sección 4.3.3, ya que aún es necesario analizar la compatibilidad para los resultados de estabilidad obtenidos.

COMPORTAMIENTO DE #COURANT Esquema H. Atrás

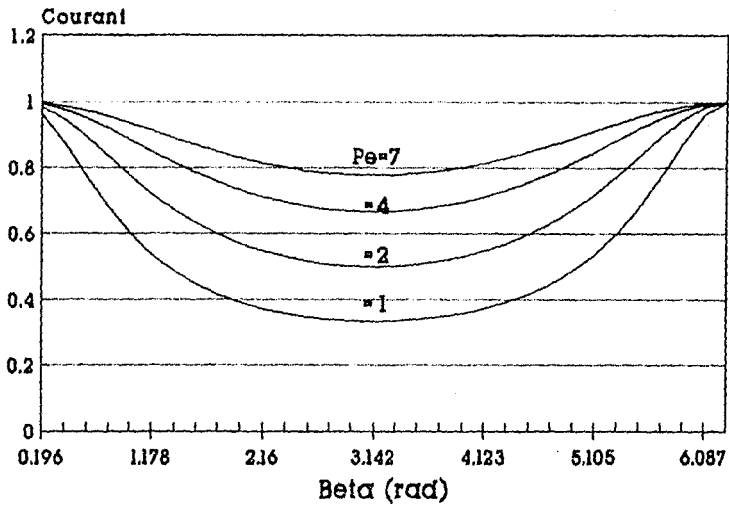


Figura 4.8. - Comportamiento de C con β y P

ESTABILIDAD HACIA ATRAS COURANT - PÉCLET

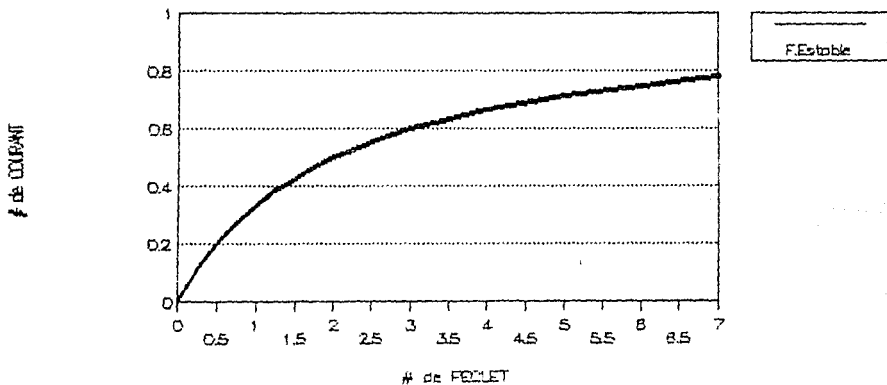


Figura 4.9. - Estabilidad C en función de P

COMPORTAMIENTO DE #COURANT Esquema H. Adelante

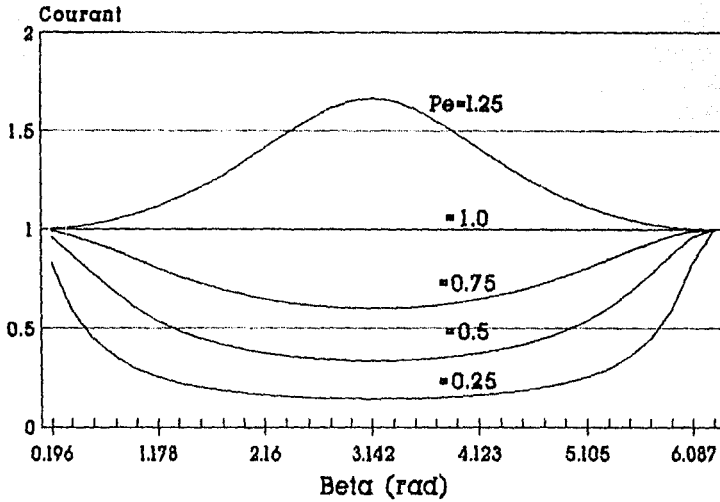


Figura 4.10. - Comportamiento de C con β y P

ESTABILIDAD HACIA ADELANTE COURANT - PECLET

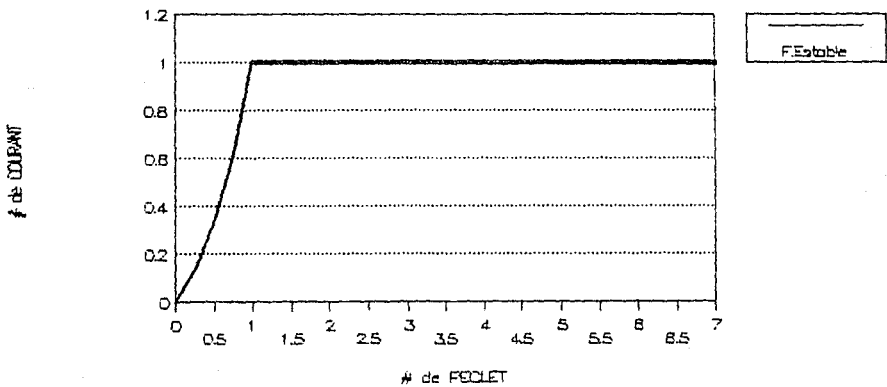


Figura 4.11. - Estabilidad C en función de P

Como se mencionó al principio del capítulo, un esquema es compatible cuando tiende a resolver la ecuación diferencial originalmente planteada al tender los incrementos, de tiempo y distancia, a cero. Tomando el esquema explícito (4.11) con diferencias centrales se tiene:

$$C_j^{n+1} = \left(\lambda + \frac{C}{2}\right) C_{j-1}^n + (1 - 2\lambda) C_j^n + \left(\lambda - \frac{C}{2}\right) C_{j+1}^n \quad (4.49)$$

Considerando las condiciones de estabilidad (4.47) en sus límites, se tiene para cualquier P y C con $\lambda=1/2$, sustituidos en (4.49):

$$C_j^{n+1} = \frac{1}{2} C_{j-1}^n + \frac{C}{2} C_{j-1}^n + \frac{1}{2} C_{j+1}^n - \frac{C}{2} C_{j+1}^n \quad ;$$

$$C_j^{n+1} = \frac{C}{2} (C_{j-1}^n - C_{j+1}^n) + \frac{1}{2} (C_{j-1}^n + C_{j+1}^n) \quad ;$$

$$\frac{1}{\Delta t} \left[C_j^{n+1} - \frac{1}{2} (C_{j-1}^n + C_{j+1}^n) \right] = - \frac{u}{2\Delta x} (C_{j+1}^n - C_{j-1}^n) \quad (4.50)$$

Donde el primer término es una forma simétrica en el espacio de discretizar la variación en el tiempo, por lo que (4.50) tiende a resolver la ecuación de convección pura $\left[\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \right]$, es decir en el límite de la estabilidad el término difusivo desaparece, siendo incongruente con la ecuación original.

De lo anterior se deduce que el esquema central es estable y congruente para las condiciones (4.47) sin la igualdad, o sea que restricciones para el esquema se transforman a:

$$\left. \begin{array}{l} C < \frac{1}{2} P \\ P < 2 \end{array} \right\} \quad (4.51)$$

El mismo análisis de no nulidad en los coeficientes de los esquemas se realizó para las diferencias hacia atrás y hacia adelante. Las condiciones resultantes de estabilidad y compatibilidad se presentan en la sección 4.3.3.

4.3.2. - Análisis en el esquema de Adams-Bashforth

La mecánica del análisis se presenta completa con base en la referencia original (Aldama, 1985), desarrollándose en forma análoga al análisis previo del esquema central. El esquema de Adams-Bashforth/Central para la ecuación de dispersión longitudinal es el representado por (4.13) y sustituyendo para los errores de redondeo $R_j^n = e^{i\theta j\Delta x} \zeta^n$, y dividiendo entre $e^{i\theta j\Delta x} \zeta^{n-1}$ se llega a:

$$\zeta^2 = \underbrace{\frac{3}{2}A_1 e^{-i\theta\Delta x} \zeta + A_2 \zeta + \frac{3}{2}A_3 e^{i\theta\Delta x} \zeta}_{F(\zeta)} - \underbrace{\frac{1}{2}A_1 e^{-i\theta\Delta x} + A_4 - \frac{1}{2}A_3 e^{i\theta\Delta x}}_{G(I)} \quad (4.52)$$

Con $A_1 = \lambda + \frac{C}{\Delta t}$; $A_2 = 1 - 3\lambda$; $A_3 = \lambda - \frac{C}{\Delta t}$; $A_4 = \lambda$. Desarrollando en primer lugar solo los tres términos factores de ζ , con $\beta = \theta\Delta x$ se tiene:

$$\begin{aligned} F(\zeta) &= \zeta + \frac{3}{2}\lambda\zeta \left(e^{i\beta} + e^{-i\beta} \right) - 3\lambda\zeta - \frac{3}{2}\frac{C}{\Delta t}\zeta \left(\frac{e^{i\beta} - e^{-i\beta}}{2} \right) = \\ &= \zeta + \frac{3}{2}\frac{C}{P}\zeta (2 \cos\beta) - 3\frac{C}{P}\zeta - \frac{3}{2}\frac{C}{\Delta t}\zeta i \operatorname{sen}\beta = \\ &= \zeta \left\{ 1 + \frac{3}{2}\frac{C}{\Delta t} \left[\frac{2(\cos\beta - 1)}{P} - i \operatorname{sen}\beta \right] \right\} = \\ F(\zeta) &= \zeta \left(1 + \frac{3}{2}\mu \right) \end{aligned} \quad (4.53)$$

Se observa que μ tiene la misma composición que en el análisis anterior, es decir:

$$\mu = C \left[\frac{2(\cos\beta - 1)}{P} - i \operatorname{sen}\beta \right] \quad (4.33)$$

Ahora se procede a desarrollar los restantes términos independientes de ζ :

$$G(I) = \lambda - \frac{1}{2}\lambda \left(e^{i\beta} + e^{-i\beta} \right) + \frac{1}{2}C \left(\frac{e^{i\beta} - e^{-i\beta}}{2} \right) =$$

$$= -\frac{1}{2} C \left[\frac{2(\cos\beta - 1)}{P} - i \operatorname{sen}\beta \right] =$$

$$G(I) = -\frac{1}{2} \mu \quad (4.54)$$

Sustituyendo (4.53) y (4.54) en (4.52) se llega finalmente a:

$$\zeta^2 - \left(1 + \frac{3}{2} \mu \right) \zeta + \frac{1}{2} \mu = 0 \quad (4.55)$$

Que como cuadrática tiene la siguiente solución:

$$\zeta_{1,2} = \frac{1}{2} + \frac{3}{4} \mu \pm \frac{1}{2} \left(1 + \mu + \frac{9}{4} \mu^2 \right)^{1/2} \quad (4.56)$$

De la misma forma que se validó parcialmente el esquema central, se puede analizar a partir de (4.56) la condición de estabilidad para difusión pura, es decir $u=0$, $C=0$; por lo que:

$$\mu = \mu_R = 2(\cos\beta - 1) \frac{P \Delta t}{\Delta x^2} \quad (4.57)$$

Aplicando el criterio de estabilidad de Cauchy $|\zeta| \leq 1$ a la parte real de (4.56) se tiene:

$$\left| \frac{1}{2} + \frac{3}{4} \mu_R \pm \frac{1}{2} \left(1 + \mu_R + \frac{9}{4} \mu_R^2 \right)^{1/2} \right| \leq 1$$

$$-2 \leq 1 + \frac{3}{2} \mu_R \pm \left(1 + \mu_R + \frac{9}{4} \mu_R^2 \right)^{1/2} \leq 2 \quad (4.58)$$

Resolviendo el lado izquierdo de la desigualdad, separando términos y multiplicando por (-1):

$$3 + \frac{3}{2} \mu_R \geq \mp \left(1 + \mu_R + \frac{9}{4} \mu_R^2 \right)^{1/2} \quad ; \text{ y elevando al cuadrado:}$$

$$9 + 9 \mu_R + \frac{9}{4} \mu_R^2 \geq 1 + \mu_R + \frac{9}{4} \mu_R^2$$

$$\therefore -1 \leq \mu_R$$

Y resolviendo el lado derecho en forma análoga:

$$\mu_R \leq 0$$

Combinando los resultados se tiene la solución de la desigualdad:

$$-1 \leq \mu_R \leq 0 \quad (4.59)$$

Sustituyendo (4.57) en la desigualdad (4.59):

$$\frac{K\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2(1 - \cos\beta)} \quad (4.60)$$

Lo más desfavorable se presenta cuando $\beta = \pi$; $\cos\beta = -1$, por lo que la estabilidad para difusión pura es:

$$\frac{K\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{4} \quad (4.61)$$

Es decir $\lambda \leq 1/4$, resultado que se espera se mantenga al menos parcialmente para el análisis completo.

Retomando el problema de convección-difusión y aplicando el método de la analogía, se plantea una ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{dy}{dt} = \delta y \quad (4.62)$$

La aproximación a (4.62) con el esquema de Adams-Bashforth es:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = \delta \left[\frac{3}{2} y_n - \frac{1}{2} y_{n-1} \right] \quad (4.63)$$

En términos de la función compleja $\zeta = e^{i\theta}$, y definiendo a $\mu_0 = \delta\Delta t$, se tiene de (4.63):

$$\zeta^{n+1} - \zeta^n = \mu_0 \left[\frac{3}{2} \zeta^n - \frac{1}{2} \mu_0 \zeta^{n-1} \right] \quad (4.64)$$

Dividiendo entre ζ^{n-1} , y agrupando términos:

$$\zeta^2 - \left[1 + \frac{3}{2} \mu_0 \right] \zeta + \frac{1}{2} \mu_0 = 0 \quad (4.65)$$

Obteniéndose una función completamente análoga a la del esquema original representado por (4.55), por lo que la estabilidad para (4.55) y (4.65) será idéntica. Sustituyendo la forma de $\zeta = e^{i\theta}$ en la última expresión y despejando μ_0 se llega a:

$$\mu_0 = \frac{2(e^{2i\theta} - e^{i\theta})}{3e^{i\theta} - 1} \quad (4.66)$$

La expresión (4.66) representa la frontera de estabilidad neutra en el plano complejo. La figura 4.12 muestra el rango de estabilidad del esquema.

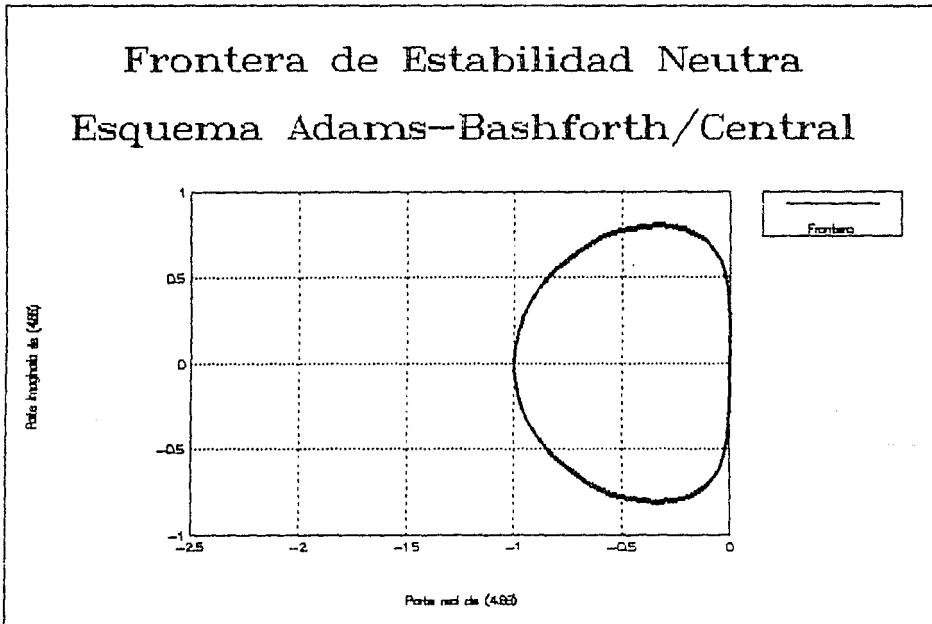


Figura 4.12. - Frontera de estabilidad neutra.

De la expresión (4.66) es posible conocer el módulo $|\mu_0|$ y aplicando la relación análoga de μ y despejando el número de

Courant, se establece el problema de optimización (ec. 4.46):

$$C = \min_{\beta} \frac{|\mu_0|}{\left[\frac{4(\cos\beta - 1)^2}{P^2} + \sin^2\beta \right]^{1/2}} \quad (4.46)$$

Que ahora sujeto al modulo $|\mu_0|$ representado por (4.66), se resuelve numéricamente. El comportamiento del número de Courant para distintos valores de β y del número de Péclet se muestra en la figura 4.13.

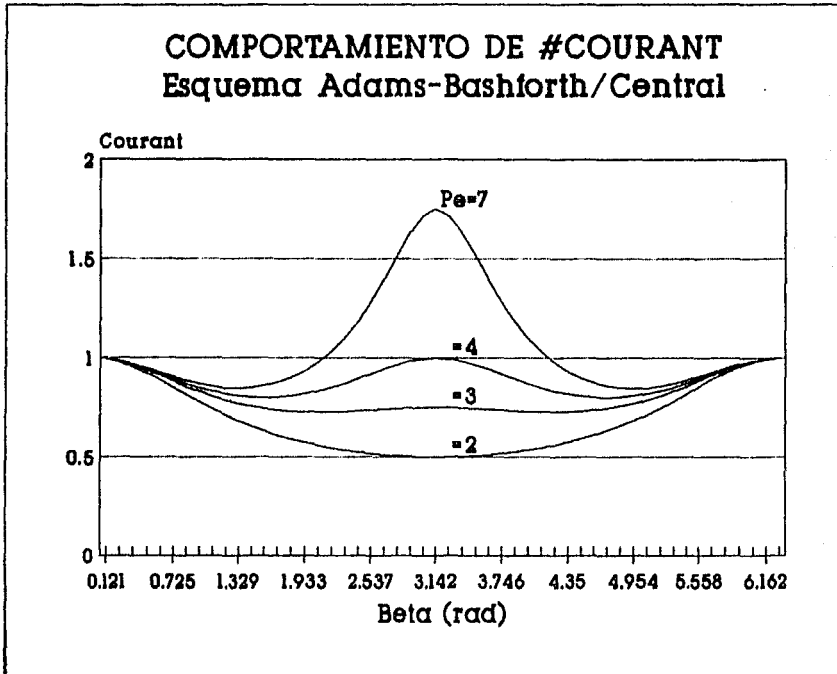


Figura 4.13. - Comportamiento de C con β y P

Finalmente en la figura 4.14 se presenta la gráfica de estabilidad de Courant en función de Péclet.

De la figura 4.13 se puede observar que la variación para los C mínimos se da cuando $\beta = \pi$ para valores de P hasta de 2.68, que es la pendiente de la parte lineal en la figura 4.14. De lo anterior se desprende la condición de estabilidad:

$$\left. \begin{array}{l} C \leq \frac{1}{4} P \\ P \leq 2.68 \end{array} \right\} \quad (4.67)$$

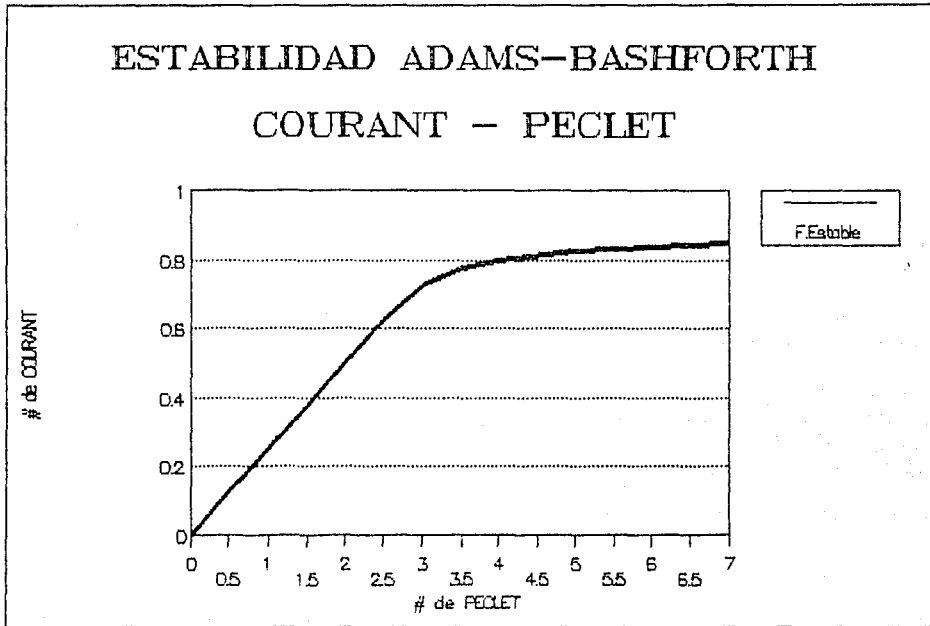


Figura 4.14. - Estabilidad C mínimo función de P

4.3.3. - Resumen de los análisis

De los análisis de estabilidad y compatibilidad se obtuvieron las condiciones que se resumen a continuación. Para los esquemas explícitos de primer orden fue posible generalizar los resultados en una expresión con un factor cuyo valor es de 1,0 y -1 para los

esquemas con diferencias hacia atrás, centradas y hacia adelante respectivamente. Individualmente las condiciones de estabilidad y compatibilidad para los esquemas explícitos de 1er. orden son:

ESQUEMA:

Esquema Explícito 1er. Orden	$C_j^{n+1} = A_0 C_j^n + A_1 C_j^n + A_2 C_{j+1}^n$		
	A_0	A_1	A_2
Dif. hacia atrás	$\lambda + C$	$1 - 2\lambda - C$	λ
Diferencia centrada	$\lambda + \frac{C}{2}$	$1 - 2\lambda$	$\lambda - \frac{C}{2}$
Dif. hacia adelante	λ	$1 - 2\lambda + C$	$\lambda - C$
$\lambda = \frac{K\Delta t}{\Delta x} = \frac{C}{P} \quad ; \quad C = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad ; \quad P = \frac{u\Delta x}{K}$			

CONDICIONES DE ESTABILIDAD

Esquema explícito con diferencias:	Límite del # de Courant	Límite del # de Péclét
Hacia Atrás	$C < \frac{P}{2+P}$	$P > 0$
Centrada	$C < \frac{1}{2} P$	$P < 2$
Hacia Adelante	$C < \frac{P}{2-P}$	$P < 1$

O bien resumidos en una expresión general:

CONDICION DE ESTABILIDAD

Esquemas explícitos de 1er. Orden	Límite del # de Courant	Diferencias	g	Límite del # de Péclét
	$C < \frac{P}{2 + gP}$	Atrás	+1	$P > 0$
		Centrada	0	$P < 2$
		Adelante	-1	$P < 1$

Para el esquema de Adams-Bashforth con diferencias centradas el

esquema y su condición de estabilidad son:

ESQUEMA DE ADAMS-BASHFORTH

$$C_j^{n+1} = \frac{3}{2} \left(\lambda + \frac{C}{\Delta t} \right) C_{j-1}^n + \left(1 - 3\lambda \right) C_j^n + \frac{3}{2} \left(\lambda - \frac{C}{\Delta t} \right) C_{j+1}^n - \frac{1}{2} \left(\lambda + \frac{C}{\Delta t} \right) C_{j-1}^{n-1} + \lambda C_j^{n-1} - \frac{1}{2} \left(\lambda - \frac{C}{\Delta t} \right) C_{j+1}^{n-1}$$

CONDICION DE ESTABILIDAD

<i>Límite del # de Courant</i>	<i>Límite del # de Péclét</i>
$C \leq \frac{1}{4} P$	$P \leq 2.68$

Independientemente de cumplir con las condiciones presentadas, es recomendable revisar que para los valores elegidos de C y P y por lo tanto de λ , los valores de los coeficientes de los esquemas sean no nulos y así evitar la posibilidad de incongruencia con la ecuación diferencial de dispersión longitudinal.

Por otro lado al disminuir los valores de C y P , los valores de los incrementos Δx y Δt también disminuyen aumentando el número de cálculos, lo cual puede verse como desventaja; mas estos son tan simples que no incrementan en forma importante el tiempo de proceso. Es más, al no requerirse algoritmo para su solución, los cálculos pueden efectuarse con herramientas tales como hojas de cálculo de programas comerciales.

En resumen se presentan las cotas de las condiciones de estabilidad para esquemas explícitos simples y que como se vera en el siguiente capítulo proporcionan muy buenos resultados en forma sencilla y rápida.

5.- COMPARACIÓN DE RESULTADOS DE LOS ESQUEMAS

Este capítulo tiene la finalidad de presentar ejemplos de los resultados que se obtienen de aplicar los esquemas explícitos con las condiciones de estabilidad obtenidas, para ello se ha dividido en dos partes: en la primera se compararán los resultados contra las soluciones analíticas para la condición de concentración inicial constante, variando los coeficientes de dispersión para incluir la influencia de la parte difusiva; en la segunda parte se muestran los resultados obtenidos con los esquemas comparados contra mediciones experimentales reportadas por Fischer en 1967.

5.1.- Comparación con soluciones analíticas

Con la finalidad de observar distintas condiciones en los parámetros involucrados se realizaron pruebas para tres velocidades de flujo, tres coeficientes de dispersión longitudinal y tres condiciones distintas de estabilidad, que cubren un amplio rango de condiciones.

La tabla 5.1 muestra las condiciones probadas, indicando el número de la figura en donde se comparan los resultados del esquema central contra la solución analítica. La condición inicial es de concentración constante, y condición de frontera de concentración nula en el infinito para un canal lo suficientemente largo. La solución analítica es la presentada por la ecuación (3.11).

u (m/s)	K (m ² /s)	P -	C -	Δx (m)	Δt (s)	Tiempos a probar	Figura #
2.0	0.5	1.5	0.5	0.375	0.09375	t ₁ =0.9375 s t ₂ =4.6875 s	5.1
	50			37.5	9.375	t ₁ =75.0 s t ₂ =225 s	5.2
	500			375	93.75	t ₁ =1500 s t ₂ =3000 s	5.3
0.1	200	1.5	0.5	3000	15000	t ₁ =120000 s t ₂ =270000 s	5.4
1.0				300	150	t ₁ =600 s t ₂ =1200 s	5.5
5.0				60	6	t ₁ =60 s t ₂ =150 s	5.6
1.5	300	0.5	0.2	100	13.3	t ₁ =253.3 s t ₂ =600.0 s	5.7
		1.0	0.4	200	53.3	t ₁ =1066 s t ₂ =2560 s	5.8
		1.9	0.8	380	202.6	t ₁ =1418 s t ₂ =3648 s	5.9

Tabla 5.1. - Condiciones de Prueba del Esquema Central.

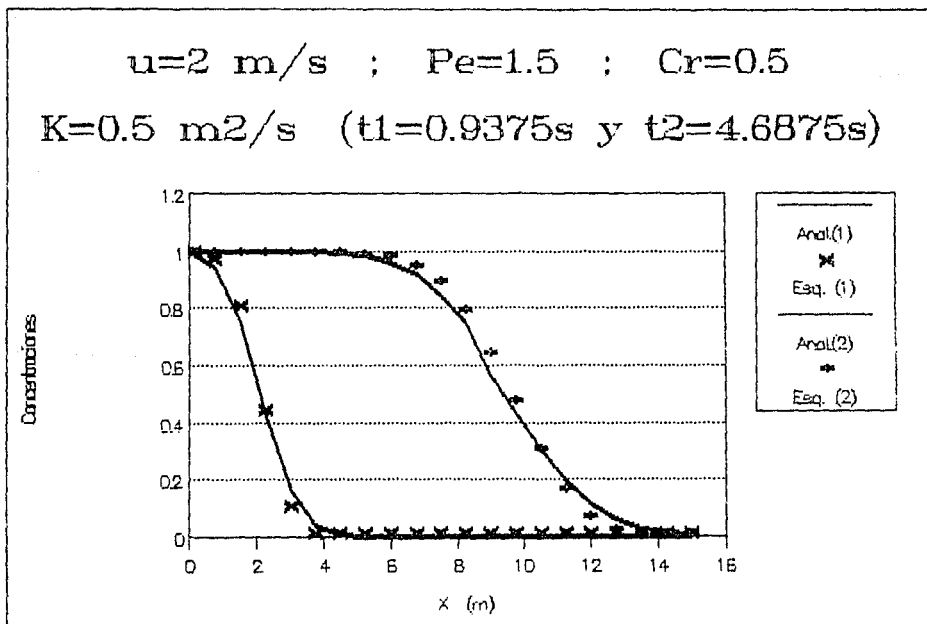


Figura 5.1. - Comparación entre solución analítica y esquema central

$u=2 \text{ m/s}$; $Pe=1.5$; $Cr=0.5$
 $K=50 \text{ m}^2/\text{s}$ ($t_1=75\text{s}$ y $t_2=225\text{s}$)

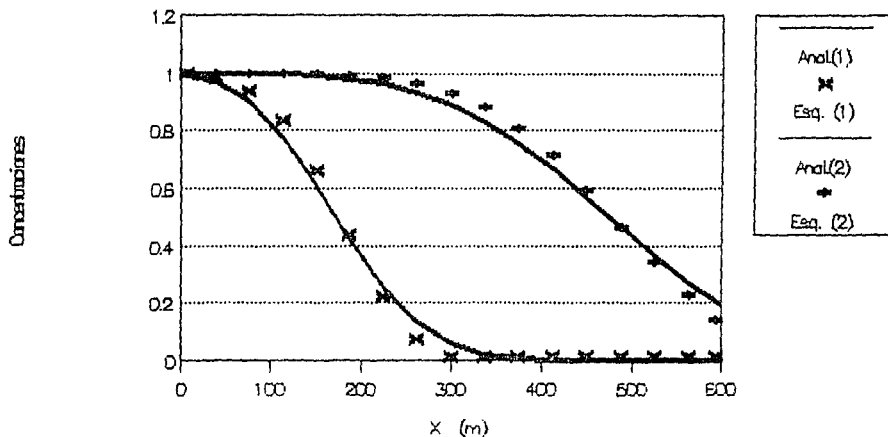


Figura 5.2.-Comparación entre solución analítica y esquema central

$u=2 \text{ m/s}$; $Pe=1.5$; $Cr=0.5$
 $K=500 \text{ m}^2/\text{s}$ ($t_1=1500\text{s}$ y $t_2=3000\text{s}$)

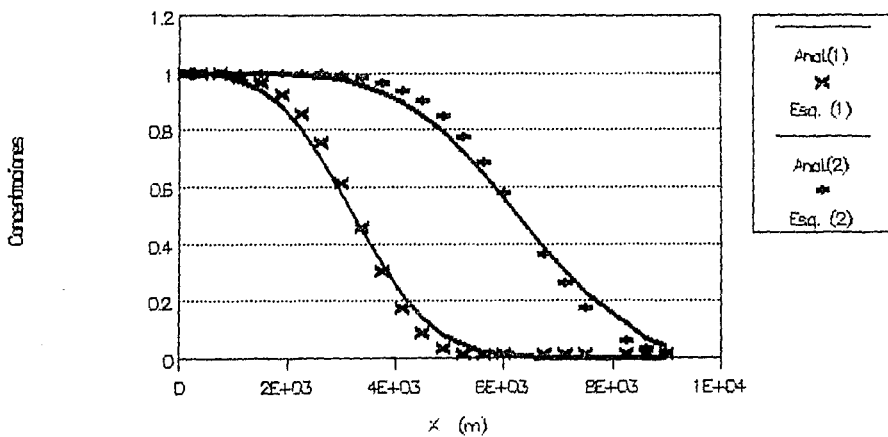


Figura 5.3.-Comparación entre solución analítica y esquema central

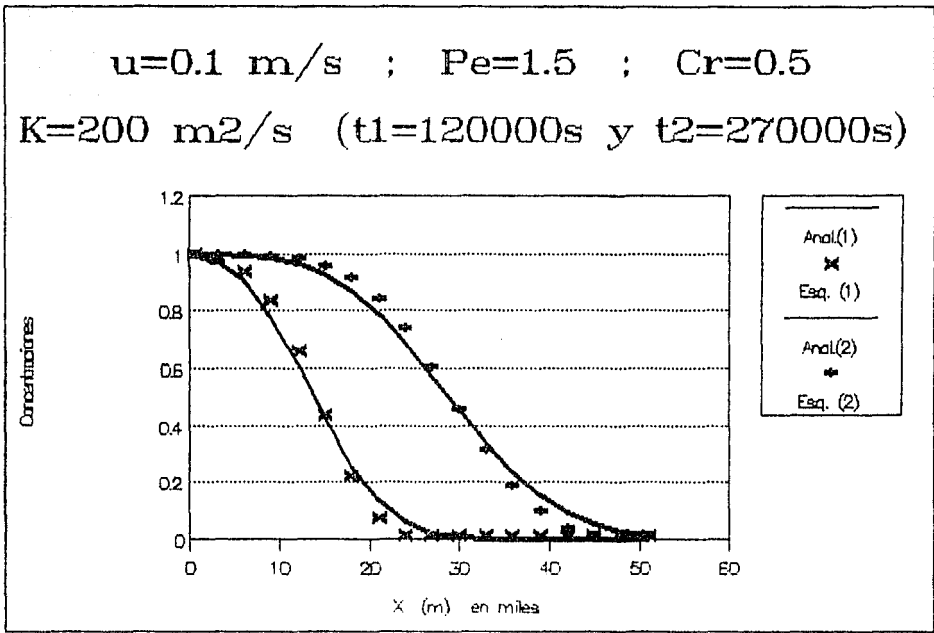


Figura 5.4. -Comparación entre solución analítica y esquema central

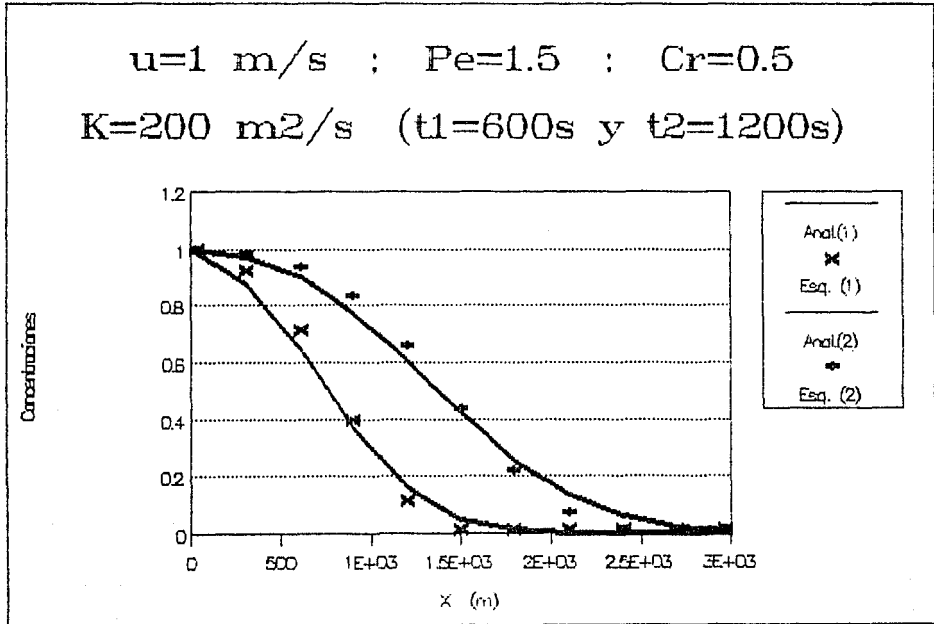


Figura 5.5. -Comparación entre solución analítica y esquema central

$u=5 \text{ m/s}$; $Pe=1.5$; $Cr=0.5$
 $K=200 \text{ m}^2/\text{s}$ ($t_1=60\text{s}$ y $t_2=150\text{s}$)

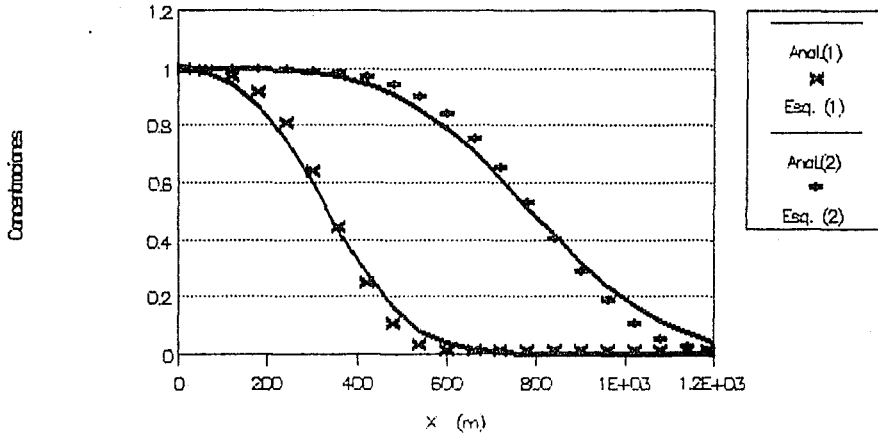


Figura 5.6. -Comparación entre solución analítica y esquema central

$u=1.5 \text{ m/s}$; $Pe=0.5$; $Cr=0.2$
 $K=300 \text{ m}^2/\text{s}$ ($t_1=253.3\text{s}$ y $t_2=600\text{s}$)

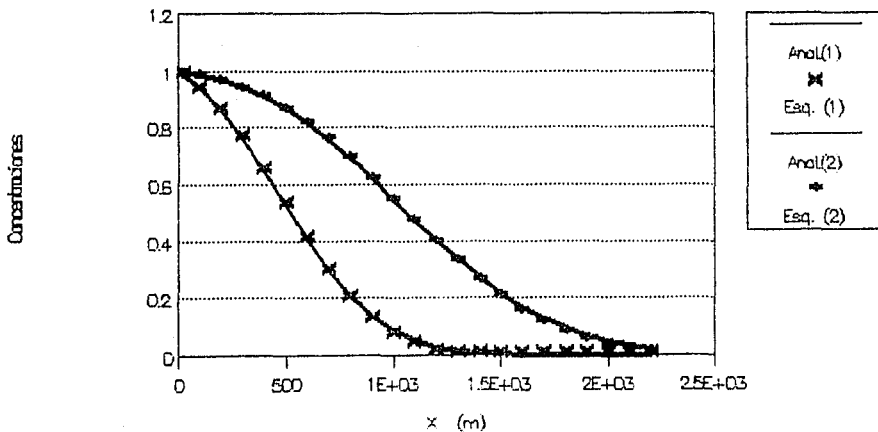


Figura 5.7. -Comparación entre solución analítica y esquema central

$u=1.5 \text{ m/s}$; $Pe=1$; $Cr=0.4$
 $K=300 \text{ m}^2/\text{s}$ ($t_1=1066\text{s}$ y $t_2=2560\text{s}$)

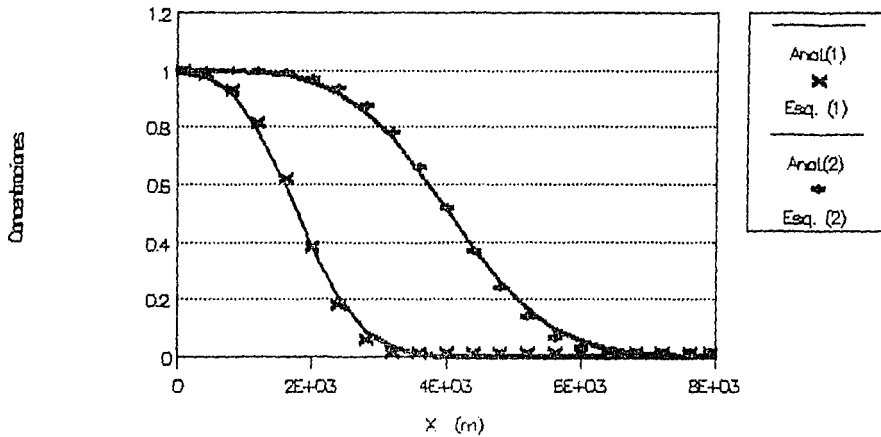


Figura 5.8. -Comparación entre solución analítica y esquema central

$u=1.5 \text{ m/s}$; $Pe=1.9$; $Cr=0.8$
 $K=300 \text{ m}^2/\text{s}$ ($t_1=1418\text{s}$ y $t_2=3648\text{s}$)

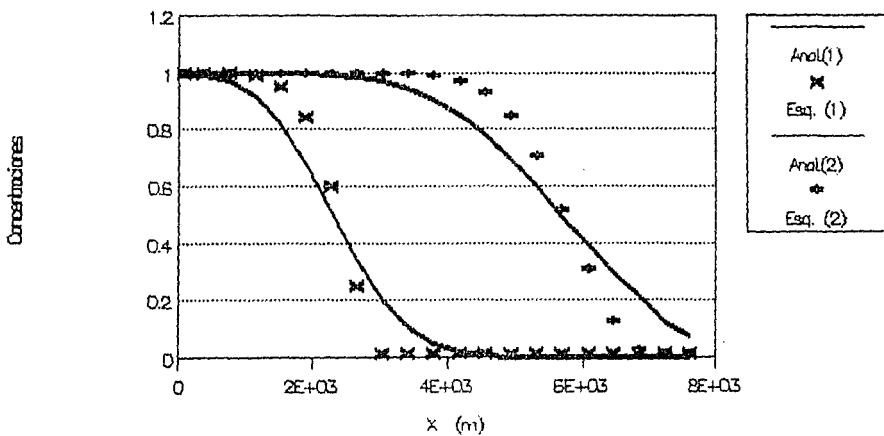


Figura 5.9. -Comparación entre solución analítica y esquema central

Hasta aquí se han comparado los resultados de la solución analítica contra los obtenidos, como representativos de los métodos numéricos, del esquema central. Como se puede observar de las gráficas anteriores, los resultados son bastante buenos, aún para difusión poco importante, es decir convección dominante (ver figura 5.1).

Cabe destacar que cuando los valores de P y C se alejan de los límites establecidos, la solución converge todavía más a los resultados casi en forma indistinguible. En el caso más desfavorable, representado en la figura 5.9, con $P=1.9$ y $C=0.8$ el error máximo asociado con la mayor diferencia es de aproximadamente el 12%, mientras que para los demás casos el error máximo no sobrepasa el 3%.

Con la idea de probar entre sí los resultados de los distintos esquemas propuestos, se escogen las condiciones de estabilidad que cumplan simultáneamente para los cuatro esquemas. La tabla 5.2 muestra las condiciones conjuntas.

Esquema	Condiciones $f(P)$	P	Condición $f(C)$	C
H. Atrás	$P > 0$	0.8	$C \leq P / (2+P) \leq 0.28$	0.2
Centrado	$P \leq 2$		$C \leq P / 2 \leq 0.4$	
H. Adelante	$P \leq 1$		$C \leq P / (2-P) \leq 0.60$	
Adams-Bash	$P \leq 2.68$		$C \leq P / 4 \leq 0.2$	

Tabla 5.2. - Análisis conjunto de estabilidad.

Tomando las siguientes condiciones:

$$u=1.5 \text{ m/s} \quad ; \quad K=300 \text{ m}^2/\text{s}$$

$$P = 0.8 \quad ; \quad C = 0.2$$

$$\Delta x = 160 \text{ m} \quad ; \quad \Delta t = 21.33 \text{ s}$$

se prueban para un tiempo de 512 segundos. Los resultados se muestran en la figura 5.10.

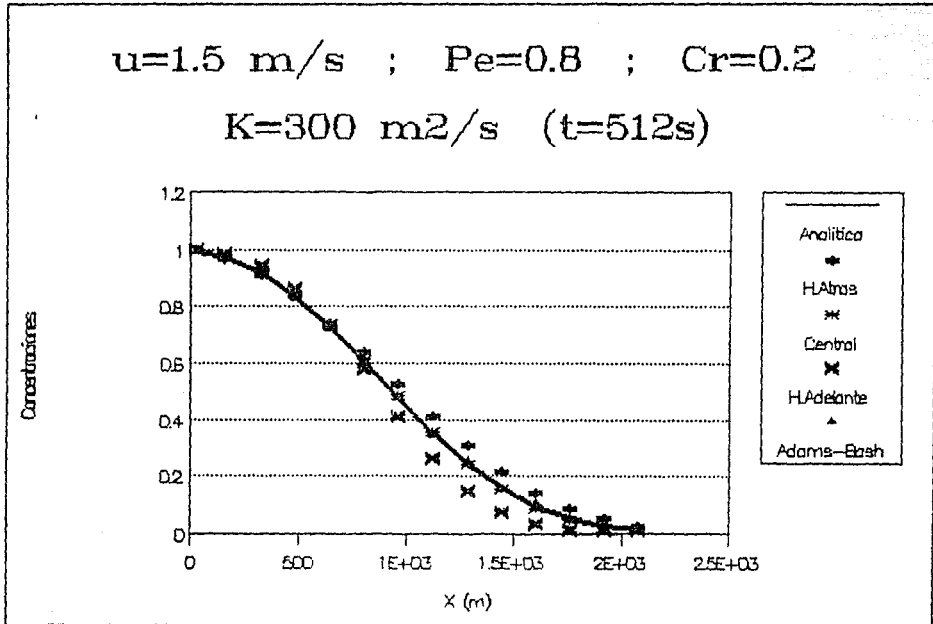


Figura 5.10.- Comparación entre los distintos esquemas.

Como se puede observar de la figura 5.10, los esquemas con diferencias hacia atrás y hacia adelante son los que presentan errores (no mayores al 11%) con respecto a la solución analítica.

Esto puede deberse principalmente a que los valores elegidos del número de Péclet y Courant están cerca de los límites de los criterios de estabilidad obtenidos. Es decir con $Pe=0.8$, se está muy cerca al límite de la condición en función de Péclet para las diferencias hacia adelante, y con $Cr=0.2$, se está cerca del límite de la condición en función de Courant para los esquemas con diferencias hacia atrás.

Por otro lado en los esquemas central y de Adams-Bashforth, se cumple con valores lo suficientemente alejados de los límites y por lo que se observa, los resultados de los métodos son casi idénticos a los obtenidos con la solución analítica.

5.2.- Comparación con mediciones experimentales reportadas

Dadas las condiciones tan idealizadas que presenta la obtención de la ecuación de dispersión longitudinal (flujo uniforme, unidimensional, sección rectangular, turbulencia homogénea), fue difícil encontrar un caso reportado en forma completa. Los datos y mediciones que cumplen con dichas hipótesis fueron los reportados por Fischer en 1967.

De dicho reporte (Fischer, 1967) se tomó la serie denominada 2700 que presenta las mediciones de concentraciones en dos secciones. Para los fines comparativos que persigue este trabajo se tomarán como condición inicial las mediciones de la primera sección y se predecirán con el esquema las concentraciones en la segunda sección para compararse contra las mediciones reportadas.

Datos (Fischer, 1967):

Del Canal. - Sección Rectangular ; Rugosidad.- Suave $\epsilon=0.016$

Ancho del canal	$h = 109.22 \text{ cm}$
Longitud	$L = 40 \text{ m}$
Constante de Von Karman	$k = 0.39$

Del Flujo. - Uniforme

Velocidad media	$u = 36.2 \text{ cm/s}$
Velocidad al cortante	$u_* = 1.62 \text{ cm/s}$
Tirante medio	$d = 12.8 \text{ cm}$
Coefficiente de dispersión	$K = 236 \text{ cm}^2/\text{s}$

De las Secciones:

Distancia de la inyección a la primera sección	$x_1 = 14.06 \text{ m}$
Distancia de la inyección a la segunda sección	$x_2 = 25.06 \text{ m}$

Las figuras 5.11 y 5.12 muestran los valores de las concentraciones reportadas por Fischer, en la primera reproducidos íntegramente de la referencia original y en la segunda transformados a concentraciones relativas a la máxima medida y con origen de tiempo cero.

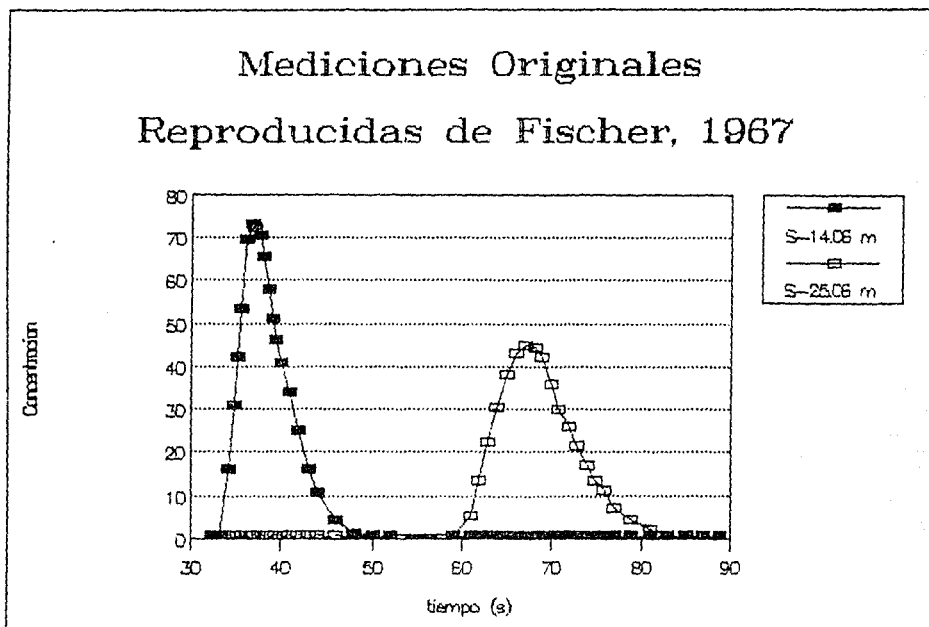


Figura 5.11. - Mediciones originales. Fischer, 1967.

Se procedió a discretizar los valores reportados para las siguientes condiciones de estabilidad del esquema central:

$$P = 1.9173 \quad ; \quad \Delta x = 12.5 \text{ cm} \quad \therefore 89 \text{ secciones desde } x_1 \text{ a } x_2$$

Con dos pruebas del número de Courant:

- 1.- $C = 0.181 \quad ; \quad \Delta t = 0.0625 \text{ s} \quad \therefore 912 \text{ intervalos de tiempo.}$
- 2.- $C = 0.362 \quad ; \quad \Delta t = 0.125 \text{ s} \quad \therefore 456 \text{ intervalos de tiempo.}$

Mediciones Transformadas

Fischer, 1967

ESTA TERCERA NO DEBE
SALIR A BIBLIOTECA

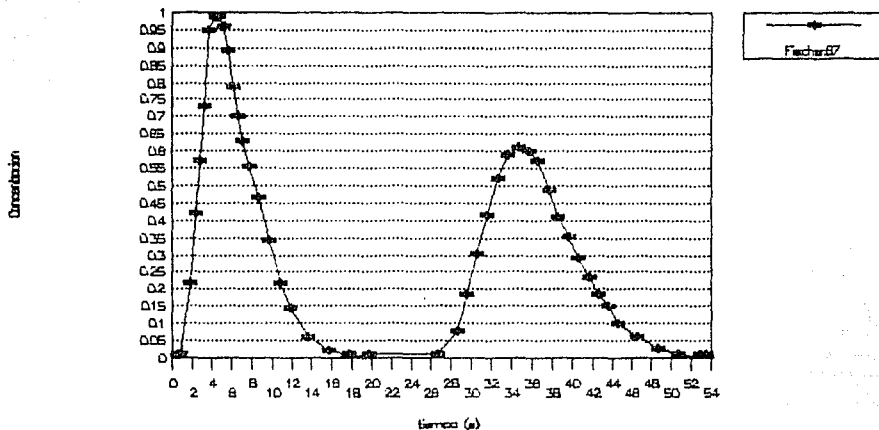


Figura 5.12. - Mediciones transformadas. Fischer, 1967.

Fischer 67 vs. Esquema ($Pe=1.9173$)

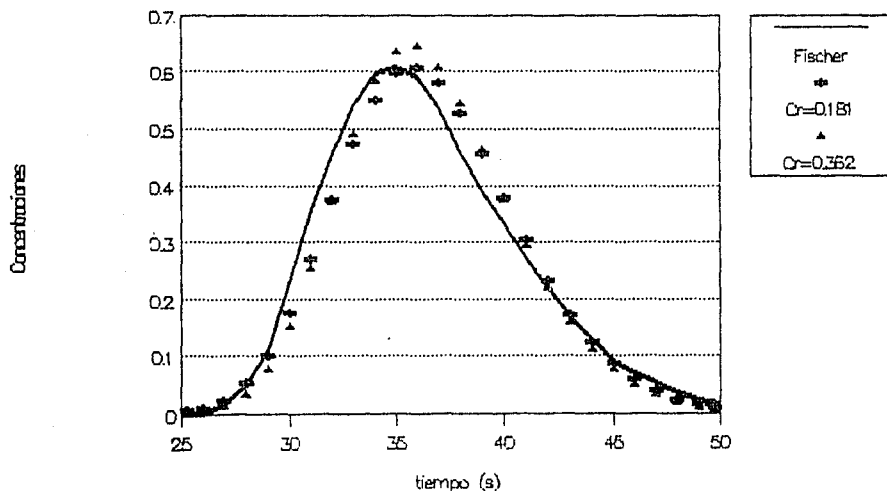


Figura 5.13. - comparación de resultados.

Con las discretizaciones para los Δt indicados, se utilizaron los datos de la sección $x_1=14.06m$ como condición inicial y se introdujeron como tal en el esquema central, obteniéndose para la sección $x_2=25.06m$ (1100 cm de distancia de 1 a 2), los valores de concentraciones mostrados en la figura 5.13 y se comparan contra el arreglo discretizado de las mediciones para dicha sección.

Los errores en el pico fueron en ambos casos menores al 5%, lo que indica una muy buena aproximación. Cabe mencionar que el modelo explícito probado predice en forma correcta el inicio en el tiempo de la llegada del contaminante, presentando un error de fase casi nulo. Por otra parte los resultados muestran una aproximación cada vez mayor a medida que los valores de Courant y de Péclet tienden a alejarse de los límites obtenidos, coincidiendo esto con lo antes expuesto sobre la convergencia.

Es decir, de analizar la convergencia se puede indicar que ésta se asegura al cumplir con las condiciones de estabilidad y que además los errores en los resultados disminuyen al reducir los valores de los parámetros de estabilidad alejándolos de los límites.

Las conclusiones en cuanto a la bondad en el uso de esquemas explícitos para la solución de la ecuación de convección-difusión se plantean en el capítulo siguiente. Por ahora indicamos exclusivamente que las soluciones obtenidas con los esquemas explícitos, comparados contra soluciones analíticas y mediciones experimentales, presentan un comportamiento sumamente bueno y que de manera simple producen resultados bastante confiables.

6.- CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En esta parte final se presentan las conclusiones alcanzadas a lo largo del desarrollo del trabajo, así como las recomendaciones para utilizar los esquemas planteados y algunos lineamientos generales a seguir en el estudio de procesos de transferencia de masa.

En una primera parte se presentaron los conceptos básicos y las ecuaciones que rigen el fenómeno de la difusión, tanto a nivel molecular como a su análogo macroscópico de la dispersión en flujo turbulento.

Se presentó la ecuación simplificada de dispersión longitudinal, sujeta a las siguientes simplificaciones:

- Flujo unidimensional,
- flujo uniforme e incompresible,
- geometría regular,
- la Ley de Fick de proporcionalidad entre la difusión y el gradiente de concentración,
- turbulencia estacionaria y homogénea y
- válida después del tiempo de mezclado transversal.

Una vez obtenida la ecuación, se procedió a resolverla, aplicando esquemas explícitos en diferencias finitas. Se plantearon los análisis de estabilidad, haciendo uso del método de la analogía con la ecuación diferencial ordinaria, obteniendo para los esquemas presentados (explícitos de 1er. orden y Adams-Bashforth), los criterios donde los esquemas son estables y convergentes como una función de los números de Courant y de Péclét combinados en una condición que a su vez limita a los incrementos de Δx y Δt .

Es interesante mencionar que, hasta donde el autor conoce, sólo Price et al. (1966) indica que para diferencias finitas centradas, existen oscilaciones numéricas para valores de Péclét mayores a dos, ésta observación se basa exclusivamente en pruebas exhaustivas del método numérico, y no en un análisis de estabilidad que presente algún criterio combinando el número de Péclét con el número de Courant, como se estableció en este trabajo.

Adicionalmente, en la revisión de la bibliografía existente no se encontró ningún criterio de estabilidad conjunto para la ecuación combinada de convección-difusión.

Es conocida y muy utilizada la técnica de separar efectos y resolver primero la parte convectiva y posteriormente la difusiva, sin embargo como se mostró en el capítulo 4, las condiciones de estabilidad obtenidas para cada parte por separado y luego combinadas para resolver la ecuación en su forma completa provocan comportamientos oscilatorios en las soluciones obtenidas con el esquema.

Los resultados obtenidos del análisis de estabilidad para la

ecuación completa son congruentes con lo que por experiencia indica Price et al. (1966), ya que efectivamente para los esquemas explícitos centrados, analizados en el capítulo 4, el límite superior del número de Péclét para evitar comportamientos oscilatorios es dos.

Es evidente que con las restricciones planteadas, uno de los problemas que se presentan es la disminución de Δx y Δt para problemas con difusión poco importante, es decir convección dominante, aumentando por lo tanto el número de cálculos a realizar. Sin embargo, los esquemas propuestos son tan simples que aunque aumenten dichos cálculos, el tiempo de proceso no se incrementa en forma importante.

El número de operaciones de punto flotante (OPF) que se realizarían para resolver cada intervalo de tiempo para un mismo problema con esquemas implícitos, es aproximadamente un 73% mayor al de las OPF con un esquema explícito, es decir, que si el esquema explícito ocupa 10 OPF, el implícito realiza 73 para el primer Δt , para el segundo incremento, existirá una diferencia de 20 contra 146 OPF y así sucesivamente.

Por otro lado para problemas en grandes extensiones (ríos importantes), será conveniente revisar si es necesario el uso de esquemas implícitos incondicionalmente estables que permiten el uso de incrementos mayores.

Sin embargo, aún cuando en un esquema implícito se puedan tener incrementos mayores, debe cuidarse que la malla sea lo suficientemente representativa del cauce para no perder información, lo que hace necesario un balance entre el método a utilizar para resolver el problema y permitir que los esquemas

explícitos sean la opción de solución.

Aún cuando los esquemas explícitos presentados están asociados a la ecuación de dispersión longitudinal en su forma más simple, pueden ser una herramienta computacional útil para contar con órdenes de magnitud del problema de una manera sencilla y rápida.

En cuanto a la convergencia se puede indicar que está asociada y garantizada al cumplirse la estabilidad en el esquema, pero es conveniente señalar que los errores serán aún menores cuando los números de Courant y Feclét se alejen de los límites establecidos por los criterios de estabilidad presentados.

Al aplicar los criterios de estabilidad en los esquemas explícitos y resolver para distintas condiciones de velocidad y coeficientes de dispersión, se obtiene una excelente aproximación con las soluciones analíticas (ver capítulo 5).

Adicionalmente, y para reforzar la bondad de los esquemas explícitos, se compararon los resultados arrojados por el esquema central contra mediciones experimentales reportadas por Fischer, 1967; obteniéndose una predicción con respecto a lo medido con diferencia máxima en el pico del 5%, lográndose reducirla a un 0.2% al disminuir el número de Courant. Lo anterior confirma la idea de la convergencia de los esquemas arriba planteada.

Es importante aclarar que independientemente de cumplir con los criterios de estabilidad, para asegurar la compatibilidad del esquema con la ecuación diferencial, es recomendable revisar que para los valores de C , P y λ propuestos, los valores de los coeficientes de los esquemas sean no nulos.

Un contaminante descargado en un canal, ya sea natural o artificial, tenderá a ser dispersado por el movimiento hidrodinámico convectivo y por una dilución dada por los mecanismos de difusión. Desde el punto de la descarga hasta el momento en que se completa la difusión transversal en el cauce, conocido como tiempo de mezclado (Fischer, 1979), se presenta un desarrollo de la nube de contaminante hasta uniformizarse a todo lo ancho del canal. En esta zona de mezclado transversal o zona cercana, la ecuación unidimensional de dispersión longitudinal no es aplicable.

Basándose en la idea de mantener la simplicidad en el cálculo con los esquemas, la siguiente etapa que se recomienda estudiar es la de extender la solución para la zona donde aún no se desarrolla completamente la difusión transversal, convirtiéndolo en un problema bidimensional.

Finalmente se recomienda adaptar los esquemas probados y extender los enfoques a problemas de dispersión en ríos para contar con un modelo que permita predecir el comportamiento de los contaminantes en cauces naturales.

NOTACION UTILIZADA

(M = masa ; L = longitud ; T = tiempo)

a	- radio de tubería (L)
A ₀ , A ₁ , A ₂	- coeficientes del esquema explícito
A, B	- componentes del sistema binario
C	- concentración
\bar{C}	- concentración media
C'	- desviación de la concentración
C	- número de Courant
d	- tirante del escurrimiento (L)
D _x , D _y , D _z	- coeficientes difusión en las direcciones x, y, z (L ² T ⁻¹)
e	- base de los logaritmos naturales (e=2.7182818...)
g	- aceleración de la gravedad (LT ⁻²)
g	- coeficiente de peso
h	- ancho del cauce (L)
i	- componente imaginaria; $i = \sqrt{-1}$
j, n	- índices
k	- constante de Von Karman
K	- coeficiente de dispersión longitudinal (L ² T ⁻¹)
L	- longitud del cauce o canal (L)
M, m	- masa (M)
\bar{N}	- vector de flujo de masa (ML ⁻² T ⁻¹)
P	- número de Péclét
\bar{q}	- vector de flujo de transferencia de masa (ML ⁻² T ⁻¹)
r _{A, B}	- reacción o rapidez de producción de masa A, B
R _j ⁿ	- error de redondeo para la sección j en el intervalo n
t	- tiempo (T)
T _x	- tiempo de dispersión en la dirección x (T)
u, v, w	- velocidades en las direcciones x, y, z (LT ⁻¹)
\bar{u}	- velocidad media (LT ⁻¹)
u'	- desviación de la velocidad (LT ⁻¹)
u*	- velocidad de cortante (LT ⁻¹)

NOTACION UTILIZADA (Cont.)

(M = masa ; L = longitud ; T = tiempo)

$\{U^2\}$	- varianza de la dispersión
\vec{v}	- vector velocidad (LT^{-1})
V_A, V_B	- velocidades medias de las componentes A,B (LT^{-1})
V_0	- Volumen (L^3)
x, y, z	- coordenadas espaciales (L)
$\beta = \theta \Delta x$	- ángulo de paso de los errores en serie de Taylor
δ	- coeficiente complejo
Δ	- indica incremento de cantidad
$\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z$	- coeficientes de difusión turbulenta ($L^2 T^{-1}$)
λ	- cociente entre Courant y Péclet
$\bar{\mu}$	- media
μ, μ_0	- funciones complejas
μ_R, μ_I	- parte real e imaginaria de la función compleja μ
μ_{0R}, μ_{0I}	- parte real e imaginaria de la función compleja μ_0
Π	- número Pi = 3.1415926...
ρ	- densidad (ML^{-3})
σ	- desviación estandar
σ^2	- varianza
τ_0	- esfuerzo cortante lateral o de fondo ($ML^{-1} T^{-2}$)
(ξ, τ)	- ejes transformados de (x,t) moviéndose a la velocidad media del flujo.
$ \zeta \leq 1$	- condición de estabilidad de Cauchy
∞	- infinito
∇	- operador vectorial <i>gradiente</i>
$\nabla \cdot$	- operador vectorial <i>divergente</i>
∇^2	- operador escalar <i>Laplaciano</i>

APENDICE (A)

OPERADORES VECTORIALES

Coordenadas Cartesianas.

$$\text{Gradiente (Escalar)} \quad \nabla \epsilon = \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \mathbf{e}_y + \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \mathbf{e}_z$$

$$\text{Divergente (Vector)} \quad \nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

$$\text{Rotacional (Vector)} \quad \nabla \times \mathbf{V} = \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \mathbf{e}_x + \\ \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \mathbf{e}_y + \\ \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \mathbf{e}_z \end{array} \right\}$$

$$\text{Laplaciano (Escalar)} \quad \nabla^2 \epsilon = \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial z^2}$$

Coordenadas Cilíndricas.

$$\text{Gradiente (Escalar)} \quad \nabla \epsilon = \frac{\partial \epsilon}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \mathbf{e}_z$$

$$\text{Divergente (Vector)} \quad \nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r v_r \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

$$\text{Rotacional (Vector)} \quad \nabla \times \mathbf{V} = \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} - \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right) \mathbf{e}_r + \\ \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \mathbf{e}_\theta + \\ \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r v_\theta \right) - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) \right] \mathbf{e}_z \end{array} \right\}$$

$$\text{Laplaciano (Escalar)} \quad \nabla^2 \epsilon = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \epsilon}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial z^2}$$

$$\text{erf}(Z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^Z e^{-z^2} dz$$

Z	erf(z)	Z	erf(z)
0.00	0.00000	1.60	0.97633
0.05	0.05640	1.65	0.98035
0.10	0.11249	1.70	0.98377
0.15	0.16801	1.75	0.98665
0.20	0.22271	1.80	0.98907
0.25	0.27632	1.85	0.99109
0.30	0.32861	1.90	0.99277
0.35	0.37936	1.95	0.99416
0.40	0.42837	2.00	0.99531
0.45	0.47547	2.05	0.99625
0.50	0.52049	2.10	0.99701
0.55	0.56332	2.15	0.99763
0.60	0.60386	2.20	0.99813
0.65	0.64204	2.25	0.99853
0.70	0.67782	2.30	0.99885
0.75	0.71117	2.35	0.99911
0.80	0.74212	2.40	0.99931
0.85	0.77069	2.45	0.99947
0.90	0.79693	2.50	0.99959
0.95	0.82091	2.55	0.99969
1.00	0.84272	2.60	0.99976
1.05	0.86245	2.65	0.99982
1.10	0.88021	2.70	0.99986
1.15	0.89613	2.75	0.99990
1.20	0.91031	2.80	0.99992
1.25	0.92289	2.85	0.99994
1.30	0.93400	2.90	0.99996
1.35	0.94375	2.95	0.99997
1.40	0.95227	3.00	0.99998
1.45	0.95968	3.05	0.99999
1.50	0.96608	3.10	1.00000
1.55	0.97160	3.15	1.00000

* Aproximación de la función error:

$$\text{erf}(z) = 1 - (a_1 z + a_2 z^2 + a_3 z^3) e^{-z^2} + \epsilon(z)$$

siendo $t = \frac{1}{1+p z^2}$; con valores constantes $\begin{cases} a_1 = 0.3480242 \\ a_2 = -0.0958798 \\ a_3 = 0.7478501 \end{cases}$
y de $p = 0.47047$

para $0 \leq z \leq \infty$, con error: $|\epsilon(z)| \leq 2.5 \times 10^{-5}$

como propiedades: $\text{erf}(-z) = -\text{erf}(z)$; $\text{erf}(0)=0$; $\text{erf}(\infty)=1$

APENDICE (C)

FUNCIONES COMPLEJAS

Identidades de Euler:

$$r e^{i\theta} = (\cos\theta + i \operatorname{sen}\theta)r = x + iy \quad ; \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}$$
$$x = r \cos\theta \quad ; \quad y = r \operatorname{sen}\theta$$

$$\operatorname{sen} \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$$

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$$

Operaciones Complejas:

- Suma/Resta

$$(a + bi) \pm (c + di) = a \pm c + (b \pm d)i$$

- Producto

$$(a + bi)(c + di) = (ac - bd) + (bc + da)i$$

- Cociente

$$\frac{a + bi}{c + di} = \frac{a + bi}{c + di} \cdot \frac{c - di}{c - di} = \frac{(a + bi)(c - di)}{c^2 + d^2}$$

REFERENCIAS

- ABBOTT, M.B., 1979. "Computational hydraulics", Pitmann A.F.P., Londres y Boston.
- ALDAMA, A.A., 1985. "Theory and applications of two- and three-scale filtering approaches for turbulent flow simulation", Ph. D. Thesis, Massachusetts Institute of Technology, USA.
- , 1987. "La analogía de la ecuación diferencial ordinaria", XIII Congreso de la ANIAC, pp. 305-307.
- BELTAOS, S., 1980. "Longitudinal dispersion in rivers", ASCE Journal of the Hydraulics Division, 106(HY1), pp. 151-172
- CARSLAW, H.S., JAEGER, J.C., 1959. "Conduction of heat in solids", 2nd. ed. Oxford Univ. Press (Clarendon), Londres y New York.
- CRANK, J., 1956. "The mathematics of diffusion", Oxford Univ. Press (Clarendon), Londres y New York.
- CUNGE, J.A., HOLLY, F.M., VERWEY, A., 1980. "Practical aspects of computational river hydraulics", Pitmann A.F.P., Londres y Boston.
- DAILY, J.N., HARLEMAN, D.R., 1966. "Dinámica de los fluidos con aplicaciones en ingeniería", Ed. Trillas (Addison-Wesley, P.C)
- ELDER, J.W., 1959. "The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow", Journal of Fluid Mechanics, 5, pp. 544-560.
- FISCHER, H.B., 1967. "The mechanics of dispersion in natural streams", ASCE Journal of the Hydraulics Division, 93(HY6), pp. 187-216.
- , 1968. "Dispersion prediction in natural streams", ASCE Journal of the Sanitary Engineering Division, 94(SA5), pp. 927-943.
- FISCHER, H.B., LISI, E.J., KOH, R.C., BERGER, G.N., BROOKS, N.H., 1979. "Mixing in inland and coastal waters", Academic Press, New York, N.Y.
- HOLLY, F.M., 1985. "Dispersion in rivers. Physical principles and dispersion equations", Developments in Hydraulic Engineering, Novak, Ed.
- LAU, Y.L., KRISHNAPPAN, B.G., 1977. "Transverse dispersion in rectangular channels", ASCE Journal of the Hydraulics Division, 103(HY10), pp. 1173-1189.
- LIGGET, J., CUNGE, J.A., 1975. "Numerical methods of solution of the unsteady flow equations", Cap. 4 de la publicación del Water Resources -Unsteady flow in open channel- Ed. por Mahmood y Jeyevich, Fort Collins, Colorado, USA.

REFERENCIAS (Cont.)

- PRICE, H.S., VARGA, R.S., WARREN, J.E., 1966. "Application of oscillation matrices to diffusion-convection equations", Journal of Math. and Physics, pp. 301-311.
- SAUVAGET, P., 1985. "Dispersion in rivers. Numerical computation of dispersion", Developments in Hydraulic Engineering, Novak.
- SMITH, G.D., 1977. "Numerical solution of partial differential equations: Finite difference methods", Oxford Univ. Press (Clarendon), Londres y New York.
- SIEMONS, J., 1970. "Numerical methods for the solution of diffusion-advection equations", Publication No. 88, Delft Hydraulics Laboratory, Delft, Holanda.
- TAIGBENU, A., LIGGETT, J., 1986. "An integral solution for the diffusion-advection equation", A.G.U. Prof. Paper, 5W4269, pp. 1237-1246.
- TAYLOR, G.I., 1921. "Diffusion by continuous movements", Proc. R. Soc. London Ser., A-20, pp. 196-211.
- _____, 1953. "Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube", Proc. R. Soc. London Ser., A-219, pp. 186-203.
- _____, 1954. "The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe", Proc. Soc. London Ser., A-223, pp. 446-468.
- WELTY, J.R., WICKS, C. y WILSON, R., 1969. "Fundamentos de transferencia de momento, calor y masa", Ed. Limusa (John Wiley & Sons).