

01162



DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

Facultad de Ingeniería

11  
Rj

CALCULO DE LA DISPERSION BIDIMENSIONAL CON  
METODOS EULERIANO-LAGRANGIANOS EN  
DIFERENCIAS FINITAS

**LUIS REY PUENTE JIMENEZ**

**TESIS**

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)**

CAMPUS MORELOS

1996

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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 esta 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.

*A Eunice y Luis Daniel*

*A mis padres y hermanos*

*A mis sinodales por sus comentarios y el tiempo dedicado a la revisión de este trabajo:  
Dr. Polioptro Martínez Austria, Dr. Alvaro Muñoz Mendoza, Dr. Nahun García Villanueva, M.I.  
Mauricio Escalante Estrada y M.I. José Alfredo González Verdugo.*

*Al Instituto Mexicano de Tecnología del Agua por el apoyo económico brindado a través de  
su programa de becas.*

# CONTENIDO

- 1.- Introducción.
- 2.- Análisis de la ecuación de dispersión.
  - 2.1 Dispersión longitudinal.
  - 2.2 Dispersión bidimensional.
  - 2.3 Dificultades en la modelación de la dispersión.
- 3.- Métodos numéricos.
  - 3.1 Métodos Eulerianos.
  - 3.2 Métodos Lagrangianos.
  - 3.3 Métodos Euleriano-Lagrangianos.
  - 3.4 Solución a la advección.
  - 3.5 Solución a la difusión.
  - 3.6 Condiciones iniciales y de frontera.
- 4.- Estabilidad, análisis del error y truncamiento.
  - 4.1 Estabilidad.
  - 4.2 Análisis del error.
  - 4.3 Error por truncamiento.
  - 4.4 Convergencia y consistencia.
  - 4.5 Conservación de masa
- 5.- Ejemplos de aplicación.
  - Conclusiones y Recomendaciones
  - Referencias
  - Anexo

# 1. INTRODUCCIÓN.

El fenómeno de transporte de masa está relacionado con muchos problemas importantes en diferentes áreas de la ingeniería y la ciencia. Una de las formas más útiles en las que se representa matemáticamente es la ecuación de dispersión, que describe el mezclado de una sustancia en otra. Los problemas mencionados incluyen, de manera importante, la modelación de contaminantes en los diferentes cuerpos de agua superficiales como en lagos, ríos, océanos, en aguas subterráneas o en el aire.

Para controlar la contaminación de cualquier cauce, es necesario regular la liberación de los contaminantes dañinos. Esto requiere del conocimiento de la tasa a la cual el cauce es capaz de transportar, dispersar el contaminante y depurarse mediante mecanismos como la oxidación y la acción bacterial.

Plantear la solución numérica de la ecuación de dispersión dadas las diferentes condiciones que pueden ocurrir entre un cauce y otro, es una herramienta práctica necesaria para obtener un programa de administración de descargas o bien en eventualidades, tales como derrames accidentales, con la intención de minimizar o prevenir los efectos de la contaminación.

En muchos casos, los resultados obtenidos con modelos unidimensionales no son suficientes o su efectividad es mínima. Por ejemplo la dispersión en lagos y océanos, por lo que la modelación bidimensional es más adecuada.

Los modelos numéricos de dispersión necesitan de información esencial para ser utilizados. Deben ser conocidas con anterioridad las características del flujo, del cauce o lago y del contaminante.

En las proximidades de una fuente de contaminación existen tres zonas de mezclado. En la primera el mezclado está fuertemente influenciado por las propiedades del contaminante y la forma de la descarga esta zona es conocida como campo cercano. Después de esta zona existe una de transición en la que el mezclado es influenciado tanto por la descarga como por las corrientes en el medio. La zona donde el contaminante se comporta pasivamente, es decir, solo es transportado y difundido por las corrientes y la turbulencia en el ambiente es conocida como campo lejano. Con frecuencia las dos primeras zonas son muy pequeñas en comparación a la tercera. La ecuación de dispersión describe el mezclado en el campo lejano y esta es la zona analizada en el presente trabajo.

La mayoría de los métodos numéricos empleados en la solución de la ecuación de dispersión tienen un comportamiento no deseado bajo ciertas condiciones, por ejemplo muestran difusión numérica o no son convergentes. Por ello es indispensable conocer las mejores alternativas existentes, sus características, sus alcances y su precisión al modelar este fenómeno. Esto ha sido objeto de intenso estudio en las décadas anteriores. Se han propuesto muchas formas de resolver la ecuación de dispersión pero no existe alguna totalmente satisfactoria. Se han utilizado distintos enfoques, los cuales pueden ser reunidos en tres grandes grupos: métodos Eulerianos, Lagrangianos, y Euleriano-Lagrangianos. En este trabajo se discuten y analizan las características de los métodos anteriores y se desarrollan tres esquemas basados en el último grupo en su forma bidimensional.

## 2. ANÁLISIS DE LA ECUACIÓN DE DISPERSIÓN.

El fenómeno de la dispersión está compuesto por tres mecanismos: difusión molecular, difusión turbulenta y la difusión por cortante. El primer mecanismo debido al movimiento browniano hace que las moléculas de un fluido se mezclen en otro fluido principal de acuerdo a la ley de Fick: "El flujo de las partículas será proporcional a su gradiente de concentraciones". Por otra parte en un flujo turbulento las partículas de los fluidos se mezclan, sujetas a fluctuaciones aleatorias de velocidad; este mecanismo es mucho más intenso que el anterior, por lo que con frecuencia se desprecia la difusión molecular. La difusión por cortante depende de los gradientes de velocidad que ocurren en el flujo.

Con lo anterior es posible definir a la difusión como el transporte asociado con la acción molecular y turbulenta; y a la dispersión como el transporte asociado con el efecto combinado de la variación de la velocidad transversal en la sección y la difusión. Algunos autores prefieren usar los términos difusión convectiva, convección-difusión, o advección-difusión. Según Fischer *et al* (1979): "La difusión es el transporte dilutivo de partículas. La convección es el transporte debido a la hidrodinámica del cuerpo de agua, también conocido como advección".

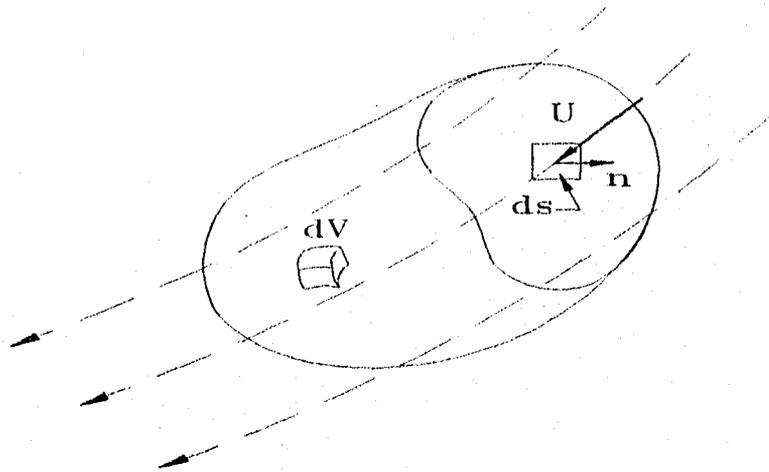


Fig.2.1.

Tal vez la forma teórica más directa de representar el proceso de dispersión está basada en el principio de conservación de masa. Considerando un volumen de control arbitrario, como el mostrado en la fig.2.1., en el cual  $dV$  es un elemento de volumen,  $ds$  es un elemento de la superficie,  $n$  es un vector unitario normal a la superficie y  $U$  define el campo de velocidades. La tasa de cambio del peso  $W$  del contaminante en el volumen de control es:

$$\frac{dW}{dt} = -\int_S c U \cdot n ds + \int_S D \nabla c \cdot n ds \quad (2.1)$$

donde  $c$  es la concentración (peso por unidad de volumen) del contaminante y  $D$  es el coeficiente de difusión, que se asume constante. Tomando en cuenta que:

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V c dV = \int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV \quad (2.2)$$

y empleando el teorema de la divergencia:

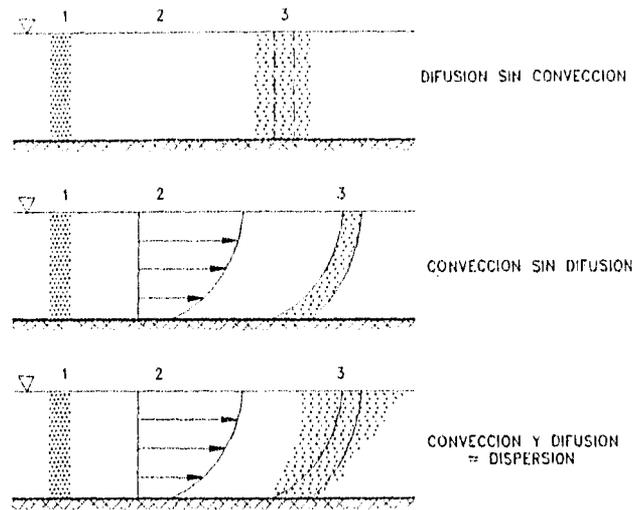
$$\int_S c U \cdot n ds = \int_V \nabla \cdot (c U) dV \quad (2.3)$$

$$\int_S D \nabla c \cdot n ds = \int_V D \nabla^2 c dV \quad (2.4)$$

el planteamiento para conservación de masa del contaminante finalmente es

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (U c - D \nabla c) = 0 \quad (2.5)$$

donde  $D$ , [ $L^2 T^{-1}$ ], es el tensor de coeficientes de difusión,  $U$ , [ $LT^{-1}$ ], es el campo de velocidad del flujo y  $c$  es la concentración (variable dependiente), la cual puede ser expresada en base a volumen, masa o en forma relativa (%). El campo de velocidades puede ser conocido por medición en campo o por modelación de la hidrodinámica. El término  $\partial c / \partial t$  es la variación de la concentración en el tiempo, el primer término entre los paréntesis es conocido como convectivo mientras que el segundo es el difusivo.



**Fig.2.2.-** Componentes de la dispersión. 1, distribución inicial; 2, perfil de velocidades; 3, distribución a un tiempo posterior.

Existen formas tanto analíticas como experimentales para determinar los coeficientes  $D$ , dependiendo de las características del sitio, del flujo, tipo de fuente, dirección, entre otras. Este coeficiente de dispersión tiene componentes en cada una de los ejes coordenados. Su determinación puede hacerse con mediciones en campo variando la distribución de un trazador en el tiempo, con lo que se calibra un modelo matemático que contenga los coeficientes como incógnitas. En el caso tridimensional el tensor de difusión es:

$$D = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

cuando el gradiente en cualquiera de las direcciones afecta la difusión en cualquier otra, existen las componentes cruzadas. En caso de que se haga coincidir cualquiera de los ejes con el flujo estas componentes se hacen nulas.

## 2.1 DISPERSIÓN LONGITUDINAL.

La dispersión longitudinal es la difusión de un trazador a lo largo del eje del flujo. Es conocida también como dispersión unidimensional (1D). Esta describe a fuentes instantáneas o variantes en el tiempo, en las cuales el mezclado es mucho más importante en la dirección longitudinal, ya que en la dirección vertical y transversal este se ha hecho uniforme. Las bases teóricas de este fenómeno fueron establecidas por Taylor (1954), en el estudio de flujos en tuberías circulares. La ecuación de dispersión unidimensional que se puede derivar de manera sencilla de la ec.2.1 (ver Fischer, 1979 o French, 1988) es la siguiente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = K \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.8)$$

en la cual el trazador está completamente mezclado a lo largo de la sección transversal, por lo que  $c$  es la concentración media en la sección de análisis,  $K$ , [ $L^2T^{-1}$ ], es conocido como coeficiente de dispersión longitudinal que toma en cuenta tanto la difusión como la convección diferencial en la sección transversal,  $u$ , [ $LT^{-1}$ ], es la velocidad media.

Taylor (1954) obtuvo una solución exacta para el coeficiente de dispersión para una tubería con flujo turbulento:

$$K = 10.1 u_* r \quad (2.9)$$

donde  $r$ , [ $L$ ], es el radio del tubo y  $u_*$ , [ $LT^{-1}$ ], es la velocidad cortante o de fricción, que puede calcularse de la siguiente manera:

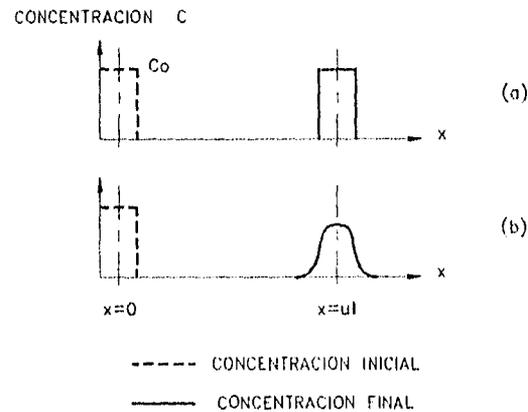
$$u_* = u \sqrt{\frac{f}{8}} \quad (2.10)$$

aquí  $f$  es el coeficiente de fricción de Darcy-Weisbach y  $u$  la velocidad media en la tubería.

En forma general la velocidad cortante  $u_*$  se define como:

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \quad (2.11)$$

donde  $\tau_0$ , [L<sup>-1</sup>MT<sup>-2</sup>], es el esfuerzo cortante en las paredes del canal, cauce o tubería, y  $\rho$ , [L<sup>-3</sup>M], es la densidad del fluido.



**Fig.2.3.-** Comportamiento de una nube contaminante a) únicamente advección, b) advección + difusión.

Para canales y cauces naturales se han propuesto fórmulas empíricas que incluyen parámetros tales como radio hidráulico, velocidad de fricción, relación ancho-profundidad, coeficiente de Manning, etc. para el cálculo del coeficiente  $K$ . Para el caso de cauces se han propuesto diversos métodos, basados fundamentalmente en mediciones de laboratorio y campo. Recientemente González y Martínez (1990) han propuesto un método general.

Puesto que las diferencias entre estas características cambian de un cauce a otro, los valores del coeficiente  $K$  pueden variar hasta en varios ordenes de magnitud.

## 2.2 DISPERSIÓN BIDIMENSIONAL.

En el caso de dispersión unidimensional, se considera que la concentración es el valor medio de toda la sección transversal; esta es una simplificación válida en ciertos casos, pero cuando esto no sucede, como por ejemplo en el caso de una sección transversal ancha, la distancia necesaria para que el trazador se homogenice en tal sección puede llegar a ser muy grande.

En un río, por ejemplo, en el cual el ancho de su sección es significativo en comparación con su profundidad, la distribución homogénea del trazador es alcanzada más rápidamente verticalmente que horizontalmente, por lo que se puede asumir que el trazador está mezclado uniformemente sobre su profundidad.

La ecuación de dispersión con profundidad media utiliza la hipótesis de que el transporte convectivo y los procesos de difusión turbulentos pueden ser combinados en los términos de difusión. El resultado es una ecuación bidimensional de dispersión a una profundidad media; su derivación se puede encontrar en Holly (1975), aquí se reproduce un forma resumida. De la ecuación 2.1, desarrollando los términos en un sistema de cordenadas tridimensional y haciéndolo coincidir el eje  $x$  con el eje principal del flujo, obtenemos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = D_{xx} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_{zz} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (2.12)$$

integrando la ecuación anterior desde el fondo  $a$  hasta la superficie  $b$  y aplicando el teorema de Leibniz, tenemos:

$$\int_a^b \frac{\partial c}{\partial t} dz + \frac{\partial}{\partial x} \int_a^b u c dz - (uc)|_b + (uc)|_a \frac{\partial a}{\partial x} + (wc)|_b - (wc)|_a + \frac{\partial}{\partial y} \int_a^b v c dz - (vc)|_b \frac{\partial b}{\partial y} + (vc)|_a \frac{\partial c}{\partial y} =$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_a^b D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} dz - \left( D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right)_b \frac{\partial b}{\partial x} + \left( D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right)_a \frac{\partial a}{\partial x} + \left( D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right)_b - \left( D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right)_a + \frac{\partial}{\partial y} \int_a^b D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} dz - \left( D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_b \frac{\partial b}{\partial y} + \left( D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_a \frac{\partial a}{\partial y} \quad (2.13)$$

reconociendo que para cualquier integrando  $\phi$ :

$$\int_a^b \phi dz = h \bar{\phi} \quad (2.14)$$

tomando en cuenta lo anterior:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(h\bar{c}) + \frac{\partial}{\partial x}(h\bar{u}\bar{c}) + \frac{\partial}{\partial y}(h\bar{v}\bar{c}) &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\overline{hD_{xx}\frac{\partial c}{\partial x}}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\overline{hD_{yy}\frac{\partial c}{\partial y}}\right) + c_b\left[u_b\frac{\partial b}{\partial x} + v_b\frac{\partial b}{\partial y} - w_b\right] + c_a\left[-u_a\frac{\partial a}{\partial x} - v_a\frac{\partial a}{\partial y} + w_a\right] \\ &+ \left[-\left(D_{xx}\frac{\partial c}{\partial x}\right)_b\frac{\partial b}{\partial x} - \left(D_{yy}\frac{\partial c}{\partial y}\right)_b\frac{\partial b}{\partial y} + \left(D_{zz}\frac{\partial c}{\partial z}\right)_b\right] + \left[\left(D_{xx}\frac{\partial c}{\partial x}\right)_a\frac{\partial a}{\partial x} + \left(D_{yy}\frac{\partial c}{\partial y}\right)_a\frac{\partial a}{\partial y} - \left(D_{zz}\frac{\partial c}{\partial z}\right)_a\right] \end{aligned} \quad (2.15)$$

Los términos entre [] de la ecuación anterior representan el flujo de masa entre las fronteras, es decir, en el fondo del canal y la superficie libre; tanto la velocidad del flujo como el transporte de masa son paralelos a las fronteras en  $a$  y  $b$ , como no existe intercambio de masa estos términos se anulan.

Considerando que cualquier cantidad  $\phi$  es la suma de su valor promediado en la vertical y su variación local  $\phi = \bar{\phi} + \phi''$  y aplicando las reglas de promedios de Reynolds, obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(h\bar{c}) + \frac{\partial}{\partial x}(h\bar{u}\bar{c}) + \frac{\partial}{\partial y}(h\bar{v}\bar{c}) = \frac{\partial}{\partial x}\left(-h\overline{u''c''} + \overline{hD_{xx}\frac{\partial c}{\partial x}}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(-h\overline{v''c''} + \overline{hD_{yy}\frac{\partial c}{\partial y}}\right) \quad (2.16)$$

los términos entre () de la parte derecha de la ecuación representan el flujo de masa horizontal debido a la convección y difusión diferencial en la vertical. Por analogía con la difusión turbulenta:

$$-h\overline{u''c''} + \overline{hD_{xx}\frac{\partial c}{\partial x}} = D_x\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (2.17)$$

procediendo de la misma manera con el eje  $y$  y eliminando  $\bar{\quad}$ , tenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(hc) + \frac{\partial}{\partial x}(huc) + \frac{\partial}{\partial y}(hvc) = D_x\frac{\partial}{\partial x}\left(h\frac{\partial c}{\partial x}\right) + D_y\frac{\partial}{\partial y}\left(h\frac{\partial c}{\partial y}\right) \quad (2.18)$$

y considerando ahora que el flujo no coincide con el eje de coordenadas:

$$\frac{\partial}{\partial t}(hc) + \frac{\partial}{\partial x}(huc) + \frac{\partial}{\partial y}(hvc) = K_{xx}\frac{\partial}{\partial x}\left(h\frac{\partial c}{\partial x}\right) + K_{xy}\frac{\partial}{\partial x}\left(h\frac{\partial c}{\partial y}\right) + K_{yy}\frac{\partial}{\partial y}\left(h\frac{\partial c}{\partial y}\right) + K_{yx}\frac{\partial}{\partial y}\left(h\frac{\partial c}{\partial x}\right) \quad (2.19)$$

en la cual los coeficientes  $K_{xx}$ ,  $K_{yy}$  y  $K_{xy}$  son componentes del tensor de difusión:

$$K_{xx} = D_x \cos^2\theta + D_y \sin^2\theta$$

$$K_{xy} = (D_x - D_y) \sin \Theta \cos \Theta$$

$$K_{yy} = D_x \sin^2 \Theta + D_y \cos^2 \Theta$$

$\Theta$  es el ángulo del eje  $x$  al eje longitudinal al flujo medido en la dirección a las manecillas del reloj,  $D_x$  y  $D_y$  son los coeficientes de difusión promediados en  $z$ . En caso de que el eje  $x$  coincida con el flujo, el coeficiente  $K_{xy}$  será nulo.

La modelación del fenómeno en forma bidimensional (2D), es decir, longitudinalmente y transversalmente para una profundidad constante:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (2.20)$$

donde  $D_x$  y  $D_y$  son los coeficientes de difusión o mezclado promediados en la dirección  $z$ ;  $u$  y  $v$  las velocidades del flujo en las direcciones  $x$  e  $y$ , respectivamente.

Los coeficientes  $K$  y  $D_x$  de las ecs. 2.3 y 2.15 respectivamente, tienen diferente magnitud. El coeficiente  $D_x$  es menor que  $K$  dado que este último es un promedio de la difusión en toda la sección transversal e incorpora el efecto del gradiente de velocidades de dicha sección.

Para un canal recto con flujo uniforme, Elder (1959) encontró las siguientes relaciones:

$$D_x = 5.93 u_* h \quad (2.21)$$

$$D_y = 0.23 u_* h \quad (2.22)$$

donde  $h$  es la profundidad media del canal; el coeficiente 0.23 está sujeto a debate, por ejemplo, se supone que el valor de este coeficiente debe ser de 0.1 a 0.2 tomando solo en cuenta la turbulencia debida a la plantilla del canal como lo sugiere el parámetro  $u_* h$ . Pero los valores reportados de este coeficiente son de 0.2 a 0.3 en canales de riego, de 0.5 a 5 o más en ríos (Holly 1985).

En grandes cuerpos de agua tales como lagos u océanos, no hay un límite natural en distancia con el cual correlacionar los movimientos turbulentos. Por este motivo el coeficiente de difusión horizontal se relaciona con alguna escala de longitud:

$$D_H = AL^n \quad (2.23)$$

donde  $D_H$  es el coeficiente de difusión horizontal ( $D_H = D_x = D_y$ ),  $L$  es la escala de longitud,  $A$  es un coeficiente que varía de 0.1 a 0.001 cm<sup>2/3</sup>/seg,  $n$  es un coeficiente empírico tomado

generalmente como  $4/3$ . La escala de longitud puede ser el ancho observado de la nube de contaminante generalmente considerada como cuatro veces la desviación estándar ( $4\sigma$ ). Esta es conocida como "ley de  $4/3$  de Richardson" (Adams y Baptista 1986). Okubo encontró en forma experimental que  $n = 1.15$  y  $A = 0.0103$  (Chin y Roberts 1985).

En la modelación de la dispersión de aguas subterráneas los coeficientes dependen de la dispersividad del suelo, conocida por medios experimentales.

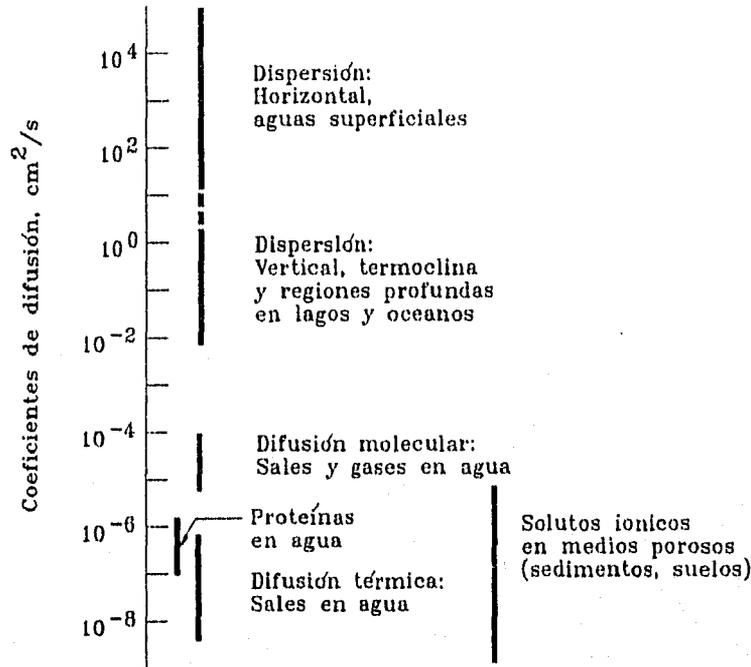


Fig.2.4.- Coeficientes de dispersión en varios ambientes.

La figura 2.3 debida a Lerman (Bowie, et al 1985) muestra la magnitud de diferentes coeficientes de difusión molecular y de dispersión encontrados en varios ambientes. Esta es solo de referencia pues su determinación más precisa se obtiene llevando a cabo experimentos en campo.

### 2.3 DIFICULTADES EN LA MODELACIÓN DE LA DISPERSIÓN.

La solución numérica de la ecuación de dispersión exige un tratamiento detallado cuando se dan ciertas condiciones. Las dificultades que se presentan en el caso unidimensional (1D), generalmente también se encuentran en el caso bidimensional (2D), por lo cual nos concentraremos por el momento en analizar las dificultades para modelar la ecuación en 1D.

La ecuación de dispersión es una ecuación diferencial parcial de segundo orden de tipo parabólico. El término  $u\partial c/\partial x$  es conocido como convectivo mientras que el término  $K\partial^2 c/\partial x^2$  es el difusivo. Un detalle interesante es que cuando  $K = 0$  la ecuación se hace de tipo hiperbólico de primer orden. Esto representa problemas al resolver numéricamente dicha ecuación dado su doble comportamiento dependiendo de la magnitud de los términos convectivo y difusivo.

En este punto definiremos tres parámetros adimensionales usados en la modelación numérica de la dispersión:

$$Pe_x = u \Delta x / K \quad (\text{Número de Peclet de malla.})$$

$$Cr_x = u \Delta t / \Delta x \quad (\text{Número de Courant de malla.})$$

$$\epsilon_x = D \Delta t / \Delta x^2 = Cr_x / Pe_x$$

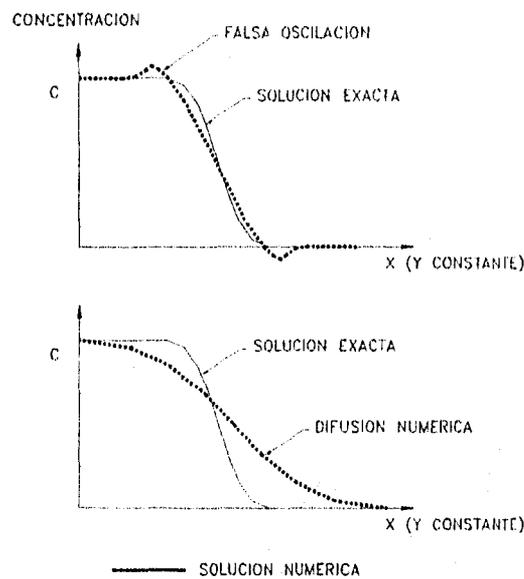
$\Delta x$  y  $\Delta t$  son los incrementos de distancia y tiempo respectivamente, usados en los esquemas numéricos,  $u$  la velocidad y  $D$  es el coeficiente de dispersión.

Cuando la difusión domina en el problema sujeto a modelación numérica, prácticamente cualquier método estándar es lo suficientemente preciso, lo cual sucede cuando  $Pe \leq 2$  (Adams y Baptista 1986). Leonard (1979) considera que computacionalmente un flujo es dominado por convección, aproximadamente cuando  $Pe \geq 5$ , por supuesto que esto será más intenso mientras que  $Pe$  sea mayor.

Los problemas potencialmente generados en la modelación de la dispersión son falsas oscilaciones o difusión numérica.

Las falsas oscilaciones son atribuibles a errores de truncamiento mayores a segundo orden. En esquemas centrados en diferencias finitas (DF), por ejemplo, se presentan cuando  $Pe \geq 2$ . Estas pueden ser eliminadas seleccionando una discretización suficientemente fina para alcanzar el límite de estabilidad. En muchos casos prácticos esto no es posible puesto que requiere de

grandes tiempos de cálculo y espacio en memoria. Como remedio de estas oscilaciones se ha propuesto el uso de métodos conocidos como "upwind", estos son aproximaciones hacia atrás en la distancia para el término convectivo, pero introducen difusión numérica. Esta se presenta como un error en la precisión de los cálculos. Fronteras que llamamos agudas se suavizan, como lo demuestra la figura 2.3.



**Fig. 2.5.-** Problemas de la aproximación numérica de la ecuación de dispersión.

La tabla 2.1 muestra los límites de oscilación de algunos de los métodos empleados en la solución de la ecuación de dispersión tomada de Jensen y Finalayson (1980), la cual se reproduce con algunos cambios para mejor comprensión.

ESQUEMA	LIMITE DE OSCILACION ( $Pe\Delta x < $ )	ORDEN DEL ESQUEMA
Diferencias finitas:		
Dif. centradas	2	$O(\Delta x^2)$
Dif. adelante	1	$O(\Delta x)$
Dif. atrás	$\infty$	$O(\Delta x)$
Elemento finito:		
Galerkin lineal	$2/(1-\alpha)$	$O(\Delta x^2)$
G. cuadrático	2	$O(\Delta x^3)$
G. cúbico	2	$O(\Delta x^4)$
E.F. con colocación ortogonal-Lagrange:		
Cuadrático	2	$O(\Delta x^3)$
Cúbico	3.4641	$O(\Delta x^4)$
Cuártico	4.644	$O(\Delta x^5)$
E.F. con colocación ortogonal-Hermite:		
Cúbico	3.4641	$O(\Delta x^4)$
Cuártico	4.644	$O(\Delta x^5)$

Tab.2.1.- Límites de oscilación de algunos métodos de solución de la ecuación de dispersión.

Otro problema que se presenta es el sistema de coordenadas a utilizar. Para calcular la dispersión en un río, por ejemplo, sería conveniente tomar en cuenta la curvatura longitudinal del mismo, por lo que generalmente son utilizadas coordenadas curvilíneas. Con la finalidad de simplificar el desarrollo de este trabajo nos concentraremos solo en secciones rectas de profundidad uniforme, utilizando coordenadas rectangulares.

### 3. MÉTODOS NUMÉRICOS.

Existe muy pocas soluciones analíticas de la ecuación de dispersión, y corresponden a casos triviales, estas dependen de las suposiciones hechas sobre la naturaleza de la fuente de contaminación y la estructura de las componentes de velocidad del flujo y los coeficientes de difusión. Esta falta de flexibilidad para resolver diferentes problemas conduce a seleccionar métodos numéricos. La solución numérica de la ecuación de dispersión está basada en la construcción y solución de un sistema de aproximaciones algebraicas en las cuales se representan los términos convectivo y difusivo. La solución a este sistema son las concentraciones de la sustancia que se dispersa en el espacio y tiempo. Para llegar a la solución son necesarias las condiciones iniciales y de frontera además de definir los campos de velocidad y difusión que podrían ser o no variables en el espacio y/o tiempo. Los campos de velocidad se conocen de mediciones directas en el campo, en modelos a escala, o a través de modelos numéricos de circulación. Los coeficientes de difusión, calculados por diversos métodos, se toman típicamente como constantes.

Los métodos usualmente empleados son los de diferencias finitas (DF) y elemento finito (EF).

Las ventajas del uso del método del EF (Adams y Baptista 1986) se pueden resumir así:

- Manejo más eficiente de fronteras complicadas, además de mejor refinamiento de la red interna.
- Un tratamiento más consistente de las condiciones de frontera y los procedimientos de interpolación sobre el dominio.

Las ventajas del método de DF:

- Una formulación más intuitiva y tiende a requerir menos espacio en memoria y tiempo del CPU, para un similar número de nodos.
- Un procedimiento más sencillo en la preparación y entrada de datos.

En problemas de 1D los métodos de DF y EF tienen los mismos tipos de errores de fase y amplitud. Aunque, como ha demostrado Gray y Pinder (1976), los esquemas de EF se comportan mejor.

En cualquiera de los métodos anteriores puede haber diferentes estrategias para resolver la ecuación de dispersión. Basados en el tipo de sistema coordinado los métodos se clasifican en Eulerianos, Lagrangianos o la combinación de ambos, Euleriano-Lagrangianos.

### 3.1 MÉTODOS EULERIANOS.

En este tipo de métodos la ecuación a solucionar se aproxima por medio de los métodos en DF o EF en una red fija en el espacio. El método de DF ha sido usado desde finales de los 50's para solucionar la ecuación de transporte. Típicamente se discretiza el dominio en una red ortogonal, en la cual en cada nodo se representa la ecuación diferencial por aproximaciones algebraicas conocidas como diferencias finitas. Los métodos de DF se comportan bien en situaciones en las que la difusión domina, es decir, valores de  $Pe$  pequeños donde la función de la concentración es suave. Cuando el gradiente de la concentración es fuerte ( $Pe$  grandes), los esquemas basados en diferencias centradas para el término convectivo sufren de oscilaciones (falsas oscilaciones) que no ocurren físicamente. Estas son consecuencia de errores de fase en longitudes cortas de onda; así las oscilaciones ocurrirán cuando las longitudes de onda del esquema sean mayores que las de la solución exacta. Price *et al.* (1966) demostró que tales oscilaciones pueden ser eliminadas restringiendo el tamaño de los incrementos espaciales de la red, mostrando que estos deben satisfacer  $\Delta x \leq 2/Pe$ . Esta no es siempre una alternativa práctica por lo que es necesario encontrar otra solución.

Los esquemas conocidos como "upwind" para el término convectivo y diferencias centradas para el término difusivo, se han usados para remediar las oscilaciones. Esto introduce grandes errores de truncado los cuales son equivalentes a un término de dispersión numérica, que en algunos casos llega a ser mucho mayor que la difusión física. El efecto de esta dispersión numérica es suavizar las fronteras agudas de concentración. Otra forma de reducir la dispersión numérica es la utilización de esquemas con alto orden de aproximación en el espacio, tiempo o ambos, con

los cuales se adiciona un término de corrección negativo al coeficiente de dispersión. Algunos de estos son conocidos como métodos de corrección de flujo.

En el método del EF el dominio es dividido en elementos de una forma conveniente como triángulos, cuadriláteros u otro tipo de polígono. Dentro de cada elemento la información se concentra en los nodos, pero puede ser interpolada al interior usando funciones preseleccionadas de interpolación. La ecuación diferencial parcial original se transforma en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo, usando un método de residuos pesados. La integración numérica de este sistema conduce finalmente a un sistema de ecuaciones algebraicas, el cual resultará en los valores de las concentraciones en los nodos.

El uso del método de residuos pesados requiere de la definición de residuos pesados elementales, resultantes de la integración sobre cada elemento de los errores generados en la aproximación del campo de concentraciones actual, pesados por funciones de peso preseleccionadas; la suma de los residuos elementales es forzada a ser cero para minimizar la aproximación de los errores. De la selección de las diferentes interpolaciones y funciones de peso resultan diferentes métodos del EF. A principios de los 70's, la mayoría de los esquemas en EF usados en la solución de la ecuación de transporte usaban las mismas interpolaciones y funciones de peso; estos métodos son conocidos como métodos Galerkin de EF (GA-EF). Los métodos anteriores conducen a aproximaciones en diferencias centradas del término advectivo y presentan las mismas limitaciones de las diferencias centradas en DF, las oscilaciones se producen cuando el número de Péclet excede un valor crítico.

Otros métodos en EF fueron desarrollados a finales de los 70's conocidos como Petrov-Galerkin, en un intento de tomar en cuenta la dirección del flujo, es decir, upwind EF. Con la misma característica de los métodos upwind en DF, estos eliminan las oscilaciones pero introducen dispersión numérica. En este método las funciones de peso se obtienen a través de las funciones de interpolación con un cambio en la forma que incrementa el peso relativo de la información en la dirección del flujo en una magnitud que depende de la geometría y las características del flujo. Otras desventajas de estos métodos son que necesitan un mayor esfuerzo computacional

y son difíciles de manejar elementos que no son cuadriláteros.

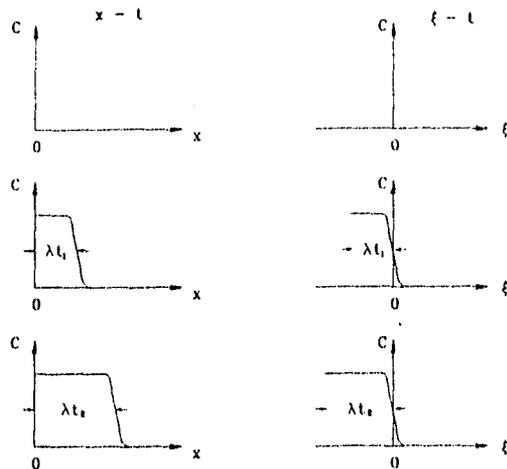
Los métodos Eulerianos generalmente no son seguros al aplicarse para  $Cr$  mayores a 1, condición conocida como de Courant-Frederich-Lewy (CFL). Si no se cumple en el caso de esquemas explícitos se hacen inestables y en esquemas implícitos, aún cuando sean estables, pierden precisión fuera de ese límite.

### 3.2 MÉTODOS LAGRANGIANOS.

Debido a que los métodos Eulerianos son insatisfactorios cuando el término convectivo domina, se aplican los métodos Lagrangianos a la solución de la ecuación de transporte. Estos métodos están basados en una red deformada o en una red fija con coordenadas deformadas, es decir, que acompaña a el flujo. En el primer caso la red es más fina en la vecindad de las fronteras agudas y más amplia fuera de ellas. Los resultados con los estos métodos están libres de oscilaciones o difusión numérica.

Aún cuando estos métodos son más seguros que los Eulerianos, tienen algunas limitaciones serias cuando se consideran problemas complejos, tal es el caso de la existencia de absorción o reacción, múltiples fuentes, intermitencia, etc.

Cuando la red o las coordenadas se deforman, las matrices en el método de EF deben ser reevaluadas y/o descompuestas nuevamente cada paso de tiempo (en el caso de coordenadas Lagrangianas, esto se debe a que la localización de las fronteras varía con el tiempo). Esquemas en DF pueden encontrarse en Al-Niami y Rushton (1978) o Bode y Sobey (1984). Otros métodos basados en EF son los desarrollados por Varoglu y Finn (1980), Jensen (1980), Jensen y Finalyson (1980) y O'Neill y Lynch (1981).



**Fig.3.1** - Sistemas coordenados de los métodos Euleriano (x-t) y Lagrangiano (ξ-t).

### 3.3 METODOS EULERIANO LAGRANGIANOS (E-L).

El propósito de estos es combinar la simplicidad de los métodos Eulerianos con las ventajas de los métodos Lagrangianos. Los métodos E-L separan la ecuación de dispersión en sus dos componentes: convección y difusión, las cuales son resueltas cada una, con la técnica más apropiada. Frecuentemente la ecuación de convección se resuelve por el método de las características, mientras que la difusión se resuelve con DF o EF.

En el método de las características se asigna a cada nodo en el tiempo  $t^{n+1}$  una partícula que no cambia su concentración mientras se mueve a lo largo de su línea característica definida por el flujo. Se localiza su posición en el tiempo anterior  $t^n$  y por medio de interpolación entre los nodos adyacentes se encuentra su concentración, la cual es asignada a el nodo en  $t^{n+1}$ . Esta es la solución del término convectivo únicamente. El término difusivo se resuelve por medio de diferencias centradas en DF o EF utilizando a las concentraciones encontradas como condiciones iniciales. De este modo se soluciona la ecuación completa de dispersión.

Los errores encontrados con este procedimiento se deben principalmente a la solución de la convección por medio de la interpolación de las concentraciones. Entre mejor sea el procedimiento de interpolación mejores serán los resultados obtenidos. Debido a que los errores se incrementan con el número de interpolaciones, entre mayor sea el incremento del tiempo  $\Delta t$ , menor será el número de interpolaciones por lo cual será mejor la precisión alcanzada. Esta es una ventaja respecto a los métodos Eulerianos que su precisión disminuye rápidamente cuando se incrementa  $\Delta t$ .

Existen diferentes procedimientos de interpolación, Baptista (1987) los clasifica en forma general en esquemas de interpolación global y local. Los primeros utilizan todos los valores conocidos de la variable dependiente para encontrar los valores en los puntos requeridos con un polinomio que involucre a todos los nodos del dominio. Esto tiene el inconveniente de utilizar mucho espacio en memoria pues el número de nodos puede llegar a ser de cientos o miles. Además, polinomios de alto orden tienden a oscilar entre los nodos, produciendo inestabilidad o errores significativos.

La interpolación local, que funciona adecuadamente, utiliza sólo algún número de nodos alrededor del punto en consideración proporcionando con esto mejor manipulación de la información requerida.

De acuerdo con su categoría los interpoladores pueden ser compactos y no compactos. La interpolación compacta sólo utiliza la información de los nodos adyacentes, mientras que la no compacta aprovecha la información en nodos más distantes.

La clase de un interpolador se define por el orden de sus derivadas. Con un interpolador de clase  $C^d$ , donde  $d$  es el orden mayor de las derivadas, todas sus derivadas serán continuas hasta un orden  $d$ . Así, si el interpolador es de clase  $C^0$  entonces no son utilizadas derivadas en el esquema.

### 3.4 SOLUCIÓN A LA ADVECCIÓN.

Si en la ecuación de dispersión (ec.2.7) se desprecian los términos difusivos, entonces se tiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad (3.1)$$

dado que la velocidad  $u$  es independiente de la concentración  $c$ , esta ecuación es una diferencial parcial lineal de primer orden, la cual puede ser descompuesta en tres ecuaciones diferenciales ordinarias (Holly y Usseglio-Polatera 1984). Es decir que es equivalente a:

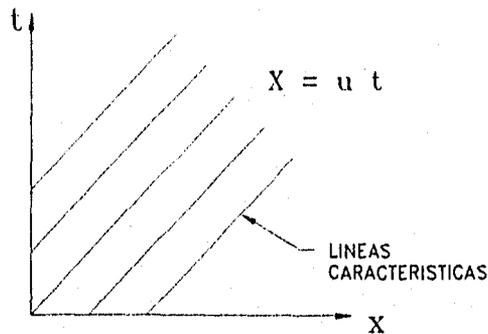
$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{dy}{dt} \frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad (3.2)$$

que representa la derivada total o sustancial de  $c$ , lo que significa que el valor de  $c$  de un volumen diferencial permanece constante durante el movimiento de ese volumen a lo largo de su trayectoria, la cual se define por:

$$\frac{dx}{dt} = u \quad (3.3)$$

$$\frac{dy}{dt} = v \quad (3.4)$$

que se conocen como direcciones o ecuaciones características.



**Fig.3.2** - Líneas características de una ecuación hiperbólica.

Integrando las ecuaciones 3.2, 3.3 y 3.4 obtenemos:

$$\frac{c_0 - c_p}{\Delta t} = 0 \quad (3.5)$$

a lo largo de la trayectoria:

$$x_O - x_P = \int_P^O u dt \quad (3.6)$$

$$y_O - y_P = \int_P^O v dt \quad (3.7)$$

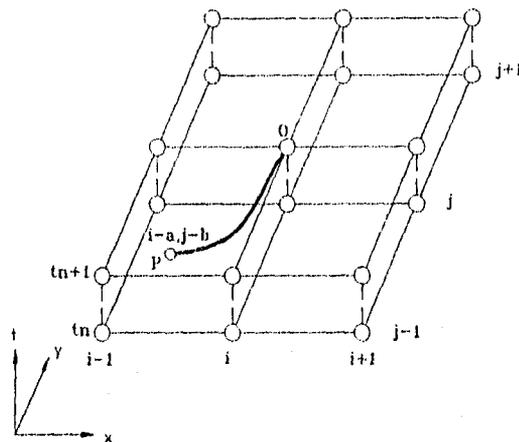
en donde P es el inicio y O el final de la línea característica.

Si la velocidad es constante las ecuaciones 3.6 y 3.7 se simplifican a:

$$x_O - x_P = u \Delta t = a \Delta x \quad (3.8)$$

$$y_O - y_P = v \Delta t = b \Delta y \quad (3.9)$$

donde  $a$  y  $b$  corresponden a los números de Courant en las direcciones  $x$  e  $y$  respectivamente.



**Fig.3.3** - Aspecto de una malla bidimensional mostrando una curva característica.

El valor de  $c_P$  se obtiene generalmente por algún método de interpolación, usando las concentraciones en el tiempo  $t^n$ , esta concentración entonces es asignada a  $c_O$ :

$$c_O = c_P \quad (3.10)$$

lo que significa que el valor de  $c_{ij}^{n+1} = c_O$ . Esto se lleva a cabo para todos los nodos de la malla.

Los diferentes métodos que usan esta técnica dependen de la forma de interpolar  $c_P$ . En el presente trabajo se analizarán la interpolación bilineal, bicuadrática y los polinomios cúbicos de

Hermite (método de Holly-Preissmann 1977).

El método más simple de interpolación es el lineal. El valor de la concentración en el punto  $c_i^{n+1} = c_p$  se calcula interpolando linealmente entre los valores de  $c_i^n$  y  $c_{i-1}^n$ .

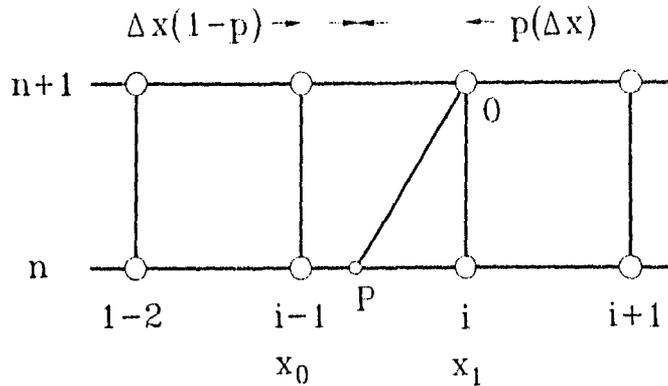


Fig.3.4 - Notación empleada, mostrada en una malla unidimensional.

Como se puede observar en la fig.3.4, una partícula en el punto P viajando a una velocidad constante  $u$  se desplazará una distancia  $x + u\Delta t$  en un tiempo  $t + \Delta t$ , por lo que tenemos:

$$c(x,t) = c(x+u\Delta t, t+\Delta t) = c(x+p\Delta x, t+\Delta t) \quad (3.11)$$

aplicando la fórmula de interpolación de Gregory-Newton modificada (Wylie y Barrett 1985):

$$f(P) \equiv f(x+p\Delta x) = f_1 - p[f_1 - f_0] + \frac{p(p-1)}{2!}[f_2 - 2f_1 + f_0] - \dots \quad (3.12)$$

donde  $f(P)$ ,  $f_1$  y  $f_0$  son las concentraciones en los puntos P,  $x_1$  y  $x_0$  respectivamente,  $p$  es un coeficiente de peso que posiciona al punto P con respecto a  $c_i^n$  y  $c_{i-1}^n$ . Puesto que el polinomio es de primer grado en la interpolación lineal, solo se utilizan los dos primeros términos de la ecuación anterior. Sustituyendo los valores conocidos para los dos puntos:

$$c_p = c_i^n - p(c_i^n - c_{i-1}^n) \quad (3.13)$$

en el que se puede observar que  $p$  es el número de Courant de la malla cuando este es menor que la unidad. Pero cuando  $Cr > 1$  la línea característica se traslada varios nodos más atrás de los inferiores al punto O. Como  $p$  es un factor de peso entre las concentraciones más próximas

al punto P, es necesario adicionar otra variable que represente el número de nodos hacia atrás en el que se encuentra el segmento de interpolación, en este caso se designará como  $s$ . Por lo que para el caso unidimensional el número de Courant será la suma de ambos.

Generalizando para cualquier número de Courant, el método de las características se plantea de la siguiente forma más general (fig.3.5):

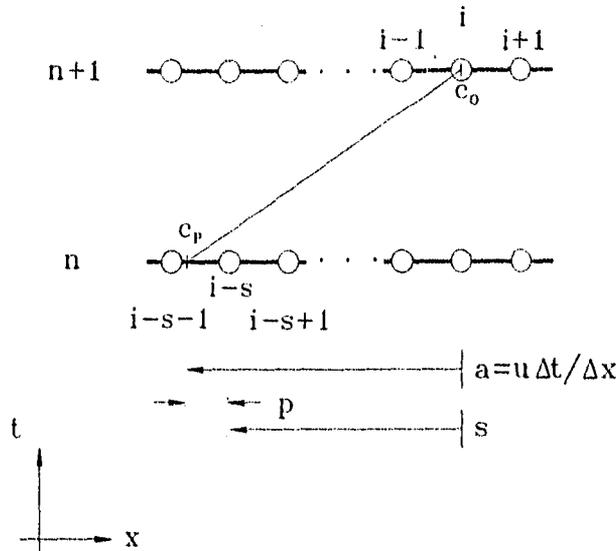


Fig.3.5 - Generalización del método de las características para cualquier Cr.

Por lo que utilizando la notación anterior obtenemos un esquema más flexible en cuanto a la restricción de Courant-Frederich-Lewy para la interpolación lineal:

$$c_p = c_{i-a}^n = c_{i-s}^n - p(c_{i-s}^n - c_{i-s-1}^n) \quad (3.14)$$

donde  $a$  es el número de Courant en la dirección  $x$ ,  $s$  es la parte entera y  $p$  la fraccionaria del mismo, por lo que  $a = s + p$ . De la fig. 3.5,  $s$  es el número de nodos que recorre la curva característica y  $p$  es la fracción de  $\Delta x$  entre los nodos  $i-s$  e  $i-s-1$ .

Con la fórmula de interpolación anterior es posible que el número de Courant sea mayor a 1, lo cual es una ventaja sobre los esquemas de diferencias finitas comunes, y lo será tanto como las condiciones del problema a resolver lo permitan, tanto en su escala espacial como temporal.

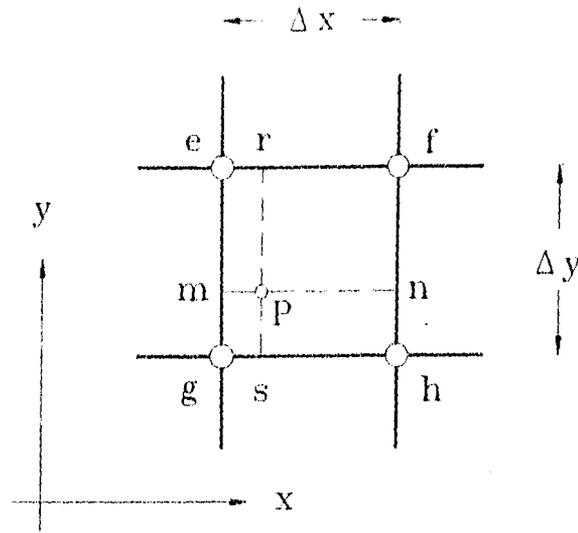


Fig.3.6 - Celda de interpolación.

La interpolación bilineal emplea las concentraciones de cuatro nodos adyacentes a el punto P donde inicia la curva característica (fig.3.6). Se obtiene a través de doble interpolación lineal en cada uno de los ejes. Utilizando la ecuación 3.13 se encuentra el valor de  $r$  con las concentraciones en los puntos  $e$  y  $f$ , después se calcula  $s$  con los puntos  $g$  y  $h$ . Por último se calcula  $P$  con una interpolación lineal entre  $r$  y  $s$  pero en la dirección  $y$ . Combinando los dos pasos anteriores y arreglando términos se obtiene:

$$c_p = c_{i-a,j-b}^n = (1-p)[(1-q)c_{i-s,j-r}^n + qc_{i-s,j-r-1}^n] + p[(1-q)c_{i-s-1,j-r}^n + qc_{i-s-1,j-r-1}^n] \quad (3.15)$$

donde  $s$  y  $r$  son las partes entera,  $p$  y  $q$  las fraccionarias del número de Courant en las direcciones  $x$  y  $y$  respectivamente, es decir,  $a = s+p$  y  $b = r+q$ . El esquema anterior es el método upwind en 2D, por lo que será estable pero presentará difusión numérica.

Con la misma ec. 3.12, tomando los tres primeros términos, obtenemos la fórmula de interpolación cuadrática:

$$c_i^{n+1} = c_i^n - \frac{p}{2}(c_i^n - c_{i-1}^n) + \frac{p}{2}(c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n) \quad (3.16)$$

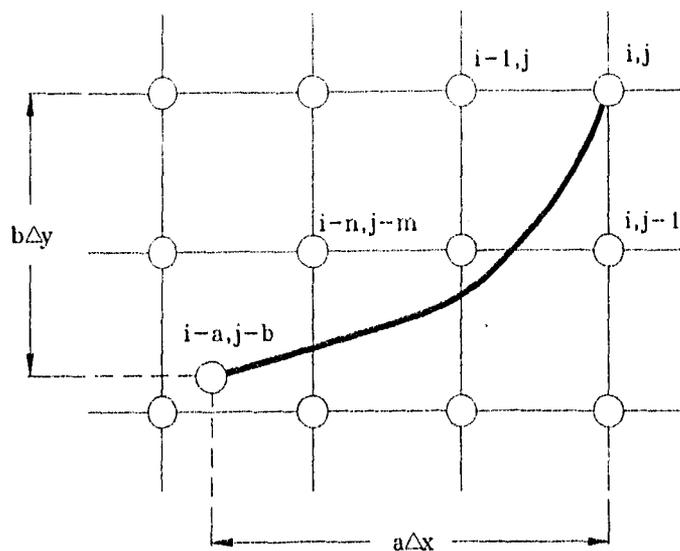


Fig.3.7 - Vista en planta de la malla y notación para  $Cr > 1$ .

Una vez generalizado para cualquier  $Cr$ , el esquema es el siguiente:

$$c_i^{n+1} = c_{i-s}^n - \frac{p}{2}(c_{i-s}^n - c_{i-s-1}^n) + \frac{p}{2}(c_{i-s-1}^n - 2c_{i-s}^n + c_{i-s+1}^n) \quad (3.17)$$

En la interpolación bicuadrática se necesitan la información de nueve nodos adyacentes al punto  $P$ , los cuales están relacionados de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} c_{i-a,j-b}^n = & \frac{1}{2}p(1+p) \left[ \frac{1}{2}(1+q)c_{i-s-1,j-r-1}^n + (1-q^2)c_{i-s-1,j-r}^n - \frac{1}{2}q(1-q)c_{i-s-1,j-r+1}^n \right] \\ & + (1-p^2) \left[ \frac{1}{2}(1+q)c_{i-s,j-r-1}^n + (1-q^2)c_{i-s,j-r}^n - \frac{1}{2}q(1-q)c_{i-s,j-r+1}^n \right] \\ & - \frac{1}{2}p(1-p) \left[ \frac{1}{2}(1+q)c_{i-s+1,j-r-1}^n + (1-q^2)c_{i-s+1,j-r}^n - \frac{1}{2}q(1-q)c_{i-s+1,j-r+1}^n \right] \end{aligned} \quad (3.18)$$

en la cual se ha generalizado para cualquier número de Courant. Aunque en su versión 1D este esquema es estable, en el caso 2D es inestable. Leith (Roache 1982) propuso una modificación al esquema anterior basado en el concepto de pasos fraccionales de tiempo. Este método es llamado operador de separación en el tiempo. Consiste en aplicar el interpolador cuadrático en 1D, en la cual si es estable, separadamente en cada una de las direcciones  $x$  e  $y$ , en sucesión,

tomando los valores resultantes de la primera dirección como valores de inicio para la segunda:

$$c_{i-a,j-b}^{n+1/2} = -\frac{1}{2}p(1-p)c_{i-s+1,j-r}^n + (1-p^2)c_{i-s,j-r}^n + \frac{1}{2}p(1+p)c_{i-s-1,j-r}^n \quad (3.19a)$$

$$c_{i-a,j-b}^{n+1} = -\frac{1}{2}q(1-q)c_{i-s,j-r+1}^{n+1/2} + (1-q^2)c_{i-s,j-r}^{n+1/2} + \frac{1}{2}q(1+q)c_{i-s,j-r-1}^{n+1/2} \quad (3.19b)$$

en realidad el término  $c_{i,j}^{n+1/2}$  no es la solución intermedia en el tiempo, sino un valor precedente utilizado en la solución. Si se deseara usar la interpolación bicúbica serían necesarias las concentraciones de 16 nodos alrededor del punto P.

En su versión unidimensional el método de interpolación cúbica de Hermite tiene una precisión de cuarto orden, está basado en la construcción de polinomios de interpolación entre la variable dependiente y sus derivadas para dos puntos adyacentes en el eje espacial (Holly y Preissmann 1977). En comparación con otros, el método H-P presenta menores errores de dispersión y difusión numérica como se demostrará en el siguiente capítulo.

La ecuación de interpolación de Hermite para un polinomio de grado  $2N+1$  en forma unidimensional es la siguiente:

$$c_p = \sum_{i=0}^N c_i \Phi_{0i}(x) + \sum_{i=0}^N \frac{dc}{dx} \Phi_{1i}(x) \quad (3.20)$$

donde N es el número de intervalos utilizados en la interpolación y:

$$\Phi_{0i} = [1 - 2L_i(x)(x-x_i)][L_i(x)]^2 \quad (3.21)$$

$$\Phi_{1i} = (x-x_i)[L_i(x)]^2 \quad (3.22)$$

$L_i(x)$  es la función de Lagrange:

$$L_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_N)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_N)} \quad (3.23)$$

Es posible usar polinomios de Hermite hasta de quinto orden, pero los más comunes son de tercer orden como el del esquema de Holly y Preissmann, por lo que en ese caso  $N = 1$ . El método calcula  $c_p$  utilizando los valores de  $c_{i,s-1}$  y  $c_{i,s}$  y sus derivadas espaciales  $cx_{i,s-1}$  y  $cx_{i,s}$  en el tiempo  $n$ . Sustituyendo las ecuaciones anteriores y tomando en cuenta que:

$$x_i - x_p = p \Delta x$$

se obtiene:

$$c_p = h_1 c_{i-s-1}^n + h_2 c_{i-s}^n + h_3 c x_{i-s-1}^n + h_4 c x_{i-s}^n \quad (3.24)$$

donde:

$$h_1 = p^2 (3 - 2p) ; h_2 = 1 - h_1 ;$$

$$h_3 = p^2 (1 - p) \Delta x ; h_4 = -p (1 - p)^2 \Delta x$$

Además es necesario conocer el valor de la derivada espacial en cada punto, la cual se obtiene derivando en el espacio la ecuación 3.22, de esta manera:

$$c x_p = k_1 c_{j-s-1}^n + k_2 c_{j-s}^n + k_3 c x_{j-s-1}^n + k_4 c x_{j-s}^n \quad (3.25)$$

donde:

$$k_1 = 6p (p - 1) / \Delta x ; k_2 = -k_1 ;$$

$$k_3 = p (3p - 2) ; k_4 = (p - 1)(3p - 1)$$

En su artículo Holly y Presissmann (1977) solo sugieren como utilizar su método en dos dimensiones, en otro artículo Holly y Usseglio-Polatera (1984) desarrollan el método con mayor detalle en la forma bidimensional. Esto se logra en forma sencilla utilizando las ecuaciones anteriores en cada uno de los ejes involucrados, tal como se haría una interpolación bilineal. Con los valores conocidos de  $c$  y  $c_y$  en los extremos de la líneas  $ge$  y  $hf$  (fig.3.6) se encuentra el valor  $c$  en  $m$  y  $n$  con la ec. 3.13 para la dirección  $y$ . Usando  $c_x$  y  $c_{xy}$  en los extremos de las líneas  $ge$  y  $hf$  se calcula  $c_x$  en los puntos  $m$  y  $n$  con la ec. 3.13 en la dirección  $y$ . Con la misma ecuación en la dirección  $x$  y utilizando  $c$  y  $c_x$  en los extremos de  $ef$  y  $gh$  se encuentra  $c$  en los puntos  $r$  y  $s$ . Empleando  $c_y$  y  $c_{yx} = c_{xy}$  en los extremos de las líneas  $ef$  y  $gh$  se calcula  $c_y$  en  $r$  y  $s$  con la misma ecuación en la dirección  $x$ . Utilizando los valores de  $c$  y  $c_x$  en los extremos de  $mn$  calculamos  $c$  y  $c_x$  en el punto P, con las ecs. 3.13 y 3.14 respectivamente, en la dirección  $x$ . Por último con  $c$  y  $c_y$  en los extremos de  $rs$  se calcula  $c_y$  en el punto P con la ec. 3.14 en la dirección  $y$  (para mayores detalles véase Holly y Usseglio-Polatera 1984).

Una vez determinada la concentración y sus derivadas en el punto P, la concentración es asignada al punto  $c_{ij}^{n+1}$  por integración a lo largo de la curva característica. Pero es necesario conocer  $c x^{n+1}$ ,  $c y^{n+1}$  y  $c x y^{n+1}$  trasportando los valores conocidos. Esto se logra con la diferencial de la ec. 3.1 con respecto a  $x$  e  $y$ :

$$\frac{Dcx}{Dt} = -u_x cx - v_x cy \quad (3.26)$$

$$\frac{Dcy}{Dt} = -u_y cx - v_y cy \quad (3.27)$$

en la cual  $D/Dt$  es la derivada sustancial a lo largo de la trayectoria,  $u_x = \partial u/\partial x$ ,  $u_y = \partial u/\partial y$ ,  $v_x = \partial v/\partial x$ ,  $v_y = \partial v/\partial y$ , y las derivadas de las concentraciones en  $x$  e  $y$  son  $cx$  y  $cy$  respectivamente. Las derivadas  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $v_x$  y  $v_y$  son deducidas del campo de velocidades y  $cx$  y  $cy$  fueron calculadas en los anteriores pasos. Para obtener  $cx y^{n+1}$  se deriva en forma cruzada la ec.

3.1:

$$\frac{Dcxy}{Dt} = -u_y cxx - v_x cyy - u_{xy} cx - v_{xy} cy - (u_x + v_y) cxy \quad (3.28)$$

donde  $cxx$  es la segunda derivada con respecto a  $x$ , y del mismo modo las siguientes. Para resolver la ecuación anterior es necesario evaluar otras derivadas, por lo que para calcular  $cx y^{n+1}$  se usa una forma más conveniente utilizando la información ya recabada:

$$cxy_{ij}^n = \frac{1}{2} \left[ \frac{cx_{i,j+1}^n - cx_{i,j-1}^n}{y_{j+1} - y_{j-1}} \right] + \frac{1}{2} \left[ \frac{cy_{i+1,j}^n - cy_{i-1,j}^n}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right] \quad (3.29)$$

En un campo de velocidad constante no es necesario realizar las anteriores aproximaciones, los valores de las concentraciones y sus derivadas serán aquellos encontrados con las ecs. 3.22 y 3.23. Glass y Rodi (1982) propusieron un método similar utilizando el método H-P pero con algunas diferencias al propuesto por Holly y Usseglio-Polatera. Con la finalidad de mejorar la precisión del método de H-P, Yang y Hsu (1991) proponen una modificación en la cual utilizan la información de  $m$  niveles en el tiempo ( $t^{n-m}$ ) para llevar a cabo los cálculos. Los resultados alcanzados para  $m = 4$  son mejores pero a costa de mayor esfuerzo computacional. Yang, Belleudy y Temperville (1991) plantean la construcción de un esquema de un mayor orden que el H-P, utilizando un polinomio de sexto orden usando las concentraciones en los nodos, sus primeras y segundas derivadas, para el término advectivo, pero tiene la desventaja de utilizar mucho mayor espacio en memoria.

Toda (1986) desarrolló un método híbrido basado en el método H-P, para la solución de la ecuación de dispersión. Este método aproxima simultáneamente los términos advectivo y difusivo en 1D, utilizando el esquema de H-P para la advección y Crank-Nicolson para el difusivo, obteniéndose con esto una reducción en el tratamiento de las condiciones de frontera. Desafortunadamente las desventajas son las mismas que el método H-P, el espacio en memoria es considerable para una computadora personal.

### 3.5 SOLUCIÓN A LA DIFUSIÓN.

Considerando ahora los términos difusivos, la ecuación a resolver es la siguiente:

$$\frac{Dc}{Dt} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (3.30)$$

Esta es una ecuación de tipo parabólico, susceptible de ser resuelta con algún método en DF o EF en su forma bidimensional. Los esquemas explícitos en DF son una opción pero sus condiciones de estabilidad son más restrictivas que las de los métodos implícitos. En forma general los métodos implícitos más utilizados son los implícitos completos o el de Crank-Nicolson. Las dificultades se presentan al tratar de resolver la matriz resultante de estos esquemas pues esta resulta no tener alguna estructura bien definida que pudiese ser resuelta más eficientemente. Usar algún tipo de procedimiento como el método eliminación de Gauss sería muy lento.

El problema con el esquema implícito bidimensional puede ser salvado separando el algoritmo de solución en dos mitades para avanzar un intervalo de tiempo. Cada mitad, en la cual los términos de esta están asociados con una dirección en las coordenadas, son tratadas implícitamente. Consecuentemente solo los términos de esa dirección son agrupados junto a la diagonal principal. Como resultado puede usarse el eficiente algoritmo de Thomas para obtener la solución en ambas direcciones. Los valores resultantes de la solución a la primera mitad son usados como valores iniciales para resolver la segunda dirección. Estos valores serán la solución para ese intervalo de tiempo.

La técnica de separación más conocida es el método implícito de direcciones alternantes (IDA). Este método fue propuesto por Peaceman, Rachford y Douglas como una variación del método de Crank-Nicolson y es especialmente eficiente para regiones rectangulares. El método de Crank-Nicolson es incondicionalmente estable, por lo tanto se adopta para resolver la difusión, requiriendo la solución simultánea de las ecuaciones en diferencias para cada uno de los puntos de la retícula de todo dominio para cualquier intervalo de tiempo. El esquema es el siguiente:

$$\frac{W_{ij}^{n+1/2} - W_{i-aj-b}^n}{\Delta t/2} = \frac{D_x}{(\Delta x)^2} [W_{i+1j}^{n+1/2} - 2W_{ij}^{n+1/2} + W_{i-1j}^{n+1/2}] + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} [W_{ij+1}^n - 2W_{ij}^n + W_{ij-1}^n] \quad (3.31)$$

$W$  es la variable dependiente a conocer, en los esquemas de interpolación bilineal y bicuadrático será la concentración, pero en el método de interpolación de Hermite se sustituirán además las derivadas en cada nodo. Los valores de  $W_{i-aj-b}^n$  son los de la solución al término advectivo,  $W^n$  es la solución en el tiempo anterior, mientras que  $W^{n+1/2}$  son los valores intermedios de inicio para la siguiente dirección.

La matriz de coeficientes resultante tiene una forma tridiagonal que puede ser resuelta en una forma sencilla por el algoritmo de Thomas.

Una vez resuelta la dirección  $x$  se procederá con la dirección  $y$  con el esquema siguiente:

$$\frac{W_{ij}^{n+1} - W_{i-aj-b}^n}{\Delta t/2} = \frac{D_y}{(\Delta y)^2} [W_{ij+1}^{n+1} - 2W_{ij}^{n+1} + W_{ij-1}^{n+1}] + \frac{D_x}{(\Delta x)^2} [W_{i+1j}^{n+1/2} - 2W_{ij}^{n+1/2} + W_{i-1j}^{n+1/2}] \quad (3.32)$$

Procediendo a resolverse de la misma forma que la anterior matriz. En este caso  $W^{n+1}$  son los valores de la variable dependiente para el tiempo  $n+1$ . El método de H-P necesita que cada una de las componentes, es decir, la concentraciones y sus derivadas, sean recalculadas con el método IDA antes de iniciar un nuevo intervalo de tiempo.

### 3.6 CONDICIONES INICIALES Y DE FRONTERA.

Los valores de las concentraciones a lo largo de la frontera espacial son condiciones de frontera mientras que los valores de concentraciones o cualquiera de sus derivadas para un tiempo específico son las condiciones iniciales.

Los tipos de condiciones de frontera dependen del problema a modelar, el tratamiento a cada una de ellas es distinto. La forma más eficiente de manejarlas es aún materia de estudio (Berezowsky 1990).

Las fronteras pueden ser sólidas, de entrada o salida de flujo, y deberán ser especificadas de manera distinta para la advección o difusión.

Existen tres tipos de condiciones en las fronteras. Cuando un valor  $c(\xi, t)$  ( $\xi$  es alguno de los ejes modelados) se impone en la frontera se obtiene la conocida condición de Dirichlet. Esta se presenta cuando se modela la entrada de un contaminante a un río o embalse. Un valor impuesto de la derivada de la concentración  $\partial c/\partial \xi$  es una condición de tipo Neumann que implica, por ejemplo, reflexión en una frontera impermeable donde  $\partial c/\partial \xi = 0$ . Una condición mixta es de tipo Robin.

Las condiciones de frontera para la advección en fronteras cerradas y aquellas donde el flujo sale del dominio de interés, no son necesarias puesto que las líneas características no cortan estas fronteras. El punto P siempre se encontrará dentro de una celda del dominio y su valor se encontrará interpolando con los valores impuestos en esas fronteras. El transporte a través de las fronteras solidas se hace nulo en los nodos que son colineales a la frontera siempre que no existan componentes de la velocidad normales a la frontera, siendo también esta una condición de frontera para modelos hidrodinámicos.

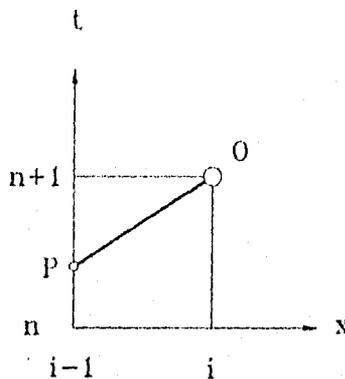
Para aquellas fronteras en las cuales el flujo entra al dominio, la información se proporciona como una condición en función del tiempo. Esta información es la concentración en la dirección tangencial  $T$  en función del tiempo, es decir  $c(T, t)$ , y debe ser diferenciable en  $T$  y  $t$ . De esta manera es posible calcular  $\partial c/\partial t$  y  $\partial c/\partial T$ . Con los valores anteriores es posible calcular  $\partial c/\partial N$ , siendo  $N$  la dirección perpendicular a la frontera, con la ecuación:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_T \frac{\partial c}{\partial T} + u_N \frac{\partial c}{\partial N} = 0 \quad (3.33)$$

donde  $u_T$  y  $u_N$  son las velocidades tangencial y normal en el punto P. Por lo anterior es necesario que sean diferenciables, es decir, no se permiten discontinuidades.

Para el cálculo de la difusión son necesarias condiciones de frontera en todo el dominio debido a su naturaleza parabólica. Puesto que las derivadas de las concentraciones también son afectadas por este proceso es necesario especificarles condiciones de frontera en todo el dominio, por lo que se considera una sobrespecificación de las condiciones. En realidad solo se reimponen las condiciones de frontera ya establecidas por la advección, puesto que las variaciones de la concentraciones debido a la difusión son ligeras. Las fronteras cerradas utilizan el principio de imagen de nodos para las concentraciones y sus derivadas.

Por último, una vez generalizado el método para cualquier número de Courant, es necesario definir el tratamiento de las fronteras cuando  $Cr > 1$ . Cuando este es mayor que la unidad las líneas características intersectan a la frontera y, como se mencionó, las condiciones impuestas son las que definirán el procedimiento a seguir.



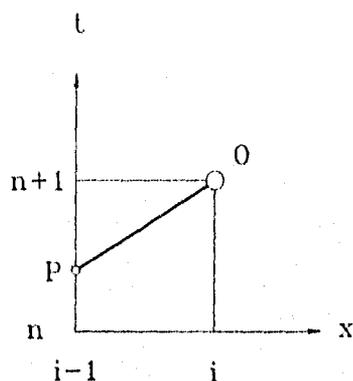
**Fig.3.8** - Celda en la frontera con línea característica para  $Cr > 1$ .

En este caso Verwey y Daubert (1978) proponen realizar la interpolación del punto P con las concentraciones en  $c^n$  y  $c^{n+1}$ . Lo cual puede llevarse a cabo con cualquiera de los esquemas analizados.

donde  $u_T$  y  $u_N$  son las velocidades tangencial y normal en el punto P. Por lo anterior es necesario que sean diferenciables, es decir, no se permiten discontinuidades.

Para el cálculo de la difusión son necesarias condiciones de frontera en todo el dominio debido a su naturaleza parabólica. Puesto que las derivadas de las concentraciones también son afectadas por este proceso es necesario especificarles condiciones de frontera en todo el dominio, por lo que se considera una sobrespecificación de las condiciones. En realidad solo se reimponen las condiciones de frontera ya establecidas por la advección, puesto que las variaciones de la concentraciones debido a la difusión son ligeras. Las fronteras cerradas utilizan el principio de imagen de nodos para las concentraciones y sus derivadas.

Por último, una vez generalizado el método para cualquier número de Courant, es necesario definir el tratamiento de las fronteras cuando  $Cr > 1$ . Cuando este es mayor que la unidad las líneas características intersectan a la frontera y, como se mencionó, las condiciones impuestas son las que definirán el procedimiento a seguir.



**Fig.3.8** - Celda en la frontera con línea característica para  $Cr > 1$ .

En este caso Verwey y Daubert (1978) proponen realizar la interpolación del punto P con las concentraciones en  $c^n$  y  $c^{n+1}$ . Lo cual puede llevarse a cabo con cualquiera de los esquemas analizados.

## 4. ESTABILIDAD, ANÁLISIS DEL ERROR Y TRUNCAMIENTO.

En muchas situaciones físicas de la dinámica de fluidos existen discontinuidades tales como las ondas de choque, que son representadas como fronteras agudas. Debido a los grandes gradientes asociados a estas fronteras la precisión de las soluciones numéricas es difícil de obtener.

En ecuaciones diferenciales parciales elípticas o parabólicas, las condiciones iniciales y de frontera de este tipo no son un problema, pues con aproximaciones de alto orden se alcanzan resultados precisos. Con las ecuaciones hiperbólicas una discontinuidad en los datos iniciales se propaga en el dominio de interés y causa considerables dificultades computacionales.

Los problemas asociados a la aproximación a través de los métodos de DF o EF son de dos clases. En la vecindad a fronteras agudas la solución numérica está caracterizada por oscilaciones o sobresaltos excesivos relativos a la solución numérica o por suavización de la frontera. Las causas de estos fenómenos pueden ser analizadas a través del examen de las características de propagación de onda de los esquemas numéricos. Cuando las ondas son transportadas con una fase incorrecta se desarrollan las oscilaciones. Cuando las ondas son numéricamente sobreamortiguadas se presenta la suavización numérica de las fronteras. De esta manera en la discusión de cada procedimiento numérico se deben analizar los errores de fase y amplitud.

Debido al procedimiento de separación de los fenómenos de convección y difusión en los métodos E-L, el análisis de Fourier se realiza también por separado para cada uno de ellos en su forma unidimensional. Aunque el análisis de los métodos lineal y cuadrático en su forma bidimensional es relativamente sencillo, la complejidad del método de interpolación de Hermite en 2D es bastante mayor por lo que se presentan solo algunas de las condiciones que se deberán respetar y algunos comentarios al respecto.

#### 4.1 ESTABILIDAD.

Esta se puede definir como la tendencia en la solución numérica a decaer cuando ocurre cualquier perturbación espontánea. Esta se presenta como oscilaciones no físicas desde la línea de simetría y se propagan a las fronteras. La amplitud de estas oscilaciones se incrementa con el tiempo.

Los errores producidos durante el cálculo no son debidos a un procedimiento incorrecto sino que la computadora no puede calcular con un infinito número de cifras decimales. En la práctica, cada cálculo se lleva a cabo por un número finito de lugares decimales los cuales introducen un error de redondeo a cada paso del cálculo. Un esquema particular es estable si el efecto acumulativo de todos los errores de redondeo producidos en la aplicación del algoritmo es despreciable.

El análisis de Fourier es el método generalmente empleado para analizar los esquemas e interpretado por métodos como el matricial o el de Von Neumann. Cada modo en la serie de Fourier crecerá o decaerá dependiendo de la ecuación discretizada, la cual posee una expresión específica para el factor de crecimiento o decaimiento para cada modo. Si un modo particular creciera sin límite, la ecuación tiene una solución inestable. Esto puede suceder aún si la ecuación es resuelta en forma exacta, es decir, sin errores de redondeo presentes. Si se introducen estos errores de redondeo, la misma naturaleza de las ecuaciones podrían causar su crecimiento inaceptable. Consecuentemente los procedimientos de análisis de estabilidad del esquema son los mismos ya sean estos estables o inestables. Para poder realizar el análisis de estabilidad de Fourier, la ecuación diferencial parcial debe cumplir las siguientes condiciones:

- a).- Debe ser lineal.
- b).- El dominio de interés debe ser infinito.
- c).- Espaciamiento de retícula debe ser constante.
- d).- Los coeficientes de la ecuación son constantes.

Suponiendo que la componente inicial está dada por una función de Fourier:

$$c_j^0 = \exp(i\beta_j \Delta x) \quad (4.1)$$

donde  $\exp$  es la función exponencial,  $i = (-1)^{1/2}$ ,  $\beta$  es la frecuencia espacial del error,  $\Delta x$  es el incremento de distancia,  $j$  la posición del componente. Puesto que  $\Theta = \beta \Delta x$ :

$$c_i^0 = \exp(ij\Theta) \quad (4.2)$$

La solución del esquema numérico para cualquier tiempo  $n$ , se puede expresar como:

$$c_i^n = G^n e^{ij\Theta} \quad (4.3)$$

donde  $G$  es conocido como factor de amplitud. Este debe cumplir la condición:

$$|G| \leq 1 \quad (4.4)$$

El esquema de interpolación lineal para la ecuación de advección (ec. 3.14):

$$c_j^{n+1} = c_{j-s}^n - p(c_{j-s}^n - c_{j-s-1}^n) \quad (4.5)$$

sustituyendo la ec.4.3 en la anterior

$$G^{n+1} e^{i\beta j \Delta x} = G^n e^{i\beta(j-s) \Delta x} - p[G^n e^{i\beta(j-s) \Delta x} - G^n e^{i\beta(j-s-1) \Delta x}] \quad (4.6)$$

dividiendo por  $G^n e^{i\beta j \Delta x}$

$$G = e^{-i\beta s \Delta x} [1 - p(1 - e^{-i\beta \Delta x})] \quad (4.7)$$

de la identidad trigonométrica de Euler

$$e^{-i\Theta} = \cos\Theta - i \operatorname{sen}\Theta \quad (4.8)$$

obtenemos el factor de amplificación

$$G = e^{-i\beta s \Delta x} [1 - p(1 - \cos\Theta) - i p \operatorname{sen}\Theta] \quad (4.9)$$

multiplicando por su complejo conjugado y considerando que  $|e^{i\Theta}| = 1$ :

$$|G| = \left[ 1 - 4p(1-p) \operatorname{sen}^2 \frac{\Theta}{2} \right]^{1/2} \quad (4.10)$$

Para mantener la estabilidad del esquema se debe cumplir con  $p \leq 1$  (condición CFL).

Físicamente esta condición indica que una partícula del fluido no deberá viajar más de un incremento espacial  $\Delta x$  en un incremento de tiempo  $\Delta t$ . Con la generalización del método de las características, siempre  $p$  será menor que la unidad por lo que se garantiza la condición Courant-Friedrichs-Lewy.

Con el esquema de interpolación cuadrático (ec. 3.17):

$$c_j^{n+1} = c_{j-s}^n - \frac{p}{2}(c_{j-s+1}^n - c_{j-s-1}^n) + \frac{p^2}{2}(c_{j-s-1}^n - 2c_{j-s}^n + c_{j-s+1}^n) \quad (4.11)$$

sustituyendo

$$G^{n+1} e^{i\beta j \Delta x} = G^n e^{i\beta(j-s)\Delta x} - \frac{p}{2} G^n [e^{i\beta(j-s+1)\Delta x} - e^{i\beta(j-s-1)\Delta x}] + \frac{p^2}{2} G^n [e^{i\beta(j-s+1)\Delta x} - 2e^{i\beta(j-s)\Delta x} + e^{i\beta(j-s-1)\Delta x}] \quad (4.12)$$

procediendo de la misma manera que el anterior obtenemos:

$$G = e^{-i\beta s \Delta x} [1 + p^2(\cos\Theta - 1) - ip \operatorname{sen}\Theta] \quad (4.13)$$

de aquí

$$|G| = \left[ 1 - 4p^2(1-p^2) \operatorname{sen}^4 \frac{\Theta}{2} \right]^{1/2} \quad (4.14)$$

para mantener la estabilidad del esquema se debe cumplir también que  $p \leq 1$ .

El análisis de estabilidad del esquema de Holly-Preissman está basado en un método matricial. Debido a que este esquema requiere de dos ecuaciones para obtener la solución de la advección este procedimiento se hace más conveniente.

Las concentraciones y sus derivadas en los puntos  $j-s$  y  $j-s-1$  se expresan de la siguiente manera:

$$c_{j-s}^n = c^n e^{i\beta(j-s)\Delta x}, \quad c_{j-s-1}^n = c^n e^{i\beta(j-s-1)\Delta x} \quad (4.15)$$

$$cx_{j-s}^n = cx^n e^{i\beta(j-s)\Delta x}, \quad cx_{j-s-1}^n = cx^n e^{i\beta(j-s-1)\Delta x} \quad (4.16)$$

donde  $c^n$  y  $cx^n$  son las amplitudes complejas del componente de Fourier para la concentración y su derivada, en el tiempo  $n$ .

Sustituyendo en la ecuaciones obtenemos:

$$\begin{bmatrix} c^{n+1} \\ cx^{n+1} \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} c^n \\ cx^n \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

T es la matriz de transición del tiempo  $n$  al  $n+1$ , la cual

$$T = e^{-i\beta s \Delta x} \begin{bmatrix} t_1 & t_2 \\ t_3 & t_4 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

$$t_1 = h_1 e^{-i\beta \Delta x} + h_2; \quad t_2 = h_3 e^{-i\beta \Delta x} + h_4 \quad (4.19)$$

$$t_3 = k_1 e^{-i\beta \Delta x} + k_2; \quad t_4 = k_3 e^{-i\beta \Delta x} + k_4 \quad (4.20)$$

dado que T es independiente del tiempo, tenemos

$$\begin{bmatrix} c^n \\ cx^n \end{bmatrix} = T^n \begin{bmatrix} c^0 \\ cx^0 \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

en las cuales  $c^0$  y su derivada  $cx^0$  es un vector inicial el cual puede especificarse arbitrariamente. Para encontrar el error que se comete al aproximar con este esquema es necesario encontrar los eigenvalores de la ec.4.17 y considerar que  $|e^{-i\theta}| = 1$ :

$$\begin{bmatrix} t_1 - \lambda & t_2 \\ t_3 & t_4 - \lambda \end{bmatrix} = \lambda^2 - (t_1 + t_4)\lambda + t_2 t_3 = 0 \quad (4.22)$$

resolviendo la expresión cuadrática

$$\lambda = \frac{(t_1 + t_4) \pm \sqrt{(t_1 + t_4)^2 - 4t_2 t_3}}{2} \quad (4.23)$$

existen dos eigenvalores, dependiendo del signo del discriminante de la ecuación anterior, denotados por  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ , tomando el positivo en el primer caso y negativo en el segundo respectivamente. El eigenvalor  $\lambda_1$  es conocido como la raíz física o modo primario y  $\lambda_2$  es la raíz computacional o modo secundario (Sauvaget 1986). El primero es el que determina principalmente como se propaga la solución y es el utilizado para comparar los esquemas.

Despejando los valores de las ecuaciones y tomando en cuenta que:

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i \operatorname{sen}\theta \quad (4.24)$$

se obtiene

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{\frac{A_1 + \sqrt{A_1^2 + A_2^2}}{2} + (h_1 + k_3)\cos\theta + h_2 + k_4} - i \sqrt{\frac{-A_1 + \sqrt{A_1^2 + A_2^2}}{2} + (h_1 + k_3)\sen\theta} \right] \quad (4.25)$$

siendo

$$A_1 = B_1\cos(2\theta) + 2B_2\cos\theta + B_3 \quad (4.26)$$

$$A_2 = B_1\sen(2\theta) + 2B_2\sen\theta \quad (4.27)$$

$$B_1 = (h_1 - k_3)^2 + 4h_3k_1 \quad (4.28)$$

$$B_2 = (h_1 - k_3)(h_2 - k_4) + 2(h_4k_1 + h_3k_2) \quad (4.29)$$

$$B_3 = (h_2 - k_4)^2 + 4h_4k_2 \quad (4.30)$$

multiplicándolo por su complejo conjugado:

$$|\lambda| = \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{A_1 + \sqrt{A_1^2 + A_2^2}}{2} + (h_1 + k_3)\cos\theta + h_2 + k_4} \right]^2 + \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-A_1 + \sqrt{A_1^2 + A_2^2}}{2} + (h_1 + k_3)\sen\theta} \right]^2 \quad (4.31)$$

Nuevamente encontramos que el eigenvalor  $\lambda$  será menor que la unidad solo si  $p \leq 1$ .

La estabilidad del esquema IDA completo para la solución de la difusión, es el producto de los factores de amplificación para cada una de las direcciones, por lo que partiendo de las ecs. 3.29 y 3.30:

$$G = \frac{1 - 2\epsilon_y \sen^2(\theta_y/2)}{1 + 2\epsilon_x \sen^2(\theta_x/2)} \frac{1 - 2\epsilon_x \sen^2(\theta_x/2)}{1 + 2\epsilon_y \sen^2(\theta_y/2)} \quad (4.32)$$

donde  $\epsilon = Cr/Pe$ , en este caso no se deduce pues se encuentra extensamente en la literatura (Lapidus y Pinder 1988, Fletcher 1988, etc).

## 4.2 ANÁLISIS DEL ERROR.

La representación de la ecuación hiperbólica en series de Fourier, es la siguiente:

$$c(t,x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n \exp(i\alpha_n t + i\beta_n x) \quad (4.33)$$

donde los coeficientes  $F_n$  dependen de las condiciones iniciales impuestas sobre el esquema. Los parámetros  $\alpha_n$  y  $\beta_n$  son las frecuencias temporal y espacial respectivamente, del  $n$ -ésimo componente de la serie. El parámetro  $\beta_n$  es comúnmente llamado número de onda y se define como  $\beta_n = 2\pi/L_n$ , donde  $L_n$  es la longitud de onda del  $n$ -ésimo componente de la serie (Fig.4.1).

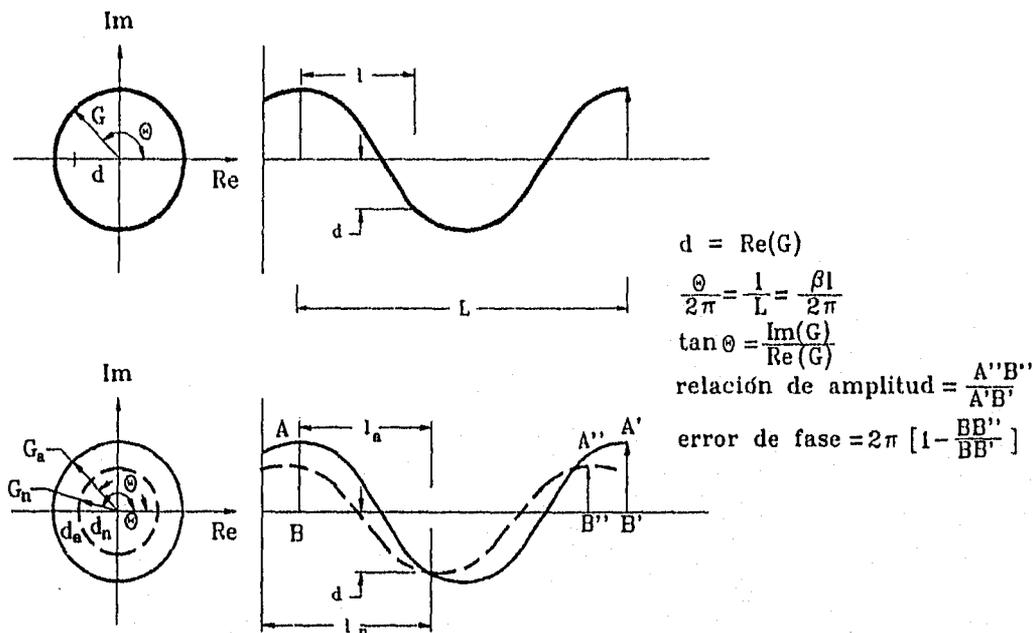


Fig.4.1 - Notación empleada en el análisis de Fourier.

Debido a la linealidad de la ecuación, es posible invocar la teoría de la superposición. Se pueden encontrar las funciones propias usando un término arbitrario en la expansión de Fourier:

$$c_n = F_n \exp(i\alpha_n t + i\beta_n x) \quad (4.34)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación original, obtenemos la expresión analítica que relaciona la frecuencia temporal y el número de onda o frecuencia espacial, que es:

$$\frac{\partial}{\partial x} \exp(i\alpha_n t + i\beta_n x) + u \frac{\partial}{\partial x} \exp(i\alpha_n t + i\beta_n x) = 0 \quad (4.35)$$

del cual  $\alpha_n = -u \beta_n$ .

Un término típico en la solución general a la ecuación puede ser escrito como:

$$c_n = F_n \exp(-iu\beta_n t + i\beta_n x) = F_n \exp(i\beta_n(x - ut)) \quad (4.36)$$

La amplitud del  $n$ -ésimo componente se define por  $F_n$  y la traslación se describe por  $\exp(i\beta_n(x - ut))$ .

Ahora considérese el comportamiento de los componentes de Fourier en un esquema numérico. Asumiendo que la solución de la aproximación numérica puede ser resuelta en forma análoga al caso analítico, esto es:

$$c_s(x) \approx \sum_{n=-p}^p F_n \exp(i\alpha'_n t + i\beta_n(s\Delta x)) \quad (4.37)$$

donde  $\alpha'_n$  es la frecuencia temporal del esquema numérico y  $p$  corresponde a la parte entera asociada con el más pequeña longitud de onda que puede ser propagada por la aproximación numérica, usualmente esta es  $2\Delta x$ . Como en el caso del operador analítico, es necesario considerar solamente un término de esta serie:

$$c_{s_n} = F_n \exp(i\alpha'_n t + i\beta_n(s\Delta x)) \quad (4.38)$$

Cuando esta expresión se substituye en el esquema numérico, se obtiene una relación entre la frecuencia temporal  $\alpha'_n$  y los otros parámetros del esquema. Podemos escribir simbólicamente esta relación como  $\alpha'_n = \alpha'_n(\Delta t, \Delta x, u, \beta_n)$ .

La forma funcional de  $\alpha'_n$  no será la misma que la analítica. Después de un lapso de tiempo  $\Delta t$ , los términos de las soluciones analítica y numérica tienen la siguiente forma:

$$c_n^{t+\Delta t} = F_n \exp(i\alpha'_n(t+\Delta t) + i\beta_n(s\Delta x)) = F_n \exp(i\alpha_n t + i\beta_n x) \exp(i\alpha_n \Delta t)$$

$$= c_n^t \exp(i\alpha_n \Delta t) = c_n^t G_n^a \quad (\text{analítica})$$

$$\begin{aligned} c_n^{t+\Delta t} &= F_n \exp(i\alpha_n'(t+\Delta t) + i\beta_n(s\Delta x)) \\ &= c_n^t \exp(i\alpha_n' \Delta t) = c_n^t G_n \quad (\text{numérica}) \end{aligned}$$

donde  $G_n^a$  y  $G_n$  son los factores de amplificación analítico y numérico, respectivamente.

La magnitud del factor de amplificación puede ser interpretado como la razón de la amplitud del enésimo componente de Fourier después de un lapso de tiempo  $\Delta t$  a su amplitud en el comienzo del paso de tiempo. Después de que el enésimo componente ha viajado una longitud de onda completa, su razón disipativa toma la forma:

$$|\exp(i\alpha_n' N_n \Delta t)| = |\exp(i\alpha_n' \Delta t)|^{N_n} = |G_n^a|^{N_n} \quad (4.39)$$

donde  $N_n$  es el número de lapsos de tiempo necesarios para propagar el enésimo componente hasta una longitud de onda:

$$N_n = \frac{L_n}{u \Delta t} = \frac{L_n}{Cr \Delta x} \quad (4.40)$$

El esquema será numéricamente estable solo si  $|G_n|$  es limitado del anterior por la unidad para todo  $n$ .

Introduciendo la relación  $\alpha_n = -u \beta_n$  en la definición del factor de amplificación analítico, obtenemos después de una longitud de onda:

$$\begin{aligned} |\exp(i\alpha_n N_n \Delta t)| &= |\exp(-iu \beta_n N_n \Delta t)| = \\ &= |\exp(-iu \beta_n \Delta t)|^{N_n} = |G_n^a|^{N_n} = 1 \end{aligned} \quad (4.41)$$

La expresión analítica requiere que, en ausencia del error numérico el enésimo componente no cambie la amplitud como función del tiempo. Esto es consistente con el comportamiento de las ecuaciones hiperbólicas. La medida del error en amplificación del componente  $n$ , llamado  $R_n$ :

$$R_n = \frac{|G_n^a|^{N_n}}{|G_n^a|^{N_n}} = \frac{|G_n^a|^{N_n}}{|1|^{N_n}} = |G_n^a|^{N_n} \quad (4.42)$$

Si la solución numérica propaga el enésimo componente sin error de amplificación,  $R_n = 1$ . Cuando  $R_n$  es menor que la unidad, la amplitud de este componente después de la propagación

de una onda es menor que en la solución exacta; cuando es mayor que la unidad, el comportamiento opuesto es el esperado.

El error de fase es el asociado con la propiedad traslacional de cada componente. Este puede ser expresado en términos de las partes real e imaginaria del eigenvalor. El  $n$ -ésimo componente de Fourier presenta un ángulo de fase de  $\Theta$  después de un lapso de tiempo. El ángulo puede ser calculado como:

$$\tan \theta_n = \frac{\text{Im} G_n}{\text{Re} G_n} \quad (4.43)$$

Después de  $N_n$  lapsos de tiempo, el valor del ángulo de fase es  $N_n \theta_n$ . Sin embargo el componente de Fourier de la solución analítica se traslada exactamente hasta  $2\pi$  radianes. La diferencia entre esas dos medidas del ángulo de fase constituye la medida del error de fase:

$$\Theta_n = N_n \theta_n' - 2\pi \quad (4.44)$$

Otro indicador alternativo es la razón del ángulo de fase numérico al analítico:

$$\Theta_n^a = \frac{N_n \theta_n'}{2\pi} \quad (4.45)$$

conocido como relación de fases.

Cuando  $R < 1$  el esquema presenta difusión numérica o artificial. Esta suaviza las fronteras agudas debidas a los grandes gradientes. Como se puede observar de la fig.4.2, el esquema cuadrático tiene menor error de amplitud que el esquema lineal para el mismo número de Courant, por lo que la difusión numérica será menor. La solución exacta tiene un valor de  $R = 1$  para cualquier número de Courant, esto solo se logra con los esquemas si  $Cr = 1$  o  $Cr = 0$ . Esto es consistente con el análisis de estabilidad llevado a cabo anteriormente.

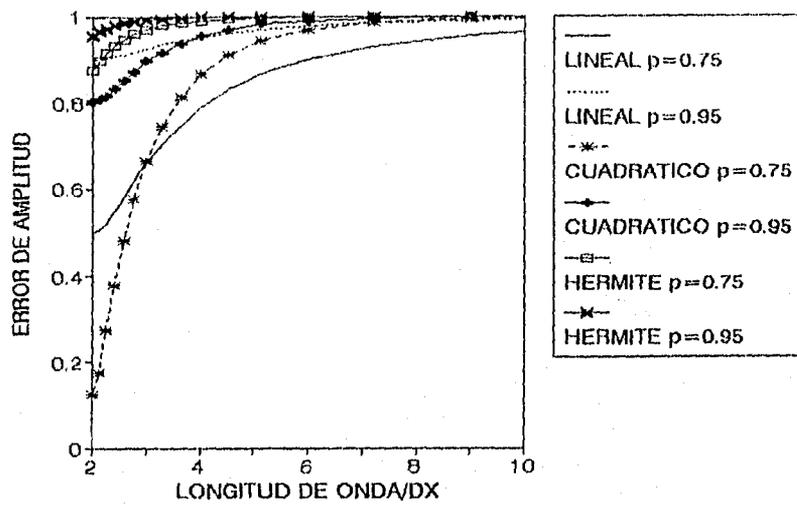
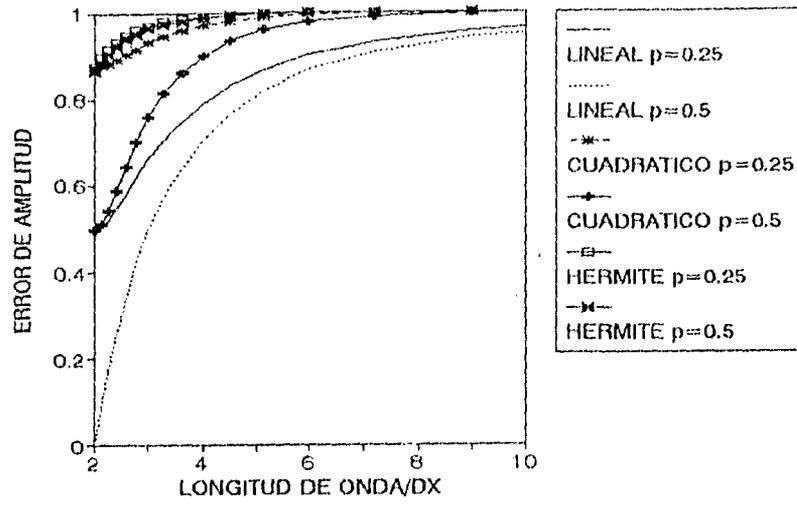


Fig.4.2.- Error de amplitud para diferentes  $p$ .

En la siguiente figura se muestra el error de amplitud en forma unidimensional para el método IDA con diferentes valores de  $\epsilon$  :

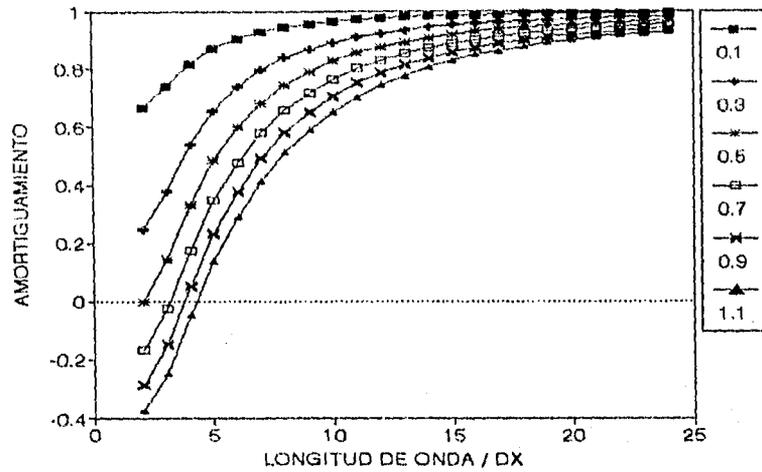


Fig.4.3.- Error de amplitud del método IDA para diferentes  $\epsilon$ .

El ángulo de fase para el esquema lineal

$$\Theta = \tan^{-1} \left[ \frac{-p \sin \theta}{1 - p(1 - \cos \theta)} \right] \quad (4.44)$$

Para el esquema cuadrático

$$\Theta = \tan^{-1} \left[ \frac{-p \sin \theta}{1 + p^2 (\cos \theta - 1)} \right] \quad (4.45)$$

El esquema de interpolación de Hermite tiene un ángulo de fase

$$\Theta = \tan^{-1} \left[ \frac{Im_{HER}}{Re_{HER}} \right] \quad (4.46)$$

donde:

$$Re_{HER} = \frac{1}{2} \sqrt[3]{ \frac{A_1 + \sqrt{A_1^2 + A_2^2}}{2} + (h_1 + k_3) \cos \theta + h_2 + k_4 } \quad (4.47)$$

$$Im_{HER} = \frac{1}{2} \sqrt{\left[ \frac{-A_1 + \sqrt{A_1^2 + A_2^2}}{2} + (h_1 + k_3) \text{sen} \theta \right]} \quad (4.48)$$

las variables están definidas en las ecs. 4.26 a la 4.30.

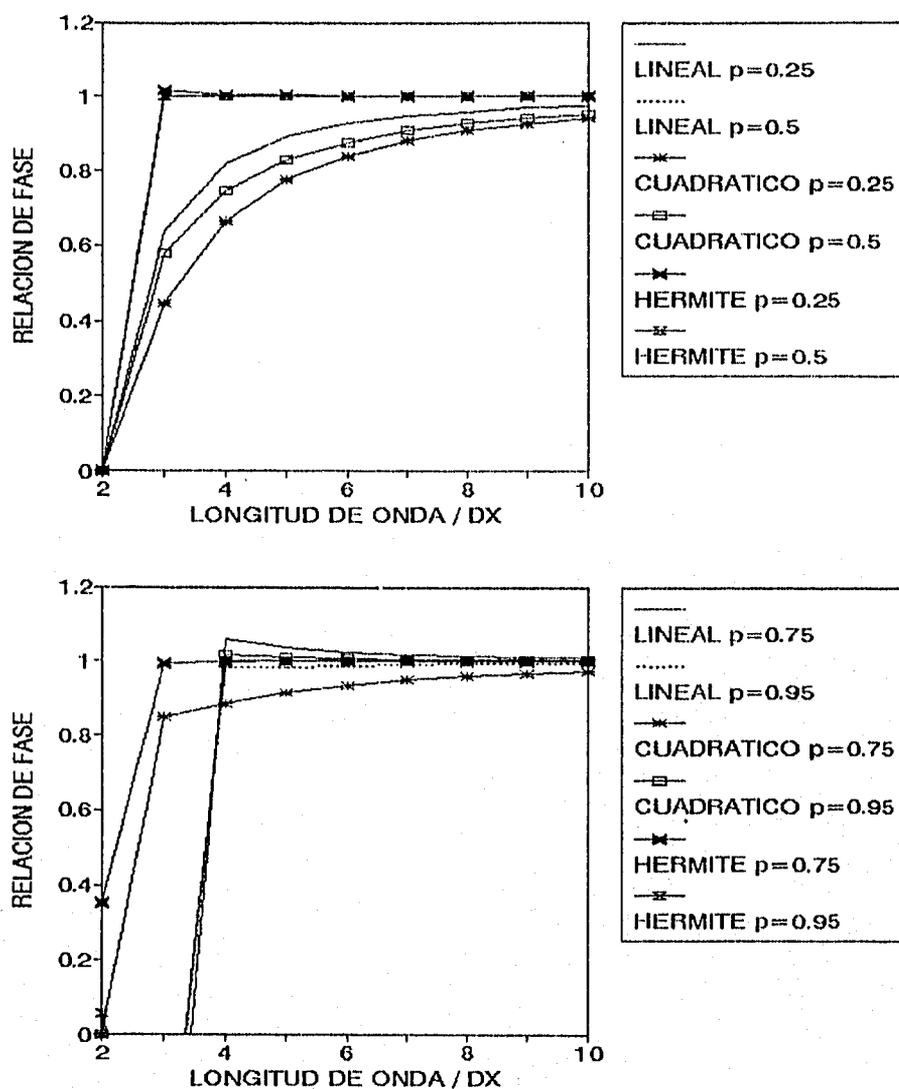


Fig.4.4.- Error de fase para los diferentes esquemas.

La ecuación de difusión tiene solamente una respuesta de amplitud, no tiene relación de fase pues no existen términos imaginarios en su factor de amplitud.

El error de fase disminuye cuando la longitud de onda aumenta, hasta que para longitudes de onda de  $20 \Delta x$  y mayores el error se hace muy pequeño para los dos esquemas. Los componentes con longitudes de onda de  $2 \Delta x$  hasta  $20 \Delta x$  propagan en forma diferente los errores dependiendo del esquema y del número de Courant utilizado.

El esquema lineal cuando  $Cr = 1$  o  $Cr = 0.5$ , tiene una correcta propagación sin error de fase y sin error de amplitud, lo que resulta en la solución exacta de los valores en los nodos. Esto puede ser verificado por el análisis del error de truncamiento. Otros valores de  $Cr$  están asociados con errores de fase, unos son positivos (la onda de Fourier se propaga demasiado rápido) y otros negativos (la onda viaja demasiado lento).

Las longitudes de onda pequeñas, que corresponden a frecuencias espaciales más altas, se propagan incorrectamente. Estas son precisamente las que son necesarias para resolver fronteras agudas, y debido a la fase incorrecta se muestran con oscilaciones en series de Fourier de la solución numérica. En consecuencia cuando varios componentes son sumados de forma completa a la solución numérica esta presentará falsas oscilaciones no físicas relacionadas a los errores de fase. Este fenómeno es conocido como dispersión numérica.

Es claro que se requieren un mínimo de 10 intervalos por longitud de onda para representar la solución adecuadamente tanto para la advección como para la difusión. Las imprecisiones con números de onda mayores se deben a errores de truncamiento que son inherentes a cualquier proceso de discretización. Se deben seleccionar esquemas y parámetros con considerable cuidado para minimizar los errores en los resultados.

Para el caso bidimensional aunque los esquemas son incondicionalmente estables, los errores se acumulan por lo que las características de los errores serán más restrictivas que para los casos unidimensionales aquí mostrados.

### 4.3 ANÁLISIS DEL ERROR POR TRUNCAMIENTO.

Los esquemas numéricos aplicados a las ecuaciones diferenciales parciales tienen errores que se originan de los errores de truncamiento (E.T.) de las aproximaciones por diferencias. Los errores de truncamiento dan cierta naturaleza artificial a la solución de un esquema numérico. Para analizar el efecto de los E.T., se utilizan las ecuaciones modificadas, que son ecuaciones diferenciales similares a las originales. Las ecuaciones modificadas incluyen todos los efectos de los errores de truncamiento. Se obtienen al sustituir los desarrollos de Taylor por las aproximaciones por diferencias. Tanto las soluciones de las ecuaciones originales y modificadas se pueden obtener en la forma analítica en una retícula con espaciamiento uniforme en un dominio infinito. Así se pueden comparar los efectos de los errores de truncamiento mediante la comparación de las dos soluciones analíticas.

Considérese el esquema de interpolación lineal:

$$c_j^{n+1} = pc_{j-1}^n + (1-p)c_j^n \quad (4.49)$$

Los desarrollos de Taylor de  $c^{n+1} = c(x_p, t_{n+1})$  y  $c_{i-1}^n = c(x_{i-1}, t_n)$  en torno de  $x = x_i$  y  $t = t_n$  son, respectivamente:

$$c_i^{n+1} = c + \Delta t c_t + \frac{\Delta t^2}{2} c_{tt} + \frac{\Delta t^3}{6} c_{ttt} \dots \quad (4.50)$$

$$c_{i-1}^n = c - \Delta x c_x + \frac{\Delta x^2}{2} c_{xx} - \frac{\Delta x^3}{6} c_{xxx} \dots \quad (4.51)$$

donde  $c$  sin índice superior denota a  $c = c(x_p, t_n)$  y  $c_t$  y  $c_x$  son las derivadas parciales de  $u$  en  $(x_p, t_n)$ . Sustituyendo los desarrollos de Taylor en la ecuación obtenemos:

$$\left[ c + \Delta t c_t + \frac{\Delta t^2}{2} c_{tt} + \dots \right] = (1-p)c + p \left[ c - \Delta x c_x + \frac{\Delta x^2}{2} c_{xx} - \dots \right] \quad (4.52)$$

cancelando los términos resulta:

$$c_t + uc_x = -\frac{\Delta t}{2}c_{tt} + \frac{p}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} c_{xx} + \dots \quad (4.53)$$

$$c_t + uc_x = -\frac{\Delta t}{2}c_{tt} + \frac{u}{2} \Delta x c_{xx} + \dots \quad (4.54)$$

con lo que se demuestra que el error de truncamiento es  $O(\Delta t, \Delta x)$ . De la ecuación de advección tenemos:

$$c_t = -uc_x, \quad c_{tt} = u^2 c_{xx} \quad y \quad c_{ttt} = -u^3 c_{xxx} \quad (4.55)$$

de esta manera podemos escribir

$$c_t + uc_x - \frac{u}{2} \Delta x (1-p) c_{xx} + \dots \quad (4.56)$$

el tercer término de esta ecuación es conocido como difusividad numérica,  $\alpha = 0.5 u \Delta x (1-p)$ , o también término de viscosidad numérica.

Es claro que cuando  $p = 1$  en el esquema anterior la difusividad es nula y la solución planteada por este coincide con la solución exacta.

Procediendo del mismo modo para es esquema de interpolación cuadrático obtenemos:

$$c_t + uc_x = -\frac{\Delta t}{2}c_{tt} + \frac{u^2}{2} \Delta t c_{xx} - \frac{\Delta t^2}{6}c_{ttt} - u \frac{\Delta x^2}{6}c_{xxx} + \dots \quad (4.57)$$

sustituyendo la segunda relación de la ec. 4.54, en el primer término a la derecha de la ecuación anterior:

$$c_t + uc_x = -\frac{\Delta t^2}{6}c_{ttt} - u \frac{\Delta x^2}{6}c_{xxx} + \dots \quad (4.58)$$

por lo tanto el orden de truncamiento es  $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ .

Sustituyendo los desarrollos de Taylor en la ecuación de interpolación cúbica de Hermite (ec. 3.22), todos los términos hasta de un orden tres se cancelan:

$$c_t + uc_x = -u \frac{\Delta x^2 \Delta t}{24} c_{4x} + u^2 \frac{\Delta x \Delta t^2}{12} c_{4x} - u^3 \frac{\Delta t^3}{24} c_{4x} + \dots \quad (4.59)$$

demostrándose que la ec. 3.22 tiene una precisión de tercer orden, pero cuando se calcula la derivada de la concentración  $c_x$  con la ec. 3.23., es decir se deriva la ec. 4.58 al igual que el método H-P se obtiene un error de truncamiento de cuarto orden. Una característica atractiva de este método es que el orden de aproximación puede incrementarse con la incorporación de derivadas espaciales de orden mayor en solo los dos puntos que la definen en 1D, sin aumentar el número de puntos en las que se hace la interpolación. Si la segunda derivada es adicionada en cada punto, se construye un polinomio de quinto grado entre los puntos  $i-1$  e  $i$ , usando tres valores por cada nodo, alcanzándose una precisión de sexto orden. De la misma forma, se puede alcanzar cualquier orden de precisión con adición de las correspondientes ordenes de las derivadas. La desventaja es que las derivadas de las concentraciones tienen que ser tratadas como nuevas variables dependientes.

El método IDA para la solución de la difusión tiene un orden de truncamiento  $O(\Delta t^2, \Delta x^2, \Delta y^2)$ , el cual es bastante conocido pues se utilizó un esquema de Crank-Nicholson (Lapidus y Pinder 1982)

La utilización de esquemas de orden superior involucra a más puntos lo cual los hace menos económicos que los de bajo orden. Desde una perspectiva práctica, la precisión que se alcance para un tiempo de ejecución es más importante que la precisión por si misma, esta siempre se incrementará por refinamiento de la retícula. Esquemas de orden superior demuestran relativamente pequeñas ventajas para redes anchas pero demuestran una mejor precisión cuando la retícula es refinada. Para un problema en particular es frecuente que el nivel de precisión de la solución es adecuado para una retícula ancha, o bien la retícula ancha es necesaria debido a las limitaciones de memoria o tiempo de ejecución de la computadora.

Cuando ocurren gradientes severos, la magnitud de las derivadas de orden superior es mucho más grande que las derivadas de bajo orden. Por lo que para una retícula dada los términos de orden superior en la expresión de error de truncamiento no disminuyen tan rápido como cuando la solución exacta es suave. Por esta misma razón, a menos que la retícula sea fina la magnitud de las derivadas de orden mayor en el término principal del error de truncamiento serán tan grandes como un orden de discretización alto que el error global es comparable a la discretización de bajo orden.

#### 4.4 CONSISTENCIA Y CONVERGENCIA.

Un esquema numérico se dice que es consistente cuando se aproxima a la ecuación parcial original haciendo arbitrariamente pequeño el espacio de la malla. El error se anula cuando  $\Delta x \rightarrow 0$ :

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} E.T. = 0 \quad (4.60)$$

De las ecs. 4.55, 4.56 y 4.58 del error de truncamiento de los métodos de interpolación lineal, cuadrático y de Hermite, respectivamente; es evidente que cumplen con esta propiedad.

La convergencia es la propiedad de un esquema numérico de aproximarse a la solución exacta de cada valor de la variable dependiente a medida que el espaciamiento de la red tiende a cero. La diferencia entre la solución exacta y la numérica se denota por E:

$$E_{ij}^n = ec_{ij}^n - c_{ij}^n \quad (4.61)$$

donde  $ec_{ij}^n$  y  $c_{ij}^n$  son las soluciones exacta y numérica respectivamente. Si  $E_{ij}^n \rightarrow 0$ , cuando  $\Delta x \rightarrow 0$ , el esquema numérico es convergente.

Una vez realizadas las pruebas de estabilidad y consistencia es posible demostrar la consistencia por medio del teorema de equivalencia de Lax: "Dada una aproximación en diferencias finitas que satisface la condición de consistencia, la estabilidad es condición suficiente y necesaria para la convergencia". Por lo que concluimos que los esquemas analizados anteriormente son convergentes.

#### 4.5 CONSERVACIÓN DE MASA.

El principio de conservación de masa requiere que la suma acumulativa de la masa entrando y saliendo del dominio es igual a la masa acumulada. Es decir, tiempo a tiempo la suma de las concentraciones deberá ser la misma en todo el dominio:

$$\sum_{\text{todo } ij} c_{ij}^n = \sum_{\text{todo } ij} c_{ij}^0 \quad (4.62)$$

Es necesario considerar tanto las concentraciones positivas como las negativas obtenidas numéricamente pues aunque estas últimas no tiene un significado físico si son suprimidas (por ejemplo, fijando en cero las concentraciones negativas) se formará un efecto de creación artificial de masa. Definiendo la relación de masa  $R_m$  como:

$$R_m = \frac{\sum_{\text{todo } ij} c_{ij}^n}{\sum_{\text{todo } ij} c_{ij}^0} \quad (4.63)$$

La prueba a los esquemas se llevó a cabo con los problemas bidimensionales del último capítulo y ahí se hacen las comparaciones.

## 5. EJEMPLOS DE APLICACIÓN.

Con la intención de estudiar el comportamiento de los esquemas citados se proponen una serie de ejemplos idealizados en una variedad de condiciones. En principio estos son sólo ejemplos teóricos que sirven para evaluación de los métodos.

El caso unidimensional de solución de la ecuación de dispersión es la mejor forma gráfica de comparar los diversos esquemas numéricos. En el siguiente problema se modela un campo de concentración gaussiano con las siguientes condiciones iniciales y de frontera:

$$c(x,0) = \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_0^2}\right] \quad (5.1)$$

$$c(x,t) \rightarrow 0 \text{ cuando } x \rightarrow \infty$$

donde  $\sigma_0$  es la desviación estándar inicial y  $x_0$  es la posición inicial de la nube de contaminante.

La solución analítica de la ecuación 2.3 para estas condiciones es:

$$c(x,t) = \frac{\sigma_0}{\sigma} \exp\left[-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma_0^2}\right] \quad (5.2)$$

en la que  $\bar{x} = x_0 + ut$  para una velocidad  $u$  constante y  $\sigma^2 = \sigma_0^2 + 2Kt$ .

Con  $\sigma_0^2 = 3$ ,  $x_0 = 5$ ,  $\Delta x = 1$  m,  $\Delta t = 1$  s,  $u = 0.8$  m/s y  $K = 0.0566$  m<sup>2</sup>/s por lo que  $Cr = 0.8$  y  $Pe = 15$ . Se puede observar la curva de concentración inicial en la fig.5.1.

Se compararon cuatro esquemas, los tres analizados anteriormente y un esquema explícito en diferencias hacia atrás (upwind). De la fig. 5.1, después de transcurrido un tiempo de  $20 \Delta t$ , el esquema con interpolador lineal tiene el mismo comportamiento que el upwind, en ambos la concentración máxima de contaminante calculada es aproximadamente menor en un 10% que la de la solución analítica. En tanto que el esquema con el interpolador cuadrático se obtienen resultados muy próximos la solución analítica pero son aún mejores los del interpolador de Hermite.

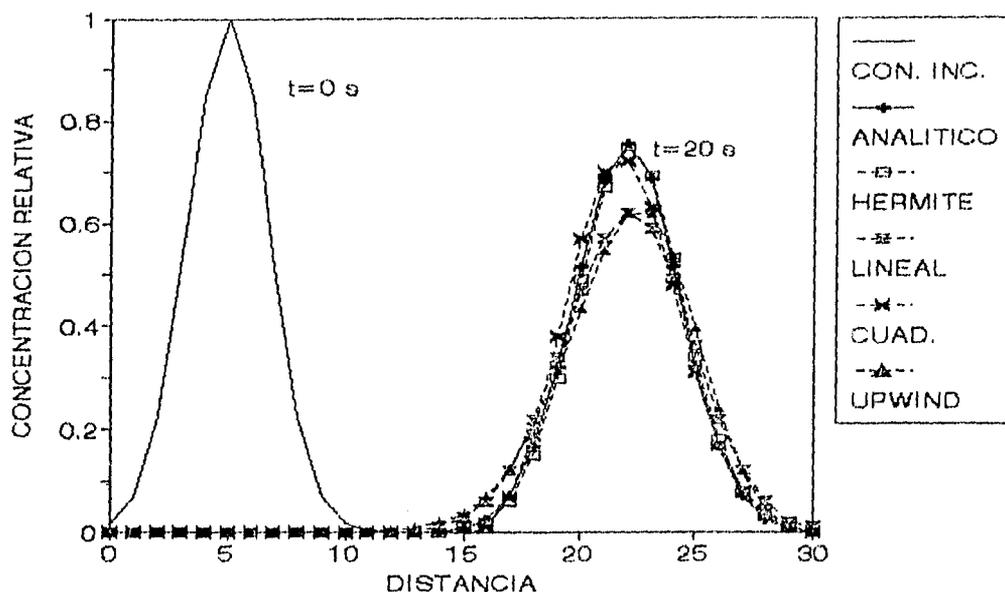


Fig.5.1.- Comparación de esquemas numéricos contra la solución analítica de una nube de contaminante.

Como segundo problema tenemos un área de profundidad constante en el cual es arrojado un trazador. Esta tiene un coeficiente de difusión isotrópico, es decir igual y constante en las direcciones  $x$  y  $y$ , además el flujo es unidireccional.

El área es definida con retícula de  $10 \times 10$  nodos con  $\Delta x = \Delta y = 1$  m. Se ha seleccionado un  $\Delta t = 0.85$  s. La velocidades en los ejes  $x$  e  $y$  son  $u = 1$  m/s y  $v = 0$ , respectivamente. Con la anterior información deducimos que  $a = 0.85$  y  $b = 0$  (números de Courant en  $x$  e  $y$ ). Las condiciones iniciales ( $t = 0$ ) del campo de concentraciones son:

$$c(0,5) = 1, c(0,6) = 1, c(1,5) = 1, c(1,6) = 1$$

fuera de estos  $c(x,y) = 0$ . Los siguientes casos son los modelados:

PROBLEMA	COEF. DE DIFUSION	NUM. DE PECLET
A	0.2	5
B	0.02	50
C	0.002	500

Las siguientes figuras representan los resultados de modelar la nube de contaminante con los diferentes métodos y con las anteriores condiciones.

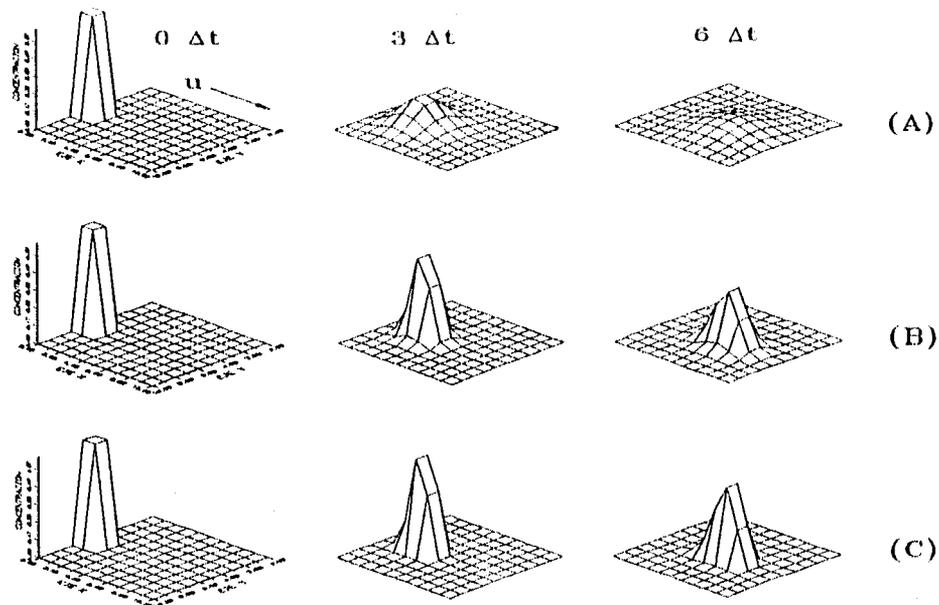


Fig.5.2.- Resultados de la aplicación del esquema con interpolador lineal.

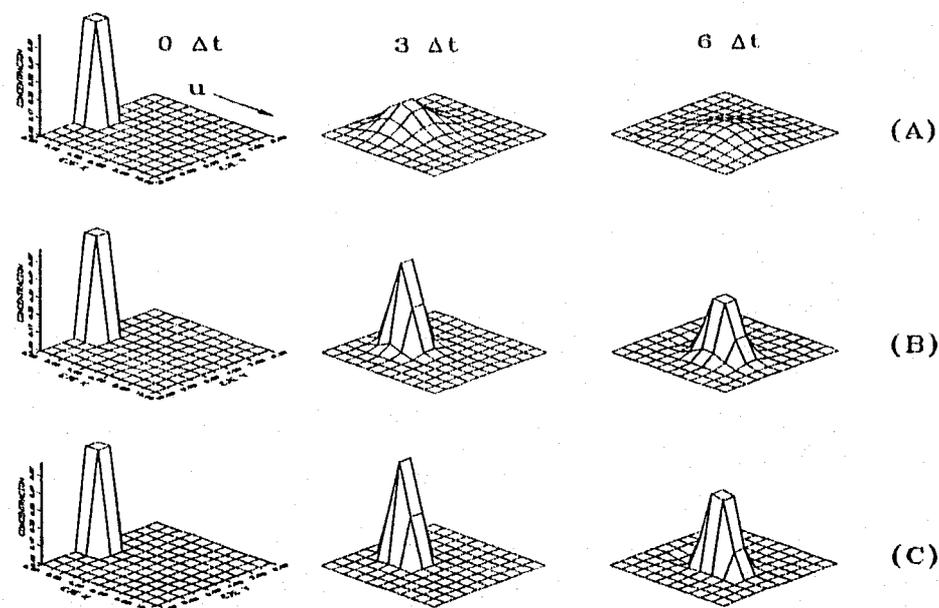


Fig.5.3.- Resultados de la aplicación del interpolador cuadrático.

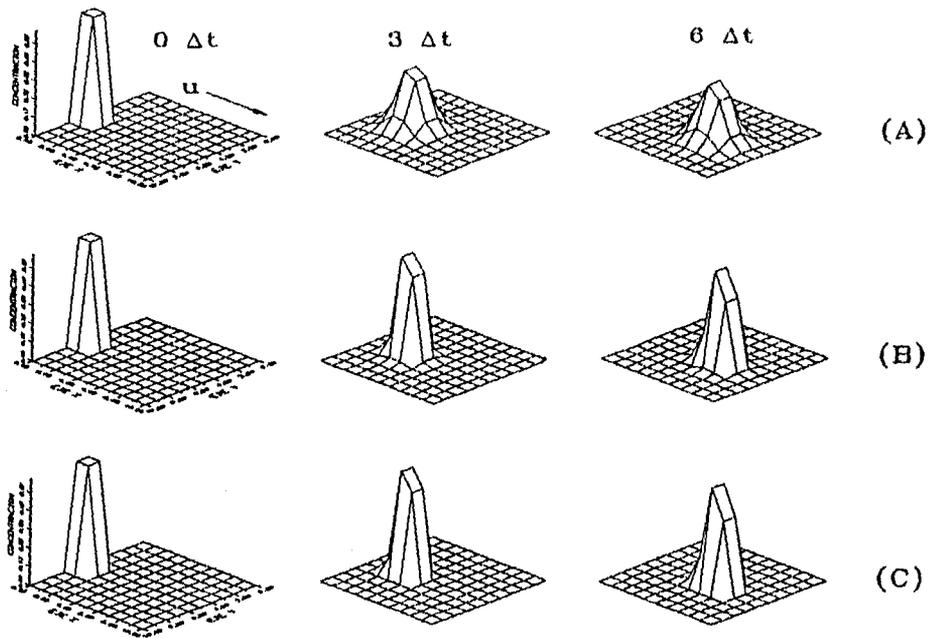


Fig.5.4.- Resultados de la aplicación del interpolador de Hermite.

Las gráficas siguientes muestran las pruebas de conservación de masa relacionadas a los esquemas en los anteriores ejemplos bidimensionales, observándose que no son estrictamente conservativos. El mayor error observado es el del esquema con el método de interpolación cuadrático que para el último caso presenta ya, aunque pequeños, valores negativos de la concentración. El método de Hermite es el que mostró mejor conservación de masa para todas la pruebas realizadas. El esquema con interpolación lineal es aceptable en cuanto esta prueba pero tiene una fuerte difusión numérica, observándose en la concentración máxima calcula.

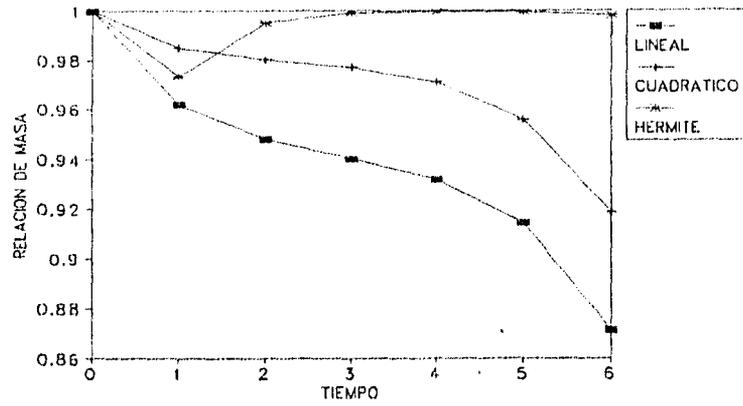


Fig.5.5.- Error de masa para el problema (A).

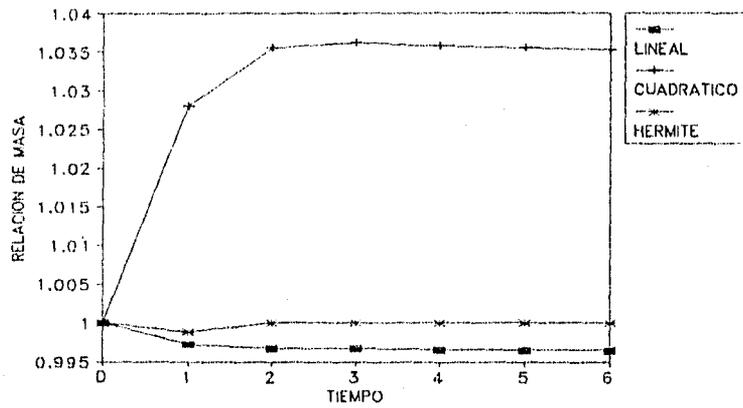


Fig.5.6.- Error de masa para el problema (B).

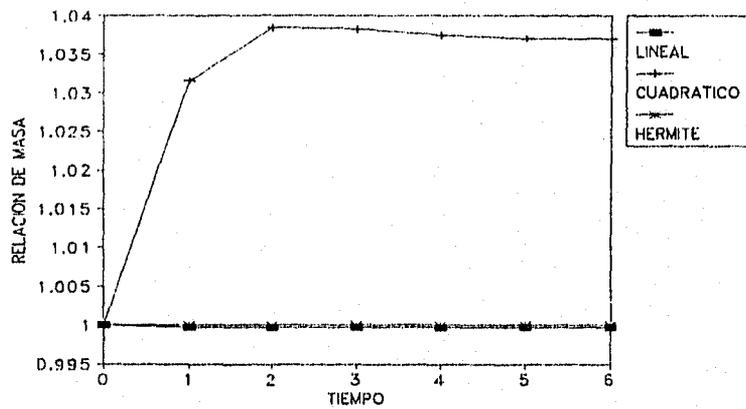


Fig.5.7.- Error de masa para el problema (C).

El siguiente ejemplo muestra la dispersión de un campo de concentraciones bidimensional de forma rectangular en un flujo uniforme. Las condiciones iniciales y de frontera son las siguientes:

$$c(x,y,0) = \begin{cases} 1 & \text{cuando } -0.5 \leq x \leq 0.5, -0.1 \leq y \leq 0.1 \\ 0 & \text{en cualquier otro} \end{cases}$$

la solución analítica de estas condiciones es (Xue y Xie 1988):

$$c(x,y,t) = \frac{1}{4} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{e-x+ut}{\sqrt{4D_x t}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{e+x-ut}{\sqrt{4D_x t}} \right) \right] \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{f-y+vt}{\sqrt{4D_y t}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{f+y-vt}{\sqrt{4D_y t}} \right) \right] \quad (5.3)$$

donde  $\operatorname{erf}$  es la función de error,  $e = 0.5$  (mitad del rectángulo en la dirección  $x$ ) y  $f = 0.1$  (mitad del rectángulo en la dirección  $y$ ). Para el caso en que  $D_x = 0.005$ ,  $D_y = 0.0002$ ,  $u = 0.025$ ,  $v = 0$ ,  $\Delta t = 0.1$  en una malla de  $\Delta x = \Delta y = 0.05$  extendiéndose de  $-1.5 \leq x \leq 1.5$ ,  $-0.55 \leq y \leq 0.55$ . Comparando la solución analítica con la solución con el método de interpolación de Hermite:

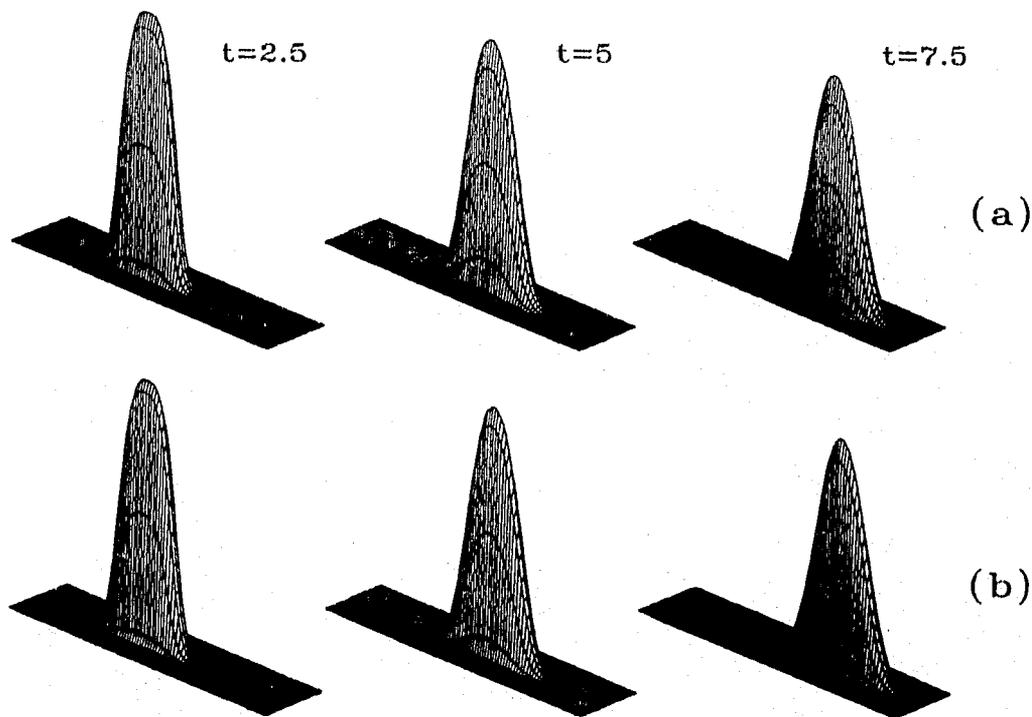


Fig.5.5.- Solución bidimensional para (a) la solución analítica y (b) de Hermite.

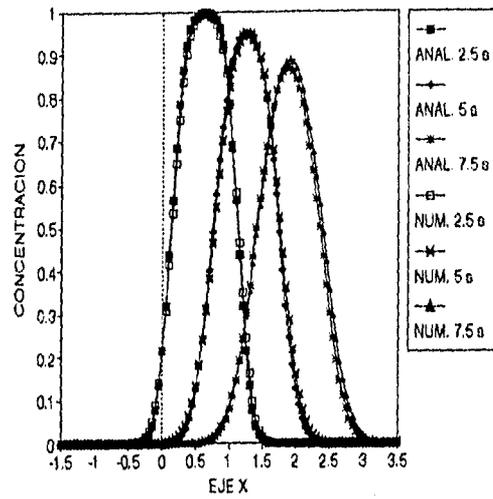


Fig.5.6.- Comparación de resultados en el eje x.

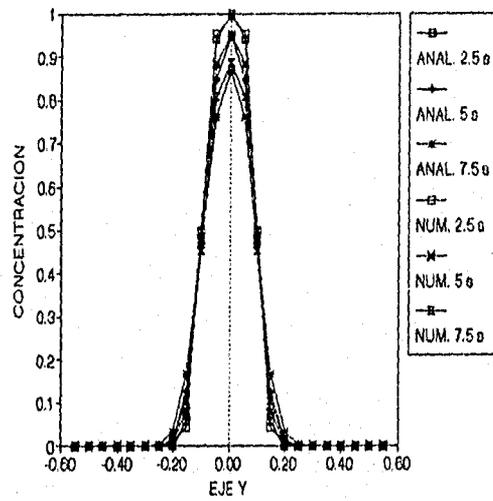
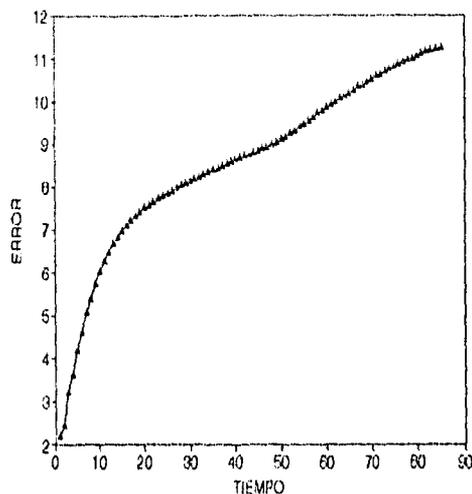


Fig.5.7.- Comparación de resultados en el eje y.

La figura 5.8 muestra la magnitud del error absoluto entre la solución numérica y la analítica conocida como norma cuadrada ( $L_2$ ), definida por:



**Fig.5.8**

$$L_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} (ec_{ij} - c_{ij})^2} \quad (5.4)$$

$ec_{ij}$  y  $c_{ij}$  son los valores de la concentración de la solución analítica y la numérica, y  $N_x$  y  $N_y$  el número de nodos en  $x$  e  $y$ , respectivamente. En la figura 5.6 se observa la variación del error absoluto en el tiempo representado por el número de iteración. El error inicial es nulo y este se incrementa con el transcurso del proceso de cálculo.

Como se ha insistido en los capítulos anteriores, el esquema más preciso de los analizados es el que utiliza la interpolación de Hermite, por lo cual se proporciona otro ejemplo de aplicación solucionado con este método. En una sección de un canal de 5 m de ancho se inicia la descarga constante de un contaminante en una pared lateral. Esto se representa como un nodo fuente. El flujo en el canal es uniforme y permanente, con una velocidad de 1 m/s y considerando un coeficiente de difusión isotrópico de 0.2 m<sup>2</sup>/s. La retícula es de 5 x 10 nodos, espaciados uniformemente en  $x$  e  $y$  a 1 m, con un  $\Delta t$  de 0.8 s. Los resultados son mostrados en la figura 5.9.

La concentración relativa del contaminante es unitaria en el nodo fuente. Se pueden observar los diferentes niveles de concentración del contaminante para la una descarga constante para 3.4 s y 6.8 s de tiempo transcurridos. De una forma similar puede abordarse problema como el de un río con una fuente lateral de contaminación artificial o natural.

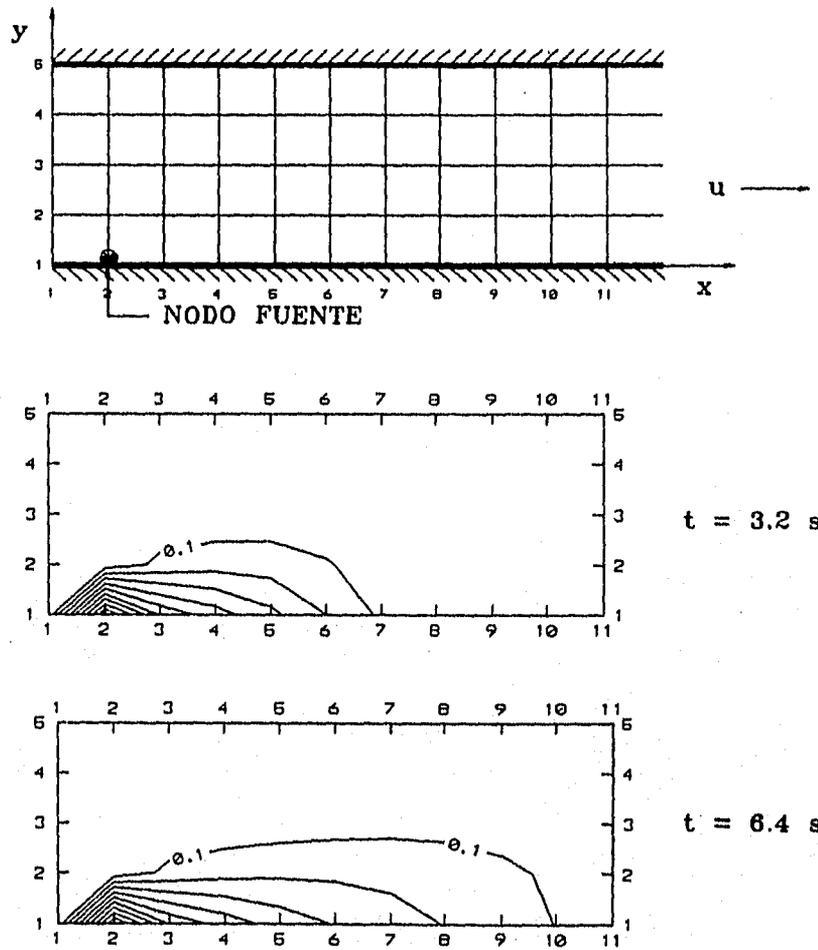


Fig.5.9

## CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

La modelación numérica de estos contaminantes es una herramienta para la toma de decisiones con la que es posible hacer pronósticos del comportamiento de los contaminantes y su concentración, previendo medidas para el control de las descargas.

El presente trabajo resuelve el problema de la modelación de la dispersión bidimensional de contaminantes conservativos utilizando algunos de los métodos Euleriano-Lagrangianos existentes. Como se observó, las ventajas de estos son su flexibilidad de aplicación al seleccionar la más conveniente discretización en el espacio y tiempo, disminuyendo los problemas comúnmente encontrados de dispersión y difusión numérica cuando el flujo es dominado convectivamente.

El tamaño del incremento de tiempo, no está sujeto a la restricción  $Cr < 1$  en estos métodos, pero es necesario tener un mayor cuidado en la interpolación de las líneas características en las fronteras que con los métodos Eulerianos. Es necesario hacer un análisis detallado del tamaño óptimo del incremento del tiempo a utilizar cuando el flujo es no uniforme puesto que esta es la situación más común en la naturaleza. Esto requiere de un conocimiento amplio de las escalas espaciales y temporales del problema a ser modelado.

Las condiciones de frontera impuestas a los esquemas numéricos de solución de la dispersión son generalmente las mismas que las de la solución a la hidrodinámica, por lo que se recomienda utilizar también este tipo de métodos en este último problema, facilitando la programación del problema global.

Aunque los procedimientos presentados no se restringen a algún cuerpo de agua en especial, las características propias de cada ambiente y la forma de descarga del contaminante deben ser conocidas para la correcta modelación del fenómeno.

El esquema de interpolación de Hermite para la solución de la advección es el más preciso de los esquemas presentados. La complejidad su aplicación dependerá del problema a resolver, pues el cálculo de la concentraciones y sus derivadas implica mayores tiempos de cálculo y espacio de memoria, pero la precisión alcanzada es bastante aceptable. Los errores de cálculo de este método fueron menores a los demás por lo que se consideró el más conveniente en este trabajo.

Los esquemas estudiados son una alternativa viable una vez adaptados para resolver las ecuaciones bidimensionales puesto que las mallas espacial y temporal pueden ser seleccionadas en la forma más conveniente.

Se han desarrollado métodos que aumentan la precisión de cálculo de fronteras muy agudas (Pe muy grandes), pero son generalmente de mayor esfuerzo computacional. El presente trabajo se centró en los problemas que los métodos comunes existentes no resuelven o lo hacen a costa de su precisión, pero son abordables con métodos Euleriano-Lagrangianos con mejores resultados. Existen otros métodos similares a los aquí expuestos, algunos tienden a simplificar el cálculo pero generalmente a costa de la precisión. La selección dependerá de las condiciones impuestas por el problema y del equipo disponible para su solución.

Por último es necesario profundizar en los problemas reales aplicando los anteriores esquemas verificando, calibrando y validando contra resultados medidos en campo.

## REFERENCIAS

Adams, E.E., Baptista, A.M.; *Ocean dispersion modeling*. Encyclopedia of Fluid Mechanics; vol. 6, 1986.

Al-Niami, A.N.S., Rushton, K.R.; *Finite-difference solutions for one-dimensional dispersion using an improved mesh desing*. Journal of Hydrology, 39, p.301-310, 1978.

Baptista, A.M.; *Solution of advection-dominated transport by Eulerian-Lagrangian methods using the backwards method of characteristics*. Doctoral tesis of M.I.T., 1987.

Bentley, L.R.; *Comment on " On the use of reach-back characteristics method for calculation of dispersion"*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 13, 1205-1206, 1991.

Bentley, L.R., Aldama, A., Pinder, G.F.; *Fourier analysis of the Eulerian-Lagrangian least squares collocation method*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 11, 427-444, 1990.

Berezowsky, M.; *Boundary conditions for two-dimensional advection-dispersion models*. Computational Methods in Surface Hydrology; editores Gambolati et. al.; 1990.

Bode, L., Sobey, R.L.; *Accurate modelling of two dimensional mass transport*. Proceedings of the 19th International Conference on Coastal Engineering, ASCE, Houston, 1984.

Bowie, G.L., Mills, W.B., Porcella, D.B., Campbell, C.L., Pagenkopf, J.R., Rupp, G.L., Johnson, K.M., Chan, P.W.H., Gherini, S.A., Chamberlin, Ch.E.; *Rates, constants and kinetics formulations in surface water quality modeling*; EPA, junio 1985.

Casulli, V.; *Numerical simulation of shallow water flow*. Computational Methods in Surface Hydrology; editores Gambolati et. al.; 1990.

Cheng, R.T., Causulli, V., Milford, S.N.; *Eulerian-Lagrangian solution of the convection-dispersion equation in natural coordinates*. Water Resources Research, Vol. 20, no.7, pp.944-952, july 1984.

Chin, D.A., Roberts, P.J.W.; *Model of dispersion in costal waters*. Journal of Hydraulic Engineering of ASCE, vol. 111, no. HY1, january, 1985.

Elder, J.W.; *The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow*. Journal of Fluid Mechanics, vol.5, part 4, pp.544-560, may 1959.

Fischer, H.B.; *Dispersion predictions in natural streams*. Journal of Sanitary Engineering Division of ASCE, vol. 94, no. SA5, october 1968.

Fisher, H. B. List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J., Brooks, N.H.; *Mixing in inland and coastal waters*. Academic Press, Inc.; 1979.

Fletcher, C.A.J.; *Computational techniques for fluid dynamics*. Vols.I y II. Springer-Verlag, 1988.

French, R.H.; *Hidráulica de canales abiertos*; editorial Mc.Graw-Hill, 1988.

Glass, J., Rodi, W.; *A higher order numerical scheme for scalar transport*. Computer in applied mechanics and engineering, 31, 337-358, 1982.

González, J.A., Martínez, P.M.; *Método general para calcular el coeficiente de dispersión en ríos*. Ingeniería Hidráulica en México, mayo/agosto, 1990, pp. 26-32.

Gray, W.G., Pinder, G.F.; *An analysis of the numerical solution of the transport equation*. Water Resources Research, vol 12, no. 3, pp.547-555, june 1976.

Holley, E.R.; *Unified view of diffusion and dispersion*. Journal of Hydraulic Engineering of ASCE, vol. 95, no. HY2, march 1969.

Holly, F.M.; *Two dimensional mass transport in rivers*. Hydrology papers, Colorado State University, Ft. Collins Colorado, September 1975.

Holley, F.M.; *Dispersion in rivers and coastal waters -1. Physical principles and dispersion equations*; Developments in hydraulic engineering - 3; editor P.Novak, 1985.

Holly, F.M., Preissmann, A.; *Accurate calculation of transport in two dimensions*. Journal of Hydraulic Engineering of ASCE, vol. 103, no. HY11, november 1977.

Holly, F.M., Preissmann, A.; *Closure of "Accurate calculation of transport in two dimensions"*. Journal of Hydraulic Engineering of ASCE, no. HY8, august 1980.

Holly, F.M., Usseglio-Polatera, J.M.; *Dispersion simulation in two dimensional tidal flow*. Journal of Hydraulic Engineering of ASCE, vol. 110, no. 7, 905-926, july 1984.

Jensen, O.K., Finlayson, B.A.; *Oscillation limits for weighted residual methods applied to convective diffusion equations*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 15, pp. 1681-1689, 1980.

Jensen, O.K. y Finlayson, B.A.; *Solution of the transport equations using a moving coordinate system*. Advances in Water Resouces, 1980, Vol. 3, March.

Lapidus, L., Pinder, G.F.; *Numerical solution of partial differential equations in science and engineering*. John Wiley and Sons, 1982.

Leonard, B.P.; *A survey of finite differences of opinion on numerical modeling of the*

*incompressible defective convection equation*. Finite Element Methods for Convection Dominated Flows, winter annual meeting of ASME, 1979.

Neuman, S.P.; *Adaptative Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 20, pp. 321-337, 1984.

Neuman, S.P.; *A Eulerian-Lagrangian numerical scheme for the dispersion-convection equation using conjugate space-time grids*. Journal of Computational Physics; 41, p. 270-294; 1981.

O'Neill, Lynch; *Highly efficient, oscillation free solution of transport equation over long times and large spaces*. Water Resources Research, vol 17, no. 6, pp.1665-1675, december 1981.

Price, H.S., Varga, R.S., Warren, J.E.; *Application of oscillation matrices to diffusion-convection equations*. Journal of Mathematics and Physics; 301-311, 1966.

Roache, P.J.; *Computational fluid mechanics*. Hermosa Publishers, 1982.

Sauvaget, P.; *Dispersion in rivers and coastal waters -2. Numerical computation of dispersion*. Developments in hydraulic engineering - 3; editor P.Novak, 1985.

Shamir, U.Y., Harleman, D.R.F.; *Numerical solutions for dispersion in porous mediums*. Water Resources Research, Vol. 3, no. 2, pp.557-581, 1967.

Sobey, R.J.; *Numerical alternatives in transient stream response*. Jour. of Hyd. Eng. ASCE, vol 110. no.6, june 1984.

Stone, H.L., Brian, P.L.T.; *Numerical solution of convective transport problems*. Journal of A.I.Ch.E., vol. 9, no. 5, pp.681-668, september 1963.

Taylor, G.I.; *The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe*; Proceedigs of Royal Society. A, vol. ccxxiii 1954, 446-468.

Toda, K.; *Numerical modelling of advection phenomena*. Doctoral tesis of Iowa University, 1986.

Varoglu, E., Finn, W.D.L.; *Finite elements incorporating characteristics for one dimensional diffusion convection equation*. Journal of Computational Physics, 34, p. 371-389, 1980.

Varoglu, Finn; *A finite element method for the diffusion-convection equation with constant coefficients*. Advances in Water Resouces, 1978, Vol. 1, December.

Verwey, A., Daubert, O.; *Discussion to "Accurate calculation of transport in two dimensions"*. Journal of Hydraulic Engineering of ASCE, HY7, p. 1116-1118, july 1978.

Wylie, C.R., Barrett, L.C., *Advaced engineering mathematics*; fifth edition, McGraw-Hill, 1985.

Xue, Y., Xie, Ch.; *A characteristic alternating direction implicit scheme for the advection-dispersion equation*; Computational methods in water resources, Vol.2, Numerical methods for transport and hydrologic process, Proceedings of VII International conference on computational methods in water resources, 1988.

Yang, G., Belleudy, P., Temperville, A.; *A higher-order eulerian scheme for coupled advection-diffusion transport*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 12, 43-58, 1991.

Yang, J-Ch., Hsu, E-L.; *Time-line interpolation for solution of the dispersion equation*. Journal of Hydraulic Research, vol. 28, no. 4, 1990.

Yang, J-Ch., Hsu, E-L.; *On the use of reach-back characteristics method for calculation of dispersion*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 12, 225-235, 1991.

**ANEXO**

```

'METODO EULERIANO-LAGRANGIANO BIDIMENSIONAL PARA EL CALCULO DE
'LA DISPERSION EN UNA SECCION DE UN CANAL DE PROFUNDIDAD CONSTANTE.
'(UTILIZANDO UN INTERPOLADOR DE HEMITE, METODO DE HOLLY-PREISSMAN)
DECLARE SUB THOMAS ()
COMMON SHARED A(), B(), D(), N
CLS
INPUT "VELOCIDAD EN EL CANAL (m/s) = "; U
INPUT "COEFICIENTE DE DISPERSION EN X (m2/s) = "; KDX
INPUT "COEFICIENTE DE DISPERSION EN Y (m2/s) = "; KDY
INPUT "INTERVALO DE DISTANCIA EN X (m) = "; DX
INPUT "INTERVALO DE DISTANCIA EN Y (m) = "; DY
INPUT "INTERVALO DE TIEMPO (s) = "; DT
INPUT "NUMERO DE NODOS EN X"; NX
INPUT "NUMERO DE NODOS EN Y"; NY
INPUT "NUMERO DE INTERVALOS DE TIEMPO"; NT
PRINT "LOCALIZACION DEL PUNTO DE DESCARGA..."
INPUT "NO. DE NODO EN X = "; NNX
INPUT "NO. DE NODO EN Y = "; NNY
INPUT "CONCENTRACION EN LA DESCARGA = "; CONDES

IF NX < NY THEN N = NY ELSE N = NX
  DIM C(1,NX+1,NY+1),CX(1,NX + 1,NY + 1),CY(1,NX+1,NY+1),CXY(1,NX+1,NY+1)
  DIM A(N + 1, N + 1), B(N + 1), D(N + 1)

  CRX = U * DT / DX: PEX = U * DX / KDX: LX = KDX * DT / DX ^ 2 / 2
  CRY = V * DT / DY: PEY = V * DY / KDY: LY = KDY * DT / DY ^ 2 / 2
  PRINT "CRX = "; CRX; "PEX = "; PEX; " LX="; LX
  PRINT "CRY = "; CRY; "PEY = "; PEY; " LY="; LY

  A1 = CRX ^ 2 * (3 - 2 * CRX): A2 = 1 - A1
  A3 = CRX ^ 2 * (1 - CRX) * DX: A4 = -CRX * (1 - CRX) ^ 2 * DX
  B1 = A2 * CRX * (CRX - 1) / DX: B2 = -B1
  B3 = CRX * (3 * CRX - 2): B4 = (1 - CRX) * (1 - 3 * CRX)

  C1 = CRY ^ 2 * (3 - 2 * CRY): C2 = 1 - C1
  C3 = CRY ^ 2 * (1 - CRY) * DY: C4 = -CRY * (1 - CRY) ^ 2 * DY
  D1 = C2 * CRY * (CRY - 1) / DY: D2 = -D1
  D3 = CRY * (3 * CRY - 2): D4 = (1 - CRY) * (1 - 3 * CRY)

  OPEN "CANALHER.DAT" FOR OUTPUT AS #1
  PRINT #1, "CRX = "; CRX; "PEX = "; PEX; " LX="; LX
  PRINT #1, "CRY = "; CRY; "PEY = "; PEY; " LY="; LY

  DEF FNXA (CON, CONS, COND, CONDS) = A1*CON+A2*CONS+A3*COND+A4*CONDS
  DEF FNXB (CON, CONS, COND, CONDS) = B1*CON+B2*CONS+B3*COND+B4*CONDS

  DEF FNYA (CON, CONS, COND, CONDS) = C1*CON+C2*CONS+C3*COND+C4*CONDS
  DEF FNYB (CON, CONS, COND, CONDS) = D1*CON+D2*CONS+D3*COND+D4*CONDS

```

```

110 FOR K = 1 TO NT
  C(0, NNX, NNY) = CONDES
  TT = 0: CONT = CONT + 1: PRINT "CONT = "; CONT
  PRINT #1, CONT * DT

  FOR I = 1 TO NX
    FOR J = 1 TO NY
      CON = C(0,I-1,J-1): CONS = C(0,I-1,J): COND = CY(0,I-1,J-1): CONDS = CY(0,I-1,J)
      CK = FNYA(CON, CONS, COND, CONDS)
      CON = C(0,I,J-1): CONS = C(0,I,J): COND = CY(0,I,J-1): CONDS = CY(0,I,J)
      CM = FNYA(CON, CONS, COND, CONDS)
      CON = CX(0,I-1,J-1): CONS = CX(0,I-1,J): COND = CXY(0,I-1,J-1)
      CONDS = CXY(0,I-1,J)
      CXK = FNYA(CON, CONS, COND, CONDS)
      CON = CX(0,I,J-1): CONS = CX(0,I,J): COND = CXY(0,I,J-1): CONDS = CXY(0,I,J)
      CXM = FNYA(CON, CONS, COND, CONDS)
      CON = C(0,I-1,J): CONS = C(0,I,J): COND = CX(0,I-1,J): CONDS = CX(0,I,J)
      CL = FNXA(CON, CONS, COND, CONDS)
      CON = C(0,I-1,J-1): CONS = C(0,I,J-1): COND = CX(0,I-1,J-1): CONDS = CX(0,I,J-1)
      CN = FNXA(CON, CONS, COND, CONDS)
      CON = CY(0,I-1,J): CONS = CY(0,I,J): COND = CXY(0,I-1,J): CONDS = CXY(0,I,J)
      CYL = FNXA(CON, CONS, COND, CONDS)
      CON = CY(0,I-1,J-1): CONS = CY(0,I,J-1): COND = CXY(0,I-1,J-1)
      CONDS = CXY(0,I,J-1)
      CYN = FNXA(CON, CONS, COND, CONDS)
      CON = CK: CONS = CM: COND = CXK: CONDS = CXM
      C(1, I, J) = FNXA(CON, CONS, COND, CONDS): CX(1, I, J) = FNXB(CON, CONS,
      COND, CONDS)
      CON = CN: CONS = CL: COND = CYN: CONDS = CYL
      CY(1, I, J) = FNYB(CON, CONS, COND, CONDS)
    NEXT J
  NEXT I

```

\*\*\*\*\*INICIO CALCULO DIFUSION\*\*\*\*\*

```

130 TT = 1 + TT
  N = NY
  FOR I = 1 TO NY
    A(I, I) = 1 + 2 * LY
    A(I, I - 1) = -LY
    A(I, I + 1) = -LY
  NEXT I

  FOR J = 1 TO NX
    FOR I = 1 TO NY
      A(I, NY + 1) = LY * C(1, J, I + 1) + (1 - 2 * LY) * C(1, J, I) + LY * C(1, J, I - 1)
      IF I = 1 THEN A(I, NY + 1) = A(I, NY + 1) + LY * C(1, J, I + 1)
      IF I = NY THEN A(I, NY + 1) = A(I, NY + 1) + LY * C(1, J, I - 1)
    NEXT I
  NEXT J

```

CALL THOMAS

FOR I = 1 TO NY  
C(1, J, I) = D(I)  
NEXT I  
NEXT J

140 FOR J = 1 TO NX  
A(J, J) = (1 + 2 \* LX)  
A(J, J - 1) = -LX  
A(J, J + 1) = -LX  
NEXT J  
N = NX

FOR X = 1 TO NY  
FOR J = 1 TO NX  
A(J, NX + 1) = LX \* C(1, J + 1, X) + (1 - 2 \* LX) \* C(1, J, X) + LX \* C(1, J - 1, X)  
IF J = 1 THEN A(J, NX + 1) = A(J, NX + 1) + LX \* C(1, J + 1, X)  
NEXT J

CALL THOMAS

IF TT <> 1 THEN GOTO 143  
FOR J = 1 TO NX  
C(0, J, X) = D(J)  
NEXT J

143 IF TT <> 2 THEN GOTO 146  
FOR J = 1 TO NX  
CX(0, J, X) = D(J)  
NEXT J

146 IF TT <> 3 THEN GOTO 148  
FOR J = 1 TO NX  
CY(0, J, X) = D(J)  
NEXT J

148 NEXT X

IF TT <> 1 THEN GOTO 170  
FOR J = 1 TO NY  
FOR I = 1 TO NX  
C(0, NNX, NNY) = 1  
PRINT USING "#.##.", C(0, I, J);  
PRINT #1, USING " ##.###.", C(0, I, J);

NEXT I  
PRINT  
PRINT #1,  
NEXT J

170 IF TT = 3 THEN GOTO 200

FOR I = 1 TO NX

FOR J = 1 TO NY

IF TT = 1 THEN C(I, I, J) = CX(I, I, J)

IF TT = 2 THEN C(I, I, J) = CY(I, I, J)

NEXT J

NEXT I

GOTO 130

200 FOR I = 1 TO NX

FOR J = 1 TO NY

CXY(0,I,J) = (CX(0,I,J+1) - CX(0,I,J-1))/(2\*DY) + (CY(0,I+1,J) - CY(0,I-1,J))/(2\*DX)

NEXT J

NEXT I

C(0, NNX, NNY) = 1

NEXT K

CLOSE #1

END

SUB THOMAS

B(1) = A(1, 1): D(1) = A(1, N + 1)

FOR I = 2 TO N

R = A(I, I - 1) / B(I - 1)

B(I) = A(I, I) - R \* A(I - 1, I)

D(I) = A(I, N + 1) - R \* D(I - 1)

NEXT I

D(N) = D(N) / B(N)

FOR I = N - 1 TO 1 STEP -1

D(I) = (D(I) - A(I, I + 1) \* D(I + 1)) / B(I)

NEXT I

END SUB