

01183



**UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**FACULTAD DE INGENIERÍA**



**MODELACIÓN BIDIMENSIONAL DE FLUJO Y TRANSPORTE NO  
LINEALES EN MEDIOS POROSOS APLICANDO ELLAM**

**VÍCTOR MANUEL ARROYO CORREA**

**T E S I S**

PRESENTADA A LA DIVISION DE ESTUDIOS DE POSTGRADO DE LA

**FACULTAD DE INGENIERÍA  
DE LA  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

COMO REQUISISTO PARA OBTENER  
EL GRADO DE

**DOCTOR EN INGENIERÍA HIDRÁULICA**

CAMPUS MORELOS  
2005

m. 344681



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.

---

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en forma digital y en acceso al contenido de mi trabajo intelectual.

NOMBRE: VICTOR MANUEL  
ARROYO CORREA

FECHA: 17/05/2005

FIRMA: 

## Dedicatoria

Con agradecimiento y respeto, a mis padres Gabriel y Josefina.

A mi esposa Patricia; a mis hijos: José, Manuel y Guadalupe.

A mis hermanos

A mis amigos y compañeros

Al doctor, Álvaro A. Aldama Rodríguez, por dirigir y dar sustento a este trabajo.

A mis sinodales: Dr. Nahún H. García Villanueva, Dr. Francisco J. Aparicio Mijares, Dr. Carlos Fuentes Ruiz, Dra. Graciela Herrera Zamarrón, Dr. Felipe Arreguín Cortés y Dra. Joselina Espinoza Ayala, por su revisión y comentarios a este trabajo. Al Dr. Julio Sergio Santana por su apoyo en la traducción.

Al Instituto Mexicano de Tecnología del Agua y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por su apoyo económico.

---

## Resumen

Se presenta una metodología para aplicar el método euleriano-lagrangiano localizado adjunto (ELLAM) a las ecuaciones de flujo y transporte no lineal en un medio poroso. La aplicación se realiza a la ecuación de advección-difusión-reacción y a la ecuación del flujo del agua en un suelo (ecuación de Richards) en dos dimensiones.

La metodología consiste en aplicar previamente una técnica de linealización tipo Taylor-Fréchet. Esta linealización es básicamente una expansión alrededor de valores de la variable dependiente en un paso de tiempo previo, a lo largo de las líneas características. En esta expansión, los términos de segundo orden se desprecian, generándose un operador modificado lineal. Tal estrategia permite obtener una aproximación de segundo orden de precisión en el tiempo, independientemente si se emplea una técnica iterativa o no iterativa.

Un análisis de la propagación de propiedades numéricas para la ecuación de transporte lineal, muestra que ELLAM no tiene errores de fase lo cual hace que esta metodología solucione de forma muy precisa problemas fuertemente dominados por advección. También se comprueba que no existen diferencias apreciables en si se usa una función de peso constante o una de tipo lineal, lo cual permite que, en aras de la simplicidad se use preferentemente la primera para solucionar problemas con coeficientes variables, no lineales y en múltiples dimensiones. Esto se ilustra en detalle a través de los retratos de amplitud y de fase.

Con el fin de verificar las ventajas y desventajas de la metodología propuesta se realizan comparaciones de la técnica de linealización tipo Picard, con la técnica de linealización Taylor-Fréchet, para resolver la ecuación de advección difusión-reacción no lineal a través de ELLAM. La comparación se ilustra a través de varios ejemplos en donde uno de ellos es un sistema de dos ecuaciones que describen un proceso de biodegradación aerobia. Igualmente, para la ecuación de flujo se presentan varios ejemplos en donde se comprueba la ventaja de esta técnica con relación a las técnicas tradicionales de diferencias finitas y elemento finito lo que permite manejar incrementos en el espacio e intervalos relativamente más grandes, sin presentar problemas de resolución espacial y de convergencia. Esta metodología puede ser generalizada a dos o tres dimensiones incorporando cualquier tipo de frontera. Los resultados mostrados corresponden a la primera aplicación de ELLAM para resolver la ecuación de Richards, lo cual permite concluir que ELLAM se puede aplicar a la solución de problemas altamente no lineales, siempre y cuando la técnica de linealización sea apropiada.

---

## Abstract

A methodology to apply the Eulerian Lagrangian localized adjoint method (ELLAM) to the nonlinear equations for flow and transport in porous media is presented. The application is carried out, on both the advection-diffusion-reaction equation and the equation for the flow of water through soils (Richards equations) in two dimensions.

This methodology consists in first applying a Taylor-Frechet linearization technique, which is an expansion around the values of the dependent variable in a previous time-step, along the characteristics. In this expansion, the second order terms are considered as negligible, so that a modified linear operator is obtained. This strategy allows getting a second order approximation in time, no matter whether an iterative or a non iterative technique is used.

An analysis of the propagation of the numerical properties for the linear transport equation, shows that ELLAM does not have phase errors. Therefore, this methodology is adequate to solve in a precise manner advection dominated problems. Furthermore, it proves that there are not important differences between using a constant weight or a linear weight function. This, for the sake of simplicity, allows using the former to solve nonlinear multidimensional problems with variable coefficients. This is thoroughly illustrated through phase and amplitude portraits.

In order to evaluate the advantages and disadvantages of the proposed methodology, a set of comparisons between the Picard type linearization technique and the Taylor-Frechet linearization technique to solve the nonlinear advection-diffusion-reaction equation through ELLAM, is carried out. Several examples serve to illustrate these comparisons. One of them is a two equations system describing an aerobic biodegradation problem. The other examples have to do with the flow equation. Through these examples, the advantage of this technique over the traditional techniques based on the finite differences or finite element method, is clearly stated, since it allows the use of wider time and space steps without presenting convergence and spatial resolution problems. This methodology can be generalized to two and three dimensions with any boundary conditions. The shown solutions are the result of the first application of ELLAM to solve the Richards equation. This proves that ELLAM can be applied to solve high nonlinear problems, provided that the used linearization technique is appropriate.

---

# NOMENCLATURA

$B$	Integral de flujo en la frontera.
$c$	Concentración de soluto.
$\bar{c}$	Valor de $c$ en un paso de tiempo previo siguiendo o no las líneas características.
$\tilde{c}$	Función de corrección para $c$ .
$Cr = V\Delta t/\Delta x$	Número de Courant.
$D$	Tensor de coeficientes de difusión efectiva.
$dN(\bullet)$	Derivada de Fréchet de primer orden del operador $N(\cdot)$ .
$f$	Función que representa la pérdida o ganancia de masa.
$g, h$	Condición de frontera.
$i, j$	Subíndices espaciales para los nodos.
$k(c)$	Coefficiente de reacción de primer orden.
$\bar{k}'(c) = dk(c)/dc$	
$\bar{k}(c) = k(\bar{c})$	Aproximación a $k(c)$ .
$\tilde{k}(\bar{c}) = k(\bar{c}) + k'(\bar{c})\bar{c}$	
$M$	Número total de puntos de integración en el espacio.
$M_x$	Número de puntos de integración en $x$ .
$M_y$	Número de puntos de integración en $y$ .
$n$	Subíndice temporal.
$Nc = \text{INT}(Cr)$	Parte entera de $Cr$ .
$N(\bullet), \ell(\bullet)$	Operador diferencial.
$N^*(\bullet)$	Operador adjunto del operador $N(\bullet)$ .
$\tilde{N}(\cdot)$	Operador lineal asociado a $N(\bullet)$ .
$NS$	Número de subintervalos en los que se divide el espacio.
$NST$	Número de subintervalos en el intervalo de tiempo $\Delta t$ .
$NT$	Número de puntos de integración.

---

$P$	Punto.
$P'$	Movimiento advectivo de $P$ .
$Pe = V\Delta x/D$	Número de Péclet de la malla.
$\mathbf{q}$	Vector de densidad del flujo volumétrico o flujo de Darcy.
$\mathbf{q}_s$	Flujo de soluto.
$SSIP$	Puntos estratégicos de integración en el espacio.
$STIP$	Puntos estratégicos de integración en el tiempo.
$t, T$	Tiempo.
$t^*$	Tiempo de intersección en la frontera para una característica.
$t_m^*$	Punto de integración temporal.
$u(x, t)$	Variable incógnita en la ecuación de transporte.
$U_i^n$	Aproximación discreta a la variable $u(x, t)$ .
$U(x_k)$	Pesos de integración para la fórmula del trapecio.
$\mathbf{V}$	Campo de velocidades.
$w$	Función de peso arbitraria.
$W_{ij}(\bar{x}, t^{n+1})$	Función de peso aproximada en dos dimensiones.
$W_{ij}^x(x, y, t)$	Función de peso aproximada en la dirección $x$ .
$W_{ij}^y(x, y, t)$	Función de peso aproximada en la dirección $y$ .
$x^*$	Pie de la característica en $t^n$ .
$(x, y)$	Coordenada espacial.
$(x^*, y^*)$	Proyección de $(x, y)$ en $t^n$ .
$(\bar{x}, \bar{y})$	Proyección de $(x, y)$ en $t^{n+1}$ .
$z$	Eje de las profundidades orientada positivamente hacia abajo.
$\alpha = 1 - (Cr - Nc)$	
$\Delta x$	Incremento en la dirección $x$ .
$\Delta y$	Incremento en la dirección $y$ .
$\Delta z$	Incremento en la dirección $z$ .
$\Delta t$	Incremento temporal.
$\Omega$	Dominio espacial.
$\partial\Omega$	Frontera del dominio.
$\boldsymbol{\eta}(x, y)$	Vector unitario normal a $\partial\Omega$ .
$\psi$	Presión del agua en el suelo (expresada en altura de columna de agua)
$\Psi$	Valor de $\psi$ en un paso de tiempo previo siguiendo o no las líneas características.
$\Psi$	Función de corrección para $\psi$ .
$\theta(\psi)$	Contenido volumétrico de agua en el suelo.
$\theta$	Factor de peso $0 \leq \theta \leq 1$ .
$K(\psi)$	Conductividad hidráulica.
$K'(\psi) = dK(\psi) / d\psi$	

$$\bar{K} = K'(\psi) \left( 1 + \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)$$

$S(\psi), C(\psi) = -\partial\theta / \partial\psi$  Contenido específico de humedad.

$$S'(\psi) = dS(\psi) / d\psi$$

$$\bar{S} = S'(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$\Gamma$  Término de adición o consumo de masa en el sistema.

$\rho = D\Delta t / \Delta x^2$  Número de dispersión.

$\kappa = k\Delta t$  Número adimensional para la reacción.

$$\gamma = (\exp(\kappa) - 1 / \kappa)$$

$\Phi$  Término de adición o sustracción de soluto debido a Reacciones físico-químico-biológicas.

$\xi_{ij}$  Región correspondiente a la celda  $i, j$  en  $t^{n+1}$ .

$\xi_{ij}^*$  Proyección hacia atrás de  $\xi_{ij}$  en  $t^n$ .

$X(t^{n+1}; x, t)$  Línea característica para  $t^{n+1}$  desde  $(x, t)$ .

$\nabla x_i \equiv x_i - x_{i-1}$  Operador en diferencias hacia atrás.

$\Delta x_i \equiv x_{i+1} - x_i$  Operador en diferencias hacia adelante.

$[x_{i-1} - x_{i-1}]$  Celda básica de integración para la función de peso lineal.

$[x_{i-(1/2)} - x_{i+(1/2)}]$  Celda básica de integración para la función de peso constante.

$$\overline{\Delta x_i} = \Delta x_i / NS$$

---

## ÍNDICE

Agradecimientos	ii
Resumen	iv
Abstract	v
Nomenclatura	vi
Índice	ix
Lista de figuras	xiii
Cuadro de ejemplos	xviii
Introducción	1
Referencias	12
<b>Capítulo 1 ESTADO DEL ARTE Y JUSTIFICACIÓN</b>	<b>15</b>
Referencias	18
<b>Capítulo 2 MARCO TEÓRICO</b>	<b>20</b>
Introducción	20
Escalas de estudio	21
Modelos deterministas mecanicistas	24
Modelación física	24
Flujo del agua	24
Transporte de solutos	25
Modelación química	26
Modelos de adsorción-desorción	26
Ventajas e inconvenientes	28
Modelos deterministas funcionales	29
Los modelos continuos	29
Los modelos discretos	29

	Ventajas e inconvenientes	30
	Modelos Estocásticos	30
	Modelos estocásticos mecanicistas	30
	Funciones de transferencia	32
	Resumen	32
	Referencias	35
<b>Capítulo 3</b>	<b>DESCRIPCION DE ELLAM</b>	<b>38</b>
	Introducción	38
	ELLAM en una dimensión	39
	Planteamiento del problema	39
	Formulación ELLAM	40
	Elección de la función de peso y líneas características	42
	Evaluación de las integrales	50
	Características que no cruzan las fronteras	53
	Características que cruzan las fronteras	57
	Prueba de conservación de masa	70
	Evaluación de la integral en el tiempo $t^n$	71
	FVELLAM	80
	Evaluación de las integrales	84
	Evaluación de la integral de flujo de frontera	86
	Prueba de conservación de masa	94
	Proyección de líneas características y puntos de integración	96
	Ejemplos de aplicación 1D	98
	ELLAM en dos dimensiones	106
	Planteamiento del problema	106
	Formulación ELLAM	106
	Elección de la función de peso y líneas características	111
	Evaluación de las integrales	111
	Integral en el tiempo $t^{n+1}$	112
	Integrales del término difusivo	116
	Integral en el tiempo $t^n$	116
	Evaluación de la integral de flujo de frontera	119
	Prueba de conservación de masa	126
	Proyección de líneas características y puntos de integración	127
	Estructura de la matriz	127
	Ejemplos de aplicación 2D	128
	Resumen	134
	Referencias	135
<b>Capítulo 4</b>	<b>LINEALIZACIÓN DE LA ECUACION DE FLUJO Y TRANSPORTE</b>	<b>137</b>
	Introducción	137

	Ecuación de transporte reactivo no lineal en una dimensión	138
	Planteamiento del problema	138
	Técnica de linealización tipo Picard	139
	Expansión de Taylor-Fréchet	140
	Ecuación de transporte reactivo no lineal en dos dimensiones	141
	Planteamiento del problema	141
	Técnica de linealización tipo Picard	142
	Expansión de Taylor-Fréchet	142
	Ecuación de Richards en una dimensión	143
	Planteamiento del problema	143
	Técnica de linealización tipo Picard	144
	Expansión de Taylor-Fréchet	144
	Ecuación de Richards en dos dimensiones	147
	Planteamiento del problema	147
	Técnica de linealización tipo Picard	148
	Expansión de Taylor-Fréchet	149
	Resumen	151
	Referencias	152
<b>Capítulo 5</b>	<b>PROPAGACIÓN DE PROPIEDADES DE ELLAM</b>	<b>153</b>
	Introducción	153
	Planteamiento del problema	154
	Solución vía ELLAM	155
	Para la función de peso lineal	155
	Para la función de peso constante	155
	Representación en series de Fourier	156
	Representación de la solución analítica	156
	Representación de la solución numérica	157
	Función de peso lineal	158
	Función de peso constante	158
	Estabilidad	159
	Precisión	159
	Pruebas numéricas	160
	Resumen	166
	Referencias	167
<b>Capítulo 6</b>	<b>SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE Y FLUJO NO LINEALES VÍA ELLAM</b>	<b>169</b>
	Introducción	169
	Ecuación de transporte reactivo no lineal	170
	En una dimensión	170
	Linealización tipo Picard	170
	Linealización tipo Taylor-Fréchet	170

Ejemplos de aplicación	175
Conclusiones	181
En dos dimensiones	182
Linealización tipo Picard	182
Linealización tipo Taylor-Fréchet	183
Ejemplos de aplicación	184
Conclusiones	189
Ecuación de Richards	190
En una dimensión	190
Linealización tipo Picard	190
Linealización tipo Taylor-Fréchet	190
Ejemplos de aplicación	195
Conclusiones	205
En dos dimensiones	206
Linealización tipo Picard	206
Linealización tipo Taylor-Fréchet	210
Ejemplos de aplicación	217
Conclusiones	234
Referencias	234
Capítulo 7 <b>CONCLUSIONES</b>	<b>236</b>
Anexo A: Cálculo de las integrales de la ecuación 3.100.	240
Anexo B: Cálculo de los flujos parciales de frontera $B1$ y $B2$ .	267
Anexo C: Cálculo de las integrales de la ecuación 6.28.	270
Anexo D: Cálculo de las integrales de la ecuación 6.46.	275
Anexo E: Cálculo de las integrales de la ecuación 6.65.	285
Anexo F: Modelos conceptuales para la biodegradación.	297
Anexo G: Se comprueba que $N^*(w_i^{n+1}) = O(\Delta t^2)$ .	319
Anexo H: Influencia de la conductividad hidráulica.	322
Anexo I: Programa <i>ellam2dx</i> .	326

---

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1.</b> Mecanismos de Flujo y transporte en un medio poroso	2
<b>Figura 2.</b> Flujo del agua desde la atmósfera hacia el suelo	3
<b>Figura 3.</b> Ilustración de la dispersión hidrodinámica	5
<b>Figura 4.</b> Ilustración de la dispersión mecánica en un medio poroso Dos partículas no guardan la misma distancia relativa.	5
<b>Figura 5.</b> Problemas de difusión numérica y oscilaciones no físicas en las metodologías numéricas	7
<b>Figura 6.</b> Los procesos químicos y biológicos influyen fuertemente en procesos de advección y difusión	8
<b>Figura 3.1.</b> División del dominio $(x,t)$ en subintervalos	41
<b>Figura 3.2.</b> Intervalos espaciales y líneas características.	44
<b>Figura 3.3.</b> Geometría de la función de peso lineal ( $k \neq 0$ )	46
<b>Figura 3.4.</b> Geometría de la función de peso constante ( $k \neq 0$ )	47
<b>Figura 3.5.</b> Geometría de la función de peso lineal ( $k=0$ )	48
<b>Figura 3.6.</b> Geometría de la función de peso constante ( $k=0$ )	49
<b>Figura 3.7.</b> Geometría ELLAM para $V$ y $\Delta x$ constante y un $Cr$ Arbitrario	52
<b>Figura 3.8.</b> Geometría ELLAM para $1 \leq Cr < 2$	57
<b>Figura 3.9.</b> Geometría para $w_0^{i+1}(x,t)$	58
<b>Figura 3.10.</b> Geometría para $w_1^{i+1}(x,t)$	60
<b>Figura 3.11.</b> Geometría para $w_2^{i+1}(x,t)$	61
<b>Figura 3.12.</b> Geometría para $w_E^{i+1}(x,t)$	63

<b>Figura 3.13.</b> Geometría para $w_{E+1}^{i+1}(x,t)$	<b>64</b>
<b>Figura 3.14.</b> Geometría para $w_{E+2}^{i+1}(x,t)$	<b>65</b>
<b>Figura. 3.15.</b> Estructura general de la matriz para ELLAM	<b>69</b>
<b>Figura 3.16.</b> Equivalencia entre líneas características	<b>70</b>
<b>Figura 3.17.</b> Puntos de integración y subintervalos para las celdas básicas de integración	<b>73</b>
<b>Figura 3.18a.</b> Función de aproximación en $t^{n+1}$ en nodos internos para una maya uniforme y $NS=2, 4, 8$	<b>76</b>
<b>Figura 3.18b.</b> Función de aproximación en $t^{n+1}$ en la frontera de entrada para una maya uniforme y $NS=2, 4, 8$	<b>77</b>
<b>Figura 3.19a.</b> Función de aproximación en nodos internos en $t^{n+1}$ para una malla no uniforme y $NS=2,4,8$	<b>78</b>
<b>Figura 3.19b.</b> Función de aproximación en $t^{n+1}$ en la frontera de entrada para una maya no uniforme y $NS=2, 4, 8$	<b>79</b>
<b>Figura 3.20.</b> Líneas características interceptando las fronteras: a) desde el tiempo $t^{n+1}$ (hacia atrás) la frontera de entrada; b) interceptando hacia delante (desde $t^n$ ) la frontera de salida; c) interceptando hacia atrás (desde $t^{n+1}$ ) para determinar $x_{L+1/2}^*$	<b>83</b>
<b>Figura 3.21.</b> $U(x,t)$ es lineal entre dos nodos consecutivos. Se muestra la aplicación de la regla del trapecio para $NS=2$ en una celda básica de integración	<b>85</b>
<b>Figura 3.22.</b> División del dominio espacial en FVELLAM	<b>85</b>
<b>Figura 3.23.</b> División del intervalo $\Delta t$ en un número finito de subintervalos $NST$ . Se muestra el caso para $NST=4$	<b>87</b>
<b>Figura 3.24.</b> Geometría FVELLAM para el caso de cuatro celdas de integración	<b>94</b>
<b>Figura 3.25.</b> División del intervalo $\Delta t$ en un número finito de subintervalos para la ecuación (3.81)	<b>97</b>
<b>Figura 3.26a.</b> Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.1	<b>99</b>
<b>Figura 3.26b.</b> Comparación de diferencias finitas con la solución analítica para el ejemplo 3.1	<b>99</b>
<b>Figura 3.26c.</b> Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.1 (convección pura).	<b>100</b>
<b>Figura 3.27a.</b> Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.2 ( $Cr=1$ )	<b>102</b>
<b>Figura 3.27b.</b> Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.2 ( $Cr=1.5$ )	<b>102</b>
<b>Figura 3.27c.</b> Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.2 ( $Cr=1.76$ )	<b>103</b>
<b>Figura 3.28a.</b> Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.3 ( $Cr=1.0$ )	<b>104</b>
<b>Figura 3.28b.</b> Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.3 ( $Cr=1.5$ )	<b>104</b>

<b>Figura 3.28c.</b> Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.3 ( $Cr=1.76$ )	<b>105</b>
<b>Figura 3.29.</b> Geometría ELLAM en dos dimensiones	<b>109</b>
<b>Figura 3.30.</b> Nomenclatura de los nodos para ELLAM en dos dimensiones	<b>113</b>
<b>Figura 3.31.</b> Localización de los puntos de integración en una celda básica de integración en función de $NS$ . Los círculos indican los puntos para $NS=2$ , y los triángulos los puntos agregados para $NS=4$	<b>117</b>
<b>Figura 3.32a.</b> La región $\Omega_e$ recibe masa desde la frontera de entrada localizada en $x=x_{1/2}$ , $y=(y_{j-1/2}, y_{j+1/2})$ .	<b>121</b>
<b>Figura 3.32b.</b> La región $\Omega_s$ contribuye a la salida de masa en la frontera de salida localizada en $y= y_{m+1/2}$ , $x=(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$	<b>123</b>
<b>Figura 3.33.</b> Estructura de la matriz de coeficientes indeterminados para ELLAM en dos dimensiones considerando fronteras de primer tipo	<b>128</b>
<b>Figura 3.34.</b> Solución analítica para el ejemplo 3.4. Vista en planta	<b>130</b>
<b>Figura 3.35.</b> Solución analítica para el ejemplo 3.4. Vista en Isométrico	<b>130</b>
<b>Figura 3.36.</b> Solución ELLAM para el ejemplo 3.4. Vista en planta	<b>131</b>
<b>Figura 3.37.</b> Solución ELLAM para el ejemplo 3.4. Vista en Isométrico.	<b>131</b>
<b>Figura 3.38.</b> Comparación entre solución analítica y la solución ELLAM para el ejemplo 3.4, para un corte que pasa por $(-0.25,0)$	<b>132</b>
<b>Figura 3.39.</b> Solución en elemento finito tipo Galerkin para el ejemplo 3.4. Vista en planta (Wang <i>et al.</i> , 1996).	<b>133</b>
<b>Figura 3.40.</b> Solución en elemento finito tipo Petrov-Galerkin para el ejemplo 3.4. Vista en planta (Wang <i>et al.</i> , 1996).	<b>133</b>
<b>Figura 5.1.</b> Condiciones iniciales para el problema del escalón	<b>161</b>
<b>Figura 5.2.</b> Caso conservativo: $\kappa = 0, \rho = 5.33 \times 10^{-5}, Cr = 5, Pe = 93750$	<b>162</b>
<b>Figura 5.3.</b> Caso no conservativo: $\kappa = 0.0625, \rho = 0.8, Cr = 5, Pe = 6.25$	<b>164</b>
<b>Figura 5.4.</b> Caso no conservativo con funciones periódicas.	<b>165</b>
<b>Figura 6.1a.</b> Comparación entre una solución en diferencias finitas (FD) usando una malla fina y la solución Taylor-Fréchet ELLAM (ELLAM). Los números cerca de las curvas indican valores del tiempo $t$	<b>175</b>
<b>Figura 6.2a.</b> Resultados del ejemplo 6.2 para Picard ELLAM	<b>176</b>
<b>Figura 6.2b.</b> Resultados del ejemplo 6.2 para Taylor-Fréchet ELLAM	<b>177</b>
<b>Figura 6.3a.</b> Resultados del ejemplo 6.3 para Picard ELLAM	<b>178</b>
<b>Figura 6.3b.</b> Resultados del ejemplo 6.3 para Taylor-Fréchet ELLAM	<b>178</b>
<b>Figura 6.4.</b> Resultados del ejemplo 6.4 para Taylor-Fréchet ELLAM	<b>180</b>
<b>Figura 6.5.</b> Condiciones iniciales y de frontera para el ejemplo 6.5.	<b>184</b>
<b>Figura 6.6.</b> Resultados del ejemplo 6.5 para $t=25$ , vista en planta.	<b>185</b>
<b>Figura 6.7.</b> Resultados del ejemplo 6.5 para $t=50$ , vista en planta.	<b>186</b>
<b>Figura 6.8.</b> Resultados del ejemplo 6.5 para $t=50$ , vista en isométrico.	<b>186</b>

<b>Figura 6.9.</b> Comparación de resultados del ejemplo 6.5 con elemento finito para $t=50$ .	<b>187</b>
<b>Figura 6.10.</b> Comparación de resultados del ejemplo 6.6 con diferencias finitas para $t=50$ .	<b>188</b>
<b>Figura 6.11.</b> Comparación entre resultados Taylor-Fréchet ELLAM y diferencias finitas.	<b>196</b>
<b>Figura 6.12.</b> Comparación entre resultados Taylor-Fréchet ELLAM, diferencias finitas y elemento finito.	<b>197</b>
<b>Figura 6.13.</b> Resultados del ejemplo 6.9 sin iteraciones.	<b>199</b>
<b>Figura 6.14.</b> Resultados del ejemplo 6.9 con una iteración.	<b>199</b>
<b>Figura 6.15.</b> Resultados del ejemplo 6.9 con cinco iteraciones.	<b>200</b>
<b>Figura 6.16.</b> Resultados del ejemplo 6.9 con diez raciones.	<b>200</b>
<b>Figura 6.17.</b> Resultados del ejemplo 6.10 con una iteración.	<b>202</b>
<b>Figura 6.18.</b> Resultados del ejemplo 6.10 con cinco iteraciones.	<b>202</b>
<b>Figura 6.19.</b> Resultados del ejemplo 6.10 con diez iteraciones.	<b>203</b>
<b>Figura 6.20.</b> Resultados del ejemplo 6.10 con el mismo grado de aproximación entre DF, Hydrus y T-F ELLAM.	<b>204</b>
<b>Figura 6.21.</b> Comparación entre resultados Taylor-Fréchet ELLAM, diferencias finitas y elemento finito del ejemplo 6.11.	<b>217</b>
<b>Figura 6.22.</b> Condiciones iniciales y de frontera del ejemplo 6.12.	<b>219</b>
<b>Figura 6.23.</b> Elección del incremento temporal del ejemplo 6.12.	<b>220</b>
<b>Figura 6.24.</b> Elección del incremento espacial en el ejemplo 6.12.	<b>221</b>
<b>Figura 6.25.</b> Solución "exacta" del ejemplo 6.12 para $t=30$ h.	<b>222</b>
<b>Figura 6.26.</b> Solución "exacta" del ejemplo 6.12 para $t=500$ h	<b>222</b>
<b>Figura 6.27.</b> Solución "exacta" del ejemplo 6.12 para $t=1000$ h.	<b>223</b>
<b>Figura 6.28.</b> Solución del ejemplo 6.12 con T-F ELLAM y dos iteraciones.	<b>223</b>
<b>Figura 6.29.</b> Solución del ejemplo 6.12 con Picard ELLAM y dos iteraciones.	<b>224</b>
<b>Figura 6.30.</b> Solución del ejemplo 6.12 con Elemento finito y dos iteraciones.	<b>224</b>
<b>Figura 6.31.</b> Comparación de resultados del ejemplo 6.12 para un corte vertical en $x=2.5$ .	<b>225</b>
<b>Figura 6.32.</b> Comparación de resultados del ejemplo 6.12 para un corte horizontal en $z=5$ .	<b>225</b>
<b>Figura 6.33.</b> Condiciones de frontera del ejemplo 6.13.	<b>227</b>
<b>Figura 6.34.</b> Elección del incremento temporal del ejemplo 6.13.	<b>227</b>
<b>Figura 6.35.</b> Elección del incremento espacial del ejemplo 6.13.	<b>228</b>
<b>Figura 6.36.</b> Solución "exacta" del ejemplo 6.13 para $t=30$ min.	<b>229</b>
<b>Figura 6.37.</b> Solución "exacta" del ejemplo 6.13 para $t=600$ min.	<b>229</b>
<b>Figura 6.38.</b> Solución "exacta" del ejemplo 6.13 para $t=1000$ min.	<b>230</b>
<b>Figura 6.39.</b> Solución del ejemplo 6.13 con diferencias finitas y dos iteraciones.	<b>231</b>
<b>Figura 6.40.</b> Solución del ejemplo 6.13 con T-F ELLAM y dos iteraciones.	<b>231</b>

<b>Figura 6.41.</b> Solución del ejemplo 6.13 con Picard ELLAM y dos iteraciones.	<b>232</b>
<b>Figura 6.42.</b> Comparación de resultados del ejemplo 6.13 para un corte horizontal en $z=65$ .	<b>233</b>
<b>Figura 6.43.</b> Comparación de resultados del ejemplo 6.13 para un corte vertical en $x=0$ .	<b>233</b>

## CUADRO DE EJEMPLOS

Ejemplo	Tipo de problema	Parámetros	Resultados
3.1 (Pág. 98)	Transporte	$V=10$ $D=0.1, 0$ $K=0$	ELLAM da resultados exactos para $Pe > 2$ . Los métodos tradicionales presentan difusión numérica.
3.2 y 3.3 (Pág. 101 y 103)	Transporte	$V=1$ $D=0.20$ $K=0.01, 0$	ELLAM se aplica para cualquier $Cr$ entero o fraccionario. La función de peso captura la dinámica del problema.
3.4 (Pág. 128)	Transporte	$V$ es variable $D=0.0001$ $K=0$	Aplicación de ELLAM en dos dimensiones. ELLAM no presenta oscilaciones ni difusión numérica como lo presenta una solución con elemento finito.
5.1, 5.2 y 5.3 (Pág. 160, 163 y 165)	Transporte	$V=1$ $D=2 \times 10^{-6}$ $K=0$	ELLAM no presenta errores de fase para problema dominados por advección y cualquier tipo de frontera independientemente de la función de peso usada.
6.1, 6.2 y 6.3 (Pág. 175, 176 y 177)	Transporte	$V=1$ $D=0.2$ $K$ variable	Se aplica ELLAM a un problema no lineal. Además, la técnica de linealización Taylor-Fréchet (técnica propuesta) presenta ventajas sobre la técnica tipo Picard. Ésta última presenta problemas de convergencia.
6.4 (Pág. 179)	Transporte	$V=1$ $D=0.2$ $K$ variable	Se aplica ELLAM empleando la linealización Taylor-Fréchet para un problema de biodegradación en donde se resuelve un sistema acoplado de ecuaciones de transporte no lineales.
6.5 y 6.6 (Pág. 184)	Transporte	$V_x=1, V_y=0$ $D=0$ $K=0$	En problemas de advección pura, la metodología propuesta (T-F ELLAM) permite obtener soluciones libre de oscilaciones y difusión numérica respecto a técnicas como elemento finito, aun cuando éstas manejan una malla temporal cien mil veces menor.

Ejemplo	Tipo de problema	Parámetros	Resultados
6.6 (Pág.188)	Transporte	$V_x=1, V_y=0$ $D=0$ $K$ variable	En problemas no lineales los resultados obtenidos con T-F ELLAM no presenta oscilaciones ni difusión numérica, al contrario de lo que ocurre con una solución con diferencias finitas la cual emplea una malla en el espacio diez veces menor y en el tiempo 10 mil veces menor.
6.7 (Pág.188)	Flujo	$V$ variable $D$ variable $K$ variable	Se aplica la metodología propuesta para la solución de un problema altamente no lineal. Los resultados obtenidos con ésta metodología son convergentes, mientras que los obtenidos con una solución en diferencias finitas presentan oscilaciones. La metodología propuesta permite manejar incrementos en el tiempo y en el espacio 17 veces más grandes.
6.8 (Pág.197)	Flujo	$V$ variable $D$ variable $K$ variable	Los métodos tradicionales como diferencias finitas y elemento finito presentan problemas de inconsistencia aun cuando se usan mallas más finas respecto a las usadas con T-F ELLAM. Los resultados muestran que esto es muy notorio en un proceso de redistribución que tiende al equilibrio.
6.9 y 6.10 (Pág.198 y 201)	Flujo	$V$ variable $D$ variable $K$ variable	La metodología propuesta con un número bajo de iteraciones (incluso sin iterar) converge satisfactoriamente a los resultados. Diferencias finitas y elemento finito presentan problemas de convergencia.
6.11, 6.12, y 6.13 (Pág. 217, 218, y 226)	Flujo	$V$ variable $D$ variable $K$ variable	La metodología propuesta permite obtener resultados muy satisfactorios para diferentes condiciones de frontera y condiciones iniciales extremas. Los resultados muestran que para dos iteraciones la metodología propuesta permite usar incrementos en el tiempo cien veces mayores.

---

## INTRODUCCIÓN

El flujo y transporte en medios porosos es un tema importante en muchas ramas de la ciencia y de la ingeniería; por ejemplo en hidrología del agua subterránea, ingeniería petrolera, ciencia del suelo, mecánica de suelos, ingeniería química e ingeniería agrícola, por mencionar algunas. Dichas disciplinas consideran al suelo como el medio poroso de más interés desde su representación ideal en columnas homogéneas de arena, hasta su real complejidad conteniendo heterogeneidades (figura 1). Atendiendo a esto, se puede definir un medio poroso como una porción de espacio ocupado por materia en diferentes fases (sólida, líquida, y gaseosa), siendo al menos una de ellas persistente y posiblemente deformable, llamada la fase sólida o matriz sólida. El espacio que no es ocupado por la matriz sólida es llamado espacio vacío (o poroso). Desde el punto de vista del flujo de fluidos sólo es de interés el espacio de poros interconectados, por lo cual es llamado espacio poroso efectivo.

En este trabajo, el término "flujo" se referirá al movimiento de la fase líquida (comúnmente agua), mientras que el término "transporte" se referirá a la migración de compuestos químicos.

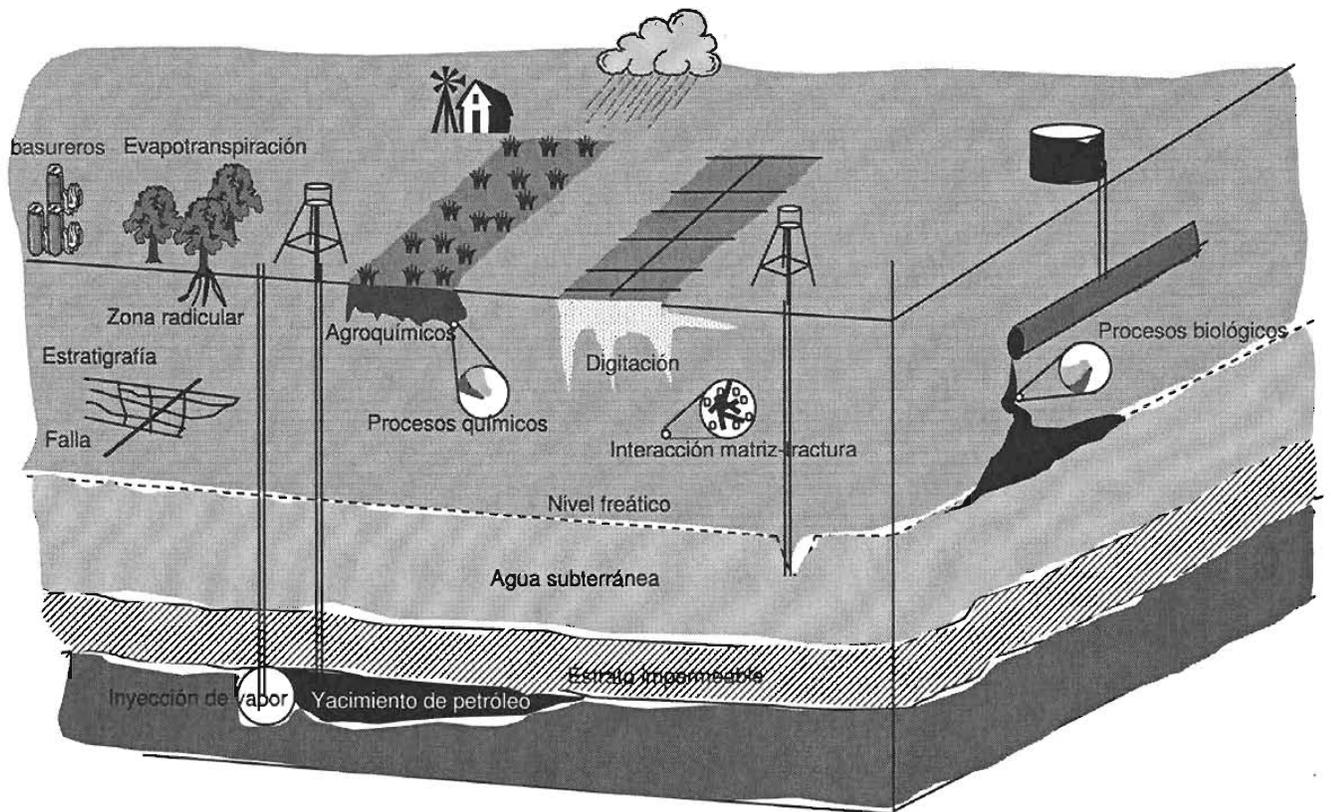


Figura 1. Mecanismos de flujo y transporte en un medio poroso.

Los compuestos químicos pueden moverse en un medio poroso en cualquiera de las fases, ya sea por advección (como componentes disueltos), o moverse independientemente fuera del patrón de flujo (por ejemplo, por difusión molecular).

La principal fuente de agua en el suelo es la atmósfera que da origen al fenómeno de precipitación, por medio del cual el agua llega a la superficie del suelo y se introduce en él mediante el proceso de infiltración. El agua en la matriz del suelo se mueve hacia abajo por la acción de la gravedad (proceso de percolación). El agua pasa de la zona no saturada a la zona saturada a través del nivel freático (recarga). Este proceso se esquematiza en la figura 2. En su recorrido, el agua disuelve y transporta componentes que interaccionan unos con otros mediante complejos fenómenos físicos, químicos y biológicos (Nielsen *et al.*, 1986; Looney y Falta, 2000). Para describir o modelar el flujo y los procesos de transporte en un medio poroso como es el suelo, se requiere de modelos matemáticos o ecuaciones que describan en forma cuantitativa estos fenómenos.

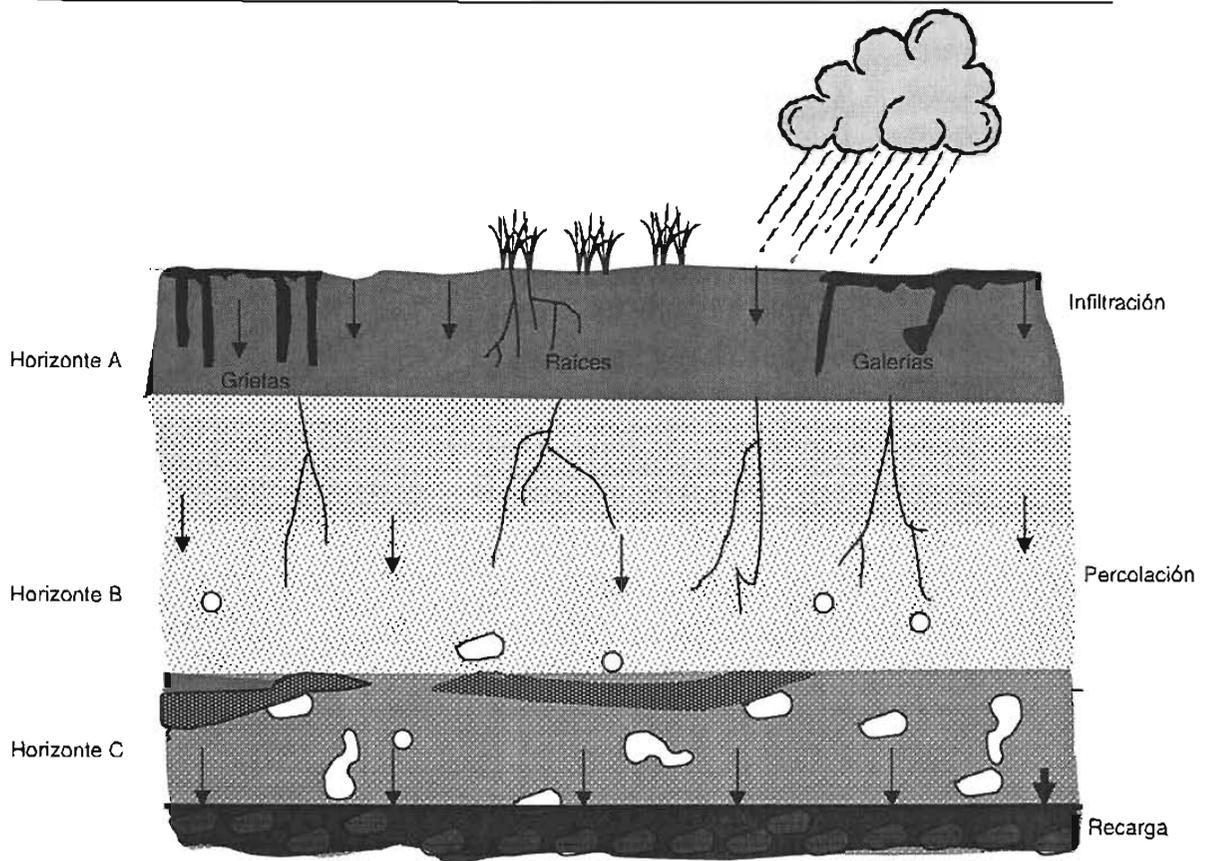


Figura 2. Flujo del agua desde la atmósfera hacia el suelo.

Los procesos físicos asociados con el flujo y transporte en medios porosos están gobernados por las leyes de conservación. Conservación de masa, cantidad de movimiento y energía gobiernan el comportamiento del flujo de fluidos, el transporte químico y la transferencia de calor en un medio poroso. A nivel del poro, estas leyes físicas están bien definidas. Sin embargo, en la práctica es más interesante conocer el comportamiento promedio de un volumen representativo. Debido a la complejidad geométrica de los poros, es muy difícil establecer un comportamiento a nivel macroscópico desde el nivel del poro. Por ejemplo, si se intenta aplicar directamente las ecuaciones de Navier-Stokes para solucionar el flujo a través de un conjunto de poros, se tendrán grandes dificultades. Estas incluyen la geometría, fenómenos físicos complejos e interacciones químicas entre el fluido y el sólido, y entre el fluido y el poro, y quizá mecanismos que hasta la fecha no han sido descritos apropiadamente.

A escala macroscópica, se usa comúnmente la teoría del continuo. En ella los procesos de flujo y transporte quedan descritos a través de leyes macroscópicas aplicadas a un volumen representativo del medio poroso (REV, por sus siglas en inglés), de dimensiones relativamente grandes

comparada con el tamaño de los poros (Bear, 1972, 1979). Las leyes físicas del flujo y transporte en un medio poroso a escala macroscópica quedan representadas matemáticamente a través de un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales en donde la estructura básica está relacionada con los mecanismos de advección y difusión.

El estudio de los fenómenos de advección-difusión es importante en muchos campos de la ciencia y la ingeniería (Bear, 1972, 1979; Hillel, 1980a,b; Nielsen *et al.*, 1986; LeVeque, 1992; Chung *et al.*, 1993). La ecuación que representa estos procesos está sujeta a condiciones de frontera apropiadas y se caracteriza por un término advectivo (hiperbólico no disipativo) y un componente difusivo (parabólico disipativo) a saber:

$$N(f) \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}f) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla f) = r(\mathbf{x}, t), (\mathbf{x}, t) \in (\Omega_{\mathbf{x}}, T) \quad (1)$$

donde  $N(\bullet)$  es un operador diferencial que puede ser lineal o no lineal;  $f$  es la variable incógnita del fenómeno;  $\mathbf{V}$  es el vector de flujo o velocidades características;  $r(\mathbf{x}, t)$  es una función que involucra términos fuente o sumidero;  $\mathbf{x}$  es un vector que define el espacio;  $t$  es el tiempo;  $\nabla$  es el operador diferencial *nabla*; y  $\mathbf{D}$  es el coeficiente de dispersión (llamado también coeficiente de dispersión hidrodinámica). Para aclarar algunas confusiones sobre este coeficiente, respecto a que a veces se confunde con el coeficiente de difusión, a continuación se da una ampliación a fin de aclarar esta ambigüedad.

El coeficiente de dispersión incorpora varios procesos de mezclado y comunmente se expresa por:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_h + \mathbf{D}_m + \mathbf{D}_c \quad (2)$$

donde  $\mathbf{D}_h$  es el coeficiente de dispersión hidrodinámica,  $\mathbf{D}_m$  es el coeficiente de dispersión mecánica, y  $\mathbf{D}_c$  el coeficiente de difusión molecular (difusión).

La dispersión hidrodinámica (figura 3) es un proceso de mezclado causado por la variación local de velocidades. Dentro de los poros del suelo la variación local de velocidades es desde cero en la frontera poro-partícula hasta un máximo cercano al centro.

La dispersión mecánica (figura 4) es el proceso de mezclado causado por el movimiento de un fluido alrededor de obstáculos. Las partículas de suelo forman un intrincado conjunto de canales que dispersan las sustancias químicas.

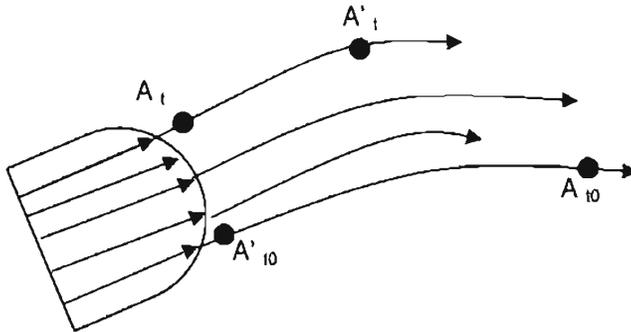


Figura 3. Ilustración de la dispersión hidrodinámica.

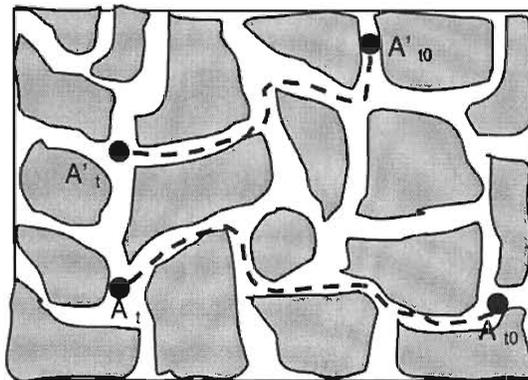


Figura 4. Ilustración de la dispersión mecánica en un medio poroso. Dos partículas no guardan la misma distancia relativa.

La difusión molecular es un proceso de mezclado causado por la presencia de un gradiente de concentraciones.

Cuando la concentración de una sustancia química es la misma en cualquier punto este proceso de mezclado es nulo. Por lo general en un medio poroso este proceso es mucho menor que los dos anteriores.

Se observa, en la ecuación (2) que si los coeficientes  $D_h$  y  $D_m$  son nulos se tendrá el caso en que el coeficiente de dispersión es igual al coeficiente de difusión. Esto ocurre por ejemplo en el fenómeno de difusión de azúcar en una taza con café en reposo.

Matemáticamente el coeficiente de dispersión se representa como un tensor de segundo orden (Bear, 1972, 1979):

$$D = \begin{vmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{vmatrix} \quad (3)$$

donde  $D_{xx}$  es el coeficiente de dispersión longitudinal, y  $D_{yy}$ , y  $D_{zz}$  son los coeficientes de dispersión transversal. A la vez, estos coeficientes se pueden expresar como el producto de un coeficiente de dispersividad y la velocidad promedio (Bear, 1972, 1979):

$$\begin{aligned} D_L &= D_{xx} = \alpha_L \bar{V} \\ D_{Ty} &= D_{yy} = \alpha_T \bar{V} \\ D_{Tz} &= D_{zz} = \alpha_T \bar{V} \end{aligned} \quad (4)$$

Regresando a la ecuación (1), esta ecuación es también llamada ecuación de transporte. Generalmente para aplicaciones prácticas no existen soluciones analíticas de esta ecuación por lo que se debe recurrir al uso de metodologías numéricas. El comportamiento de aproximaciones numéricas de esta ecuación se caracteriza principalmente a través de dos parámetros adimensionales: el número de Courant ( $Cr$ ), definido como  $Cr = V\Delta t / \Delta x$ , y el número de Péclet de la malla ( $Pe$ ),  $Pe = V\Delta x / D$ ; donde  $\Delta x$  y  $\Delta t$  son los incrementos espacial y temporal respectivamente.

Muchos fenómenos pueden representarse a través de ecuaciones de la forma (1). Por ejemplo, en la ciencia de la atmósfera, para describir el flujo de aerosoles y gases; en la ingeniería petrolera, para la descripción del flujo en la explotación de yacimientos; en ingeniería mecánica, para estudios de transferencia de calor; en hidrología, para el estudio de avenidas de inundación, y transporte de contaminantes en agua subterránea; en ingeniería hidráulica, para el flujo del agua en canales abiertos; en la ciencia del suelo, para describir el flujo del agua y transporte de contaminantes en la matriz del suelo; en remediación de suelos, para desarrollo de técnicas de remoción de contaminantes, etc. El peso relativo de las variables y parámetros descritos en la ecuación (1) puede diferir ampliamente en diferentes aplicaciones. Por ejemplo, en el contexto de flujo en medios porosos los fenómenos pueden estar influidos fuertemente por términos difusivos, como ocurre en procesos de percolación profunda, mientras que en procesos de explotación de acuíferos los términos advectivos son los predominantes.

Cuando la difusión es el proceso dominante, por lo general todas las metodologías numéricas funcionan bien. Sin embargo, cuando el fenómeno dominante es advectivo, la mayoría de los esquemas numéricos muestran oscilaciones no físicas y excesiva difusión numérica (comúnmente, cuando el número de Péclet de la malla es mayor a 2,

figura 5). Esto es corregido frecuentemente usando mallas extremadamente densas que incrementan mucho el tiempo de ejecución en computadora.

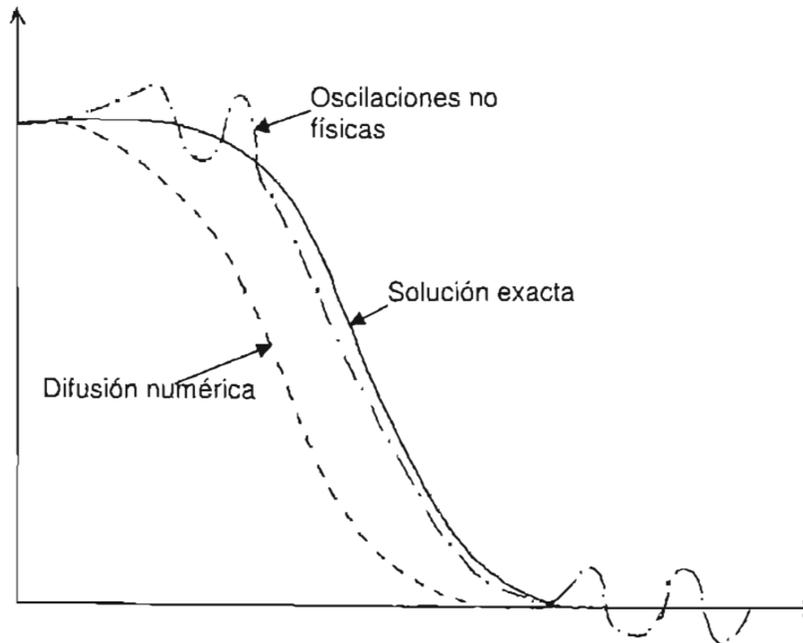


Figura 5. Problemas de difusión numérica y oscilaciones no físicas en las metodologías numéricas.

Muchos problemas de interés físico involucran no sólo procesos de advección-difusión, sino también procesos de reacción de carácter químico y biológico (Kindred y Celia, 1989; Ewing y Celia, s.f.) figura 6; que incrementan el grado de complejidad de la solución numérica de los procesos de transporte (por ejemplo, transporte de contaminantes orgánicos en un sistema agua-suelo); (Molz *et al.*, 1986). En general, en cualquier sistema en el que se requiera analizar el transporte de varias sustancias es necesario tener una ecuación del tipo advección-difusión (ecuación 1) por cada sustancia analizada, pero incluyendo un término de reacción que permita acoplarla con las correspondientes a los otros componentes. Esto obliga a resolver un sistema de ecuaciones de advección-difusión-reacción de manera simultánea. Este problema es particularmente interesante, ya que la presencia de oscilaciones no físicas en algún componente puede desestabilizar por completo la solución numérica del sistema acoplado.

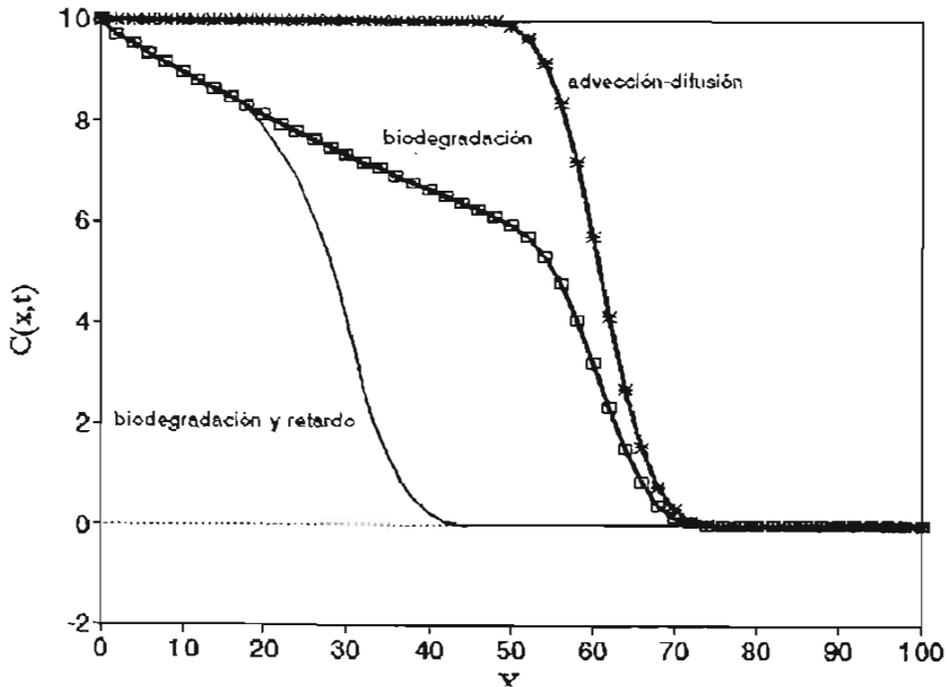


Figura 6. Los procesos químicos y biológicos influyen fuertemente en procesos de advección y difusión.

La búsqueda de formulaciones alternativas para abordar estos problemas es de gran importancia si se busca hacer eficaz la aplicación de técnicas numéricas a la solución de problemas de interés práctico. La clave para implementar metodologías numéricas que mejoren la eficiencia de los métodos numéricos es reconocer la naturaleza cambiante de la ecuación de advección-difusión-reacción (Celia *et al.*, 1989b). Los procesos dominados por difusión implican comportamientos definidos por una ecuación de tipo parabólico (de segundo orden), y los procesos dominados por advección implican comportamientos definidos por una ecuación de tipo hiperbólico (de primer orden), mientras que problemas dominados por reacción implican comportamientos definidos por una ecuación diferencial ordinaria de primer orden en el tiempo. Por lo tanto, no pueden esperarse soluciones aceptables de un método numérico que falla al acomodar estos comportamientos.

Desde el trabajo pionero de Allen y Southwell en 1954, donde se propone un esquema en diferencias centrado en el espacio para la ecuación de advección-difusión en un estado permanente, el desarrollo de metodologías para problemas de transporte ha desplegado una gran actividad mundial. A continuación se presenta una breve reseña de la bibliografía disponible sobre el tema.

Celia *et al.*, (1990), describen los métodos numéricos para problemas de transporte clasificados en dos grandes grupos o clases. El primero es referido como métodos espaciales óptimos (OSM's, por sus siglas en inglés), y el segundo como método de las características (MC's, por sus siglas en inglés). En el primero se emplea un enfoque euleriano en donde la idea central es transformar una ecuación diferencial parcial en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo, las cuales son posteriormente discretizada mediante un método en diferencias finitas. Esta idea es empleada en las técnicas estándar de diferencia finitas, elemento finito y en el método de la función de prueba óptima (OTF, por sus siglas en inglés), presentado por Celia, Herrera, y coautores ( Celia *et al.*, 1989a; 1989b). En general, estos métodos eulerianos presentan las siguientes características: (i) el error de truncado en el tiempo domina la solución; (ii) las soluciones se caracterizan por ser no precisas, es decir, que presentan excesiva difusión numérica y grandes errores de fase; (iii) el número de Courant se limita a ser menor a 1 y es en ocasiones mucho menor, y (iv) el número de Péclét de la malla debe ser menor o igual a 2, a fin de evitar problemas de resolución espacial.

Para salvar estas dificultades, el método de las características trata la parte advectiva mediante un enfoque lagrangiano y, para la parte difusiva se emplea un enfoque euleriano. Esta clase de métodos incluye una gran variedad de técnicas; por ejemplo, los métodos euleriano-lagrangiano (ELM) (Neumann, 1984; Cady y Neumann, 1988); el método de las características (MOC) (Pinder y Cooper, 1970); el método modificado de las características (MMOC) (Douglas y Rusell, 1982), y el método de desacoplamiento de operadores (Wheeler y Dawson, 1988). A pesar de que estos métodos mejoran considerablemente el error de truncado en el tiempo, así como alivian las restricciones del número de Courant, todavía presentan problemas en la conservación de masa debido a la falta de la incorporación adecuada de las condiciones de frontera.

Herrera (1985a, b, c), y Celia *et al.*, (1989a, b), presentan una metodología para la solución general de ecuaciones de segundo orden. Este procedimiento lleva a aproximaciones numéricas que automáticamente cambian en la medida en que la ecuación diferencial parcial cambia. Esto se logra definiendo funciones de peso de tal forma que el operador adjunto asociado a la parte advectiva y difusiva de la ecuación diferencial parcial (ecuación 1) se anule. Esta metodología es referida como métodos localizados adjuntos (LAM) y no está restringida a la dimensión espacial (Herrera, 1985b), por lo que puede ser extendida al tratamiento de la derivada temporal, vía una elección apropiada de la función de peso. Esta extensión es formalizada en Celia *et al.*, (1990), donde la filosofía LAM es combinada con el método de las características para dar lugar a la formulación del método localizado adjunto euleriano-lagrangiano (ELLAM, por sus siglas en inglés). El principal éxito de estos procedimientos es su tratamiento sistemático y completo sobre las condiciones de frontera,

teniendo siempre la propiedad conservativa. Asimismo, reducen significativamente el error de truncado temporal a la vez que las restricciones impuestas por el número de Courant.

Lo anterior respalda la formulación ELLAM como una metodología encaminada al desarrollo de una nueva generación de métodos numéricos de alto grado de precisión, sin restricciones en los números de Courant y de Péclét; y, sobre todo, en la solución de problemas de interés práctico para las diversas ramas de la ingeniería y la ciencia, en donde las metodologías tradicionales presentan problemas de precisión.

La principal limitante de metodologías basadas en el uso de operadores adjuntos, como LAM y ELLAM, es que, en estricto sentido dichos operadores sólo existen para ecuaciones diferenciales lineales.

En tal sentido, este trabajo tiene como objetivo ampliar el ámbito de aplicación de ELLAM a fin de que pueda ser empleado en la solución de problemas de flujo y transporte no lineales en medios porosos, haciendo énfasis en la zona no saturada. Lo anterior no pretende ser limitativo sino al contrario, ya que los problemas considerados son altamente no lineales. Para ello, este trabajo se desarrolla de la siguiente forma:

En el primer capítulo se hace una revisión del estado del arte en la solución de la ecuación de transporte mediante ELLAM. Se describen las principales variantes sobre la forma de implementar ELLAM de acuerdo con la evaluación de las integrales de masa.

En el capítulo dos se establece el marco teórico donde se enmarcan las ecuaciones básicas de flujo y transporte en medios porosos. Se mencionan las hipótesis básicas y se describen algunas formas especiales de escribir estas ecuaciones para resolver algunos problemas específicos. Se destaca la importancia de la forma de la ecuación de Richards como un prototipo debido a que las ecuaciones para flujo en multifase exhiben esta forma. Por ello, desde el punto de vista numérico, también la ecuación de Richards constituye un modelo excelente para implementar y probar nuevas metodologías aplicables a la resolución numérica como lo es ELLAM.

En el capítulo tres se describe a detalle ELLAM. Ahí se presenta la formulación clásica como apareció en Celia *et al.*, 1990. Se dan algunos detalles clave para comprender la filosofía ELLAM y que son ampliados por razones didácticas. Se realizan algunas comparaciones con las soluciones tradicionales de diferencias finitas y elemento finito. Se analiza el problema del escalón que se mueve en forma advectiva, y que constituye una de las mejores formas de mostrar las ventajas de ELLAM en la solución de problemas dominados por advección.

Debido a que, como ya se mencionó, ELLAM se aplica solamente a problemas lineales, en el capítulo cuatro se describe una forma nueva de linealizar la ecuación de transporte no lineal. Esta linealización se lleva a cabo mediante una expansión tipo Taylor-Fréchet a lo largo de las características sobre el operador no lineal. Se muestra que esta expansión produce aproximaciones de segundo orden, aun para procedimientos no iterativos. Se realizan comparaciones con técnicas tradicionales de linealización. Adicionalmente se aplica esta técnica para linealizar la ecuación de Richards en una y dos dimensiones. Estas formas linealizadas se usan en el capítulo seis para resolver esta ecuación numéricamente por medio de ELLAM.

En el capítulo cinco se muestra un análisis sobre las propiedades de propagación de ELLAM mediante un análisis de Fourier. El análisis se hace a la ecuación de advección-difusión-reacción lineal. Se analizan tanto la función de peso lineal, como la función de peso constante. Se hace también una comparación de las propiedades de propagación con las técnicas tradicionales de diferencias finitas. A pesar de que este análisis se aplica para problemas lineales, puede ayudar a establecer límites de aplicación en el caso de problemas no lineales.

En el capítulo seis se da una solución, a través de ELLAM, para la ecuación de Richards en una y dos dimensiones. Se dan aplicaciones también para el flujo de contaminantes reactivos y no reactivos. Se realizan algunas comparaciones con soluciones obtenidas con diferencias finitas y elemento finito.

En el capítulo siete se muestran las conclusiones obtenidas y se discuten algunas recomendaciones para líneas de trabajo en el futuro.

Por último, se hace notar que no se realiza ninguna revisión sobre la solución de la ecuación de transporte mediante las técnicas tradicionales (método de las características, diferencias finitas y elemento finito) y sus implicaciones, debido a que está bien documentada en la mayoría de los trabajos que aparecen en la literatura; por ejemplo: Chen y Falconer, 1994; Hicks y Steffer, 1994; Lunn y Mackay, 1995; Liu et al. 1995; Puente, 1996.

---

**Referencias:**

Allen, D. Y. R. Southwell, "Relaxation methods applied to determining the motion in two dimension of a fluid past cylinder", *Quart. J. Mech. Appl. Math.* 8, 1955, pp. 129-145.

Bear, J., Dynamics of fluids in Porous Media, *New York: American Elsevier*, 1972.

Bear, J., Hydraulics of groundwater, *New York: McGraw & Hill Book Company*. 1979.

Cady, R., y S. P. Neumann, "Three-Dimensional Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion", *Proc. VII Int. Conf. Computational Methods in Water Resources Celia et al., (eds)*, 2, 1988, pp. 183-193.

Celia, M. A., I. Herrera, E. Bouloutas. J. S. Kindred, "A new numerical approach for the advective-diffusive transport equation", *Numerical Methods for PDE's.*, 5, 1989 a, pp. 203-226.

Celia, M. A., J. S. Kindred, I. Herrera, "Contaminant transport and biodegradation, 1, A numerical model for reactive transport in porous media", *Water Resour. Res.*, 25, 1989b, pp. 203-226.

Celia, M., T. Russell, I. Herrera, y R. Ewing, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation", *Adv. Water Res.*, 13, 1990, pp. 187-206.

Chung, W-H., Alvaro Aldama,,y J. Smith, "On the effects of downstream boundary conditions on diffusive flood routing", *Adv. Water Res.*, 16, 1993, pp. 259-275.

Douglas, J. Jr., y T. F. Rusell, "Numerical methods for convection-dominated difusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite diference procedures", *SIAM J. Num. Anal.*, 19, 1982, pp. 871-885.

Ewing, R. E., y M. A. Celia, "Numerical methods for reactive transport and biodegradation", *Computacional methods in water resources IX*. Vol. 1.

Falconer, A., e Y. Chen, "Modified forms of the third-order convection, second-order diffusion scheme for the advection-diffusion equation", *Advances in water resources*, 17, 1994, pp. 147-170.

Hicks, F. E. y P. Steffer, "Comparision of finite element methods for the St. Venant equations", *Int. J. Num. Meths. Fluids*, 20, 1994, pp. 99-113.

---

Herrera, I., "Unified approach to numerical methods, Part I: Green formula for operator in discontinuous fields", *Numerical methods for partial differential equations*, 1(1), 1985 a, pp. 25-44.

Herrera, I., "Unified approach to numerical methods, Part II: Finite elements, boundary elements, and their coupling", *Numerical methods for partial differential equations*, 1(2), 1985b, pp. 159-186.

Herrera, I., L. Chargo, y G. Alducin, "Unified approach to numerical methods, Part III: Finite differences and ordinary differential equations", *Numerical methods for partial differential equations*, 1, 1985c, pp. 241-258.

Hillel, D., *Fundamentals of soil physics.*, Academic Press Inc., 1972 a.

Hillel, D., *Applications of soil physics.*, Academic Press Inc., 1972b.

Kindred, J. S., y M. A. Celia, "Contaminant transport and biodegradation, 2, Conceptual model and test simulations", *Water Resour. Res.*, 25, 1989, pp. 1149-1159.

Looney, B. Brian y Ronald Falta, "Vadose Zone Science and technology solutions", Vol. II Battelle Press, 2000.

Lunn, R. J., y R. Mackay, "Solution of multispecies in the unsaturated zone using a moving point method", *Journal of Hydrology*, 168, 1995, pp. 29-50.

Liu, H. H., y J. H. Dane, "An interpolation-corrected modified of characteristics to solve advection-dispersion equations", *Advances in water resources*, 168, 29-50, 1995.

LeVeque, R. J., *Numerical Methods for Conservation Laws*, Basel: Birkhauser Verlag, 1992.

Molz, F. J., M. A. Widdowson, y D. Benefield, "Simulation of microbial growth dynamics coupled to nutrient and oxygen transport in porous media", *Water Resour. Res.*, 22, 1986, pp. 1207-1216.

Nielsen, D. R., M. T. van Genuchten, y J. W. Biggar, "Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone", *Water Resour. Res.*, 22, 1986, pp. 895-1088.

Neumann, S. P., "Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 20, 1984, pp. 321-337.

Pinder, G. F., y H. H. Cooper, "A numerical technique for calculating the transient position of the saltwater front", *Water Res. Res.*, 6(3), 1970, pp. 875-882.

Puente, J. L., Cálculo de la dispersión bidimensional con métodos Euleriano-Lagrangianos en diferencias finitas, *Tesis de maestría, DEPFI-UNAM Campus Morelos*, 1996, pp. 64.

Wheeler, M. F. y C. N. Dawson, "An operator-splitting method for advection-difusion-reactions problems", *MAFELAP. Proc. VI. Whitman, Academic Press*, 1988, pp. 463-482.

---

# CAPÍTULO 1

## ESTADO DEL ARTE Y JUSTIFICACIÓN

El potencial de ELLAM para la solución de problemas de transporte dominados por advección ha sido mostrado por varios autores (Celia *et al.*, 1990; Celia y Zisman, 1990; Herrera y Herrera, 1994). Sin embargo, ELLAM ha sido principalmente aplicado a problemas lineales de advección-difusión-reacción en una dimensión y con coeficientes constantes.

Para que ELLAM se establezca como una metodología para la solución de problemas de interés práctico, aún quedan por resolver varios aspectos que en general se pueden resumir como sigue: (i) aplicación de ELLAM para la ecuación de transporte con velocidad y coeficientes variables, (ii) aplicación de ELLAM a dos y tres dimensiones, (iii) desarrollo de la metodología a problemas altamente no lineales, y (iv) aplicación a fronteras irregulares.

En el primer problema se destacan principalmente consideraciones sobre el seguimiento de las líneas características entre niveles en el tiempo. Esto se dificulta cuando el espaciamiento entre nodos no es uniforme. En general, para el caso de coeficientes variables, el operador adjunto asociado a la función de peso no es nulo, debido a que no es posible seguir exactamente el curso de las líneas características. En este punto prevalecen dos tendencias a considerar: una integración hacia atrás (Celia

*et al.*, 1990), o una integración hacia adelante (Healy y Rusell, 1993) para evaluar las integrales en el tiempo previo al tiempo de cálculo.

El segundo problema está relacionado directamente con la determinación de la forma de las funciones de peso. Obviamente, este problema se complica cuando se tienen coeficientes variables y las líneas características cruzan las fronteras. Aquí de nuevo salen a relucir las mismas consideraciones mencionadas respecto del primer problema. En dos dimensiones el hecho de elegir una integración hacia adelante o hacia atrás está directamente relacionado con problemas locales de conservación de masa. Se han presentado estos problemas cuando se utiliza una integración hacia atrás (Binning y Celia, 1996). Cuando se elige una integración hacia adelante, este problema se corrige en buena medida (Healy y Rusell, 1998).

Para el caso de problemas no lineales, en particular el transporte reactivo no lineal, se requiere aplicar previamente una técnica de linealización que permita emplear ELLAM, debido a que el operador adjunto sólo existe para ecuaciones diferenciales lineales. Los métodos de linealización que han sido usados hasta ahora se basan en estrategias tipo Picard, en donde los coeficientes no lineales son evaluados en un paso de tiempo previo, siguiendo las líneas características (Dahle *et al.*, 1995; Vag *et al.*, 1996). Esta técnica puede llevar a un método no iterativo, con una precisión de primer orden, o a un método iterativo, que puede alcanzar una precisión de segundo orden, siempre y cuando se utilice un esquema de integración apropiado. Sin embargo, para problemas altamente no lineales, como es el caso del flujo de agua en un medio poroso parcialmente saturado o el transporte en varias fases, aún no está claro cómo llevar a cabo la linealización. Esto es particularmente cierto cuando los términos no lineales son dominantes, lo cual puede provocar que las propiedades de convergencia en los algoritmos tipo Picard sean pobres. En relación con lo anterior, Aldama y Arroyo (1998) han desarrollado una técnica de linealización a través del empleo de una expansión tipo Taylor-Fréchet sobre el operador no lineal de advección-difusión-reacción. Esta expansión se realiza alrededor de valores de la variable dependiente en un paso de tiempo previo, a lo largo de las líneas características. En esta expansión, los términos de segundo orden son despreciados, generándose así un operador modificado lineal. Esto permite construir un problema lineal para el cual se puede determinar un operador adjunto. Esta estrategia permite obtener una aproximación de segundo orden, independientemente de si se emplea una técnica iterativa o no iterativa. Asimismo, la expansión tipo Taylor-Fréchet se puede aplicar a otros problemas no lineales, permitiéndose de esta forma construir algoritmos con propiedades de convergencia, atractivas para la solución de problemas altamente no lineales.

Sobre la posibilidad de aplicar ELLAM a fronteras irregulares aún queda mucho por explorar: las aplicaciones de ELLAM en dos y tres dimensiones se han realizado en dominios con fronteras regulares (Binning y Celia, 1996; Wang *et al.*, 1996; Healy y Rusell, 1998; Binning y Celia, 2000; Heberton *et al.*, 2000).

Este trabajo tiene como objetivo investigar la aplicación de ELLAM para problemas altamente no lineales en medios porosos, con particular interés en la ecuación de advección-difusión-reacción no lineal y de la ecuación de Richards que describe el flujo de agua en un medio poroso no saturado, a la vez que comprobar si las ventajas que se han tenido en el caso de la solución de los problemas lineales prevalecen para la solución de problemas no lineales. Un paso crucial para investigar esto es demostrar que la metodología de linealización aquí propuesta resulta eficiente en la solución de problemas altamente no lineales.

**Referencias:**

Aldama, A. A., y V. Arroyo, "An Eulerian\_Lagrangian localized adjoint method for the nonlinear advection-diffusion-reaction equation", *Comput. Meth. Water Res. XII*, Burganos et al. eds., 1998

Binning, P. y M. A. Celia, "A finite volume Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint method for solution of the contaminant transport equations in two-dimensional multiphase flow systems", *Water Res. Res.*, 32(1), 1996, pp. 103-114.

Binning, P. y M. A. Celia, "A three-dimensional forward tracking Eulerian Lagrangian localized adjoint method for solution of the contaminant transport equation", *Comput. Meth. Water Res. XIII*, Bentley et al. eds., (2), 2000, pp. 611-618.

Celia, M., T. Russell, I. Herrera, y R. Ewing, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation", *Adv. Water Res.*, 13, 1990, pp. 187-206.

Celia, M. y S. Zisman, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for reactive transport in groundwater", *Comput. Meth. Water Res. VIII*, Gambolati et al. eds., 1990.

Dahle, H. K., R. E. Ewing, & T. F. Russell, "Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for a nonlinear advection-diffusion equation", *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 122, 1995, pp. 223-250.

Heberton, C. I., T. F. Rusell, F. Konikov, y G. Z. Hornberger, "Three-dimensional finite-volume ELLAM implementation", *Comput. Meth. Water Res. XIII*, Bentley et al. eds., (2), 2000, pp. 603-610.

Herrera, G.& I. Herrera, "An Eulerian-Lagrangian method of cells, based on localized adjoint methods", *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 10, 1994, pp. 205-223.

Healy, R. W. y T.F. Rusell, "A Finite- Volume Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint method for solution of the Advection-Dispersion Equation", *Water Res. Res.*, 29(7), 1993, pp. 2399-2413.

Healy, R. W. y T.F. Rusell, "Solution of advection-dispersion equation in two dimensions by a finite-volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method", *Adv. in water Res.*, 21(1), 1998, pp. 11-26.

Vag, E., Wang J. y Helge, D. "Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for system of nonlinear advective-diffusive-reactive transport equations", *Adv. Water Res.*,19, 1996, pp. 297-315.

Wang, H., R. C. Sharpley, & S. Man, "An ELLAM for advection-diffusion equations in multidimensions", *Comput. Meth. Water Res. XI*, Aldama et al., eds., 1996.

---

## **CAPÍTULO 2**

### **MARCO TEÓRICO**

#### **Introducción**

La descripción clásica de flujo y transporte en un medio poroso está basada en el concepto de continuo aplicado a escalas, que en promedio producen una descripción continua de flujos, presiones, y concentraciones. Este proceso se conceptualiza a través del volumen elemental representativo (Bear, 1972; Hillel, 1982a).

Por otra parte, la aplicación de este concepto a un medio poroso se basa en las leyes de la conservación de masa, y de cantidad de movimiento. Para un medio poroso no saturado este concepto queda implícito en la ecuación de Richards. Para el transporte de un soluto queda descrito por la ecuación de transporte.

Todas estas ecuaciones se aceptan generalmente como una base apropiada para describir en forma cuantitativa el flujo subsuperficial de agua y el transporte de solutos en un medio poroso como es el suelo. Han sido aplicadas a través de soluciones analíticas en casos sencillos y, a través de técnicas numéricas, en situaciones más reales. Sin embargo en la práctica (escala de campo) la capacidad de predicción de estos modelos se ha visto limitada sobre todo por la dificultad de determinar apropiadamente algunos parámetros característicos (cuadro 2.1). La dificultad para determinar estos parámetros es evidente cuando se desconocen sus extremos de variabilidad.

Por ejemplo, al usar un modelo regional bidimensional para determinar el flujo, cómodamente se puede establecer el espaciamiento nodal del orden de un kilómetro o más, de tal forma que se necesita conocer la magnitud de los parámetros representativos a esta escala. Esto es un serio problema, ya que el nivel en que están descritas las ecuaciones y parámetros son a nivel de laboratorio.

Asimismo un modelo numérico puede considerar que un parámetro puede ser constante sobre una magnitud de un kilómetro cuadrado, mientras que en realidad este parámetro puede variar en muchos órdenes de magnitud sobre esa área.

Lo anterior manifiesta los problemas que surgen al aplicar principios y ecuaciones que funcionan bien a una cierta escala y que se desea aplicarlos a otra. Los problemas de escala están implícitos en la forma en que diferentes conceptos y ecuaciones son catalogados dentro del marco teórico para la descripción de los procesos que ocurren en un medio poroso. A continuación se hace una revisión de estos enfoques, sobre aquellos en los que se ha basado el estudio del flujo del agua y el transporte de contaminantes en suelos.

La siguiente revisión se apoya, en buena parte, en los trabajos de Vauclin (1994) y van Genuchten (1994); el primero fue traducido del francés por Carlos Fuentes (comunicación personal). Estos trabajos representan las últimas dos revisiones críticas del estado del arte del marco teórico de los procesos de flujo y transporte de contaminantes en medios porosos.

## **2.1. Escalas de estudio**

La comprensión de los fenómenos que ocurren en un medio poroso (como por ejemplo el suelo) es compleja por el hecho de que se trata de estudiar procesos acoplados, esencialmente no lineales, en un medio polifásico (agua-aire-sólido) susceptible de deformarse y en el cual las concentraciones de los fluidos varían en el tiempo y en el espacio bajo la acción conjugada de variaciones de energía mecánica y térmica, con la posibilidad de cambios de fase y de intercambios físico-químicos entre las fases. Cuando se abordan el estudio experimental y la modelación de las transferencias en este medio jerarquizado, deben ser consideradas tres escalas, correspondientes a niveles de análisis y de expectativas diferentes, (Vauclin, 1994):

- La escala microscópica: el poro, supuesto grande en comparación con las dimensiones moleculares. En esta escala, las magnitudes locales presentan grandes fluctuaciones. Cada fase puede ser considerada

como un medio continuo, y el medio poroso como un conjunto de medios continuos más o menos imbricados. Es en esta escala que conviene ubicarse para la comprensión fina de los mecanismos fundamentales.

- La escala macroscópica: la columna de laboratorio. La complejidad geométrica del espacio de los poros, asociada a las dificultades que plantea la definición precisa de la topología de las diferentes fases y la metrología de las variables y parámetros, hacen que la descripción microscópica no pueda ser puesta en práctica sin un cambio de escala cuya etapa esencial consiste en introducir el concepto de Volumen Elemental Representativo. Este permite establecer una equivalencia entre el medio real discreto y un medio ficticio continuo. En esta escala, los fenómenos son descritos por ecuaciones cuyas variables y parámetros son representativos de magnitudes medias en el seno del continuo del medio poroso.
- La escala megascópica : el terreno. La extensión del enfoque precedente al medio poroso natural se enfrenta a serias limitaciones, por ejemplo:
  - i) Un suelo no es jamás uniforme ni homogéneo. Sus propiedades físico-químicas varían de un «punto macroscópico» a otro. Como ilustración, el cuadro 2.1 resume algunos resultados (no exhaustivos) que muestran claramente la gran variabilidad espacial (no son raros coeficientes de variación superiores al 300%) de las propiedades hidro-dispersivas de los suelos y concentraciones, y esto, sobre superficies que van de 100 m<sup>2</sup> a 150 ha. En ellas se nota la tendencia a una distribución log-normal ( $R = \text{Moda}/\text{media} \neq 1$ ) para el conjunto de estas variables. Con el fin de estudiar y modelar las transferencias es necesario utilizar conceptos estadísticos y geoestadísticos que permitan analizar esta variabilidad, lo cual implica a menudo agregar al aspecto mecanicista de las ecuaciones una descripción estocástica de los parámetros pertinentes.
  - ii) El aspecto estadístico no implica necesariamente que estas propiedades estén aleatoriamente distribuidas en el espacio. Ellas presentan frecuentemente una estructura horizontal o vertical, misma que es importante de analizar y de tomar en cuenta en los planos de reconocimiento del medio y de su modelación.

Variables	$m$	$\sigma$	Muestras observadas/ área	$R=$ $M/m$	$N$
<b>Conductividad saturada (cm/día)</b> - NIELSEN <i>et al.</i> , 1973	25.8	64,8	120/150ha	0,19	750
- VOLZ, 1986	36.3	135,3	101/2 ha	0,027	5920
<b>Factor de escala</b> - WARRICK <i>et al.</i> , 1977	1.06	1,81	120/150 ha	0,13	1110
- RUSSO-BRESLER, 1980	1	0,73	120/0,8 ha	0,68	112
- VAUCLIN <i>et al.</i> , 1983	1	0,47	23/1 ha	0,72	92
<b>Coefficiente de dispersión (cm<sup>2</sup>/día)</b> - BIGGAR-NIELSEN, 1976	367	1,410 <sup>3</sup>	359/150 ha	0,011	7150
<b>Velocidad de poro (cm/día)</b> - BIGGAR-NIELSEN, 1976	44,2	85,4	359/150 ha	0,098	1400
<b>Difusividad gaseosa (m<sup>2</sup>/día)</b> - GRUNDMANN <i>et al.</i> , 1988 NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (ppm)	0,15	0,16	67/90 m <sup>2</sup>	0,31	448
- TABOR <i>et al.</i> , 1985	13,6	4,24	49/13 ha	0,87	37
- GRUNDMANN <i>et al.</i> , 1988	427	246,4	67/90 m <sup>3</sup>	0,65	130
<b>Flujo de N<sub>2</sub> O(mg/m<sup>2</sup>/h)</b> - FOLORUNSO-ROLSTON, 1984	0,63	1,77	36/90 m <sup>2</sup>	0,037	3055
- GRUNDMANN., 1988	0,42	0,63	67/90m <sup>2</sup>	0,17	876

Cuadro 2.1. Ejemplos de variabilidad observada.  $\sigma$  es la desviación tipo,  $R =$  moda/media.  $N$  es el número de observaciones necesarias para estimar el valor medio,  $m$  con un error relativo especificado de 10 % y con un intervalo de confianza de 95 % (Vauclin, 1994).

Un modelo puede expresarse en la forma general siguiente:

$$Y = F(X_i, a_j) + \varepsilon \quad (2.1)$$

donde  $X_i$  y  $Y$  son los vectores de la variables de entrada y de salida respectivamente,  $a_j$  los parámetros, y  $\varepsilon$  el error cometido cuando se asimila

el objeto de estudio a su imagen. La ecuación (2.1) permite la siguiente clasificación de los modelos (Vauclin 1994; van Genuchten 1994):

- Un modelo conceptual (de tipo mecanicista o funcional) corresponde a una función  $F$  fundada sobre un cierto conocimiento (no necesariamente cierto) de los procesos implicados.
- Cuando  $F$  resulta de experiencias, se trata de un modelo empírico.
- Cualquiera que sea la naturaleza de la función  $F$ , considerar las variables de entrada o los parámetros como funciones aleatorias conduce a un modelo estocástico. En el caso contrario, se trata de un modelo determinista.

Según esta terminología, la mayoría de los estudios se refieren más a los modelos conceptuales deterministas y estocásticos poniendo el acento sobre el aspecto mecanicista. En este trabajo el estudio se enfocará sobre los modelos deterministas mecanicistas.

## 2.2. Modelos deterministas mecanicistas

### 2.2.1. Modelación física

#### 2.2.1.1. Flujo del agua

En forma clásica, a escala macroscópica, el flujo del agua en suelos es descrita por la ley de Darcy:

$$\mathbf{q} = -K(\psi)\nabla(\psi - z) \quad (2.2)$$

en la cual  $\mathbf{q}$  es el vector de densidad del flujo volumétrico;  $\psi$  es la presión del agua del suelo (expresada en altura de columna de agua) que depende de el contenido volumétrico de agua del suelo  $\theta(\psi)$ ;  $K(\psi)$  es la conductividad hidráulica, y  $z$  es el eje de las profundidades orientada positivamente hacia abajo.

La combinación de la ecuación (2.2) con la ley de conservación de masa:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{q}) - \Gamma \quad (2.3)$$

donde  $\Gamma$  representa una fuente o sumidero de masa, lleva a la ecuación que describe el flujo del agua en un suelo:

$$S(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot [K(\psi) \nabla \psi] - \frac{dK}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial z} - \Gamma \quad (2.4)$$

$S(\psi) = -\partial\theta / \partial\psi$  es el contenido específico de humedad.

Para la solución de la ecuación (2.4) es necesario conocer explícitamente, aparte de las condiciones iniciales y de frontera, las características hidrodinámicas del suelo:  $\theta(\psi)$  y  $K(\psi)$ . De hecho, esto constituye toda una línea de investigación en física de suelos.

### 2.2.1.2. Transporte de solutos

En la escala macroscópica, el transporte de solutos en suelos resulta de los mecanismos de convección-dispersión, de tal forma que el flujo de solutos en el suelo es proporcionado por:

$$\mathbf{q}_s = c \mathbf{q} - \mathbf{D} \nabla c \quad (2.5)$$

que combinada con la correspondiente ecuación de conservación de masa permite obtener:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot [c \mathbf{q} - \mathbf{D} \nabla c] - \Phi \quad (2.6)$$

$c$  es la concentración de soluto en el suelo;  $\mathbf{q}$ , es el flujo volumétrico o de Darcy;  $\mathbf{D}$ , es el tensor de coeficientes de difusión efectiva, y  $\Phi$  es el término de adición o sustracción de soluto debido a reacciones físico-químico-biológicas.

Con la finalidad de discutir los procesos involucrados en el transporte de solutos en el suelo, la ecuación (2.6) para un transporte esencialmente vertical, se escribe así

$$\frac{\partial(\rho S)}{\partial t} + \frac{\partial(\theta c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \theta D(\theta, q) \frac{\partial c}{\partial z} \right\} - \frac{\partial}{\partial z} (qc) + \sum_{j=1}^n \phi_j(c, S) \quad (2.7)$$

$c$  y  $S$  son las concentraciones de la sustancia asociadas a las fases fluida y sólida respectivamente;  $D$  es el coeficiente aparente de dispersión hidrodinámica de la sustancia en el suelo,  $\rho$  es la masa volumétrica del

suelo seco,  $\theta$  el contenido volumétrico de agua en el suelo,  $\sum_{j=1}^n \phi_j(c, S)$

representa el consumo de la especie, y  $q$  la densidad del flujo volumétrico dado por la ley de Darcy.

### 2.2.2. Modelación química

El término,  $\sum_{j=1}^n \phi_j(c, S)$  de la ecuación (2.7) puede incluir diferentes procesos químicos tales como las reacciones de precipitación/disolución, las oxidoreducciones, las transformaciones de origen microbiológico de una especie en otra, el decaimiento radioactivo, etc. A excepción de cuando se trata de este último proceso, en general este término es difícil de modelar. De una parte, la identificación de los mecanismos no es siempre evidente, y de otra las interacciones con otros factores del ambiente no son más que locales. Ello conduce a menudo a introducir relaciones paramétricas pseudoempíricas. Así, este término comúnmente es aproximado por una expresión del tipo:

$$\sum_{j=1}^n \phi_j = -\mu_l \theta c - \mu_s \rho S + \gamma_l \theta + \gamma_s \rho \quad (2.8)$$

donde  $\mu_l$  y  $\mu_s$  son constantes de decaimiento de primer orden y caracterizan las tasas de desaparición de la sustancia en las fases líquida y sólida respectivamente,  $\gamma_l$  y  $\gamma_s$  son constantes de producción de orden cero para las fases líquida y sólida respectivamente. Estos diferentes coeficientes se determinan en forma experimental.

### 2.2.3. Modelos de adsorción-desorción

El primer término de la ecuación (2.7) describe la tasa con la cual una sustancia química interacciona o se intercambia con la fase sólida del suelo. Su modelación es el objeto de numerosos estudios y debates. Para describir estos procesos se utilizan hipótesis de equilibrio y de no equilibrio local.

La hipótesis de equilibrio local (LEA, por sus siglas en inglés) conduce a considerar estos procesos como instantáneos, comparados con los tiempos característicos de la convección y de la dispersión. Son descritos por isothermas de equilibrio  $S(c)$  de diferentes tipos: lineal, Freundlich, Langmuir, etc. (Bolt, 1979), y presentan a menudo una histéresis entre la adsorción y la desorción, notable para las sustancias orgánicas (Van Genuchten *et al.*, 1974). El modelo probablemente más utilizado es una simple relación lineal entre  $S$  y  $c$  de la forma:  $S = K_d c$ , donde  $K_d$  es llamado coeficiente de distribución.

Por ejemplo si se acepta la hipótesis de equilibrio local en un estado de flujo permanente y usando la ecuación (2.8), la ecuación (2.7) se simplifica a la clásica ecuación lineal de advección-difusión:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} - \mu c + \gamma \quad (2.7 a)$$

donde  $R$  es el factor de retardo dado por:

$$R = 1 + \rho K_d / \theta \quad (2.7 b)$$

y los nuevos coeficientes  $\mu$  y  $\gamma$  son:

$$\mu = \mu_l + \mu_s \rho K_d / \theta \quad (2.7 c)$$

$$\gamma = \gamma_l + \gamma_s \rho / \theta$$

Aunque la presente es la forma más común de tratar estos procesos, particularmente en los modelos de transporte en régimen hídrico permanente (van Genuchten y Alves, 1982), su dominio de validez se restringe a un rango reducido de concentración.

La hipótesis de no equilibrio local (NLEA, por sus siglas en inglés) se emplea para explicar discordancias importantes entre los resultados de modelos fundados sobre el equilibrio local y las observaciones. Esto ha conducido al desarrollo de dos tipos de modelaciones:

i) Aquéllos que toman en cuenta una cinética química:

- A un sitio (Lapidus y Amundson, 1952):

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \alpha(Kc - S) \quad (2.9)$$

- A dos sitios (van Genuchten *et al.*, 1990):

$$S_1 = FKc; \text{ y } \frac{\partial S_2}{\partial t} = \alpha[(1-F)Kc - S_2] \quad (2.10)$$

donde  $F$  es la fracción de los sitios que alcanzan instantáneamente el equilibrio.

ii) Aquéllos que se basan en la existencia física de una distribución bimodal de velocidad de poro lo cual da pie a la introducción del concepto de fracciones de agua móvil e inmóvil con cinética de intercambio (Van Genuchten y Wierenga, 1974; Gaudet *et al.*, 1977).

La aplicabilidad de estos diferentes conceptos ha sido largamente demostrada para los medios reactivos o no, y para una gran variedad de trazadores. Su utilización ha permitido mejorar el carácter predictivo de los

modelos de transporte que se basan sobre los procesos de convección y dispersión, con o sin la hipótesis de equilibrio local.

#### **2.2.4. Ventajas e inconvenientes del enfoque mecanicista**

En la medida en que los modelos mecanicistas intentan describir el mayor número de procesos, constituyen excelentes herramientas de investigación las cuales permiten estudiar al detalle las interacciones físico-químicas en los suelos (escala de poro y macroscópica), y conducir de manera rigurosa estudios de sensibilidad de algún fenómeno o parámetro. Sin embargo, presentan ciertas limitaciones, brevemente recordadas en seguida (Vauclin, 1994):

##### **a) Determinación de los parámetros**

La resolución numérica (diferencias finitas, elementos finitos, etc.) o analítica (en ciertos casos particulares y en general muy alejados de la realidad de terreno) de las ecuaciones requiere del conocimiento previo de los parámetros cuya cantidad depende evidentemente del grado de complejidad de los modelos mismos. La dificultad de obtención directa de la mayor parte de ellos hace que los parámetros sean obtenidos más a menudo por ajuste del modelo a los datos experimentales (laboratorio o terreno, obtenidos en condiciones controladas o incluso artificiales) utilizando procedimientos de optimización.

##### **b) Validación de los modelos**

La literatura muestra que en general la pertinencia de los parámetros identificados a partir de las soluciones numéricas o analíticas es raramente evaluada sobre otros datos que aquéllos que se utilizan en el procedimiento de identificación mismo. Además, mientras que los modelos simulan los flujos de agua y de materia, ellos son "válidos" a menudo sobre medidas de concentraciones que no son necesariamente los mejores indicadores de los flujos a través de la zona no saturada, en razón, particularmente, de la existencia de escurrimientos preferenciales (presencia de macroporos de origen estructural o biológico; fenómenos de inestabilidad hidrodinámica que conducen a digitaciones, etcétera).

##### **c) Utilización de los modelos en condiciones naturales**

La variabilidad espacial de los suelos y, particularmente, de sus propiedades hidrodinámicas, conduce a dudar del valor predictivo de modelos que se basan en la hipótesis de unicidad de las relaciones velocidad de poro, contenido de agua y coeficiente de dispersión. Este aspecto, acoplado a las dificultades experimentales de obtención in-situ de parámetros fenomenológicos tales como la conductividad hidráulica o el

contenido de agua, ha estimulado otros enfoques que se abordan sucintamente más adelante.

### **2.3. Modelos deterministas funcionales**

Contrariamente a los modelos precedentes, que esencialmente se basan en la noción de velocidad o flujo de materia, los modelos llamados "funcionales" son de tipo capacitivo: el suelo se asimila a un reservorio definido por dos humedades características: el punto de marchitamiento permanente y la capacidad de campo.

Según Addiscott y Wagenet (1985), pueden considerarse dos clases de modelos funcionales:

#### **2.3.1. Los modelos continuos**

En estos modelos, la difusión y la dispersión son despreciadas en la ecuación de transporte, de modo de no considerar más que el transporte convectivo (escurrimiento en pistón), el cual permite una determinación trivial del pico de concentración alrededor del cual se puede eventualmente sobreimponer estos dos efectos (De Smedt y Wierenga, 1978; Rose *et al.*, 1982).

A pesar de que este tipo de modelo, parcialmente o totalmente analítico, haya sido utilizado con un cierto éxito para simular el flujo de concentraciones aplicadas en la superficie de un suelo (Rose *et al.*, 1982 para *N*; Cameron *et al.*, 1982 para *C*), todavía presenta serias limitaciones cuando el perfil vertical del suelo es heterogéneo o contiene ya una concentración inicial. Además, con algunas excepciones (Scotter, 1978), éste no ha sido utilizado para sustancias interactivas con la fase sólida.

#### **2.3.2 Los modelos discretos**

En estos modelos se utilizan consideraciones cromáticas (Reiniger y Bolt, 1972), las cuales han sido utilizadas para simular el lavado de los suelos. Se trata aquí de dividir el suelo en una sucesión de células horizontales entre las cuales se toman en cuenta los diferentes procesos físicos, químicos e incluso biológicos. El principio de conservación de la masa aplicado al agua y a las sustancias químicas conducen, en general, a una sucesión de ecuaciones algebraicas de fácil resolución.

Este enfoque es aplicable sobre todo en el caso del transporte simultáneo de varias especies químicas (Valocchi *et al.*, 1981; Sardin *et al.*, 1986), o de sustancias fuertemente interactivas con la fase sólida (Frissel y Poelstra,

1967). Mientras que su uso es clásico en ingeniería química, parece poco conocido por los hidrólogos, físicos y químicos de los suelos.

### 2.3.3. Ventajas e inconvenientes

Además que tienen la ventaja de presentar una estructura matemática simple, estos modelos no utilizan más que una cantidad reducida de datos iniciales y de parámetros, cuya mayoría pueden obtenerse sin procedimientos de identificación. Su utilización en el terreno es facilitada por el hecho de que los parámetros "capacitivos" aparecen con menos variables que los parámetros "conductivos". Por lo tanto, su concepción no les permite contribuir a un conocimiento mejor de los procesos fundamentales. Tampoco pueden prever el impacto de modificaciones del medio físico sobre los procesos de transporte.

## 2.4. Modelos Estocásticos

Es conocido desde hace muchos años que las propiedades físico-químicas locales de los suelos presentan amplias fluctuaciones espaciales. La naturaleza, la modelación de esta variabilidad y los problemas de muestreo que le son asociados han sido descritos abundantemente (Warrick y Nielsen, 1980; Mac Bratney y Webster, 1983; Vauclin, 1983). Esta situación ha llevado a considerar los fenómenos de transferencia como procesos esencialmente erráticos, susceptibles de una cuantificación por modelos estocásticos que se pueden reagrupar en dos categorías: los modelos mecanicistas y los modelos empíricos tipo función de transferencia.

### 2.4.1. Modelos estocásticos mecanicistas

En este enfoque, las propiedades hidrodinámicas son asimiladas a funciones aleatorias que, introducidas en un modelo mecanicista, obligan a expresar la solución de un problema de transporte en términos probabilísticos.

Como ejemplo, se muestra en seguida la técnica aplicado al transporte vertical de un soluto no reactivo en un suelo parcialmente saturado:

i) A la escala de la columna de laboratorio, se admite la validez del esquema clásico que resulta de las ecuaciones (2.4) y (2.7):

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \theta D(\theta, q) \frac{\partial c}{\partial z} \right\} - q \frac{\partial c}{\partial z} \quad (2.11a)$$

$$S(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K(\psi) \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \right\} \quad (2.11b)$$

ii) A la escala del medio natural, el hecho de considerar que la conductividad hidráulica es un proceso estocástico, homogéneo, ergódico,  $K(\psi, w)$  de ley de probabilidad marginal  $f_k$ , implica que el flujo de Darcy (2.2), la velocidad de poro y el coeficiente de dispersión hidrodinámica  $D$  son igualmente procesos estocásticos, que introducidos en las ecuaciones (2.11) conducen a:

$$\theta(w) \frac{\partial c(w)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \theta(w) D(w) \frac{\partial c(w)}{\partial z} \right\} - q(w) \frac{\partial c(w)}{\partial z} \quad (2.12a)$$

$$S(w) \frac{\partial \psi(w)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K(w) \left( \frac{\partial \psi(w)}{\partial z} - 1 \right) \right\} \quad (2.12b)$$

La resolución de estas ecuaciones acopladas a las condiciones iniciales y de frontera para todas las realizaciones posibles de  $K(w)$  permite obtener, al menos en teoría, las evoluciones espacio-temporales de las funciones aleatorias  $\psi(z, t, w)$  y  $c(z, t, w)$ , cuyos momentos estadísticos pueden ser calculados por:

$$E\{\psi^n(z, t, w)\} = \int \psi^n(z, t, w) f_k(s) ds \quad (2.13a)$$

$$E\{c^n(z, t, w)\} = \int c^n(z, t, w) f_k(s) ds \quad (2.13b)$$

Mientras que la ecuación estocástica de Richards (2.12b) ha sido objeto de numerosos estudios (Warrick *et al.*, 1977; Vauclin *et al.*, 1983; Mantoglou y Gelhar, 1987, etc.), particularmente a través del escalamiento de las características hidrodinámicas, la ecuación del transporte ha recibido poca atención a excepción de los modelos desarrollados por Bresler y Dagan (1979, 1981, 1983) que son hasta el presente los más representativos de este enfoque.

El conjunto de estos resultados actualmente disponibles (bastante numerosos para la hidrodinámica, más raros para el transporte) tiende a mostrar la no existencia de "propiedades efectivas" capaces de caracterizar un medio homogéneo equivalente al medio real para el cual la solución de un problema hidro-dispersivo en medio no saturado sería idéntico a la media de las soluciones del mismo problema en medio heterogéneo.

## 2.4.2. Función de Transferencia

De modo muy esquemático, se trata de establecer una relación estocástica de la forma

$$Q_{salida}(t) = \int_0^t g[(t-t')/t'] Q_{entrada}(t') d't' \quad (2.14)$$

entre la entrada  $Q_{entrada}(t)$  y la salida  $Q_{salida}(t)$  de un volumen de control. En la ecuación (2.14),  $g(\tau/t')$  es la densidad de probabilidad de los tiempos de permanencia. Esta densidad describe la probabilidad que tendrá una molécula que entra en el volumen de control (por ejemplo la superficie del suelo), en el tiempo  $t'$  de salir (por ejemplo a una profundidad definida), entre los instantes  $\tau = t - t'$  y  $\tau + d\tau$ . En estos modelos se representan los efectos del conjunto de los procesos (sin explicitarlos) y la naturaleza de las condiciones iniciales en los límites sobre los tiempos de permanencia de una sustancia en el perfil del suelo.

Este tipo de enfoque, de naturaleza no mecanicista, ha sido utilizado con cierto éxito para simular situaciones *in situ*, realizadas con diferentes sustancias (Br, Cl, Nitratos, pesticidas). Para más detalles, se pueden consultar los trabajos de Jury (1982), Jury *et al.* (1986), White *et al.* (1986), y de Jury y Roth (1990).

Este enfoque puede constituir un modelo de gestión (planeación), en la medida en que no requiere más que de un número reducido de datos. Sin embargo, presenta el inconveniente común a todos los modelos basados en el concepto de función de transferencia (clásicamente utilizado en hidrología): la necesidad de una calibración específica en las condiciones de utilización. De tal modo, que la modificación del medio o de las condiciones en los límites obliga al establecimiento de una nueva función.

## 2.5 Resumen

- El análisis anterior muestra una gran diversidad de complejidades y aplicaciones. Numerosos modelos han sido desarrollados para una necesidad específica, y no (o difícilmente) pueden aplicarse a otras situaciones.
- La percepción y la comprensión de los fenómenos ligados a las transferencias acopladas de agua y de sustancias químicas en los suelos parcialmente saturados, se vuelven delicadas. Tomar en cuenta los diferentes procesos conduce generalmente a introducir numerosos parámetros que hacen que un modelo, que es necesariamente una

esquematación de la realidad, pueda fácilmente ajustarse a los datos experimentales, sin que contribuya necesariamente a un mejor conocimiento de los mecanismos, ni sirva de guía en nuevas investigaciones, ni sugiera acciones prácticas.

- A pesar de los progresos muy notables de estos últimos años, tanto a la escala de la columna de laboratorio como a la del terreno, muchas cuestiones permanecen actualmente sin respuesta. Por ejemplo (Vauclin, 1994):
  - ¿Cómo tomar en cuenta los caminos preferenciales debidos a la presencia de macroporosidades o a la emergencia de inestabilidades hidrodinámicas?
  - ¿Los escurrimientos son siempre de Darcy?
  - ¿Cómo modelar los efectos de la variabilidad espacial y temporal de las propiedades hidrodinámicas de los suelos, sobre el transporte de sustancias químicas?
  - ¿Cómo acoplar eficientemente los submodelos físico-químicos, geoquímicos y biológicos a los modelos hidro-dispersivos?
  - ¿Cómo mejorar las técnicas y métodos de estimación *in situ* de los parámetros que describen los fenómenos de transferencia y de transporte?Además, parece que un esfuerzo suplementario de investigación debería orientarse a i) las transferencias en los suelos estructurados o expansivos, cuya mayoría son fuertemente interactivos con las sustancias químicas; ii) el transporte de la fase gaseosa en relación, particularmente, con el devenir de las sustancias volátiles, y iii) la modelación de las bio-transformaciones.
- Además de la falta de conocimientos sobre ciertos aspectos, parece que una gran parte de los candados actuales viene de la propensión de las comunidades científicas involucradas a limitar sus conocimientos e investigaciones a su propia disciplina. Retomemos el ejemplo de la ecuación (7). Un examen de la literatura pone en evidencia las tendencias siguientes:
  - Los físicos del suelo sólo se concentran en determinar la difusidad. Ellos sugieren mejoras a la ecuación resultante, fundadas, por ejemplo, en un mejor conocimiento (indispensable, por otra parte) de la topología interna del medio poroso (i.e. el concepto de fases fluidas móvil e inmóvil).
  - Los químicos del suelo ponen el acento en los parámetros que intervienen en los fenómenos de intercambio, reacciones químicas, etc. Muy a menudo, desprecian los términos representativos del transporte difusivo y convectivo.
  - Los microbiólogos del suelo estudian principalmente el desarrollo y la actividad de las poblaciones microbianas. Además, escogen condiciones experimentales de modo que los términos difusivo y convectivo sean despreciables.
  - Los agrónomos y fisiólogos vegetales se interesan en el término de extracción, pero sólo respecto con la producción o la protección vegetal.

Esta revisión se apoyan en buena parte, en los trabajos de Vauclin (1994) y van Genuchten (1994), quienes han hecho las últimas dos revisiones críticas del estado del arte del marco teórico del flujo de agua y del transporte de contaminantes en suelos no saturados. Si bien dicha revisión es de manera general, en este trabajo se tendrán las siguientes hipótesis:

- Hay tres fases presente en el medio poroso (sólida, líquida, y gaseosa). La fase líquida y gaseosa son totalmente móviles y no miscibles, siendo la presión en el gas la atmosférica.
- El líquido que se considera es agua, el gas el aire, y el sólido partículas de suelo.
- Se supone que el medio es isotérmico, de tal forma que la transferencia de calor se desprecia.
- El flujo de agua y del aire no depende de la presencia de sustancias disueltas en el sistema suelo-agua-aire. Esta consideración permite que la ecuación de flujo se resuelva en forma independiente de la ecuación de transporte.

De acuerdo con ello, el flujo del agua y el transporte de contaminantes queda determinado a través de un modelo determinista mecanicista. Entonces, el flujo de agua queda representado a través de la ecuación de Richards (2.4), mientras que el transporte, a través de la ecuación (2.6).

Algunas otras consideraciones se mencionarán en los siguientes capítulos.

## 2.6 Referencias

Addiscott T.M., Wagenet R.J., "Concepts of solute leaching in soils: a review of modeling approaches", *J. Soil Sci.*, 36, 1985, pp. 411-424.

Bolt G. H., Soil chemistry, physico-chemical models, *Elsevier, New-York*, 1979, pp. 479.

Bresler E., y G. Dagan, "Unsaturated flow in spatially variable fields. 3 - Solute transport models and their application in two fields", *Water Resour. Res.*, 19, 1983, pp. 429-435.

Bresler E., y G. Dagan, "Solute dispersion in unsaturated heterogeneous soil at field scale. II-Applications", *Soil Sci. Soc. Am. J.* 43, 1979, pp. 467-472.

Bresler E., y G. Dagan, "Convective and pore scale dispersive solute transport in unsaturated flow conditions", *Water Resour. Res.*, 17, 1981, pp. 1683-1693.

Cameron K., C., y A. Wild, "Prediction of solute leaching under field conditions: An appraisal of three methods", *Soil J. Sci.*, 33, 1982, pp. 659-669.

De Smedt F., y P. J. Wierenga, "Approximate analytical solution for the solute flow during infiltration and redistribution", *Soil Sci Soc. Am. J.*, 42, 1978, pp. 407-412.

Frisel M. J., y P. Polestra, "Chromatic transport through soils II- Column experiments with Sr- and Ca- isotopes", *Plant soil*, 27, 1967, pp. 20-32.

Gaudet, J. P., H. Jegat, G. Vachaud, y P.J. Wierenga, "Solute transfer with exchange between mobile and stagnant water, through unsaturated sand" *Soil Sci Soc. Am. J.*, 41, 1977, pp. 665-671.

Jury, W. A., "Simulation of solute transport using a transfer function model", *Water Resour. Res.*, 18, 1982, pp. 363-368.

Jury, W. A., y L. H. Stolzy, "A field test of the transfer function model for predicting solute transport", *Water Resour. Res.*, 18, 1982, pp. 369-375.

Jury, W. A., W. F. Spencer, y W. J. Farmer, "Model for assessing behavior of pesticides and other trace organics using benchmark properties. I - Description of model", *J. Environ. Qual.*, 12, 1983, pp. 558-564.

Jury, W. A., G. G. Sposito, y R. E. White, "A transfer function model of solute transport through soil. I - Fundamental concepts", *Water Resour. Res.*, 22, 1986, pp. 243-247.

Jury, W. A., y K. Roth, Transfer function and solute movement through soil, Theory and applications, *Birkhauser Verlag, Basel (Ed.)*, 1990, pp. 226.

Knight, J. H., "Infiltration equations from exact and approximate solutions of Richards' equation. In « Advances in Infiltration »", *Am. Soc. of Agricultural Engineers (Ed.)*, 1983, pp. 21-33.

Lapidus, L., y N. R. Amundson, "Mathematics of absorption in beds. 6 - The effects of longitudinal diffusion in ion exchange and chromatographic columns" *J. Phys. Chem.*, 56, 1952, pp. 984-988.

Mcbratney, A. B, y R. Webster, "How many observations are needed for regional estimation of soil properties?", *Soil Sci.*, 135, 1983, pp. 177-183.

Mantoglou, A., y L. W. Gelhar, "Stochastic modeling of large-scale transient unsaturated flow systems", *Water Resour. Res.*, 23, 1987, pp. 37-67.

Reiniger, P., y G. H. Bolt, "Theory of chromatography and its application to cation exchange in soils", *Neth. J. Agric. Sci.*, 20, 1972, pp. 301-313.

Rose C. W., F. W. Chichester, J. R. Williams, y J. T. Ritchie, "Application of an approximate analytic method of computing solute profiles with dispersion in soils", *J. Environ. Qual.*, 11, 1978, pp. 151-155.

Sardin, M., D. Schweich, F. J. Leij, y M. Th. Van Genuchten, "Modeling the non equilibrium transport of linearly solutes in porous media: a review", *Water Resour. Res.*, 27, 1991, pp. 2287-2307.

Sardin, M., R. Krebs, y D. Schweich, "Transient mass-transport in the presence of non linear physico-chemical interaction law progressive modelling an appropriate experimental procedures", *Geoderma*, 38, 1986, pp. 115-130.

Scotter, D.R., "Preferential solute movement through larger soil voids. I-Some computations using simple theory", *Aust. J. Soil Res.*, 16, 1978, pp. 257-267.

Valocchi, A.J., "Validity of the local equilibrium assumption for modeling sorbing solute transport through homogeneous soils", *Water Resour. Res.*, 21, 1985, pp. 808-820.

Valocchi, A. J., R. L. Street, y P.V. Roberts, "Transport of ion-exchanging solutes in groundwater: chromatographic theory and field simulation", *Water Resour. Res.*, 17, 1981, pp. 1517-1527.

Vauclin, M., "Review-State of the Art. Modeling of solute transport in the vadose zone" *Revue des sciences de l'eau* 7, 1994, pp. 81-102.

Vauclin M., Méthodes d'études de la variabilité spatiale des propriétés d'un sol, Variabilité spatiale des processus de transfert dans les sols, *Ed. Les Colloques de INFRA*, 15, 1983, pp. 9-43.

van Genuchten, M. Th., "Inaugural and State of the Art Conferences", Volume 1. 15th *World Congress of Soil Science*. July 10-16, Acapulco, México, 1994, pp. 220.

van Genuchten, M. Th., J. M. Davidson, y P.J. Wierenga, "An evaluation of kinetic and equilibrium equations for prediction of pesticide movement in porous media", *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 38, 1974, pp. 29-35.

van Genuchten, M. Th., y P.J. Wierenga, "Mass transfer studies sorbing in porous media, III-Experimental evaluation with 1,4,5 T", *Soil Sci. Soc. J.*, 41, 1977, pp. 278-285.

van Genuchten, M. Th., S. M. Garelick, y W. W. G. Yeh, "Applications of parameters estimation techniques to solute transport studies", *In D.G De Coursey (Ed.), proceedings International Symposium on Water Quality Modelling Agricultural nonpoint sources*, June 19-23, Logan, UT, U.S. Dept. of Ag. Res. Serv., ARS-81, 1990, pp. 731-754.

van Genuchten, M. Th., y J. W. Alves, "Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport", *Tech. Bull. 161. Dept Agric. Washington D.C.* 1982, pp. 151.

Warrick, A. W., G. J. Mullen, y N. R. Nielsen, "Scaling field-measured soil hydraulic properties using a similar media concept", *Water Resour. Res.*, 13, 1977, pp. 355-362.

White R. E., J. S. Dyson, R. A. Haigh, W. A. Jury, y G. Sposito, "A transfer function model of solute transport through soil. 2- Illustrative applications", *Water Resour. Res.*, 22, 1986, pp. 248-254.

Warrick, A. W., y D. R. Nielsen, "Spatial variability of soil physical properties in the field", *In D. Hillel ed. Applications of Soil Physics*, Academic, Orlando, Fla., 1980, pp. 319-344.

---

## CAPÍTULO 3

# DESCRIPCION DE ELLAM

### Introducción

El método localizado adjunto euleriano-lagrangiano (ELLAM, por sus siglas en inglés) es el resultado de aplicar el método localizado adjunto (LAM, por sus siglas en inglés), junto con el método de las características, a la ecuación de transporte. LAM es una familia general de métodos numéricos que se basa en la teoría algebraica de los problemas de valores en la frontera, debida a Herrera (1984, 1985, 1986). La característica más importante de estos métodos es su capacidad de tratar eficientemente derivadas espaciales de primer orden. Sin embargo, para problemas de transporte, LAM presenta limitaciones en el número de Courant, y excesiva difusión numérica. Para salvar estas dificultades, y con el propósito de combinar las ventajas de LAM (para las derivadas espaciales) y el método de las características (para la derivada temporal), se implementa ELLAM. Esta metodología fue presentada por primera vez en una secuencia de dos artículos (Celia *et al.*, 1990; Herrera *et al.*, 1993); en el primero se describe su implementación numérica y en el segundo su fundamento teórico. Las principales características de ELLAM son que permite aliviar las restricciones en el número de Courant e incorpora de manera sistemática cualquier tipo de condición de frontera, asegurando

siempre la conservación de la masa. Posteriormente a la implementación original de ELLAM, surgió el método de celdas, o volumen finito (Herrera y Herrera, 1994), referido como FVELLAM, el cual es preferible para aplicaciones en dos y tres dimensiones.

En este capítulo se describe un desarrollo clásico de ELLAM para la ecuación de transporte lineal en una dimensión, así como la descripción FVELLAM para una y dos dimensiones. Se presentan sus principales diferencias, así como las ventajas de usar una u otra. El desarrollo presentado aquí será la base para los casos no lineales.

### 3.1. ELLAM en una dimensión

#### 3.1.1. Planteamiento del problema

Considérese la siguiente ecuación de advección-difusión-reacción lineal, en la dirección  $x$ , con  $V$ ,  $D$ , y  $k$  constantes positivas:

$$N(u) \equiv \frac{\partial u}{\partial t} + V \frac{\partial u}{\partial x} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + ku = f(x,t) \quad (3.1)$$

para  $x \in \Omega_x = [0, L]$ , y  $t \in \Omega_t = [0, \infty]$ , y sujeta a cualquiera de las siguientes condiciones de frontera y condición inicial:

$$\begin{aligned} u(x,t) &= g_1(x,t); x = 0, \text{ o } x = L, t > 0 \\ -D \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} &= g_2(x,t); x = 0, \text{ o } x = L, t > 0 \\ Vu(x,t) - D \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} &= g_3(x,t); x = 0, \text{ o } x = L, t > 0 \\ u(x,0) &= u_0(x) \end{aligned} \quad (3.1a)$$

donde  $u(x,t)$  es la variable de interés,  $V$  es la velocidad,  $D$  es el coeficiente de difusión,  $k$  es un coeficiente de reacción, y donde  $x$  y  $t$  representan las variables independientes espacial y temporal respectivamente.

Se demuestra que el operador adjunto asociado al operador diferencial  $N(\bullet)$  de la ecuación (3.1) es (Celia *et al.*, 1990):

$$N^*(\bullet) \equiv -\frac{\partial(\bullet)}{\partial t} - V \frac{\partial(\bullet)}{\partial x} - D \frac{\partial^2(\bullet)}{\partial x^2} + k \quad (3.2)$$

### 3.1.2. Formulación ELLAM

ELLAM tiene su fundamento teórico en la identidad:  $wN(u) - uN^*(w) \equiv \nabla \bullet \wp(u, w)$  (Herrera *et al.*, 1993); donde  $\wp(u, w)$  es una función bilineal apropiada y donde  $N$  y  $N^*$  son operadores diferenciales lineales, siendo el segundo el operador adjunto. En otras palabras, el operador adjunto  $N^*$  deber ser tal que permita expresar el segundo miembro de la identidad como una divergencia.

ELLAM es un método de residuos pesados y se formula usando la primera forma débil de la ecuación (3.1) en relación con una función de peso arbitraria  $w(x, t)$ , a saber:

$$\int_0^\infty \int_0^L [N(u) - f] w(x, t) dx dt = 0 \quad (3.3)$$

La ecuación (3.3) admite dividir el espacio  $[0, L]$  en  $E$  subintervalos  $\{[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{E-1}, x_E]\}$ , con  $x_0=0, x_E=L$ . Estos subintervalos son separados por  $E+1$  nodos  $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_{E-1}, x_E\} \equiv \{x_i \mid i= 0, 1, 2, \dots, E-1, E\}$ , donde el subíndice  $i$  denota una posición espacial ( $x_i \equiv i\Delta x$  para  $\Delta x$  constante). En forma general,  $\nabla_{x_i} \equiv x_i - x_{i-1}, \Delta x_i \equiv x_{i+1} - x_i$  son los operadores en diferencias hacía atrás y hacía adelante respectivamente (si  $\Delta x$  es constante:  $\nabla_{x_i} = \Delta x_i$ ). Del mismo modo, el dominio temporal es dividido en un número finito de intervalos de magnitud  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  ( $t^n \equiv n\Delta t$  para  $\Delta t$  constante), donde el superíndice  $n$  denota una posición temporal (ver figura 3.1). Esto implica que la ecuación (3.3) sea evaluada como una suma elemental de integrales aplicada a cada uno de los  $E$  subintervalos. Por lo tanto, si asociamos a cada nodo  $x_i$  una función de peso  $w_i^{n+1}(x, t)$ , que será definida más adelante, al integrar por partes dos veces la ecuación (3.3) resulta:

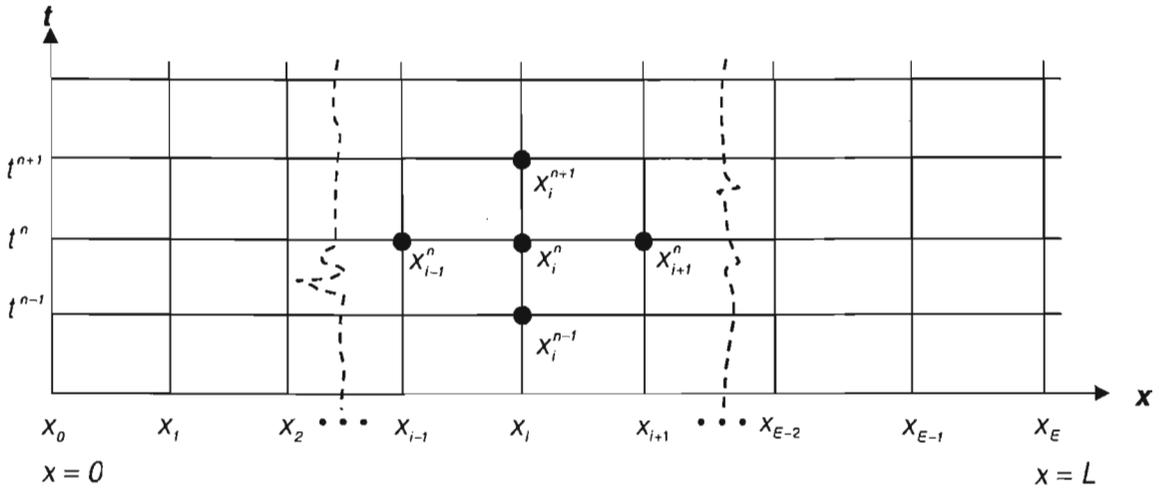


Figura 3.1. División del dominio  $(x, t)$  en subintervalos.

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \int_0^L [N(u) - f] w(x, t)_i^{n+1} dx dt \\
 &= \int_0^\infty \int_0^L \left[ \frac{\partial u}{\partial t} + V \frac{\partial u}{\partial x} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - f(x, t) \right] w_i^{n+1}(x, t) dx dt \\
 &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^{n+1}) w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^n) w_i(x, t^n) dx \\
 & - D \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_i^l(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_i^l(t)} dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_c^l(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_c^l(t)} dt \right. \\
 & \left. + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_r^l(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r^l(t)} dt \right] + \int_{\Omega_i} u(x, t) N'(w_i^{n+1}) dx dt \\
 & + \int_{\Omega_2^i} u(x, t) N'(w_i^{n+1}) dx dt - \int_{\Omega_1^i} u(x, t) f(x, t) w_i^{n+1}(x, t) dx dt = 0
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

y la definición de  $X_i^l(t)$ ,  $X_c^l(t)$  y  $X_r^l(t)$  se presenta en la figura 3.2.

El doble corchete denota el operador espacial de salto, definido como

$$\langle \bullet \rangle_{x_k} \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ (\bullet)_{x_{k+\epsilon}} - (\bullet)_{x_{k-\epsilon}} \right] \tag{3.5}$$

Considerando que la función de peso satisface la ecuación (3.2) en cada uno de los intervalos en los que se divide el dominio, en la ecuación (3.4)

son nulas las integrales que contienen el operador adjunto  $N^*(w)$ . Por lo tanto, la ecuación (3.4) se reduce a:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^{n+1}) w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^n) w_i(x, t^n) dx \\
 & - D \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x'_l(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x'_l(t)} dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x'_c(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x'_c(t)} dt \right. \\
 & \left. + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x'_r(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x'_r(t)} dt \right] - \int_{\Omega'_1 \cup \Omega'_2} f(x, t) w_i^{n+1}(x, t) dx dt = 0
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

La ecuación (3.6) es la transformación que sufre la ecuación diferencial parcial (3.1) mediante ELLAM, y constituye la forma base. Esta ecuación es válida para nodos internos donde las líneas características no cruzan las fronteras. Para el caso de nodos adyacentes a las fronteras, o en algún nodo interno donde las características las cruzan, esta forma base cambiará para capturar ese hecho. Como se verá más adelante, esta incorporación se realiza de forma natural para cualquier tipo de condición de frontera.

De la expresión (3.6) se observa que ELLAM transfiere la información de  $u(x, t)$  a valores nodales, en cada uno de los intervalos o elementos en que es dividido el dominio espacio-tiempo. Este hecho es importante, porque el grado de aproximación de ELLAM dependerá del método que se utilice para evaluar cada una de las integrales que aparecen en esta expresión. En esta ecuación, la primera integral del primer miembro será referida como la integral en el tiempo  $n+1$ ; la segunda integral será referida como integral en el tiempo  $n$ ; las demás integrales serán referidas como integrales difusivas, y la última como integral del término no homogéneo.

### 3.1.3. Elección de la función de peso y líneas características

La función  $w(x, t)$  debe elegirse de modo que al aplicarle el operador adjunto el resultado sea nulo (3.2). Es decir, se debe encontrar una función  $w(x, t)$  tal que satisfaga la siguiente ecuación diferencial homogénea:

$$N^*(w) = -\frac{\partial w}{\partial t} - V \frac{\partial w}{\partial x} - D \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + kw = 0 \tag{3.7}$$

Por analogía con el método de separación de variables, ELLAM admite que la solución a la ecuación (3.7) se encuentre dividiéndola en un término difusivo:

$$D \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0 \quad (3.8)$$

y un término advectivo-reactivo:

$$-\frac{\partial w}{\partial t} - V \frac{\partial w}{\partial x} + kw = 0 \quad (3.9)$$

La ecuación (3.8) dice que  $w(x,t)$  es una función lineal de  $x$ , mientras que la ecuación (3.9) implica que  $w(x,t)$  varía en forma exponencial a lo largo de la línea característica:  $x-x_0 = V(t-t_0)$ .

Formalmente, las líneas características de (3.9), para el caso general de una velocidad variable, quedan definidas con:

$$\frac{dx}{dt} = V[x(t), t] \quad (3.9a)$$

Para ello, dado un punto  $(\bar{x}, \bar{t})$ , con  $\bar{t} \in [t^{n+1}, t^n]$  se denotará la solución de la ecuación (3.9.a) para un punto  $(x(t), t)$  por  $X(t; \bar{x}, \bar{t})$ . En particular, se puede definir:

$$x^* = X(t^n; x, t^{n+1}) \quad (3.9b)$$

$$\hat{x} = X(t^{n+1}; x, t^n) \quad (3.9c)$$

de tal forma que  $(x, t^{n+1})$  se proyecta hacia atrás en  $(x^*, t^n)$ , y  $(x, t^n)$  se proyecta hacia adelante en  $(\hat{x}, t^{n+1})$ . Estos procedimientos se referirán como una proyección hacia atrás y una proyección hacia adelante. Dos intervalos continuos  $[x_{i-1}, x_i] \cup [x_i, x_{i+1}]$  en  $t^{n+1}$ , se proyectarán hacia atrás en  $[x^*_{i-1}, x^*_i] \cup [x^*_i, x^*_{i+1}]$  en  $t^n$  a través de sus líneas características (también en forma inversa), e implícitamente definirán dos elementos  $\Omega_1^i \cup \Omega_2^i$  en el plano  $(x,t)$  asociados al nodo  $x_i$  (figura 3.2). Estos elementos se pueden ver también como las proyecciones de la función de peso  $w(x,t)$  en el plano espacio-temporal. Adicionalmente, la característica que pasa por  $x_{i-1}$  en  $t^{n+1}$  y  $x^*_{i-1}$  en  $t^n$  será llamada característica izquierda asociada al nodo  $x_i$ , y se representará por  $X_l^i(t)$ . La característica que pasa por el nodo  $x_i$  en  $t^{n+1}$  y  $x^*_i$  en  $t^n$  será llamada una característica central asociada al nodo  $x_i$ , y se representará por  $X_c^i(t)$ . La característica que pasa por  $x_{i+1}$  en  $t^{n+1}$  y  $x^*_{i+1}$  en  $t^n$  será la característica derecha asociada al nodo  $x_{i+1}$ , y se representará por  $X_r^i(t)$  (figura 3.2). Obsérvese que estas definiciones ya fueron utilizadas en la ecuaciones (3.4) y (3.6).

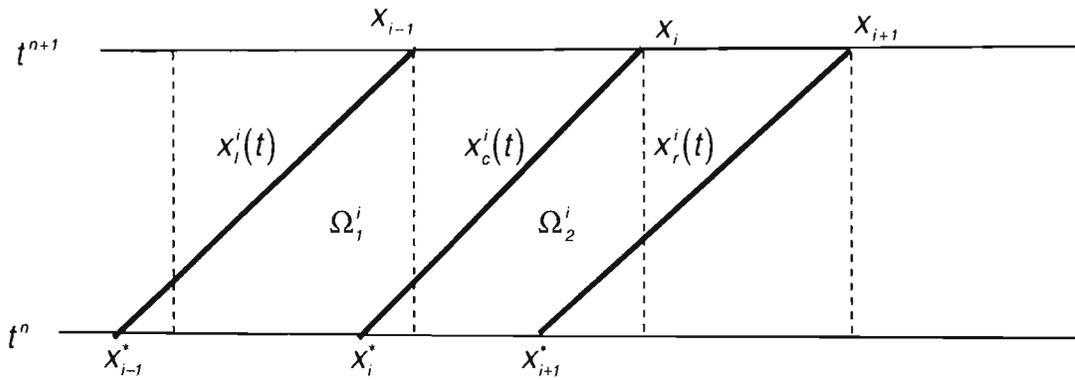


Figura 3.2. Intervalos espaciales y líneas características.

Considerando esto, se puede derivar una familia de funciones  $w(x,t)$ , que satisfacen simultáneamente las ecuaciones (3.8) y (3.9), definida para un arreglo de puntos nodales como sigue:

$$w_i^{n+1} = \begin{cases} \left( \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x} + V \frac{t^{n+1} - t}{\Delta x} \right) \exp[k(t - t^n)], & (x,t) \in \Omega_1^i, \\ \left( \frac{x_{i+1} - x}{\Delta x} - V \frac{t^{n+1} - t}{\Delta x} \right) \exp[k(t - t^n)], & (x,t) \in \Omega_2^i, \\ 0 \text{ de otra forma} \end{cases} \quad (3.10a)$$

Donde el subíndice  $i$  denota la localización espacial, el superíndice  $n$  el nivel en el tiempo, y la notación  $w_i^{n+1}(x,t)$  indica que la función de peso está asociada con el nodo espacial  $i$  y con el nivel en el tiempo  $(n+1)$ . En la ecuación (3.10a) se ha considerado un espaciamento constante de los nodos.

La función de peso  $w_i^{n+1}(x,t)$  definida con la ecuación (3.10a), tiene los siguientes requerimientos de continuidad:  $C^0[w_x]$ ,  $C^{-1}[w_t]$ , es decir, es no nula entre los niveles en el tiempo  $(t^n, t^{n+1})$ , y discontinua entre los niveles  $t^n$  y  $t^{n+1}$  y entre las líneas características izquierda, central, y derecha.

Otra solución de  $w(x,t)$  que satisface las ecuaciones (3.8) y (3.9) es de la forma siguiente:

$$w_i^{n+1} = \begin{cases} \exp[k(t - t^n)], & (x,t) \in \Omega_1^i \cup \Omega_2^i, \\ 0 \text{ de otra forma} \end{cases} \quad (3.10b)$$

La función de peso definida según la ecuación (3.10a) será referida como función de peso lineal, mientras que la definida según la ecuación (3.10b) será referida como función de peso constante.

Si no se indica lo contrario, en lo que sigue se usará la función de peso lineal. En las figuras 3.3 y 3.4 se muestra una región típica para las dos funciones de peso lineal y constante respectivamente. Obsérvese que si  $k=0$  en las ecuaciones (3.9 y 3.10), la geometría de las funciones es como se indica en las figuras 3.5 y 3.6.

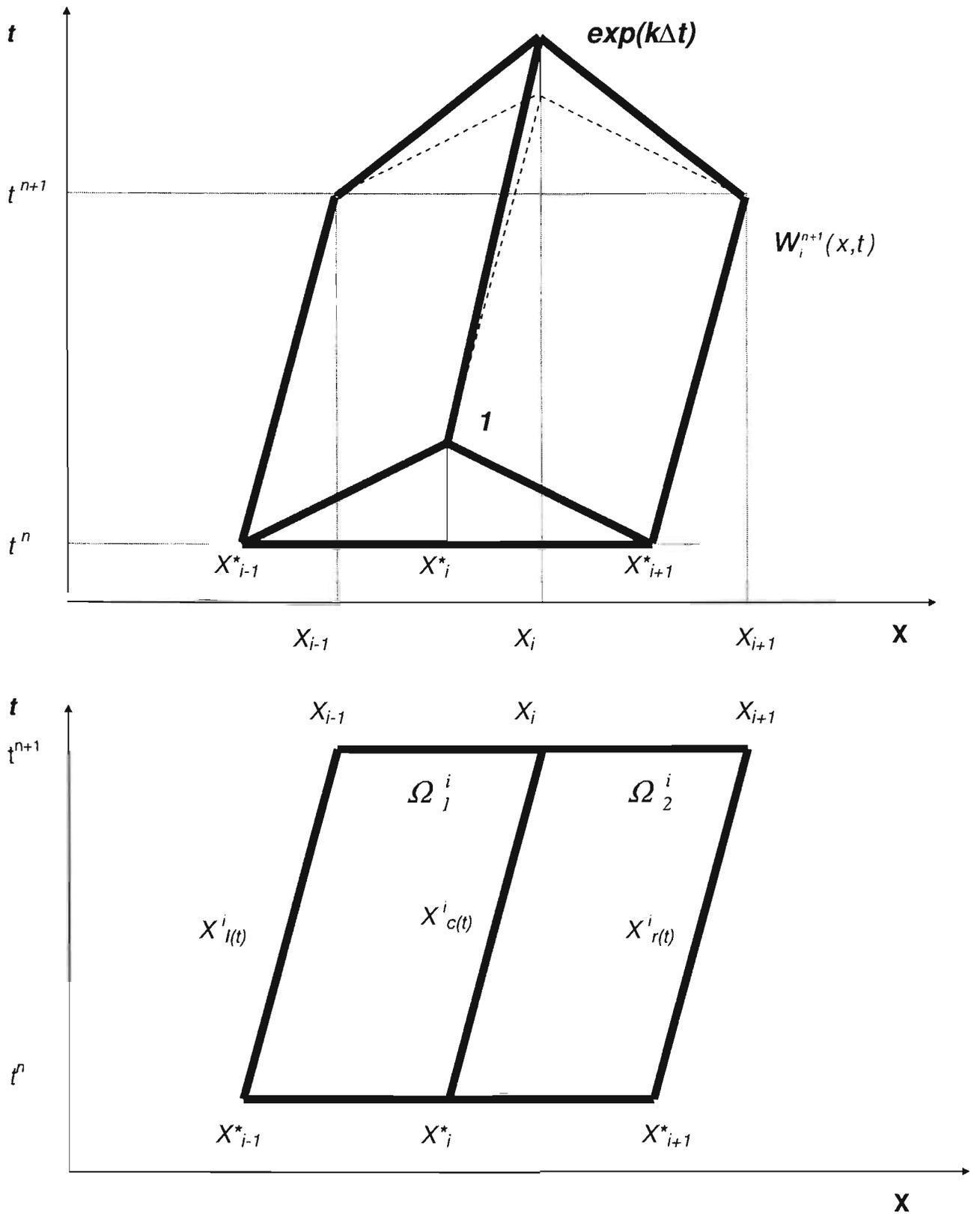


Figura 3.3. Geometría de la función de peso lineal ( $k \neq 0$ ).

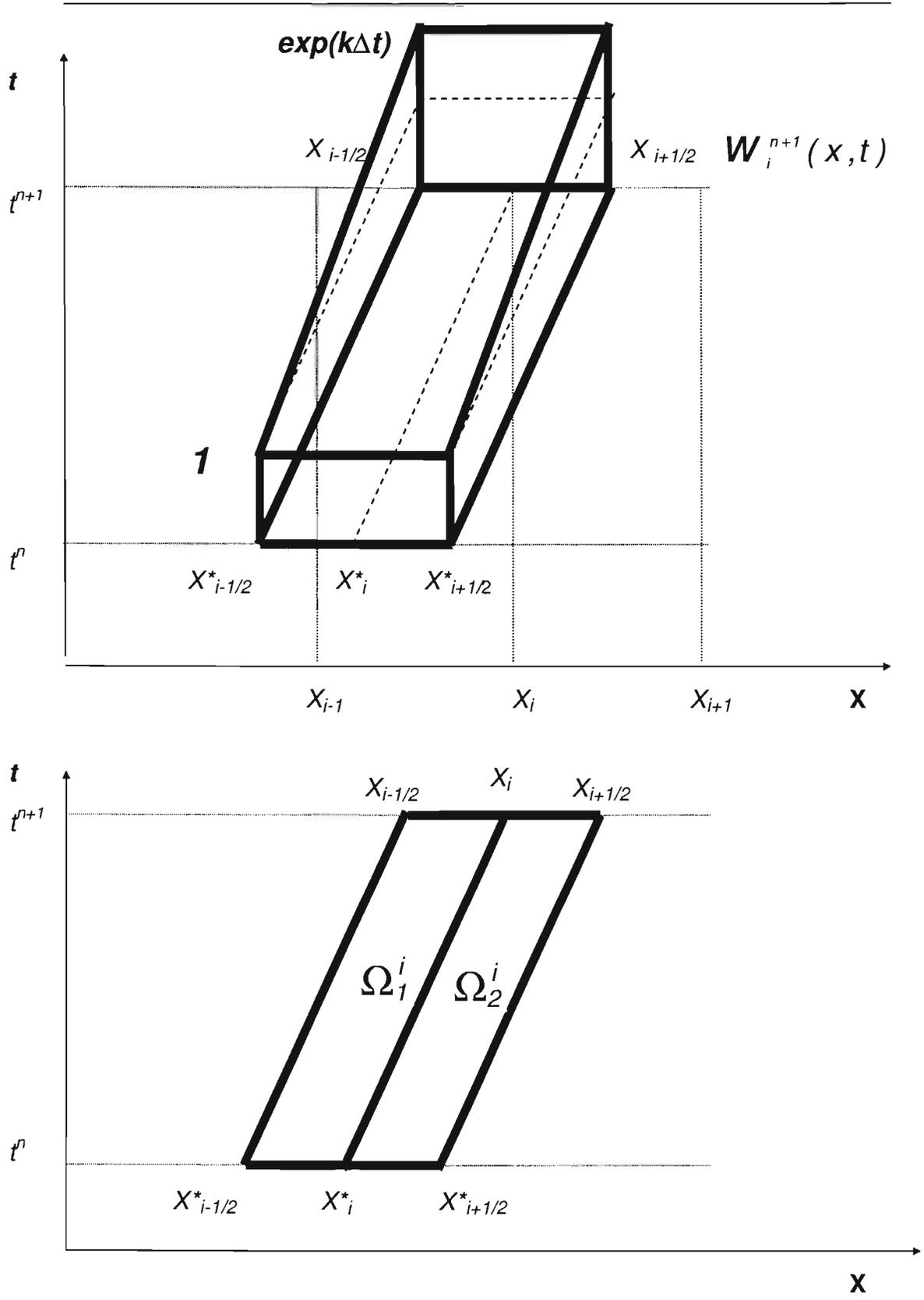


Figura 3.4. Geometría de la función de peso constante ( $k \neq 0$ ).

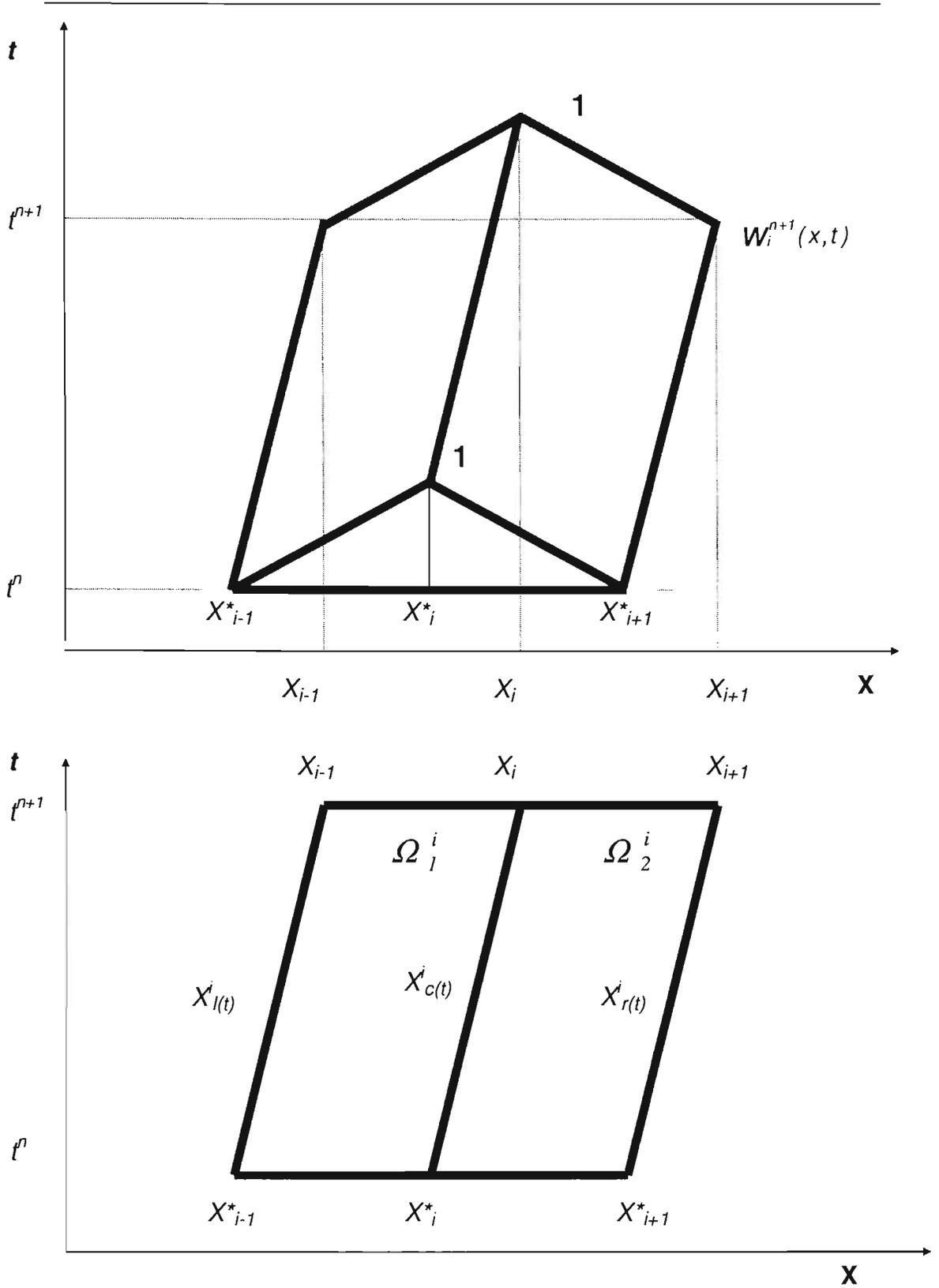


Figura 3.5. Geometría de la función de peso lineal ( $k=0$ ).

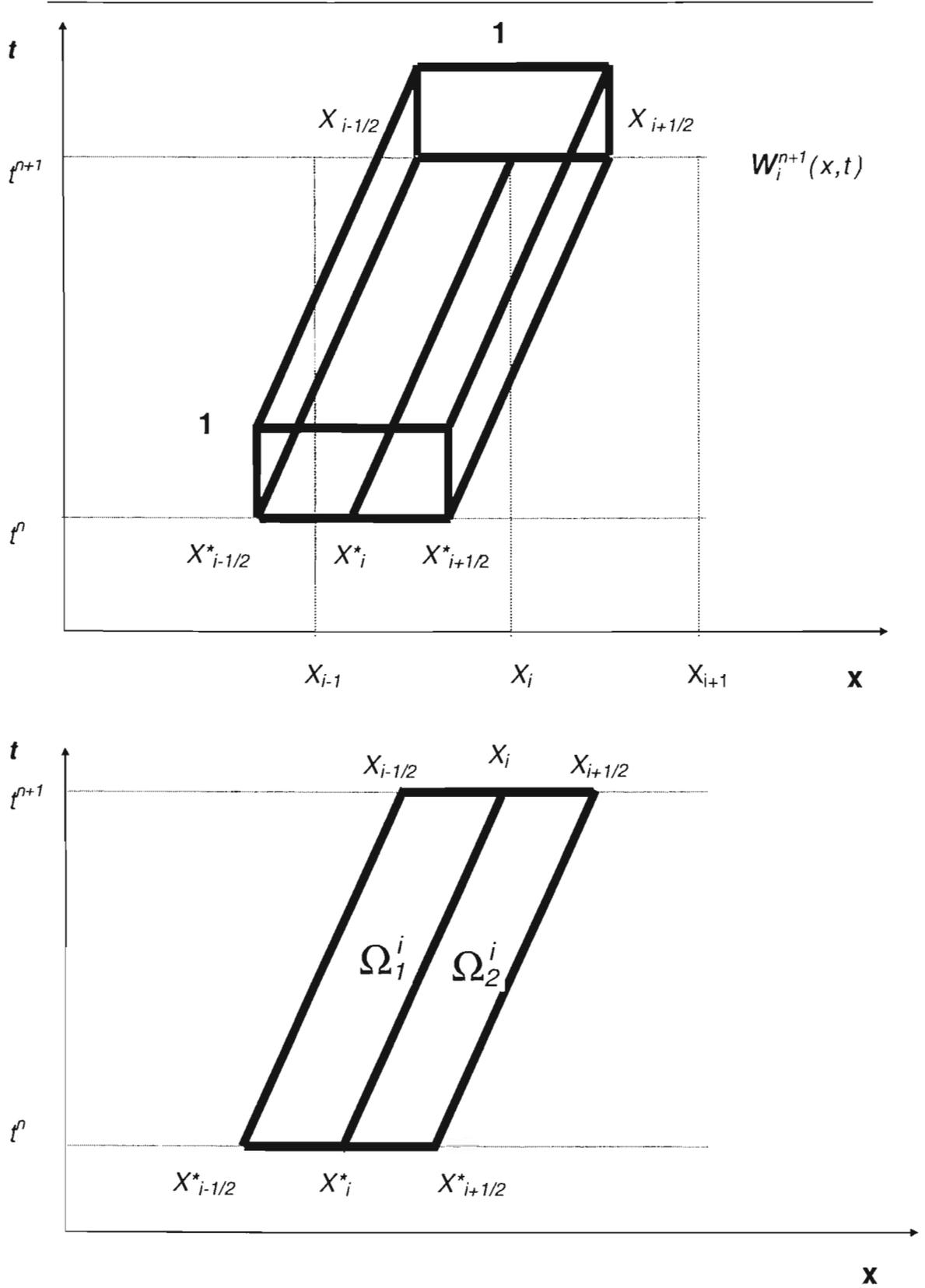


Figura 3.6. Geometría de la función de peso constante ( $k=0$ ).

### 3.1.4. Evaluación de las integrales

Al evaluar el operador espacial de salto (3.5) de acuerdo con la definición de  $w(x,t)$  dada por la ecuación (3.10a), se obtiene:

$$\left\langle \frac{\partial w^{n+1}}{\partial x_i} \right\rangle_{x_i^l(t)} = \left\langle \frac{\partial w^{n+1}}{\partial x_i} \right\rangle_{x_i^l(t)} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \exp[k(t-t^n)] \quad (3.11)$$

$$\left\langle \frac{\partial w^{n+1}}{\partial x_i} \right\rangle_{x_i^c(t)} = -\frac{2}{\Delta x} \cdot \exp[k(t-t^n)]$$

de esta forma, la ecuación (3.6) se reduce a:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^{n+1}) w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\ & - D \left[ \left( \frac{1}{\Delta x} \right) \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_i^l(t), t) \exp[k(t-t^n)] dt - \left( \frac{2}{\Delta x} \right) \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_i^c(t), t) \exp[k(t-t^n)] dt \right. \\ & \left. + \left( \frac{1}{\Delta x} \right) \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_i^r(t), t) \exp[k(t-t^n)] dt \right] = \int_{\Omega_i^2 U \Omega_i^2} f(x, t) w_i^{n+1}(x, t) dx dt \end{aligned} \quad (3.12)$$

En lo sucesivo, sea  $U_i^n$  una aproximación discreta de la función continua  $u(x,t)$ , tal que:  $x=i\Delta x$  y  $t=n\Delta t$ . Además, se admitirá que entre dos nodos sucesivos la variación de  $U_i^n$  es lineal.

Aparte de la integración exacta (que por lo general se puede obtener solamente cuando la velocidad  $V$  es constante), existen diversas formas de evaluar las integrales que aparecen en la ecuación (3.12). Por ejemplo, la integral temporal se puede evaluar de las formas siguientes:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x,t) w_i^{n+1}(x,t) dt = [\theta U_i^{n+1} + (1-\theta)U_i^n] \int_{t^n}^{t^{n+1}} w_i^{n+1}(x,t) dt \quad (3.13)$$

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x,t) w_i^{n+1}(x,t) dt = [\theta U_i^{n+1} w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) + (1-\theta)U_i^n w_i^{n+1}(x, t^n)] \quad (3.14)$$

donde la integral del segundo miembro de la ecuación (3.13) se resuelve de manera exacta y  $\theta$  es un factor de peso  $0 \leq \theta \leq 1$ . Las integrales espaciales se pueden evaluar con una aproximación del tipo (3.14), con  $\theta=1/2$  (regla del trapecio). La regla del trapecio conserva la masa, mientras que otros métodos de integración de mayor orden de aproximación (Simpson, Lobatto) producen inconsistencias, lo que origina difusión numérica en las soluciones (Healy y Rusell, 1993).

En los siguientes desarrollos las integrales espaciales se han llevado de manera exacta; sin embargo, también se pueden usar las ecuaciones del tipo (3.13) y (3.14). Para las integrales temporales, se ha empleado una aproximación del tipo (3.14) con  $\theta = 1$ .

Por otra parte, para evaluar las integrales se tendrán en cuenta las siguientes consideraciones: en general, si  $V$  y  $\Delta x$  son constantes, se pueden establecer las siguientes relaciones (figura 3.7):

$$\begin{aligned}
 X_{i-N_c-2} &\leq X_{i-1}^* \leq X_{i-1-N_c} \\
 X_{i-N_c-1} &\leq X_i^* \leq X_{i-N_c} \\
 X_{i-N_c} &\leq X_{i+1}^* \leq X_{i-N_c+1}
 \end{aligned}
 \tag{3.15}$$

donde,  $i$  es el índice espacial,  $Cr = V\Delta t/\Delta x$  es el "número de Courant",  $N_c = \text{INT}(Cr)$  es la "parte entera de  $Cr$ ",  $x^*$  indica el pie de la característica para  $t=t^n$ ,  $\alpha = 1 - (Cr - N_c)$ ,  $\alpha + \beta = 1$ . Además:

$$\begin{aligned}
 x^* &= x - (V \Delta t) \\
 x &= x^* + (V \Delta t) \\
 x_i &\equiv i \Delta X \\
 X_{i-N_c-2} &\equiv \Delta x (i - N_c - 2)
 \end{aligned}$$

Por interpolación lineal, se tienen las siguientes aproximaciones:

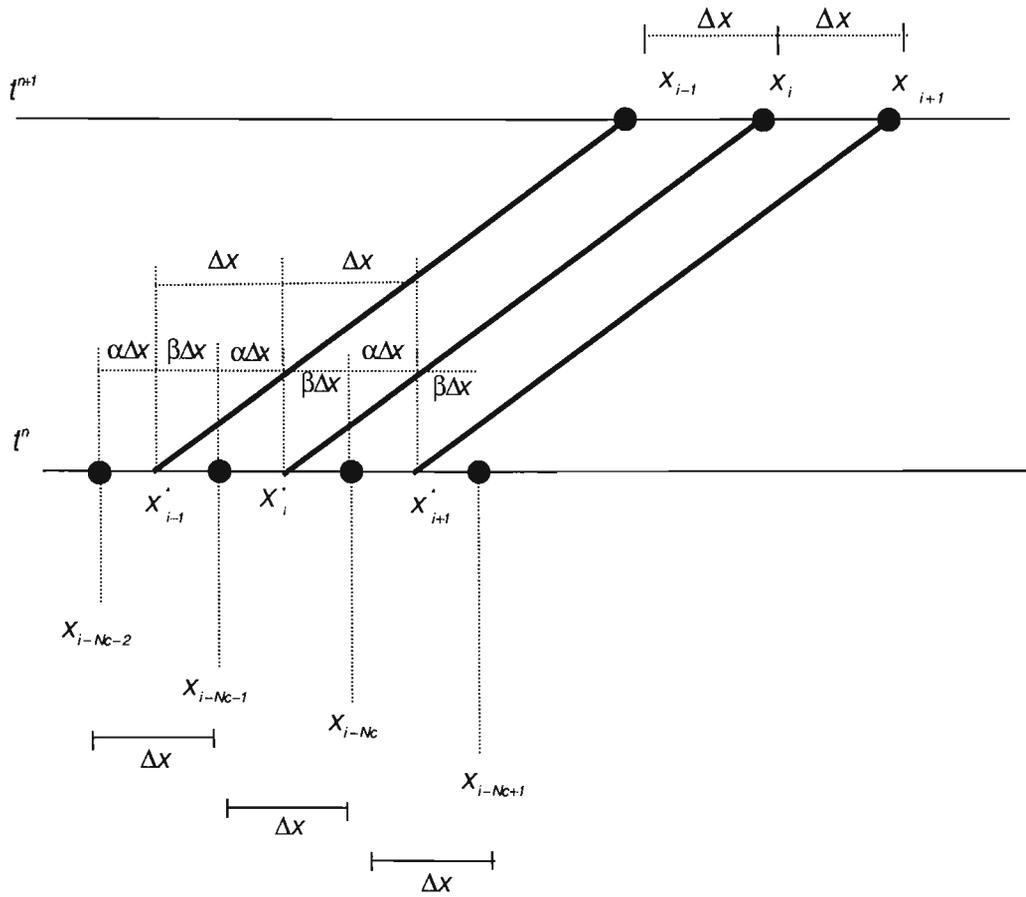


Figura 3.7. Geometría ELLAM para  $V$  y  $\Delta x$  constante y un  $C_r$  Arbitrario.

$$U_{i-1}^n = U_{i-Nc-2}^n (C_r - N_c) + U_{i-Nc-1}^n (1 + N_c - C_r); \quad X_{i-Nc-2} \leq X^* \leq X_{i-Nc-1}$$

$$U_i^{*n} = U_{i-Nc-1}^n (C_r - N_c) + U_{i-Nc}^n (1 + N_c - C_r); \quad X_{i-Nc-1} \leq X^* \leq X_{i-Nc} \quad (3.16)$$

$$U_{i+1}^{*n} = U_{i-Nc}^n (C_r - N_c) + U_{i-Nc+1}^n (1 + N_c - C_r); \quad X_{i-Nc} \leq X^* \leq X_{i-Nc+1}$$

De igual forma:

$$U_i^{n+1} = \begin{cases} U_{i-1}^{n+1} + (U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}) \left( \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x} \right) & ; x \in [x_{i-1}, x_i] \\ U_i^{n+1} + (U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}) \left( \frac{x - x_i}{\Delta x} \right) & ; x \in [x_i, x_{i+1}] \end{cases} \quad (3.17)$$

### 3.1.4.1. Evaluación de las integrales para características que no cruzan las fronteras

De acuerdo con lo anterior, la integral en el tiempo  $t^{n+1}$  de la ecuación (3.12) resulta:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left[ U_{i-1}^{n+1} + (U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}) \left( \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x} \right) \right] \left[ \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x} \right] \exp[k(t^{n+1} - t^n)] dx = \\ & \left[ \frac{\Delta x}{2} U_{i-1}^{n+1} + \frac{\Delta x}{3} (U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}) \right] \exp[k(t^{n+1} - t^n)], \\ & \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[ U_i^{n+1} + (U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}) \left( \frac{x - x_i}{\Delta x} \right) \right] \left[ \frac{x_{i+1} - x}{\Delta x} \right] \exp[k(t^{n+1} - t^n)] dx = \\ & \left[ \frac{\Delta x}{2} U_i^{n+1} + \frac{\Delta x}{6} (U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}) \right] \exp[k(t^{n+1} - t^n)], \end{aligned} \quad (3.18)$$

lo que implica que

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} U(x, t^{n+1}) w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) dx = \left[ \frac{\Delta x}{6} U_{i-1}^{n+1} + \frac{2\Delta x}{3} U_i^{n+1} + \frac{\Delta x}{6} U_{i+1}^{n+1} \right] \exp(k\Delta t).$$

Para la integral en el tiempo  $t^n$  se tiene que:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} U(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} U(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} U(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\ & = \int_{x_{i-1}}^{x_{i-1} + \beta \Delta x} U(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx + \int_{x_{i-1} + \beta \Delta x}^{x_i} U(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\ & + \int_{x_i}^{x_i + \beta \Delta x} U(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx + \int_{x_i + \beta \Delta x}^{x_{i+1}} U(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \end{aligned} \quad (3.19)$$

por interpolación lineal :

$$U(x, t^n) = \begin{cases} U_{i-N_c-2}^n + (U_{i-N_c-1}^n - U_{i-N_c-2}^n) \left( \frac{x^i - x_{i-N_c-2}}{\Delta x} \right) & ; x^i \in [x_{i-1}, x_{i-1} + \beta \Delta x] \\ U_{i-N_c-1}^n + (U_{i-N_c}^n - U_{i-N_c-1}^n) \left( \frac{x^i - x_{i-N_c-1}}{\Delta x} \right) & ; x^i \in [x_{i-1} + \beta \Delta x, x_i + \beta \Delta x] \\ U_{i-N_c}^n + (U_{i-N_c+1}^n - U_{i-N_c}^n) \left( \frac{x^i - x_{i-N_c}}{\Delta x} \right) & ; x^i \in [x_i + \beta \Delta x, x_{i+1}] \end{cases} \quad (3.20)$$

resultando

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^n) w_{i+1}^{n+1}(x, t^n) dx^i = \\ & + \Delta x U_{i-N_c-2}^n \left( \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{6} \right) + \Delta x U_{i-N_c-1}^n \left( \frac{2}{3} - \alpha^2 + \frac{\alpha^3}{2} \right) \\ & + \Delta x U_{i-N_c}^n \left( \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{2} \right) + \Delta x U_{i-N_c+1}^n \left( \frac{\alpha^3}{6} \right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

En el inciso 3.1.6 se verán algunas formas más generales para calcular la integral en el tiempo  $t^n$ , para el caso de velocidad variable, mismas que se pueden ampliar a dos y tres dimensiones.

Ahora evaluaremos las integrales del término difusivo. Como se mencionó antes, estas integrales temporales serán evaluadas en el punto  $t=t^{n+1}$ , donde resulta una aproximación totalmente implícita que lleva al método modificado de las características (MMOC) [Celia *et al.*, 1990]. De acuerdo con esto, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & \int_{t^{n-1}}^{t^{n+1}} u(x_i^i(t), t) \exp [k(t - t^n)] dt = U_{i+1}^{n+1} \left[ \theta \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right] \\
 & + U_{i-2}^{n-2} \left[ (1 - \theta)(1 - \alpha) \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right] \\
 & + U_{i-1}^{n-1} \left[ (1 - \theta)\alpha \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right] \\
 \\
 & \int_{t^{n-1}}^{t^{n+1}} u(x_c^i(t), t) \exp [k(t - t^n)] dt = \\
 & U_{i+1}^{n+1} \left[ -2\theta \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right] \\
 & + U_{i-1}^{n-1} \left[ -2(1 - \theta)(1 - \alpha) \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right] \\
 & + U_{i-2}^{n-2} \left[ -2(1 - \theta)\alpha \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right] \\
 \\
 & \int_{t^{n-1}}^{t^{n+1}} u(x_i^i(t), t) \exp [k(t - t^n)]_{x_i^i(t)} dt = U_{i+1}^{n+1} \left[ \theta \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right] \\
 & + U_{i-2}^{n-2} \left[ (1 - \theta)(1 - \alpha) \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right] \\
 & + U_{i-1}^{n-1} \left[ (1 - \theta)\alpha \left( \frac{\exp(k\Delta t) - 1}{k\Delta x} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

Al sustituir las expresiones (3.18, 3.21, y 3.22) se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & \left[ \frac{\Delta x}{6} \exp(k\Delta t) - \frac{D\theta}{k\Delta x} (\exp(k\Delta t) - 1) \right] U_{i-1}^{n+1} \\
 & + \left[ \frac{2\Delta x}{3} \exp(k\Delta t) + \frac{2D\theta}{k\Delta x} (\exp(k\Delta t) - 1) \right] U_i^{n+1} \\
 & + \left[ \frac{\Delta x}{6} \exp(k\Delta t) - \frac{D\theta}{k\Delta x} (\exp(k\Delta t) - 1) \right] U_{i+1}^{n+1} \\
 & + \left[ -\Delta x \left( \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{6} \right) - \frac{D(1-\theta)(1-\alpha)}{k\Delta x} (\exp(k\Delta t) - 1) \right] U_{i-N_c-2}^n \\
 & + \left[ -\Delta x \left( \frac{2}{3} - \alpha^2 + \frac{\alpha^3}{2} \right) + \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} (\exp(k\Delta t) - 1)(2 - 3\alpha) \right] U_{i-N_c-1}^n \\
 & + \left[ -\Delta x \left( \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{2} \right) + \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} (\exp(k\Delta t) - 1)(3\alpha - 1) \right] U_{i-N_c}^n \\
 & + \left[ \left( \frac{-\Delta x \alpha^3}{6} \right) - \frac{D(1-\theta)\alpha}{k\Delta x} (\exp(k\Delta t) - 1) \right] U_{i-N_c+1}^n \\
 & = \int_{\Omega'_1 + \Omega'_2} f(x, t) w_i^{n+1}(x, t) dx dt \tag{3.23}
 \end{aligned}$$

Esta ecuación representa la discretización correspondiente a (3.1) mediante ELLAM. Este esquema es aplicable únicamente a nodos interiores cuyas características no cruzan las fronteras en el tiempo  $(t^n, t^{n+1})$ . Para el caso de que  $1 \leq Cr < 2$ , es decir,  $N_c = 1$ , el esquema anterior será válido para nodos interiores  $3 \leq i \leq E-1$ , donde  $E$  es el número de elementos en que se discretiza el dominio de solución (figura 3.8).

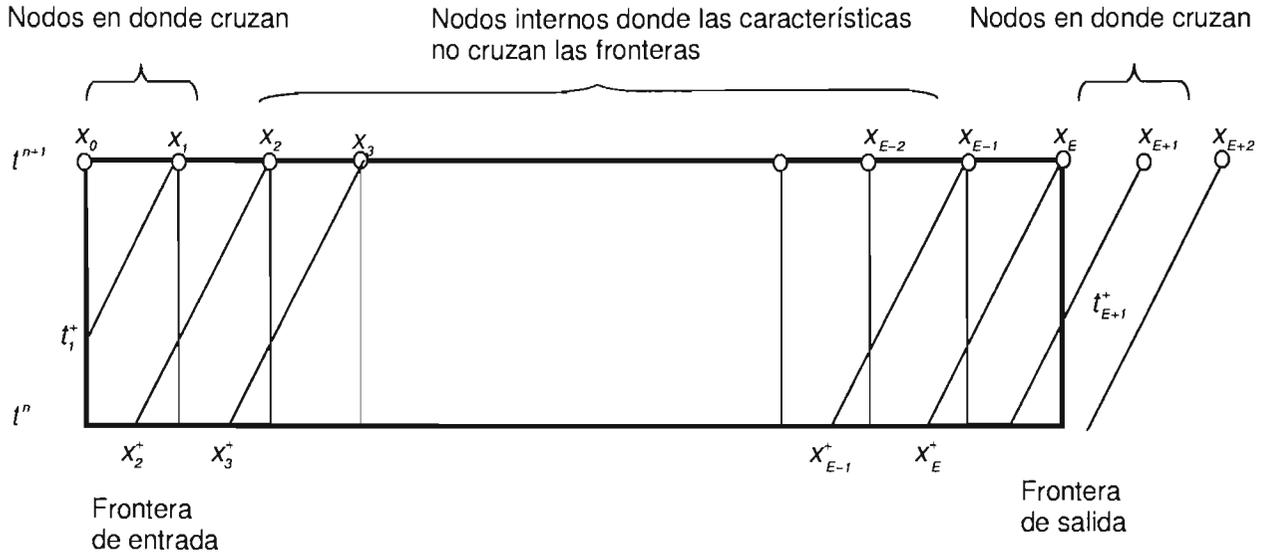


Figura 3.8. Geometría ELLAM para  $1 \leq Cr < 2$ .

### 3.1.4.2. Evaluación de las integrales para características que cruzan las fronteras

Para el caso en que  $1 \leq Cr < 2$ , ó  $Nc=1$ , y considerando las condiciones de frontera dadas en la ecuación (3.1a), el aplicar ELLAM (de la misma forma que se procedió en el inciso 3.1.2) para las fronteras izquierda y derecha se obtiene:

Para la frontera izquierda (figura 3.8 y 3.9):

Caso:  $i=0$  ;  $w_0^{i+1}(x,t)$

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_0}^{x_i} u(x, t^{n+1}) w_0^{n+1}(x, t^{n+1}) dx \\
 & - D \left[ \int_{t_i}^{t^{n+1}} u(0, t) \left( \frac{\partial w_0^{n+1}(0, t)}{\partial x} \right) dt + \int_{t_i}^{t^{n+1}} u(x_i^0(t), t) \left\| \frac{\partial w_0^{n+1}}{\partial x} \right\|_{x_i^0(t)} dt \right] \\
 & - \int_{t_i}^{t^{n+1}} \left[ V u(0, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) \right] w_0^{n+1}(0, t) dt = \int_{\Omega_2^0} f w_0^{n+1} dx dt
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

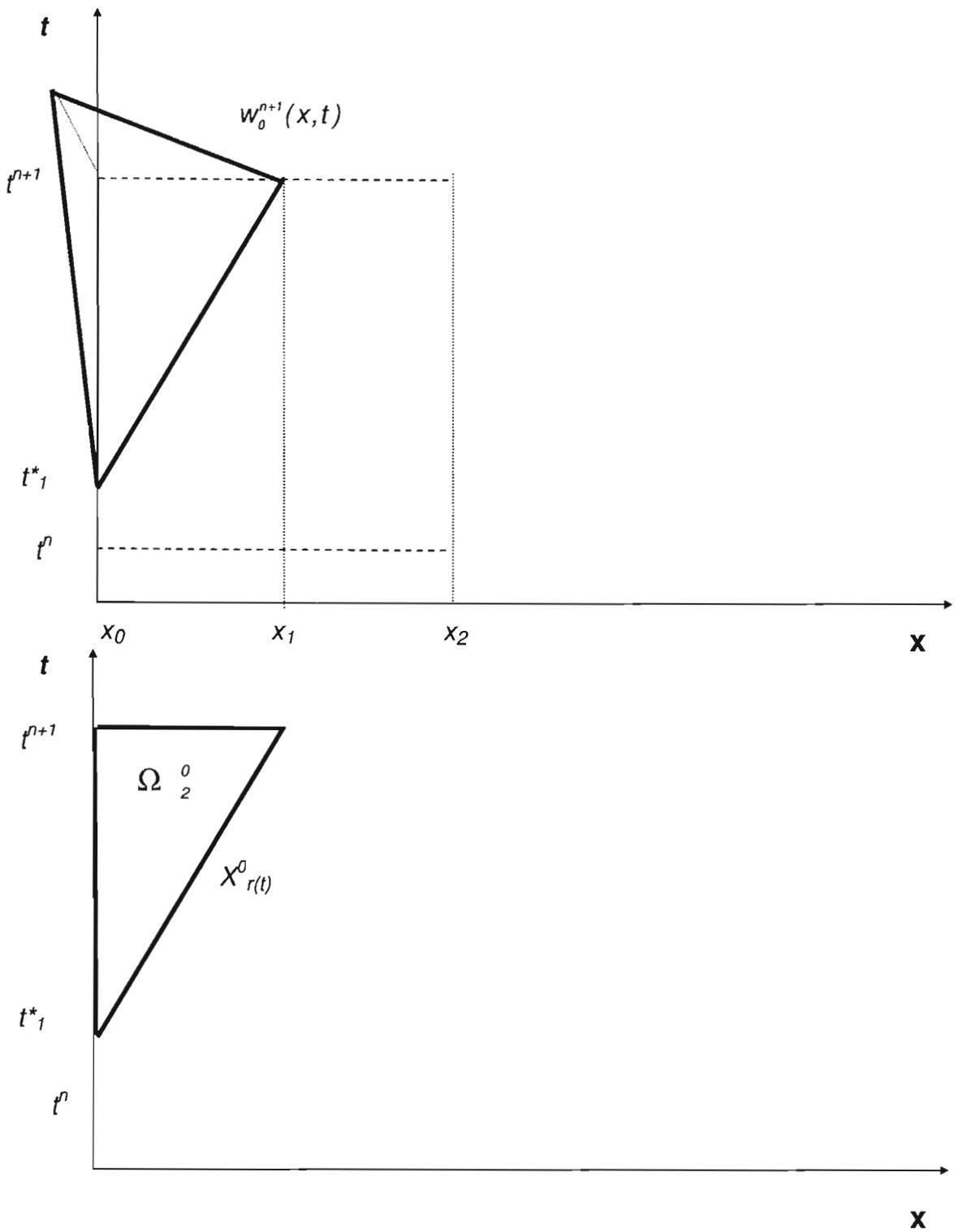


Figura 3.9. Geometría para  $w_0^{i+1}(x, t)$ .

Caso:  $i=1$  ;  $(w_1^{i+1}(x,t))$  (figuras 3.8 y 3.10):

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_0}^{x_2} u(x,t^{n+1}) w_1^{n+1}(x,t^{n+1}) dx - \int_{x_0}^{x_2} u(x,t^n) w_1^{n+1}(x,t^n) dx \\
 & - D \left[ \int_{t_i}^{t^{n+1}} u(0,t) \left\langle \frac{\partial w_1^{n+1}(0,t)}{\partial x} \right\rangle dt + \int_{t_i}^{t^{n+1}} u(x_c^1(t),t) \left\langle \frac{\partial w_1^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_c^1(t)} dt \right. \\
 & \left. + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_r^1(t),t) \left\langle \frac{\partial w_1^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r^1(t)} dt \right] \\
 & - D \int_{t^n}^{t_i} u(0,t) \left\langle \frac{\partial w_1^{n+1}(0,t)}{\partial x} \right\rangle dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ Vu(0,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(0,t) \right] w_1^{n+1}(0,t) dt \\
 & = \int_{\Omega_1^1 + \Omega_2^1} f(x,t) w_1^{n+1}(x,t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Caso:  $i=2$  ;  $(w_2^{i+1}(x,t))$  (figuras 3.8 y 3.11):

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_1}^{x_3} u(x,t^{n+1}) w_2^{n+1}(x,t^{n+1}) dx - \int_{x_0}^{x_3} u(x,t^n) w_2^{n+1}(x,t^n) dx \\
 & - D \left[ \int_{t_i}^{t^{n+1}} u(x_r^2(t),t) \left\langle \frac{\partial w_2^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r^2(t)} dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_c^2(t),t) \left\langle \frac{\partial w_2^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_c^2(t)} dt \right. \\
 & \left. + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_r^2(t),t) \left\langle \frac{\partial w_2^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r^2(t)} dt \right] \\
 & - D \int_{t^n}^{t_i} u(0,t) \left\langle \frac{\partial w_2^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{(0,t)} dt - \int_{t^n}^{t_i} \left[ Vu(0,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(0,t) \right] w_2^{n+1}(0,t) dt \\
 & = \int_{\Omega_2^2 + \Omega_1^2} f(x,t) w_2^{n+1}(x,t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

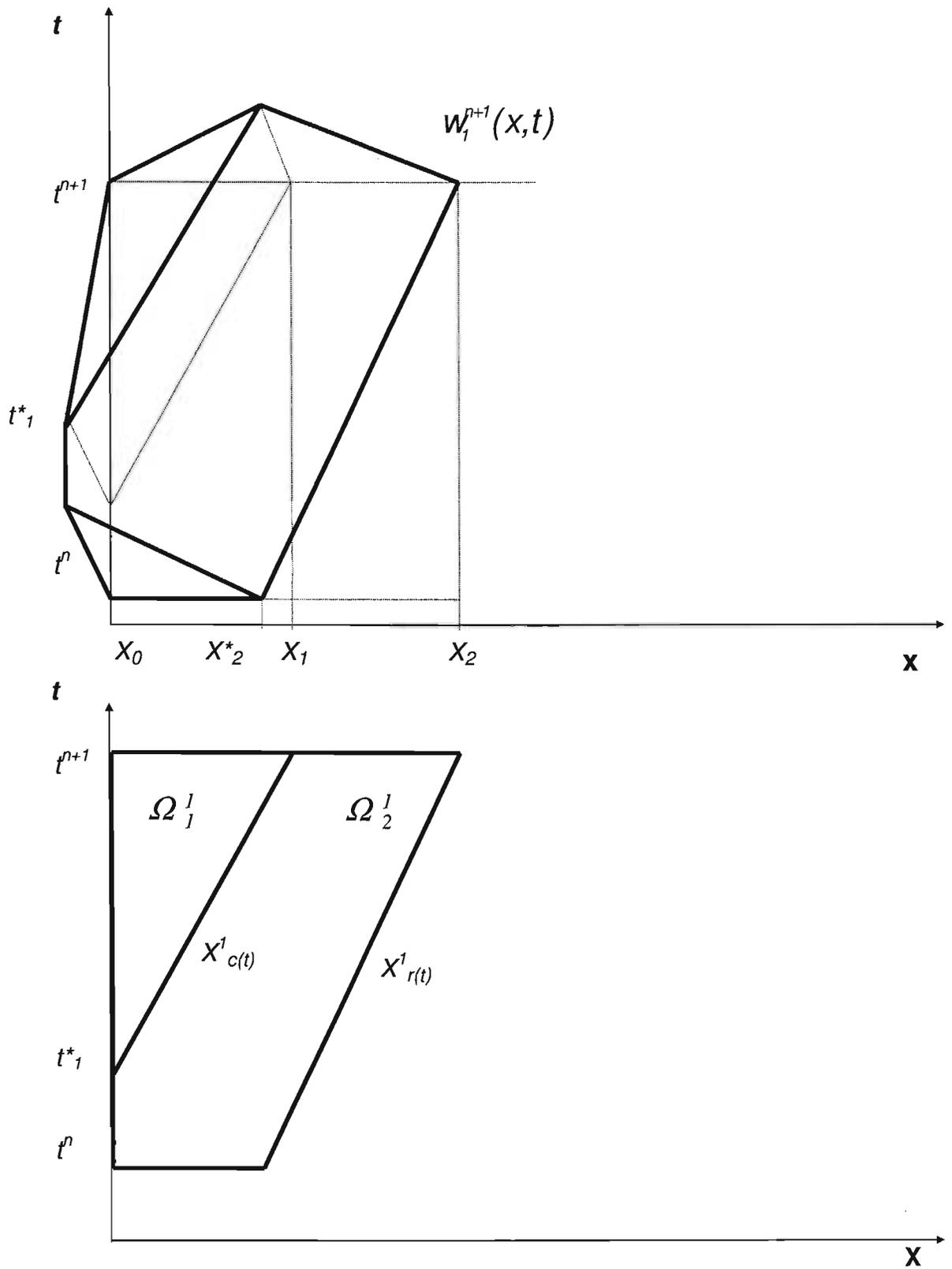


Figura 3.10. Geometría para  $w_i^{i+1}(x,t)$ .

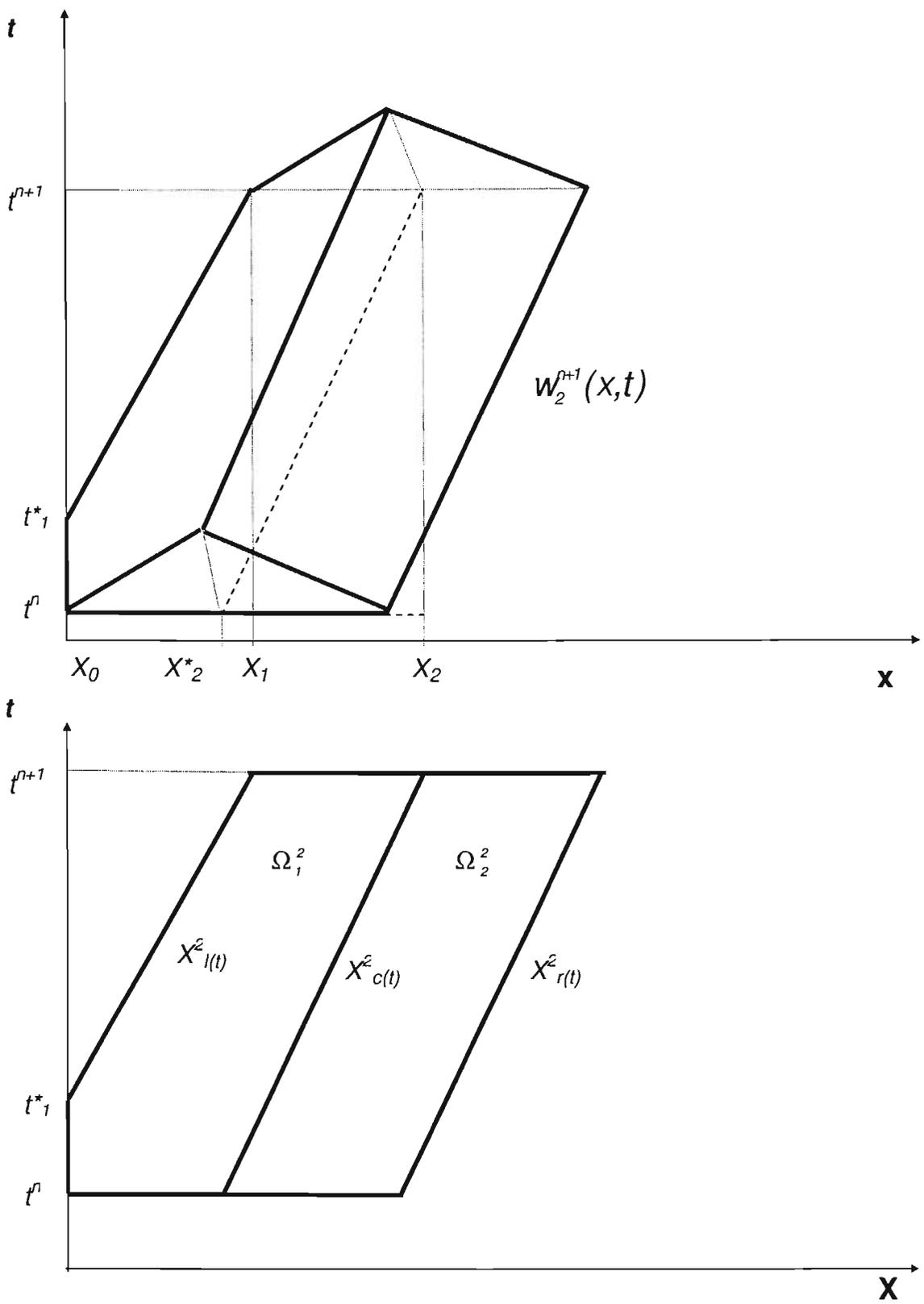


Figura 3.11. Geometría para  $w_2^{i+1}(x,t)$ .

Para la frontera derecha (figuras 3.8 y 3.12):

Para esta frontera conviene aclarar lo siguiente: como es una frontera de salida, se observa en la figura 3.12 que la última función de peso asociada al nodo  $x_E$  no alcanza a cubrir todo el dominio  $(x,t)$ , por lo que hay que agregar, los nodos  $x_{E+1}$  y  $x_{E+2}$  para asegurar conservación de masa.

Caso:  $i=E$  ;  $[w_E^{i+1}(x,t)]$  (figuras 3.8, 3.12, 3.13, 3.14):

Donde se ha considerado  $[w_E^{n+1}(x,t) + w_{E+1}^{n+1}(x,t) + w_{E+2}^{n+1}(x,t)]$ , para asegurar conservación de masa

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{E-1}}^{x_E} u(x,t^{n+1}) w_E^{n+1}(x,t^{n+1}) dx - \int_{x_{E-1}}^{x_E} u(x,t^n) w_E^{n+1}(x,t^n) dx - \int_{x_E}^{x_E} u(x,t^n) dx \\
 & - D \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_c^E(t),t) \left\langle \frac{\partial w_E^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_c^E(t)} + \left\langle \frac{\partial w_{E+1}^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r^{E+1}(t)} dt \right] \\
 & - D \left[ \int_{t^n}^{t_{E+1}^n} u(x_r^E(t),t) \left\langle \frac{\partial w_{E+1}^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_c^{E+1}} + \left\langle \frac{\partial w_{E+2}^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r^{E+2}} + \left\langle \frac{\partial w_E^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r^E(t)} dt \right] \\
 & - D \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(x_l^E(t),t) \left\langle \frac{\partial w_E^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_l^E(t)} dt \right] \\
 & - D \int_{t_{E+1}^n}^{t^{n+1}} u(L,t) \left\langle \frac{\partial w_{E+1}^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{(l,0)} dt - D \int_{t^n}^{t_{E+1}^n} u(L,t) \left\langle \frac{\partial w_{E+1}^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{(l,0)} dt \\
 & - D \int_{t^n}^{t_{E+1}^n} u(L,t) \left\langle \frac{\partial w_{E+2}^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{(l,0)} dt - D \int_{t_{E+1}^n}^{t^{n+1}} u(L,t) \left\langle \frac{\partial w_E^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{(l,0)} dt \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ Vu(L,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(l,t) dt \right] = \int_{\Omega_i^E} f(x,t) w_E^{n+1}(x,t) dx dt + \int_{\Omega_1^{E+1} + \Omega_2^{E+1}} f(x,t) dx dt
 \end{aligned}
 \tag{3.27}$$

En las ecuaciones (3.24, 3.25, 3.26, y 3.27) se observa algo muy importante: la última integral del miembro izquierdo involucra los tres tipos de frontera definidas en la ecuación (3.1.a). Este hecho corresponde a una de las características más importantes de ELLAM, ya que la incorporación se realiza de manera natural en la metodología.

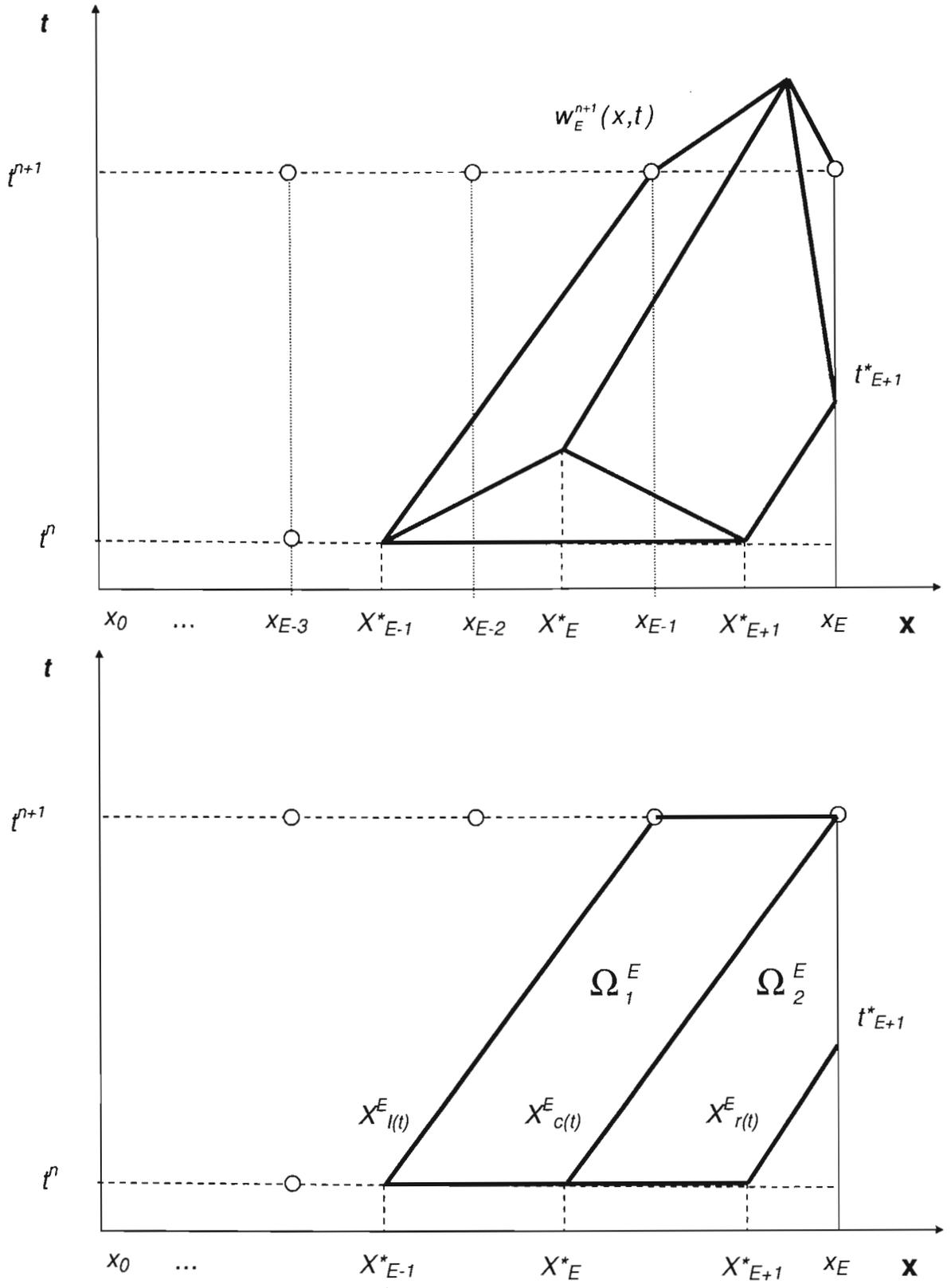


Figura 3.12. Geometría para  $w_E^{i+1}(x,t)$ .

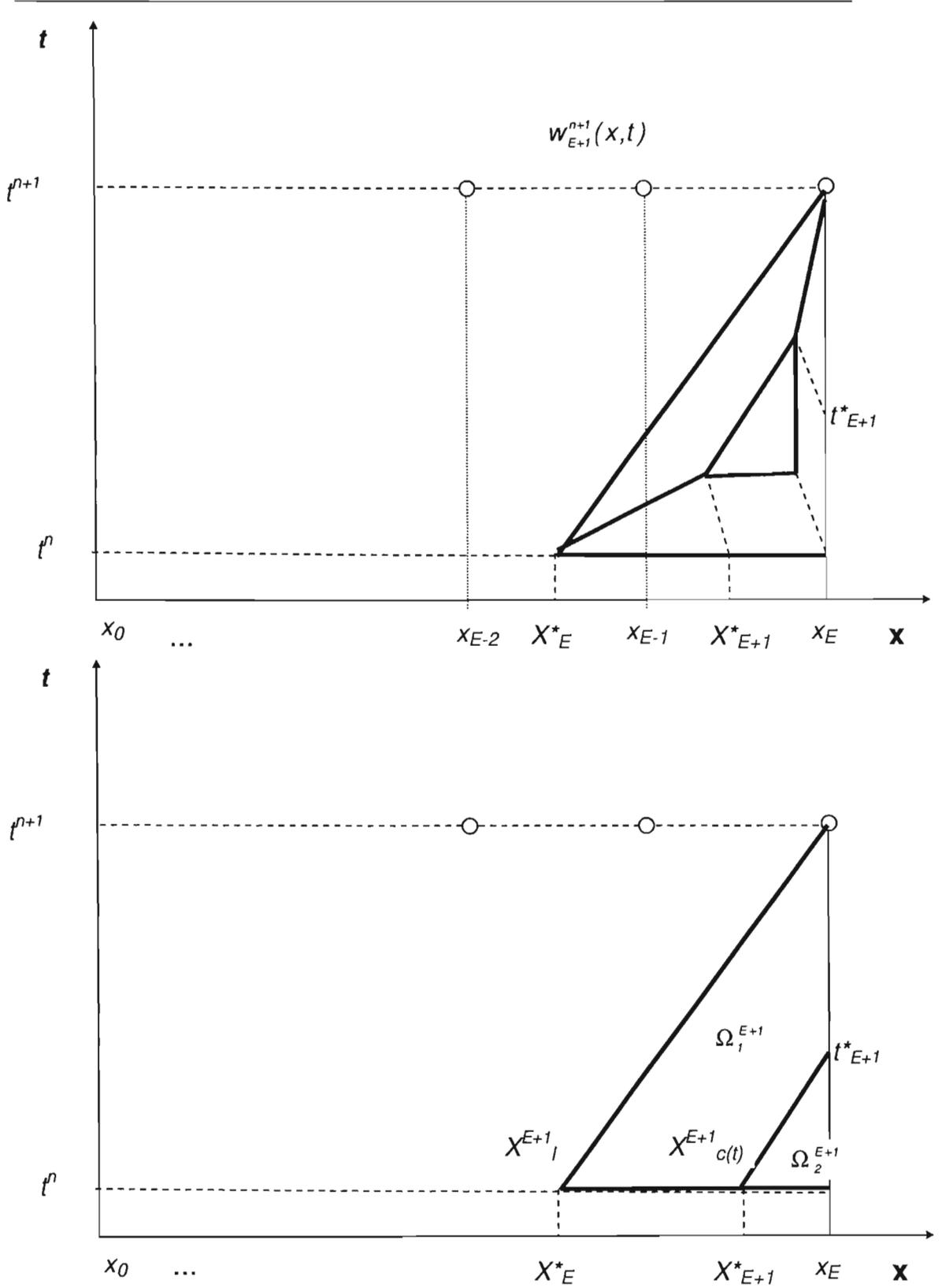


Figura 3.13. Geometría para  $w_{E+1}^{i+1}(x,t)$ .

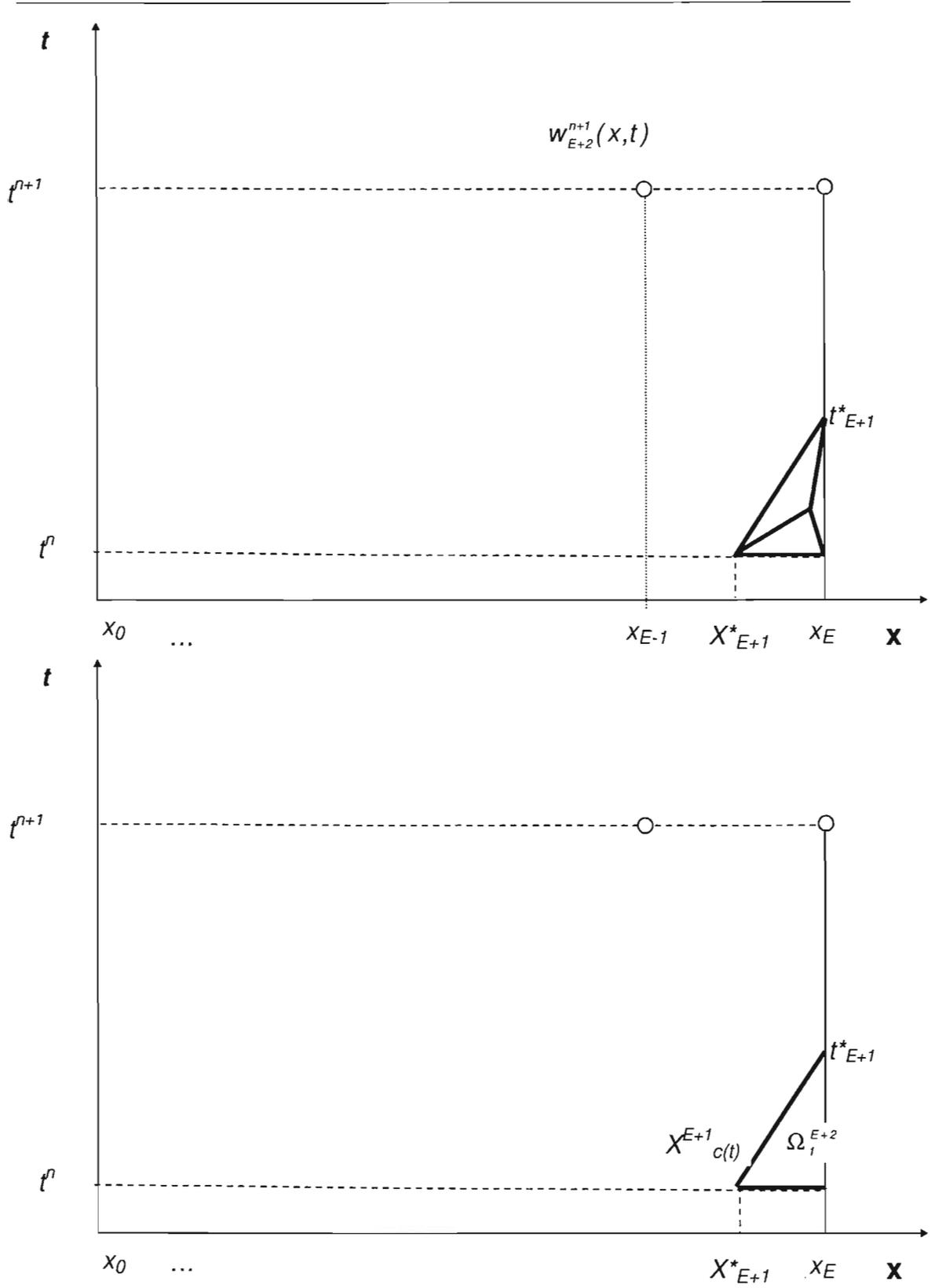


Figura 3.14. Geometría para  $w_{E+2}^{i+1}(x, t)$ .

Por otra parte, si se utiliza de nuevo para evaluar las integrales anteriores, una interpolación lineal en el espacio, y una interpolación en el tiempo (como lo indica la ecuación 3.13), se tiene respectivamente:

Caso:  $i=0 ; (w_0^{i+1}(x,t))$

$$\begin{aligned}
 & \left[ \frac{\Delta x}{3} \exp(k\Delta t) - \theta v \left( 1 - \frac{v}{k\Delta x} \right) \left( \frac{\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))}{k} \right) \right. \\
 & \left. - \theta \frac{v^2(t^{n+1} - t_i)}{k\Delta x} \exp(k(t_i - t^n)) + \frac{D\theta}{\Delta x} \left( \frac{\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))}{k} \right) \right] U_0^{n+1} \\
 & + \left[ \frac{\Delta x}{6} \exp(k\Delta t) - \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))] \right] U_i^{n+1} \\
 & + \left[ -(1-\theta)v \left( 1 - \frac{v}{k\Delta x} \right) \left( \frac{\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))}{k} \right) \right. \\
 & \left. - (1-\theta) \frac{v^2(t^{n+1} - t_i)}{k\Delta x} \exp(k(t_i - t^n)) \right] U_b^i \\
 & + \left\{ D \left[ \theta + (1-\theta) \left( \frac{t_i - t^n}{\Delta t} \right) \right] \left[ \left( 1 - \frac{v}{k\Delta x} \right) \left( \frac{\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))}{k} \right) \right] \right. \\
 & \left. + \frac{v(t^{n+1} - t_i)}{k\Delta x} \exp(k(t_i - t^n)) \right\} \frac{\partial U_0^{n+1}}{\partial x} \\
 & + \left\{ D \left[ (1-\theta) \left( 1 - \frac{t_i - t^n}{\Delta t} \right) \right] \left[ \left( 1 - \frac{v}{k\Delta x} \right) \left( \frac{\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))}{k} \right) \right] \right. \\
 & \left. + \frac{v(t^{n+1} - t_i)}{k\Delta x} \exp(k(t_i - t^n)) \right\} \frac{\partial U_0^n}{\partial x} \\
 & = \int_{\Omega_2^0} f(x,t) w_0^{n+1}(x,t) d\Omega_2^0
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Caso:  $i=1$  ;  $(w_1^{i+1}(x,t))$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{\Delta x}{6} \exp(k\Delta t) - \frac{\theta v^2}{k^2 \Delta x} \exp(k\Delta t) + \frac{\theta v}{k} \exp(k(t_i - t^n)) \left[ \frac{v}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) + \frac{v}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & - \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))] \left. \right\} U_0^{n+1} \\
 & + \left[ \frac{2\Delta x}{3} \exp(k\Delta t) + 2 \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))] \right] U_1^{n+1} \\
 & + \left[ \frac{\Delta x}{6} \exp(k\Delta t) - \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] \right] U_2^{n+1} \\
 & + \left\{ \Delta x \left( \frac{\alpha^3}{6} - \frac{\alpha^2}{2} \right) - \frac{v(1-\theta)}{k} \exp(k(t_i - t^n)) \left[ 2 - \frac{v}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) - \frac{v}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & + \frac{v(1-\theta)}{k} \left[ 2 - Cr - \frac{v}{k\Delta x} \right] - \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1](1-\alpha) \\
 & + \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k(t_i - t^n)) - 1] \left. \right\} U_0^n \\
 & + \left\{ -\frac{v}{k} \exp(k(t_i - t^n)) \left[ 2\theta - \frac{v}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) - \frac{v}{k\Delta x} \right] + \frac{v\theta}{k} \left[ 2 - Cr - \frac{v}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & - \frac{v^2(1-\theta)}{k^2 \Delta x} \exp(k\Delta t) - \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))] \\
 & + \frac{2D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i - t^n))] + \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k(t_i - t^n)) - 1] \left. \right\} U_1^n \\
 & + \left\{ \frac{(1-\theta)D}{k} \exp(k(t_i - t^n)) \left[ 2 - \frac{v}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) - \frac{v}{k\Delta x} \right] - \frac{D(1-\theta)}{k} \left[ 2 - Cr - \frac{v}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & + D \left( 1 - \frac{(t_i - t^n)}{\Delta t} \right) \frac{\exp[k(t_i - t^n)]}{k} \left[ 2\theta - \frac{v}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) - \frac{v}{k\Delta x} \right] \\
 & - \frac{D\theta}{k} \left[ 2 - Cr + \frac{v}{k\Delta x} \right] + \frac{D(1-\theta)v}{k^2 \Delta x} \exp(k\Delta t) \left. \right\} \frac{\partial U_0^n}{\partial x} \\
 & + \left\{ \frac{\theta D}{k} \exp(k\Delta t) \left( \frac{v}{k\Delta x} \right) - \frac{\theta D}{k} \exp[k(t_i - t^n)] \left[ \frac{v}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) + \frac{v}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & + D \left( \frac{t_i - t^n}{\Delta t} \right) \frac{\exp[k(t_i - t^n)]}{k} \left[ 2\theta - \frac{v}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) - \frac{v}{k\Delta x} \right] \\
 & - \frac{D\theta}{k} \left[ 2 - Cr - \frac{v}{k\Delta x} \right] + \frac{D(1-\theta)v}{k^2 \Delta x} \exp(k\Delta t) \left. \right\} \frac{\partial U_0^{n+1}}{\partial x} = \int_{\Omega_1' + \Omega_2'} f(x,t) w_1^{n+1}(x,t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

Caso:  $i=2$ ;  $(w_2^{i+1}(x,t))$

$$\begin{aligned}
 & \left[ \frac{\Delta x}{6} \exp(k\Delta t) - \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - \exp(k(t_i^* - t^n))] \right] U_1^{n+1} \\
 & + \left[ \frac{2\Delta x}{3} \exp(k\Delta t) + \frac{2D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] \right] U_2^{n+1} + \left[ \frac{\Delta x}{6} \exp(k\Delta t) - \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] \right] U_3^{n+1} \\
 & + \left\{ \Delta x \left( -\frac{1}{3} - \frac{\alpha}{2} + \alpha^2 - \frac{\alpha^3}{3} \right) - \frac{V(1-\theta)}{k} \exp[k(t_i^* - t^n)] \left[ 1 + \frac{V}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) + \frac{V}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & + \frac{V(1-\theta)}{k} \left[ 1 + Cr + \frac{V}{k\Delta x} \right] + \frac{2D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] (1-\alpha) \\
 & \left. - \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k(t_i^* - t^n)) - 1] \right\} U_0^n \\
 & + \left\{ \Delta x \left( -\frac{1}{6} - \frac{\alpha}{2} - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^3}{2} \right) + \frac{2D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] (\alpha) \right. \\
 & \left. - \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] (1-\alpha) \right\} U_1^n \\
 & + \left\{ -\Delta x \left( \frac{\alpha^3}{6} \right) - \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] (\alpha) \right\} U_2^n \\
 & + \left\{ -\frac{V\theta}{k} \exp[k(t_i^* - t^n)] \left[ 1 + \frac{V}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) + \frac{V}{k\Delta x} \right] + \frac{V\theta}{k} \left[ 1 + Cr + \frac{V}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & \left. - \frac{D(1-\theta)}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - \exp[k(t_i^* - t^n)]] - \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k(t_i^* - t^n)) - 1] \right\} U_3^n \\
 & + \left\{ \frac{D\theta(t_i^* - t^n) \exp[k(t_i^* - t^n)]}{k\Delta t} \left[ 1 + \frac{V}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) + \frac{V}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & \left. - \frac{D\theta(t_i^* - t^n)}{k\Delta t} \left[ 1 + Cr + \frac{V}{k\Delta x} \right] \right\} \frac{\partial U_0^{n+1}}{\partial x} \\
 & + \left\{ \frac{D \exp[k(t_i^* - t^n)]}{k} \left[ 1 - \left( \frac{\theta(t_i^* - t^n)}{\Delta t} \right) \right] \left[ 1 + \frac{V}{\Delta x} (t^{n+1} - t_i) + \frac{V}{k\Delta x} \right] \right. \\
 & \left. - \frac{D}{k} \left[ 1 - \left( \frac{\theta(t_i^* - t^n)}{\Delta t} \right) \right] \left[ 1 + Cr + \frac{V}{k\Delta x} \right] \right\} \frac{\partial U_0^n}{\partial x} = \int_{\Omega_1^2 + \Omega_2^2} f(x,t) w_2^{n+1}(x,t) dxdt
 \end{aligned}$$

(3.30)

Caso:  $i=E$  ;  $(W_E^{i+1}(x,t))$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \Delta x \left( -\frac{1}{6} + \frac{\alpha}{2} - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^3}{6} \right) - \frac{D(1-\theta)(1-\alpha)[\exp(k\Delta t) - 1]}{k\Delta t} \right\} U_{E-3}^n \\
 & + \left\{ \Delta x \left( -\frac{5}{6} + \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{3} \right) + \frac{D(1-\theta)(1-2\alpha)[\exp(k\Delta t) - 1]}{k\Delta t} \right\} U_{E-2}^n \\
 & + \left\{ \Delta x \left( -1 + \frac{\alpha^3}{6} \right) + \frac{D(1-\theta)\alpha[\exp(k\Delta t) - 1]}{k\Delta t} \right\} U_{E-1}^n + \left\{ -\frac{\Delta x}{2} + v(1-\theta)\Delta t \right\} U_E^n \\
 & + \left\{ \frac{\Delta x}{6} \exp(k\Delta t) - \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] \right\} U_{E-1}^{n+1} \\
 & + \left\{ \frac{\Delta x}{3} \exp(k\Delta t) + \frac{D\theta}{k\Delta x} [\exp(k\Delta t) - 1] + v\theta\Delta t \right\} U_E^{n+1} \\
 & - D\theta\Delta t \frac{\partial U_E^{n+1}}{\partial x} - D(1-\theta)\Delta t \frac{\partial U_E^n}{\partial x} \\
 & = \int_{\Omega_i^E} f(x,t) W_E^{n+1}(x,t) dxdt + \int_{\Omega_i^{E+1} + \Omega_2^{E+1}} f(x,t) dxdt
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

Por simplificación, si consideramos que  $f(x,t)=0$ , el segundo miembro de las ecuaciones anteriores será nulo. Considerando este caso y al sumar las expresiones (3.23, 3.28, 3.29, 3.30, y 3.31) se tiene un sistema lineal de ecuaciones cuya matriz de coeficientes tiene la estructura que se muestra en la figura 3.15. En general, esta estructura cambiará de acuerdo a la regla de interpolación usada para evaluar las integrales para la ecuación (3.12).

$$\begin{array}{c}
 0 \\
 1 \\
 2 \\
 \vdots \\
 Nc+1
 \end{array}
 \left[ \begin{array}{cccccc}
 X & X & & & & \\
 X & X & X & & & \\
 X & X & X & X & & \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\
 X & & & X & X & X \\
 & & & & X & X & X \\
 & & & & & X & X \\
 & & & & & & X & X
 \end{array} \right]$$

Figura 3.15. Estructura general de la matriz para ELLAM.

### 3.1.5. Prueba de conservación de masa

Para mayor claridad, se considerará que  $k=0$  (caso conservativo). Además, para probar que ELLAM proporciona conservación de masa para cualquier tipo de frontera, se deben tomar en cuenta las siguientes observaciones:

Para las líneas características, son válidas las siguientes equivalencias (figura 3.16):

$$\begin{aligned}
 X_r^{i-2}(t) &= X_l^i(t) = X_c^{i-1}(t) \\
 X_r^{i-1}(t) &= X_c^i(t) = X_l^{i+1}(t) \\
 X_l^{i+2}(t) &= X_r^i(t) = X_c^{i+1}(t)
 \end{aligned}
 \tag{3.32}$$

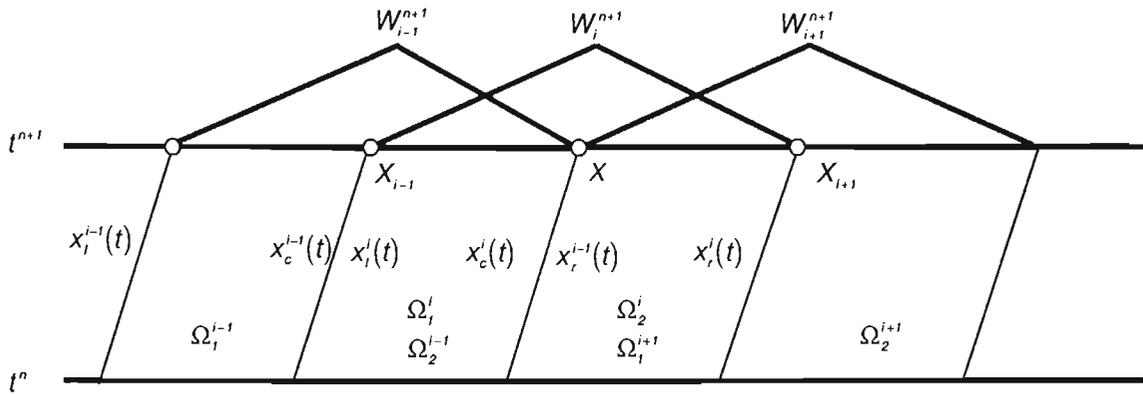


Figura 3.16. Equivalencia entre líneas características.

Para las proyecciones de  $w(x,t)$  en el plano  $(x,t)$ :

$$\begin{aligned}
 \Omega_1^i &= \Omega_2^{i-1} \\
 \Omega_2^i &= \Omega_1^{i+1}
 \end{aligned}
 \tag{3.33}$$

Para las funciones de peso:

$$\begin{aligned}
 w_i^{n+1}(x,t) + w_{i-1}^{n+1}(x,t) &= 1; \forall (x,t) \in \Omega_1^i \\
 w_i^{n+1}(x,t) + w_{i+1}^{n+1}(x,t) &= 1; \forall (x,t) \in \Omega_2^i
 \end{aligned}
 \tag{3.34}$$

Observando lo anterior, y sumando las ecuaciones para cada uno de los nodos (ecuaciones 3.6, 3.24, 3.25, 3.26, 3.27), se obtiene:

$$\int_{x_0}^{x_E} u(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_0}^{x_E} u(x, t^n) dx - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ Vu(0, t) dt - D \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) \right] dt \tag{3.35}$$

$$+ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ Vu(L, t) dt - D \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) \right] dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_0}^{x_E} f(x, t) dx dt$$

la cual es una ley de conservación global para la ecuación (3.1) con  $k=0$ . Esto prueba que ELLAM mantiene implícitamente la conservación de masa para cualquier tipo de frontera impuesta. Por lo tanto, el grado de aproximación para la conservación de masa en las soluciones numéricas dependerá exclusivamente del grado de aproximación usado para evaluar las integrales. Ello manifiesta que la evaluación de las integrales es un paso crucial en ELLAM, sobre todo la integral en el tiempo  $t^n$  (Celia, *et al.*, 1990; Heally y Rusell, 1993, 1998; Binning y Celia, 1996, 2000).

### 3.1.6. Evaluación de la integral en el tiempo $t^n$

En el inciso 3.1.4., la evaluación de la integral en el tiempo  $t^n$  ( $\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx$ ) se realizó de manera exacta, debido a que se pudieron establecer en forma sistemática a través de la ecuación (3.9b) y las relaciones (3.15), los límites de integración (por medio de una proyección hacia atrás)  $x_{i-1}^*$ ,  $x_i^*$ ,  $x_{i+1}^*$ . Esto se debió a que la velocidad es constante.

Para el caso general de una velocidad variable, existen dos técnicas que permiten calcular esta integral. La primera, referida como una integración hacia atrás, es ampliamente usada en el método de las características. En ella, la integración es efectuada en el nivel de tiempo  $t^{n+1}$ , usando valores estándar de la función de peso  $w(x, t)$  y proyectándolos hacia atrás en el nivel de tiempo  $t^n$ , donde los valores  $u(x, t^n)$  son conocidos. Los valores de  $u(x^*, t^n)$  se determinan con una interpolación lineal. Nótese que en la integración hacia atrás los límites de integración,  $x_{i-1}^*$ ,  $x_{i+1}^*$ , son las proyecciones hacia atrás de  $x_{i-1}$ ,  $x_{i+1}$ . Estas proyecciones se efectúan según la ecuación (3.9b). Una vez conocidos los límites de integración,  $x_{i-1}^*$ ,  $x_{i+1}^*$ , ésta es llevada a cabo. Desde el punto de vista computacional, el procedimiento tiene muchas complicaciones debido a que consume mucho tiempo de ejecución en computadora en razón de la complejidad de los algoritmos que deben usarse para hacerlo sistemático. Su aplicación en dos y tres dimensiones es impráctico (Heally y Rusell, 1993; Binning, 1994; Celia, 1994). En realidad, este procedimiento es el que se usó para el cálculo de esta integral en el inciso 3.1.4, pero obviamente para este caso dicho procedimiento se simplifica por el hecho de considerar una velocidad constante; sin embargo, su complicación ya se puede ver en las ecuaciones (3.19) y (3.21). Por otra parte, este

procedimiento es usado comúnmente con la función de peso lineal (Celia, 1994).

El segundo procedimiento, que es el procedimiento más práctico y que generalmente se asocia con la función de peso constante (Celia, 1994), fue propuesto por Heally y Rusell (1993). Aquí, la integración es efectuada en  $t^n$ , usando valores estándar de  $u(x, t^n)$ ; pero el valor de la función de peso  $w(x, t^n)$  se calcula en el nivel de tiempo  $t^{n+1}$ . En forma apropiada esto se representa como:

$$w(x, t^n) \equiv W(x, t^n) \equiv W(\bar{x}, t^{n+1}) \quad (3.36)$$

en donde  $\bar{x}$  es la proyección hacia adelante en  $t^{n+1}$ , de  $x$  en  $t^n$  definido según la ecuación (3.9 c). De acuerdo con ello, la integral en el tiempo  $t^n$  se calcula de la forma siguiente:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \equiv \int_0^L u(x, t^n) W_i^{n+1}(\bar{x}, t^{n+1}) dx \quad (3.37)$$

donde  $W(\bar{x}, t^{n+1})$ , referida como la función de peso aproximada que se definirá más adelante, puede tomar valores no nulos para  $\bar{x} \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ . Por ello, los límites de integración cambian. Para evaluar la integral (3.37) se utiliza la regla del trapecio. Otros métodos de integración de mayor orden, como la regla de Simpson o Lobatto, producen inconsistencias (Healy y Rusell 1993). Esto lleva a evaluar la integral (3.37) como:

$$\int_0^L u(x, t^n) W_i^{n+1}(\bar{x}, t^{n+1}) dx = \sum_{k=1}^{NT} u(x_k, t^n) \gamma(x_k) W_i^{n+1}(\bar{x}(x_k), t^{n+1}) \quad (3.38)$$

donde  $x_k$  es un punto de integración,  $u(x_k, t^n)$  se determina por interpolación lineal, y  $\gamma(x_k)$  son pesos de integración definidos por:

$$\begin{aligned} \gamma(x_k) &= 0.5(x_{k+1} - x_k); \quad k = 1 \\ \gamma(x_k) &= 0.5(x_{k+1} - x_{k-1}); \quad 1 < k < NT \\ \gamma(x_k) &= 0.5(x_k - x_{k-1}); \quad k = NT \end{aligned} \quad (3.39)$$

$NT$  es el número de puntos de integración. Healy y Rusell (1993) proponen que se agreguen a estos puntos de integración puntos estratégicos de integración (*SSIP*, por sus siglas en inglés), los cuales se determinan en posiciones donde la función de aproximación  $W(\bar{x}, t^{n+1})$  cambia de pendiente. Esto se hace principalmente para evitar problemas de conservación de masa local. El número de puntos de integración  $NT$  se determina comúnmente como el número de puntos de

integración por celda básica de integración o discretización. Por ejemplo, para el caso de una función de peso lineal, la celda básica de integración es  $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ , como se indica en las figuras 3.3 y 3.5. Para la función de peso constante, la celda básica de integración es  $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$  como se indica en las figuras 3.4 y 3.6. Los puntos de integración definirán, para cada celda básica de integración, un número de subintervalos ( $NS$ ), como se muestra en la figura 3.17.

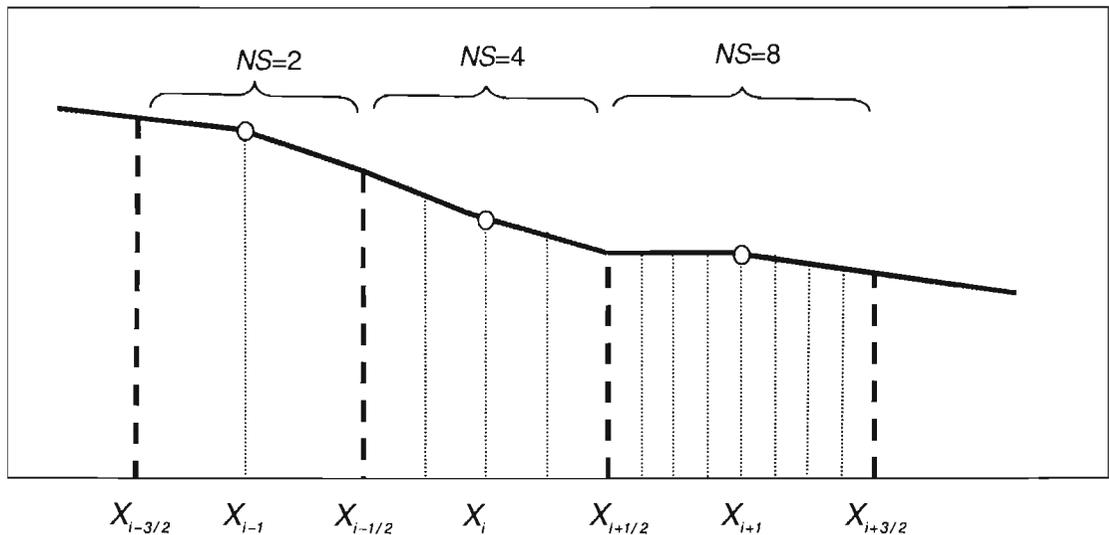


Figura 3.17. Puntos de integración y subintervalos para las celdas básicas de integración.

### Selección de la función de peso aproximada $W_i(\bar{x}, t^{n+1})$

Healy y Rusell (1993) propusieron que la función de peso aproximada debe ser continua en el dominio espacio-temporal, en que la ecuación (3.10 b) es definida. Además, que debe ser no nula en  $[t^n, t^{n+1}]$ , y satisfacer que  $\sum_i W_i(\bar{x}, t^{n+1}) = 1$  para  $\bar{x} \in [0, L]$ ,  $t \in [t^n, t^{n+1}]$ . Existe un número infinito de funciones que satisfacen esos requisitos. La forma más simple es dada por la ecuación (3.10 b). Sin embargo, para valores cercanos a valores enteros del número de Courant ( $Cr$ ) hay problemas de conservación de masa local, debido a la imposibilidad de distribuir, apropiadamente, la masa en el nivel de tiempo  $n+1$ . Una selección más general, para salvar estas dificultades, es repartir la masa entre celdas adyacentes. Para ello se hace depender la función de peso aproximada,  $W(\bar{x}, t^{n+1})$ , del número de subintervalos  $NS$  de la forma siguiente:

$$W_i(\bar{x}, t^{n+1}) = \begin{cases} 0; & \bar{x} < x_{i-1/2} - \overline{\Delta x_{i-1}} & (3.40a) \\ \frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i} \left( 1 - \frac{x_{i-1/2} - \bar{x}}{\overline{\Delta x_{i-1}}} \right); & x_{i-1/2} - \overline{\Delta x_{i-1}} \leq \bar{x} \leq x_{i-1/2} & (3.40b) \\ \frac{\Delta x_i + (\bar{x} - x_{i-1/2}) \frac{\Delta x_{i-1}}{\overline{\Delta x_i}}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}; & x_{i-1/2} \leq \bar{x} \leq x_{i-1/2} + \overline{\Delta x_i} & (3.40c) \\ 1; & x_{i-1/2} + \overline{\Delta x_i} \leq \bar{x} \leq x_{i+1/2} - \overline{\Delta x_i} & (3.40d) \\ \frac{\Delta x_i + (x_{i+1/2} - \bar{x}) \frac{\Delta x_{i+1}}{\overline{\Delta x_i}}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}; & x_{i+1/2} - \overline{\Delta x_i} \leq \bar{x} \leq x_{i+1/2} & (3.40e) \\ \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \left( 1 - \frac{\bar{x} - x_{i+1/2}}{\overline{\Delta x_{i+1}}} \right); & x_{i+1/2} \leq \bar{x} \leq x_{i+1/2} + \overline{\Delta x_{i+1}} & (3.40f) \\ 0; & \bar{x} > x_{i+1/2} + \overline{\Delta x_{i+1}} & (3.40g) \end{cases}$$

donde  $\overline{\Delta x_i} = \Delta x_i / NS$  (figuras 3.18 y 3.19a,b). Las ecuaciones (3.40) son válidas para celdas básicas de integración que no son adyacentes a las fronteras del dominio; es decir, que son válidas para  $i=2$  hasta  $i=E-1$ , siendo  $E$  el número total de celdas básicas de integración. Para celdas que son adyacentes a las fronteras ( $i=1$  para  $x=0$  e  $i=E$  para  $x=L$ ), las ecuaciones (3.40) requieren de algunas modificaciones. Cuando  $i=1$ , las ecuaciones (3.40b,c,d) se reemplazan por:

$$W_1(\bar{x}, t^{n+1}) = 1, \quad 0 \leq \bar{x} \leq x_{3/2} - \overline{\Delta x_1} \quad (3.40h)$$

y cuando  $i=E$ , las ecuaciones (3.40d,e,f) se reemplazan por:

$$W_E(\bar{x}, t^{n+1}) = 1, \quad x_{E-1/2} + \overline{\Delta x_E} \leq \bar{x} \leq L \quad (3.40i)$$

De acuerdo con las ecuaciones (3.40), para una malla uniforme, y  $NS=2,4$  u  $8$ , las funciones de aproximación se pueden ilustrar en la figuras 3.18a,b, mientras que para el caso de una malla no uniforme se ilustra en las figuras 3.19a,b. Obsérvese que para la frontera de salida las funciones de peso serán semejantes a las mostradas en las figuras 3.18b y 3.19b. Haciendo uso de estas figuras, ahora es fácil mostrar los puntos estratégicos de integración, *SSIP*, los cuales fueron comentados en el inciso 3.1.6 al definir la ecuaciones (3.38) y (3.39). Según ello, estos

---

puntos son definidos donde hay un cambio de pendiente en la función de aproximación  $W_i(x, t^{n+1})$ , y por lo tanto existen tres puntos para cada celda básica de integración, los cuales son en forma genérica:  $x_{i-1/2}$ ,  $x_{i-1/2} + \overline{\Delta x}_i$ , y  $x_{i+1/2} - \overline{\Delta x}_i$ . Estos puntos son proyectados hacia atrás desde el nivel de tiempo  $n+1$  hasta el nivel de tiempo  $n$ , y luego son incorporados en el proceso de integración numérica según las ecuaciones (3.38) y (3.39).

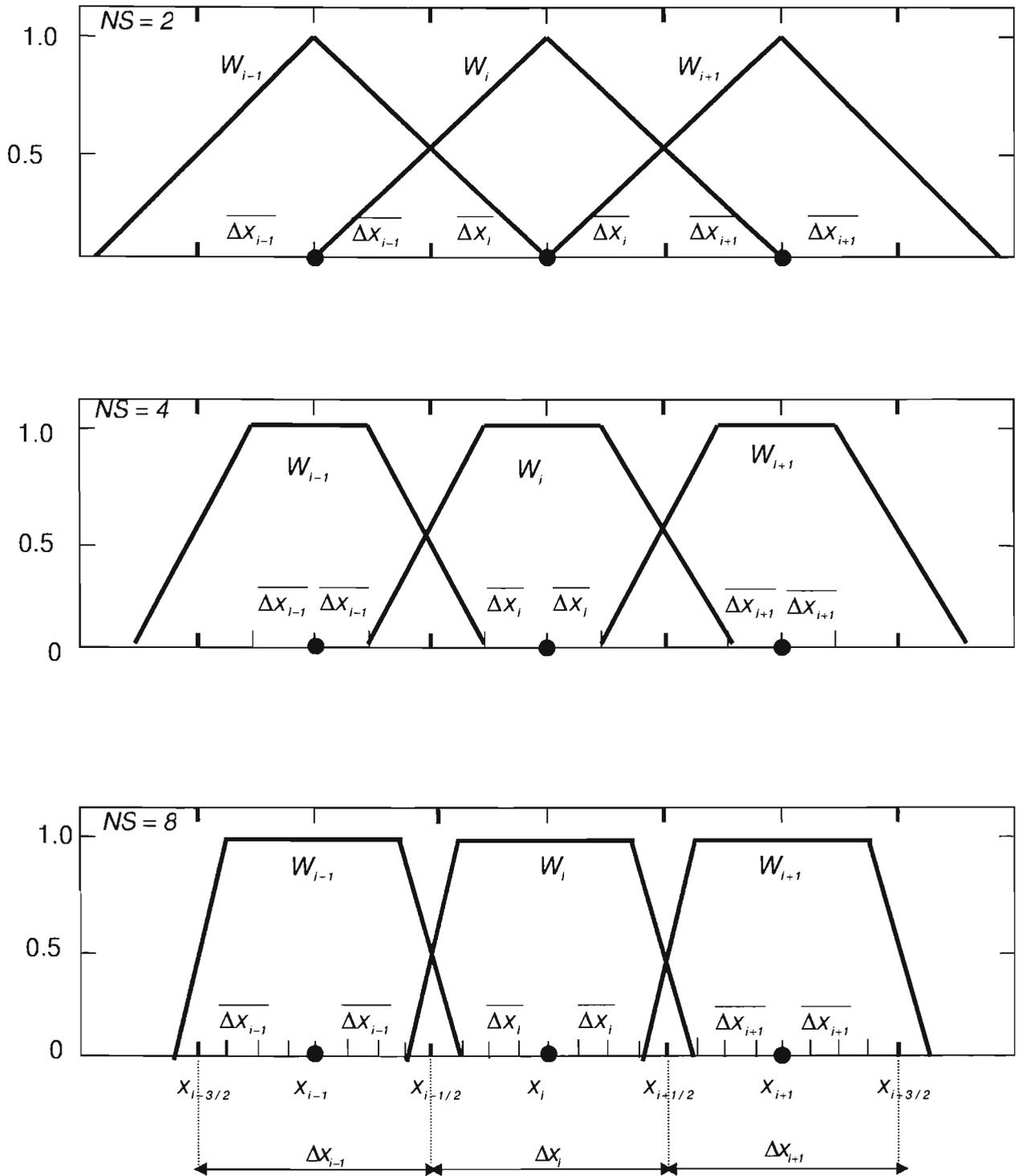


Figura 3.18a. Función de aproximación en  $t^{n+1}$  en nodos internos para una malla uniforme y  $NS=2, 4, 8$ .

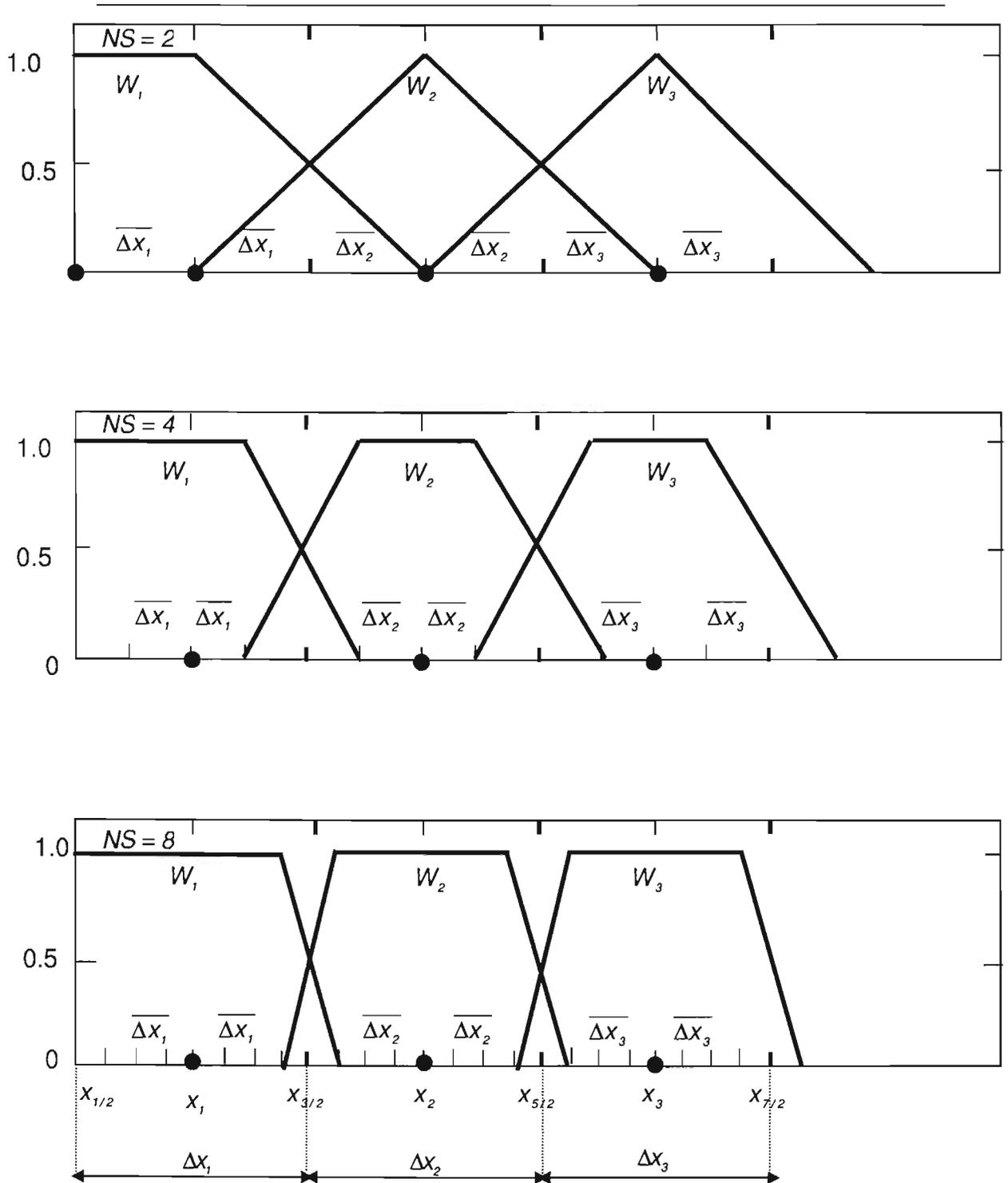


Figura 3.18b. Función de aproximación en  $t^{n+1}$  en la frontera de entrada para una malla uniforme y  $NS=2, 4, 8$ .

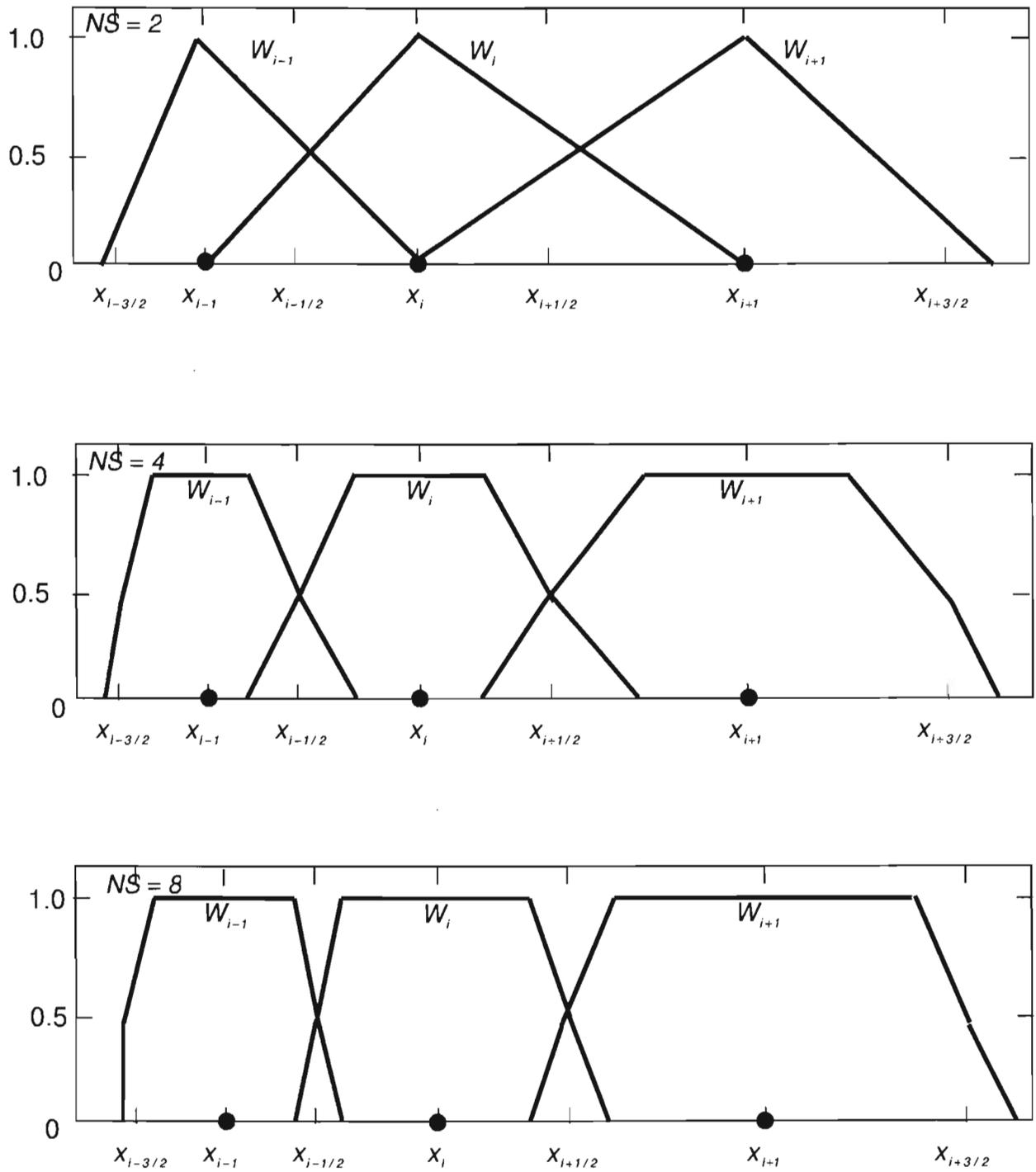


Figura 3.19a. Función de aproximación en nodos internos en  $t^{n+1}$  para una malla no uniforme y  $NS=2,4,8$ .

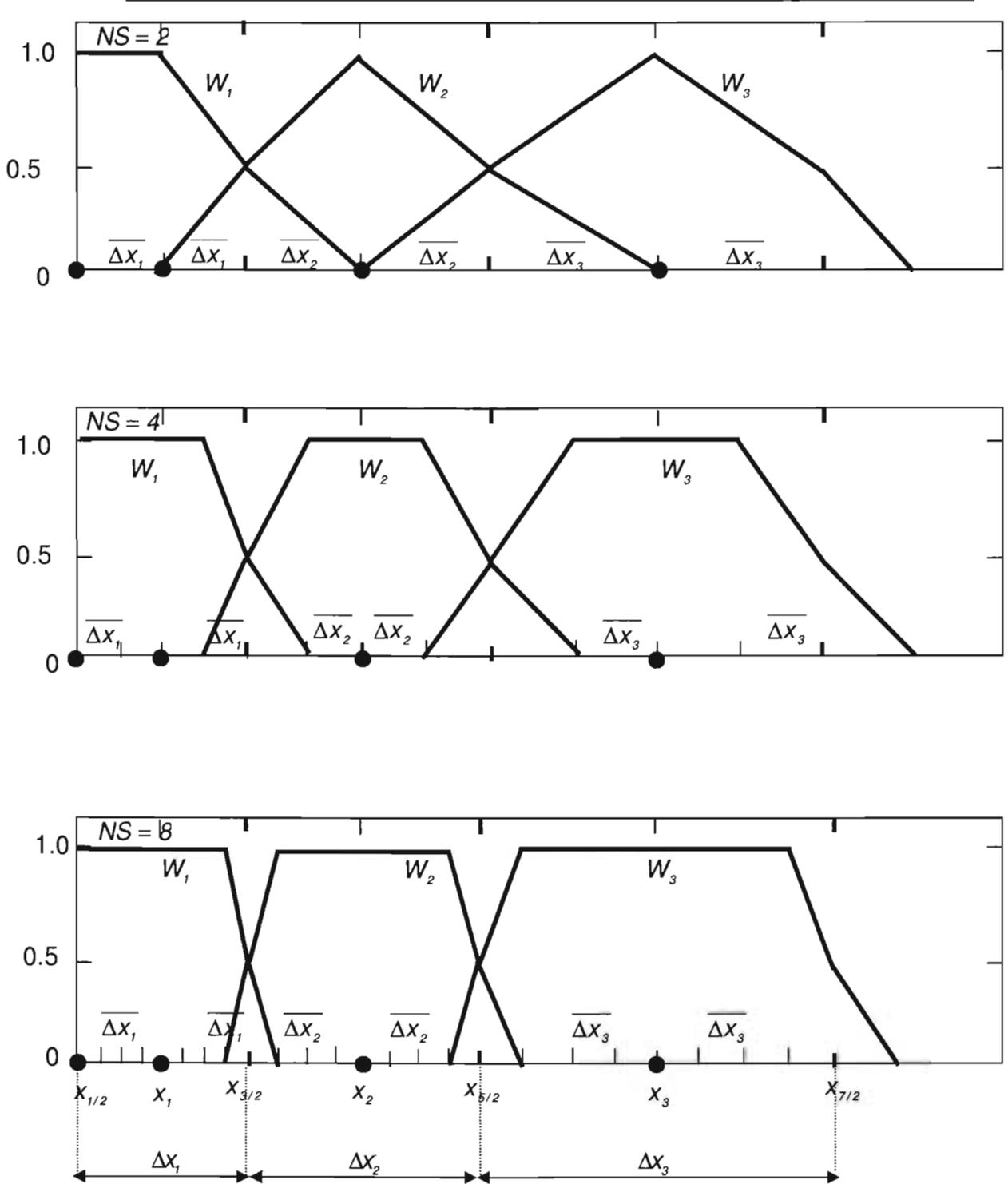


Figura 3.19b. Función de aproximación en  $t^{n+1}$  en la frontera de entrada para una malla no uniforme y  $NS=2, 4, 8$ .

ESTA TESIS NO SALE  
DE LA BIBLIOTECA

### 3.1.7. FVELLAM

En el inciso 3.1.3 se mostraron dos definiciones de la función de peso que satisfacen la ecuación (3.7), y también se indicó que el desarrollo de la metodología se establecería considerando una función de peso lineal definida por la ecuación (3.10a). Este procedimiento es mostrado en Celia *et al.* (1990), y es visto como el desarrollo clásico de ELLAM. Otra variante de ELLAM la presentan Healy y Russell (1993) al hacer uso de la función de peso definida por la ecuación (3.10b). Aquí, la función de peso es llamada *finite volume* lo que lleva a FVELLAM o *finite volume ELLAM*. A continuación se presentan el desarrollo de esta variante y sus diferencias en cuanto a la metodología clásica. Incluso, supóngase ahora que la velocidad es variable y que se representará por  $v(x,t)$ .

Con relación a la ecuación (3.1), e integrando por partes una sola vez (a diferencia de la metodología clásica, donde se integra dos veces), resulta:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{\infty} \int_0^L [N(u) - f] w(x,t) y_i^{n+1} dx dt \\
 &= \int_0^{\infty} \int_0^L \left[ \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) + v(x,t) \frac{\partial u}{\partial x}(x,t) - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) + ku(x,t) - f(x,t) \right] w_i^{n+1}(x,t) dx dt \\
 &= \int_0^L \int_0^{\infty} \frac{\partial(u(x,t)w(x,t))}{\partial t} dt dx + \int_0^L \int_0^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( v(x,t)c(x,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \right) w(x,t) \right] dx dt \\
 &+ \int_0^{\infty} \int_0^L D \frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \frac{\partial w}{\partial x}(x,t) dx dt \\
 & \int_0^{\infty} \int_0^L \left[ \frac{\partial w}{\partial t}(x,t) + v(x,t) \frac{\partial w}{\partial x}(x,t) + kw(x,t) \right] u(x,t) dx dt \\
 & \int_0^{\infty} \int_0^L f(x,t) w(x,t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

La cuarta integral de la ecuación (3.41) es la ecuación adjunta asociada a la parte advectiva-reactiva definida por la ecuación (3.9), por lo que es conveniente que sea nula. Dividiendo el tiempo en un conjunto de intervalos  $[t^{n+1}, t^n]$ , tal que  $\Delta t = (t^{n+1} - t^n)$ , la ecuación (3.41) puede ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^L u(x, t^{n+1}) w(x, t^{n+1}) dx \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left[ v(x, t) c(x, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right] \bullet \eta(x) w(x, t) dS dt \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_0^L D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \frac{\partial w}{\partial x}(x, t) dx dt \\
 & = \int_0^L u(x, t^n) w(x, t^n) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_0^L f(x, t) w(x, t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

en donde, la fórmula de Green ha sido utilizada para transformar la segunda integral en una integral sobre la frontera  $\partial\Omega$ .  $\eta(x)$  es el vector unitario normal a  $\partial\Omega$ . En una dimensión, este vector consta de dos puntos, 0 y L, por lo que  $\eta(0)=-1$  y  $\eta(L)=1$ . En general, esta integral representará flujos de frontera y será no nula solamente cerca de la frontera y cuando las líneas características cruzan a éstas.

Dividiendo el dominio espacial en un conjunto de intervalos  $[x_{i-(1/2)}, x_{i+(1/2)}]$  de longitud  $\Delta x_i$ , con nodo central en  $x_i$ , tal que  $x_{i\pm(1/2)} = x_i \pm (\Delta x_i / 2)$ , en la cual para cada intervalo se asocia una función de peso  $w_i(x, t)$  (figuras 3.4 y 3.22), y utilizando además una aproximación implícita para las integrales temporales, la ecuación (3.42) se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} u(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) dx \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left[ v(x, t) c(x, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right] \bullet \eta(x) w_i(x, t) dS dt \\
 & + \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t^{n+1}) \frac{\partial w_i}{\partial x}(x, t^{n+1}) \Delta t(x) dx \\
 & = \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} u(x, t^n) w_i(x, t^n) dx + \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} f(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) \Delta t(x) dt
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

En la tercera integral se observa que  $\partial w_i(x, t) / \partial x$  es una función delta de Dirac en  $x_{i-(1/2)}$  y  $x_{i+(1/2)}$ , por lo que ésta se calcula como:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t^{n+1}) \frac{\partial w_i}{\partial x}(x, t^{n+1}) \Delta t(x) dx = \\
 & \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) \Delta t(x) [\delta(x - x_{i-(1/2)}) - \delta(x - x_{i+(1/2)})] dx = \quad (3.44) \\
 & D \exp(k\Delta t) \left[ \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-(1/2)}, t^{n+1}) \Delta t(x_{i-(1/2)}) - \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+(1/2)}, t^{n+1}) \Delta t(x_{i+(1/2)}) \right]
 \end{aligned}$$

Sustituyendo la ecuación (3.44) en (3.43), se tiene que:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} u(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) dx \\
 & + D \exp(k\Delta t) \left[ \Delta t(x_{i-(1/2)}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-(1/2)}, t^{n+1}) - \Delta t(x_{i+(1/2)}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+(1/2)}, t^{n+1}) \right] \quad (3.45) \\
 & + B = \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} u(x, t^n) w(x, t^n) dx + \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} f(x, t^{n/1}) \exp(k\Delta t) \Delta t(x) dx
 \end{aligned}$$

en donde  $B$  representa la integral de flujo de frontera definida por:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left[ v(x, t) c(x, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right] \bullet \eta(x) w_i(x, t) dS dt \quad (3.46)$$

En la figura 3.20a se observa que los tiempos:  $t_{i-(1/2)}^*$ ,  $t_{i+(1/2)}^*$ , corresponden a los tiempos en que una característica pudiera interceptar una frontera desde  $x_{i-(1/2)}$  o  $x_{i+(1/2)}$ . Por ello, en la ecuación (3.45) se tomaron en cuenta las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned}
 \Delta t(x_i) &= t^{n+1} - t_i^* \\
 \Delta t(x_{i-(1/2)}) &= t^{n+1} - t_{i-(1/2)}^* \\
 \Delta t(x_{i+(1/2)}) &= t^{n+1} - t_{i+(1/2)}^*
 \end{aligned} \quad (3.47)$$

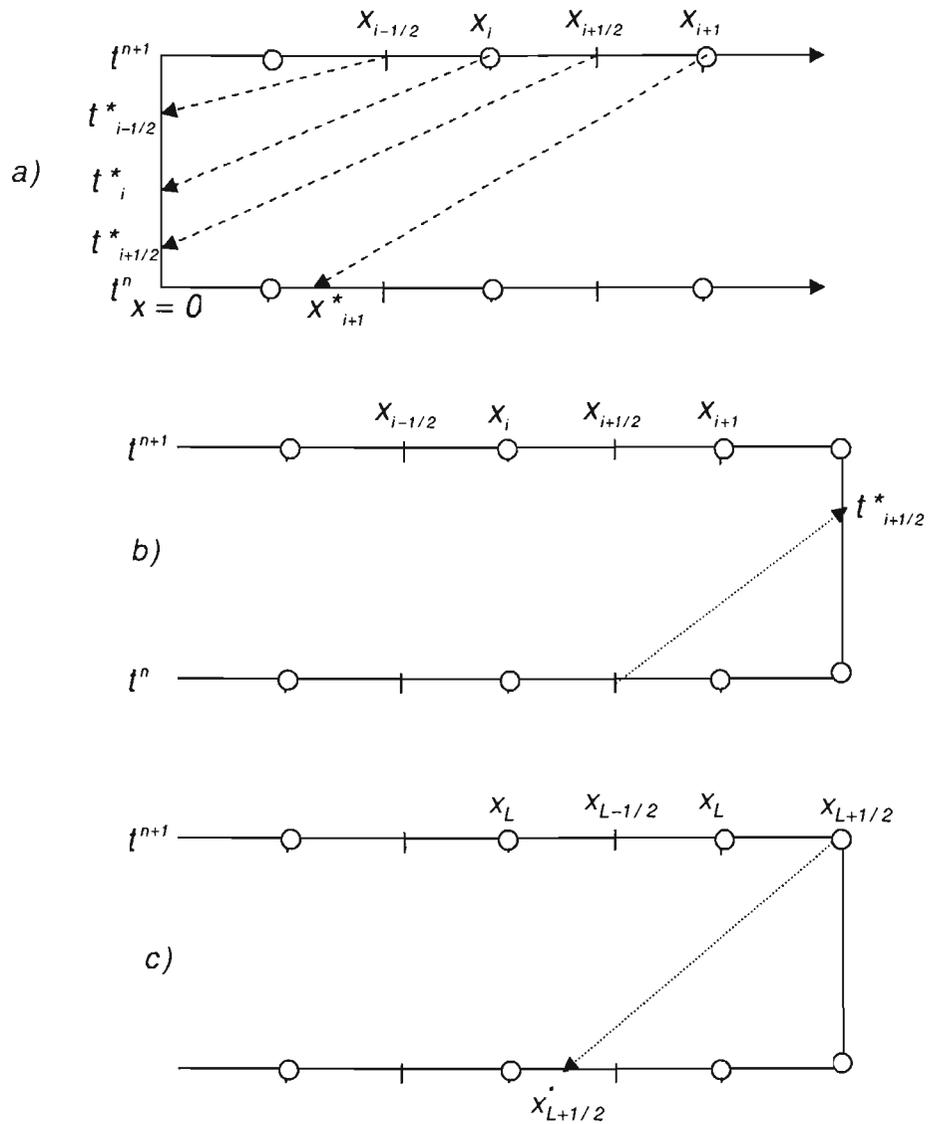


Figura 3.20. Líneas características interceptando las fronteras: a) desde el tiempo  $t^{n+1}$  (hacia atrás) la frontera de entrada; b) interceptando hacia adelante (desde  $t^n$ ) la frontera de salida; c) interceptando hacia atrás (desde  $t^{n+1}$ ) para determinar  $x_{L+1/2}^*$ .

Por otra parte, si se hace uso de la ecuación (3.37), la ecuación (3.45) se transforma en:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} u(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) dx \\
 & + D \exp(k\Delta t) \left[ \Delta t(x_{i-(1/2)}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-(1/2)}, t^{n+1}) - \Delta t(x_{i+(1/2)}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+(1/2)}, t^{n+1}) \right] \quad (3.48) \\
 & + B = \int_0^L u(x, t^n) W_i(x, t^{n+1}) dx + \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} f(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) \Delta t(x) dx
 \end{aligned}$$

y la ecuación (3.46) en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega^-} \left[ v(x, t) c(x, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right] \bullet \eta(x) W_i(x, t^{n+1}) dS dt \quad (3.49)$$

Es decir, que en la ecuación (3.48) y (3.49) se ha introducido la definición de la función de peso aproximada  $W_i(x, t^{n+1})$ . Estas ecuaciones corresponden a la ecuación base y son válidas para características que cruzan o no las fronteras. Si para una celda básica de integración las líneas características no cruzan las fronteras, el valor de  $B$  es nulo,  $\Delta t(x_{i-(1/2)}) = \Delta t(x_{i+(1/2)}) = \Delta t$ , y el valor de la integral en el tiempo  $t^n$  es no nulo y se calcula con la ecuación (3.38). Por el contrario, si para una celda básica de integración las líneas características cruzan las fronteras, entonces la integral en el tiempo  $t^n$  es nula, y el valor  $B$  se evalúa también por medio de la fórmula del trapecio, como se indicará más adelante.

Por otra parte, las ecuaciones (3.48) y (3.49) constituyen una forma más sistemática para implementar ELLAM en dos y tres dimensiones, con velocidad variable. Por ello, el procedimiento mostrado en este inciso será el que se utilice para implementar ELLAM en dos dimensiones, así como para aplicaciones no lineales.

### 3.1.7.1. Evaluación de las integrales

Al igual que en el inciso 3.1.4, sea  $U_i^n$ , una aproximación discreta de la función continua  $u(x, t)$  tal que:  $x = i\Delta x$ ;  $t = n\Delta t$ , donde se admitirá que entre dos nodos sucesivos la variación de  $U_i^n$  es lineal (figura 3.21). Además, se usará la fórmula del trapecio definida según la ecuación (3.14).

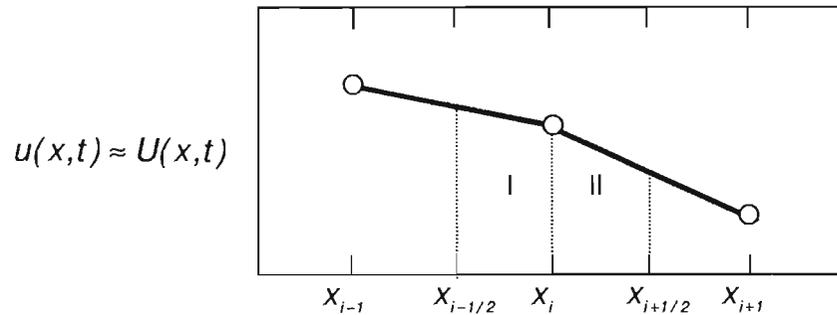


Figura 3.21.  $U(x,t)$  es lineal entre dos nodos consecutivos. Se muestra la aplicación de la regla del trapecio para  $NS=2$  en una celda básica de integración.

Considerando lo anterior, la primera integral de la ecuación (3.48) se determina por:

$$\int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} u(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) dx = \Delta x \exp(k\Delta t) \left( \frac{1}{8} U_{i-1}^{n+1} + \frac{3}{4} U_i^{n+1} + \frac{1}{8} U_{i+1}^{n+1} \right) \quad (3.50)$$

y es válida para celdas básicas de integración internas ( $2 \leq i \leq L-1$ ) figura 3.22.

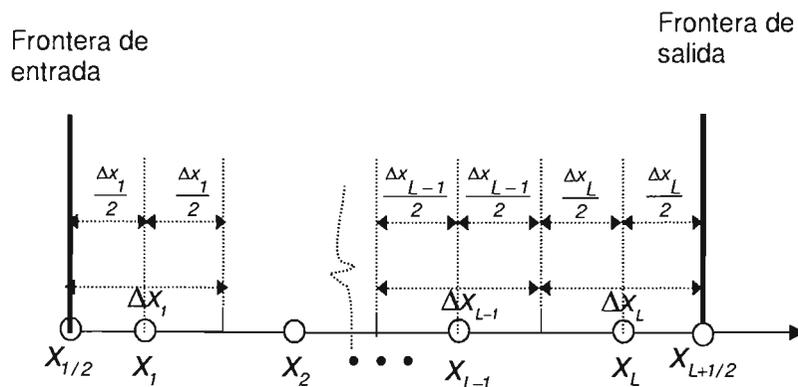


Figura 3.22. División del dominio espacial en FVELLAM.

Para celdas adyacentes a las fronteras se determina por:

$$\int_{x_{1/2}}^{x_{3/2}} u(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) dx = \Delta x \exp(k\Delta t) \left( \frac{1}{4} U_{i/2}^{n+1} + \frac{5}{8} U_i^{n+1} + \frac{1}{8} U_{i+1/2}^{n+1} \right) \quad (3.51)$$

para  $i=1$ , y para  $i=L$  es:

$$\int_{x_{L-(1/2)}}^{x_{L+(1/2)}} u(x, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) dx = \Delta x \exp(k\Delta t) \left( \frac{1}{8} U_{L-1}^{n+1} + \frac{5}{8} U_L^{n+1} + \frac{1}{4} U_{L+(1/2)}^{n+1} \right) \quad (3.52)$$

Las derivadas del término difusivo se determinan mediante una aproximación centrada, de la forma siguiente:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-(1/2)}, t^{n+1}) = \frac{U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+(1/2)}, t^{n+1}) = \frac{U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}}{\Delta x}$$

La integral en el tiempo  $t^n$  se calcula de acuerdo con la ecuación (3.38). La del término independiente se determina mediante la fórmula del trapecio. La que representa flujos de frontera ( $B$ ), es conveniente determinarla según sea una frontera de entrada o salida y qué tipo de condición de frontera se tenga, y se explicará a continuación.

### 3.1.7.2. Evaluación de la integral de flujo de frontera

Como se supone que la velocidad es positiva ( $v > 0$ ), entonces hay un movimiento de izquierda a derecha del eje  $x$ . Por lo tanto, en  $x=0$  se tendrá una "frontera de entrada", y en  $x=L$  una "frontera de salida". Por otra parte, si las líneas características de una celda básica de integración no interceptan las fronteras,  $B$  será nula, en caso contrario el cálculo de  $B$  es como sigue:

#### Frontera de entrada

Una frontera de entrada se toma en cuenta cuando una línea característica, desde  $x_{i-(1/2)}$  en  $t^{n+1}$ , intercepta la frontera de entrada en el tiempo  $t_{i-(1/2)}^* > t^n$  (figura 3.20a). En este caso  $B$  será no nula y pasará información a la celda interior de acuerdo a la condición de frontera en  $x=0$ . Note que este hecho es capturado de manera sistemática en las ecuaciones (3.48) y (3.49), mientras que en las ecuaciones (3.24)-(3.26) de la metodología clásica, es más difícil de establecer sobre todo si la velocidad es variable.

*Frontera tipo Dirichlet.* Si se tiene una condición de primer orden (tipo Dirichlet), de acuerdo con la notación de la ecuación (3.1a)  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} - \left[ v(0,t)g_1(0,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(0,t) \right] W_1(x,t^{n+1}) dt \quad (3.54)$$

Para evaluar la ecuación (3.54) divídase el intervalo de integración,  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ , en un número finito de subintervalos  $NST$  de igual tamaño (figura 3.23), de tal forma que la integral en  $[t^{n+1}, t^n]$  sea una suma de integrales para cada subintervalo.

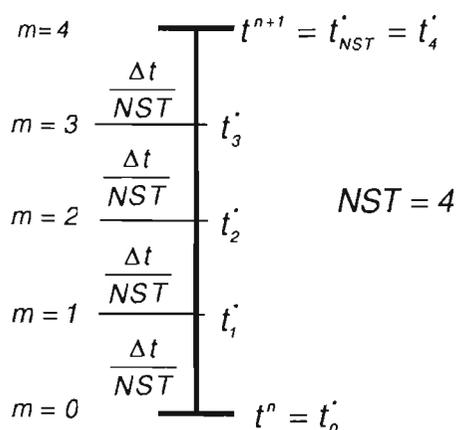


Figura 3.23. División del intervalo  $\Delta t$  en un número finito de subintervalos  $NST$ . Se muestra el caso para  $NST=4$ .

Además, sea:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = \frac{U_1(t) - g_1(t)}{\Delta x / 2} \quad (3.55)$$

y

$$U_1(t) = U_1^n + (U_1^{n+1} - U_1^n) \left( \frac{t - t^n}{\Delta t} \right), t \in [t^{n+1}, t^n] \quad (3.56)$$

Al aplicar la regla del trapecio a cada subintervalo y sumarlos, la ecuación (3.54) queda:

$$\begin{aligned}
 B = & -\frac{1}{2} \left\{ \frac{2\Delta t}{NST} \sum_{m=1}^{NST-1} g_1(t_m^*) v(0, t_m^*) W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t_m^*)) \right. \\
 & + \left( \frac{4\Delta t}{NST} \frac{D}{\Delta x} \right) \sum_{m=1}^{NST-1} g_1(t_m^*) W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t_m^*)) \\
 & - \frac{4\Delta t}{NST} \frac{D}{\Delta x} U_i^n \sum_{m=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t_m^* - t^n}{\Delta t} \right) W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t_m^*)) \\
 & - \frac{4\Delta t}{NST} \frac{D}{\Delta x} U_i^{n+1} \sum_{m=1}^{NST-1} \left( \frac{t_m^* - t^n}{\Delta t} \right) W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t_m^*)) \\
 & + g_1(t^n) \left[ \frac{\Delta t}{NST} \left( v(0, t^n) + \frac{2D}{\Delta x} \right) W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t^n)) \right] \\
 & + U_i^n \left[ -\frac{\Delta t}{NST} \left( \frac{2D}{\Delta x} \right) W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t^n)) \right] \\
 & + g_1(t^{n+1}) \left[ \frac{\Delta t}{NST} \left( v(0, t^{n+1}) + \frac{2D}{\Delta x} \right) W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t^{n+1})) \right] \\
 & \left. + U_i^{n+1} \left[ -\frac{\Delta t}{NST} \left( \frac{2D}{\Delta x} \right) W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t^{n+1})) \right] \right\} \quad (3.57)
 \end{aligned}$$

donde,  $t_m^*$  es el tiempo correspondiente a cada uno de los nodos de los subintervalos;  $NST$  el número total de subintervalos,  $m$  es un contador que indica el  $m$ -ésimo punto de integración (figura 3.23) y  $g_1(t)$  la condición de frontera tipo Dirichlet. El procedimiento de cálculo es: determinar los puntos de integración, proyectar estos puntos hacia adelante desde  $t_m^*$  hasta  $t^{n+1}$ , mediante la ecuación (3.9c), determinar  $\bar{x}(t^{n+1}; 0, t_m^*)$  y, finalmente, calcular, con la ecuación (3.40),  $W_i(\bar{x}(t^{n+1}; 0, t_m^*))$  para cada nodo  $i$ . Un adecuado número de puntos de integración distribuirá apropiadamente la información de la frontera hacia el interior del dominio; sin embargo, Healy y Rusell (1993); recomiendan agregar (al igual que la integración espacial) puntos estratégicos de integración (*STIP*, por sus siglas en inglés), los cuales se determinan proyectando hacia atrás los puntos en los cuales la función de peso aproximada cambia de pendiente. Con esto se asegura que las soluciones no contengan oscilaciones no físicas y se tenga conservación de la masa.

**Frontera tipo Neumann.** Para el caso de una frontera de segundo orden (tipo Neumann), de acuerdo con la notación de la ecuación (3.1a),  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} -[v(0, t)U(0, t) + g_2(0, t)] W_i(\bar{x}, t^{n+1}) dt \quad (3.58)$$

De nuevo, si se acepta que:

$$-D \frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = g_2(t) = -D \frac{U_1(t) - U_0(t)}{\Delta x / 2} \quad (3.59)$$

de la ecuación (3.59) se obtiene:

$$U_0(t) = U_1(t) + \frac{g_2(t)\Delta x}{2D} \quad (3.60)$$

donde:

$$U_1(t) = U_i^n + (U_i^{n+1} - U_i^n) \left( \frac{t - t^n}{\Delta t} \right), t \in [t^{n+1}, t^n] \quad (3.61)$$

Sustituyendo la ecuación (3.60) en (3.58),  $B$  puede ser calculada por el método del trapecio, como se mostró para el caso de frontera tipo Dirichlet.

*Frontera de tercer tipo.* De acuerdo con la notación de la ecuación (3.1a), para el caso de una frontera de tercer tipo (tipo Robin)  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} -g_3(0,t)W(x, t^{n+1}) dt \quad (3.62)$$

De la condición de frontera

$$g_3(0,t) = v(0,t)u(0,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(0,t)$$

y aceptando que:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = \frac{U_1(t) - U_0(t)}{\Delta x / 2} \quad (3.63)$$

se obtiene:

$$U_0(t) = \frac{g_3(t) + U_1(t) \frac{2D}{\Delta x}}{v(0,t) + \frac{2D}{\Delta x}} \quad (3.64)$$

donde:

$$U_1(t) = U_i^n + (U_i^{n+1} - U_i^n) \left( \frac{t - t^n}{\Delta t} \right), t \in [t^{n+1}, t^n]$$

la integral de flujo de frontera dada por la ecuación (3.62) se calcula también por el método del trapecio, en forma similar a como se mostró para el caso de frontera tipo Dirichlet.

### Frontera de salida

Una frontera de salida se toma en cuenta cuando una línea característica, desde  $x_{i+(1/2)}$  en  $t^n$ , intercepta la frontera de salida en el tiempo  $t_{i+(1/2)}^* < t^{n+1}$  (figura 3.20b). Nótese que la ecuación para la última celda  $[x_{L-(1/2)}, x_{L+(1/2)}]$  no cubre la región triangular con vértices  $(L, t^{n+1})$ ,  $(L, t^n)$ , y  $(x_{L+(1/2)}^*, t^n)$  (figura 3.20c). Por lo tanto, se tiene que buscar una ecuación correspondiente a esta región.

Siguiendo la nomenclatura, la función de peso aproximada para esta región se representará por  $W_{L+1}(x, t^{n+1})$ . De acuerdo con esto, los puntos espaciales de integración entre  $x_{L-(1/2)}^*$  y  $x_{L+(1/2)}^*$  envían toda la masa al interior del dominio, mientras que los puntos entre  $x_{L+(1/2)}^*$  y  $L$  envían la masa hacia la frontera. Con este entendimiento, la función de peso aproximada  $W_{L+1}(x, t^{n+1})$  quedará definida por:

$$W_{L+1}(x, t^{n+1}) = \begin{cases} 0; 0 \leq x \leq L \\ \exp[k(t - t^n)]; t^n \leq t \leq t^{n+1} \end{cases} \quad (3.65)$$

La cual está en correspondencia con:

$$W_L(x, t^{n+1}) = \begin{cases} 1; x_{L-1/2} + \overline{\Delta x_L} \leq x \leq L \\ 0; t^n \leq t < t^{n+1} \end{cases}$$

que se definió en la ecuación (3.40i).

Para una frontera de salida, la ecuación (3.48) sufrirá algunas modificaciones. La primera integral no aparece, debido a que la región triangular no tiene dominio en  $t^{n+1}$ . Por ello, la masa que representa esta integral es ahora la componente advectiva de la integral que por su parte representa el flujo de frontera. El término dispersivo correspondiente a  $(x_{i-(1/2)}, t^{n+1})$  es ahora evaluada en  $(L, t^{n+1})$ , con un peso en el tiempo de  $\Delta t$ , mientras que el término correspondiente a  $(x_{i+(1/2)}, t^{n+1})$  tiene un peso en el tiempo nulo. Por ello no aparece. Los límites de la integral en  $t^n$  se ajustan con acuerdo a la proyección de la región triangular, y la última integral del término independiente se transforma en una integral temporal,

reemplazando  $dx$  por el producto  $v(l,t) dt$ . Por lo tanto, la ecuación (3.48) para la frontera de salida quedará definida por:

$$D \exp(k\Delta t) \Delta t \frac{\partial u}{\partial x}(L, t^{n+1}) + B = \int_{x_{L+(1/2)}}^L u(x, t^n) W_{L+1}(x, t^{n+1}) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(L, t) W_{L+1}(x, t^{n+1})(t - t^n) dt \quad (3.66)$$

y la ecuación (3.46) como:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ v(L, t) u(L, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) \right] W_{L+1}(x, t^{n+1}) dt \quad (3.67)$$

Al igual que en el caso de la frontera de entrada, la de salida puede ser de tres tipos como se indica en seguida.

*Frontera tipo Dirichlet.* Si se tiene una condición de primer orden (tipo Dirichlet), de acuerdo con la notación de la ecuación (3.1a),  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ v(L, t) g_1(L, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) \right] W_{L+1}(x, t^{n+1}) dt \quad (3.68)$$

De nuevo, para evaluar la ecuación (3.68), divídase el intervalo de integración,  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  en un número finito de subintervalos  $NST$  de igual tamaño (figura 3.23), de tal forma que la integral en  $[t^{n+1} - t^n]$  sea una suma de integrales para cada subintervalo.

Además, si se acepta que:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = \frac{g_1(t) - U_L(t)}{\Delta x / 2} \quad (3.69)$$

y

$$U_L(t) = U_L^n + (U_L^{n+1} - U_L^n) \left( \frac{t - t^n}{\Delta t} \right), t \in [t^{n+1}, t^n] \quad (3.70)$$

Al aplicar la regla del trapecio a cada subintervalo y sumarlos, la ecuación (3.68) queda así:

$$\begin{aligned}
 B = & \frac{1}{2} \left\{ \frac{2\Delta t}{NST} \sum_{m=1}^{NST-1} g_1(t_m^*) v(L, t_m^*) W_{L+1}(L, t_m^*) \right. \\
 & - \left( \frac{4\Delta t}{NST} \frac{D}{\Delta x} \right) \sum_{m=1}^{NST-1} g_1(t_m^*) W_{L+1}(L, t_m^*) \\
 & + \frac{4\Delta t}{NST} \frac{D}{\Delta x} U_L^n \sum_{m=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t_m^* - t^n}{\Delta t} \right) W_{L+1}(L, t_m^*) \\
 & + \frac{4\Delta t}{NST} \frac{D}{\Delta x} U_L^{n+1} \sum_{m=1}^{NST-1} \left( \frac{t_m^* - t^n}{\Delta t} \right) W_{L+1}(L, t_m^*) \\
 & + g_1(t^n) \left[ \frac{\Delta t}{NST} \left( v(L, t^n) - \frac{2D}{\Delta x} \right) W_{L+1}(L, t^n) \right] \\
 & + U_L^n \left[ - \frac{\Delta t}{NST} \left( \frac{2D}{\Delta x} \right) W_{L+1}(L, t^n) \right] \\
 & + g_1(t^{n+1}) \left[ \frac{\Delta t}{NST} \left( v(L, t^{n+1}) - \frac{2D}{\Delta x} \right) W_{L+1}(L, t^{n+1}) \right] \\
 & \left. + U_L^{n+1} \left[ \frac{\Delta t}{NST} \left( \frac{2D}{\Delta x} \right) W_{L+1}(L, t^{n+1}) \right] \right\} \quad (3.71)
 \end{aligned}$$

donde,  $t_m^*$  es el tiempo correspondiente a cada uno de los puntos de integración,  $NST$  el número total de subintervalos,  $m$  un contador que indica el  $m$ -ésimo punto de integración (figura 3.23), y  $g_1(t)$  la condición de frontera tipo Dirichlet. En realidad, el tiempo  $t_m^*$  corresponde a las proyecciones (en la frontera de salida) de puntos de integración espaciales que están dentro del intervalo  $[x_{L-(1/2)}^*, L]$ . Para problemas con velocidad variable en dos o tres dimensiones, es muy difícil establecer en forma exacta este dominio, por lo que es factible sólo determinarlo en forma aproximada. Esto se indicará al detalle cuando se trate el problema en dos dimensiones.

*Frontera tipo Neumann.* Para el caso de una frontera de segundo orden (tipo Neumann), de acuerdo con la notación de la ecuación (3.1a),  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} [v(L, t)U(L, t) + g_2(t)] W_{L+1}(L, t) dt \quad (3.72)$$

De nuevo, si se acepta que:

$$-D \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = g_2(t) = -D \frac{U_{L+1/2}(t) - U_L(t)}{\Delta x / 2} \quad (3.73)$$

de la ecuación (3.73) se obtiene:

$$U_{L+(1/2)}(t) = U_L(t) - \frac{g_2(t)\Delta x}{2D} \quad (3.74)$$

donde:

$$U_L(t) = U_L^n + (U_L^{n+1} - U_L^n) \left( \frac{t - t^n}{\Delta t} \right), t \in [t^n, t^{n+1}] \quad (3.75)$$

sustituyendo la ecuación (3.74) en (3.72),  $B$  puede ser calculada por el método del trapecio como se mostró para el caso de frontera tipo Dirichlet.

*Frontera de tercer tipo.* De acuerdo con la notación de la ecuación (3.1a), para el caso de una frontera de tercer tipo (tipo Robin),  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} g_3(0, t) W_{L+1}(L, t) dt \quad (3.76)$$

De la condición de frontera

$$g_3(L, t) = v(L, t)u(L, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(L, t)$$

y aceptando que:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = \frac{U_{L+(1/2)}(t) - U_L(t)}{\Delta x / 2} \quad (3.77)$$

se obtiene:

$$U_{L+(1/2)}(t) = \frac{g_3(t) - U_L(t) \frac{2D}{\Delta x}}{v(L, t) - \frac{2D}{\Delta x}} \quad (3.78)$$

donde:

$$U_L(t) = U_L^n + (U_L^{n+1} - U_L^n) \left( \frac{t - t^n}{\Delta t} \right), t \in [t^n, t^{n+1}]$$

La integral de flujo de frontera dada por la ecuación (3.76) se calcula también por el método del trapecio, en forma similar a como se mostró para el caso de frontera tipo Dirichlet.

### 3.1.7.3. Prueba de conservación de masa

Para probar que FVELLAM conserva la masa en cualquier tipo de frontera, por cuestiones de claridad se supone que  $k=0$ . Además, supóngase que se tiene un dominio dividido en cuatro celdas básicas de integración como se muestra en la figura 3.24. De acuerdo con la metodología que se explicó para FVELLAM, al aplicar (3.45) y (3.46) para cada celda básica de integración, se establece el siguiente conjunto de ecuaciones:

para el nodo  $x_1$ :

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{1/2}}^{x_{3/2}} u(x, t^{n+1}) dx \\
 & + D \left[ \Delta t(x_{1/2}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{1/2}, t^{n+1}) - \Delta t(t_{3/2}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{3/2}, t^{n+1}) \right] \\
 & + B_1 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{1/2}}^{x_{3/2}} f(x, t) w_1(x, t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.79 a}$$

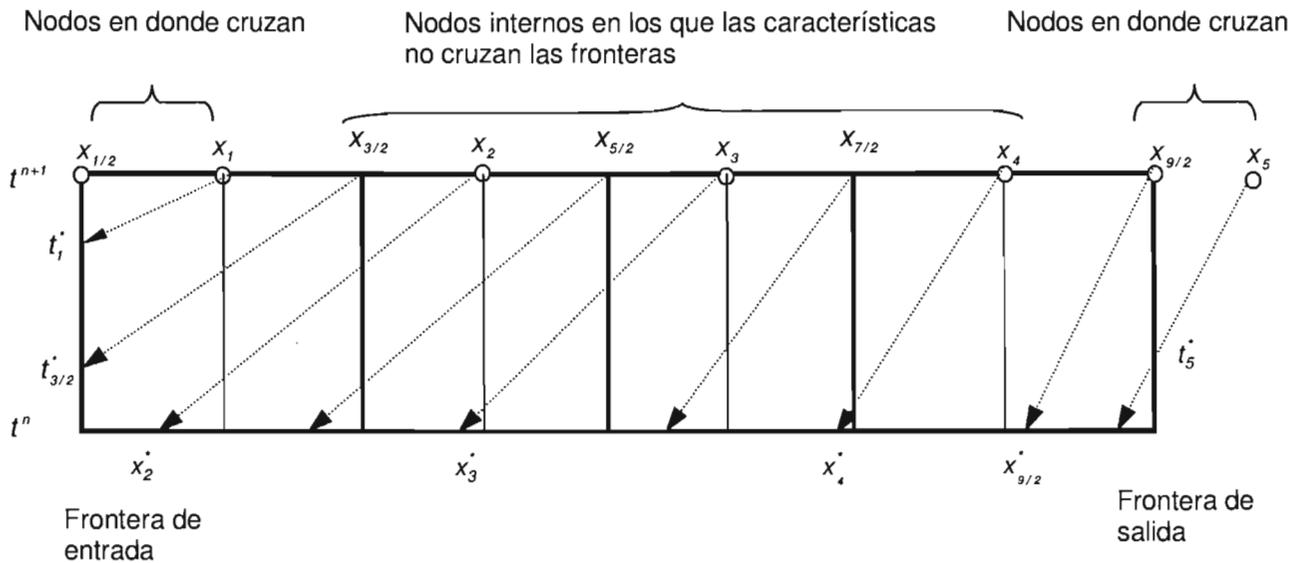


Figura 3.24. Geometría FVELLAM para el caso de cuatro celdas de integración.

para el nodo  $x_2$ :

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{3/2}}^{x_{5/2}} u(x, t^{n+1}) dx \\
 & + D \left[ \Delta t(x_{3/2}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{3/2}, t^{n+1}) - \Delta t(t_{5/2}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{5/2}, t^{n+1}) \right] \\
 & + B_2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{3/2}}^{x_{5/2}} f(x, t) w_2(x, t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.79 b}$$

para el nodo  $x_3$ :

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{5/2}}^{x_{7/2}} u(x, t^{n+1}) dx \\
 & + D \left[ \Delta t(x_{5/2}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{5/2}, t^{n+1}) - \Delta t(t_{7/2}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{7/2}, t^{n+1}) \right] \\
 & + B_3 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{5/2}}^{x_{7/2}} f(x, t) w_3(x, t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.79 c}$$

para el nodo  $x_4$ :

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{7/2}}^{x_{9/2}} u(x, t^{n+1}) dx \\
 & + D \left[ \Delta t(x_{7/2}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{7/2}, t^{n+1}) - \Delta t(t_{9/2}) \frac{\partial u}{\partial x}(x_{9/2}, t^{n+1}) \right] \\
 & + B_4 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{7/2}}^{x_{9/2}} f(x, t) w_4(x, t) dx dt
 \end{aligned} \tag{3.79 d}$$

y la ecuación complementaria para la región triangular( nodo  $x_5$ ):

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ v(L, t) u(L, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) \right] + D \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) \Delta t(t_{9/2}) = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{7/2}}^{x_{9/2}} f(x, t) w_5(x, t) dx dt \tag{3.79 e}$$

donde:

$$B_1 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ v(L,t)u(L,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(L,t) \right]_{x_{1/2}} (-1)w_1(x,t) dt$$

$$B_2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ v(L,t)u(L,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(L,t) \right]_{x_{1/2}} (-1)w_2(x,t) dt$$

$B_3=0$  (porque las líneas características no cruzan la frontera).

$B_4=0$  (porque las líneas características no cruzan la frontera).

Además, como  $w_1(x,t)=w_2(x,t)=w_3(x,t)=w_4(x,t)=w_5(x,t)=1$  para  $(x,t) \in \Omega_{x,t}$  (según la ecuación 3.10b si  $k=0$ ), al sumar las expresiones (3.79a-3.79e) se verifica que:

$$\begin{aligned} & \int_0^L u(x,t^{n+1}) dx - \int_0^L u(x,t^n) dx - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ v(x,t)u(0,t) dt - D \frac{\partial u}{\partial x}(0,t) \right] dt \\ & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[ v(x,t)u(L,t) dt - D \frac{\partial u}{\partial x}(L,t) \right] dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_0^L f(x,t) dx dt \end{aligned} \quad (3.80)$$

la cual representa una ley de conservación global para la ecuación (3.1). Por lo tanto, el grado de exactitud de FVELLAM dependerá del grado de exactitud con que se determinen cada una de las integrales que aparecen en las ecuaciones (3.45) y (3.46).

### 3.1.8. Proyección de líneas características y puntos de integración

La proyección de las líneas características es un paso crucial en ELLAM, debido a que el transporte de masa del tiempo  $t^n$  al  $t^{n+1}$  (o viceversa) lo hace siguiendo las líneas características. Cuando la velocidad es constante, todas las líneas características son paralelas entre sí y sus trayectorias quedan definidas en forma exacta a través de las ecuaciones (3.9a,b,c). Por el contrario, cuando la velocidad es variable, el seguimiento de las líneas características es complicado y sólo quedan definidas en forma aproximada. Igualmente, la proyección de los puntos de integración desde  $t^n$  al  $t^{n+1}$  (o viceversa) la hace siguiendo las líneas características.

Para un campo de velocidad variable, la proyección de los puntos de integración se efectúa por los métodos semianalíticos descritos por Pollock (1988), Goode (1990), y Healy y Rusell (1993). En ellos se supone que la velocidad entre las celdas básicas de integración (por ejemplo:  $x_{i-1/2}$ ,  $x_{i+1/2}$ ) se conoce y es uniforme en el tiempo, y que varía linealmente

en cada celda. Por lo tanto, los puntos de integración son trazados celda por celda, con la siguiente fórmula (Healy y Rusell, 1993):

$$x(t_{m+1}) = x(t_m) \pm v(x(t_m), t_m) \left[ \exp\left(\frac{\partial v}{\partial x} \Delta t_{j+1}\right) - 1 \right] \left[ \frac{1}{\frac{\partial v}{\partial x}} \right] \quad (3.81)$$

donde se escoge el signo (+) para proyecciones hacia adelante, y el signo (-) para proyecciones hacia atrás;  $x(t_m)$  es la posición del punto de integración en el tiempo  $t_m$  (figura 3.25);  $m$  es el índice para denotar las divisiones en el tiempo;  $\Delta t_m$  el tamaño de los subintervalos en el tiempo, y es igual al tiempo que se requiere para proyectar un punto a través de una celda completa o parcial, tal que  $\sum_{m=1}^M \Delta t_m = \Delta t$ ;  $M$  es el número total de subintervalos en el tiempo;  $t_0 = t^n$ , para proyecciones hacia adelante,  $t_0 = t^{n+1}$  para proyecciones hacia atrás.

La proyección de los puntos de integración está intrínsecamente relacionada al cálculo de la integral en el tiempo  $t^n$ , y al cálculo de la integral de flujos de frontera. Por ello, la determinación apropiada de las líneas características es crucial para que ELLAM desarrolle su propiedad de conservar la masa como fue mostrado anteriormente.

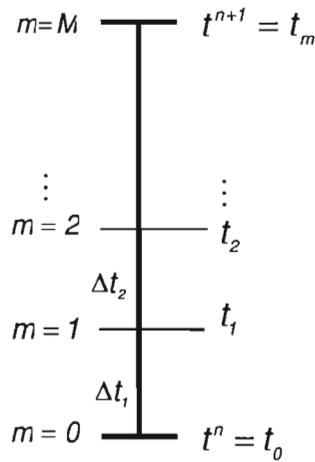


Figura 3.25. División del intervalo  $\Delta t$  en un número finito de subintervalos para la ecuación (3.81).

### 3.1.9. Ejemplos de aplicación 1D

#### Ejemplo 3.1

Considérese que para solucionar la ecuación (3.1) se tienen las siguientes condiciones auxiliares:

$$u(x,t) = u_a(x,t); \quad x = a, t > 0$$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial u_a(x,t)}{\partial x}; \quad x = b, t > 0$$

$$u(x,0) = \exp(-\pi x^2)$$

La solución analítica de la ecuación (3.1) para el presente caso será (Celia *et al.*, 1990):

$$u_a(x,t) = \frac{1}{\sqrt{1+4\pi Dt}} \exp\left[\frac{-\pi(x-Vt)^2}{1+4\pi Dt}\right]$$

A continuación se presentan algunas comparaciones de la solución analítica con ELLAM y con una solución en diferencias finitas. En cada una de las figuras se indican los parámetros característicos de cada corrida. Se consideran los siguientes datos:  $a = 3$ ,  $b = 9$ ;  $V = 10$ ,  $D = 0.1$

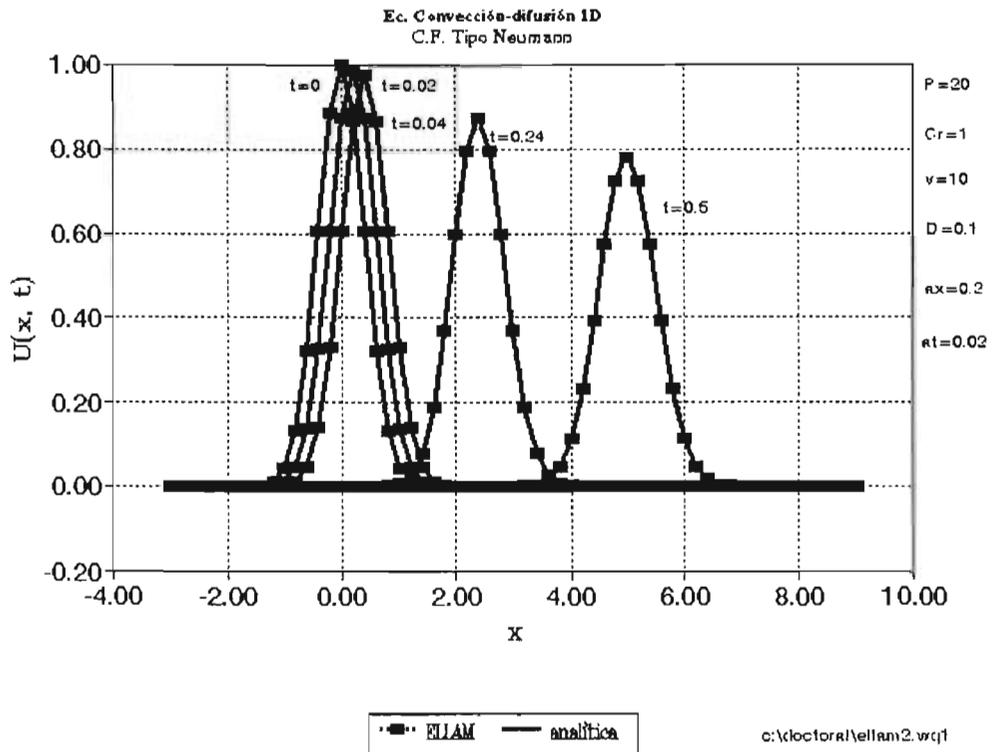


Figura 3.26a. Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.1.

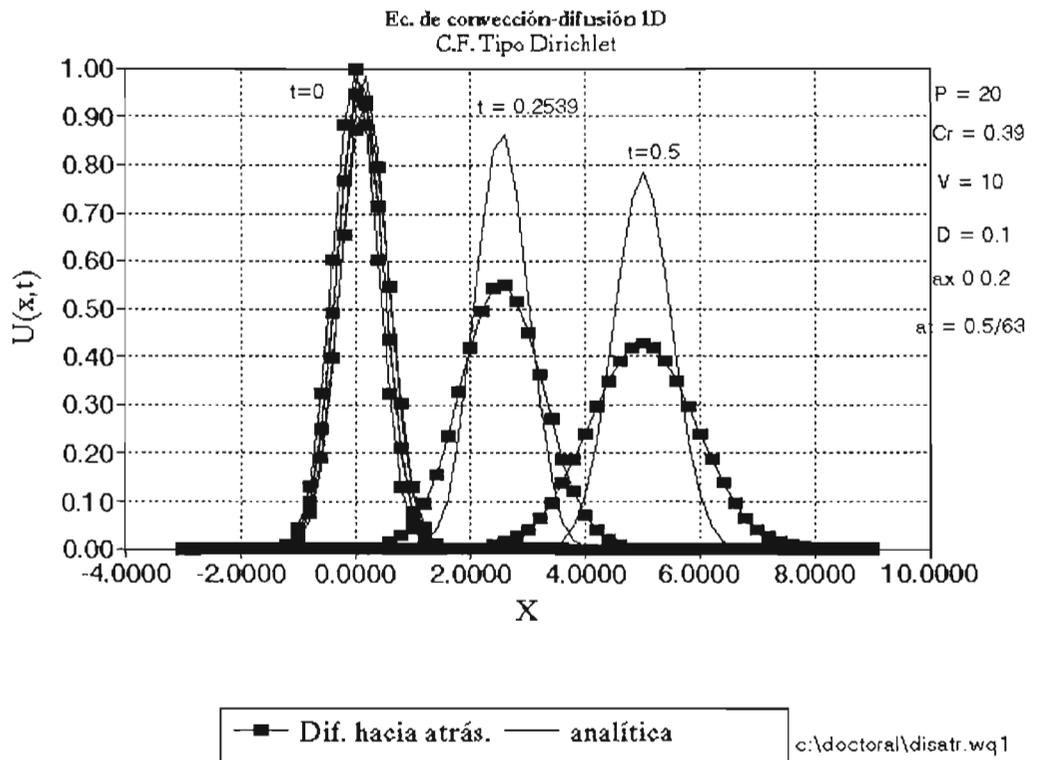


Figura 3.26b. Comparación de diferencias finitas con la solución analítica para el ejemplo 3.1.

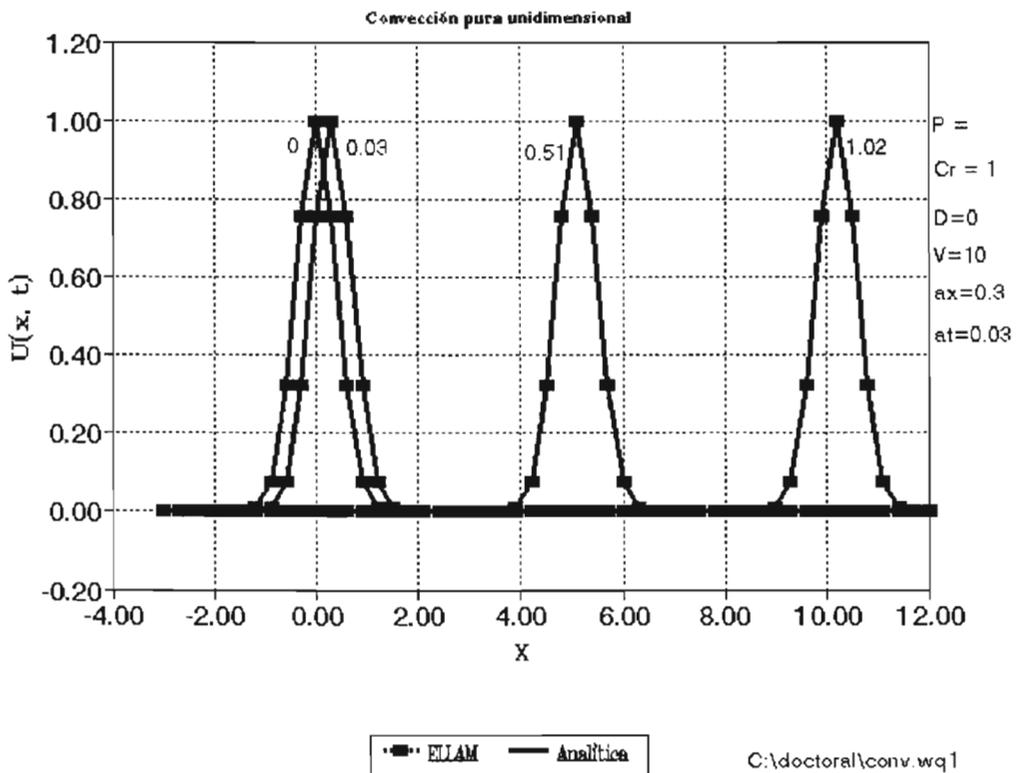


Figura 3.26c. Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.1 (convección pura).

La figura (3.26a) muestra la comparación de resultados cuando se soluciona la ecuación (3.1) a través de ELLAM. Como se ve, los resultados del método son exactos para cada nodo en los que se dividió el espacio. La figura (3.26b) muestra ahora la misma solución, con un método de diferencias finitas implícito, donde se usó una diferencia hacia atrás para aproximar el término convectivo. En este caso, se observa que a pesar de que el esquema en diferencias finitas es estable, existe una fuerte difusividad numérica. Estos problemas de difusión numérica serán analizados con más detalle en el capítulo 5, a través de un análisis de Fourier.

En la figura (3.26c) se muestran los resultados para el caso en el que el coeficiente de difusión  $D=0$ . Para este caso, la ecuación (3.1) se convierte de una ecuación de segundo orden (tipo parabólico) a una de primer orden (tipo hiperbólico). Para este problema, las condiciones de frontera necesarias serán sólo una. Así, para obtener el esquema de ELLAM para este caso bastará hacer nulos los términos que aparecen multiplicando al coeficiente de difusión  $D$  en las ecuaciones (3.23,3.28-3.31 y 3.49). Es

decir, que el método incorpora automáticamente el cambio de solución. Obsérvese que esto es debido a que la función de peso  $w(x,t)$ , para el caso en que  $D=0$ , sigue satisfaciendo la ecuación adjunta (3.2). Esto pone de manifiesto que ELLAM transfiere a la función de peso la dinámica del problema. Los resultados que se observan en la figura 3.26c muestran que ELLAM da valores exactos en cada uno de los nodos. Para este caso, no se presenta la solución con el método en diferencias finitas (ni ningún otro método) porque la solución no es posible sin que se presenten difusión numérica u oscilaciones espurias.

*Ejemplo 3.2.*

Considérese ahora el ejemplo donde se tienen las siguientes condiciones auxiliares:

$$u(x,t) = u_a(x,t) = U_0 = 10; \quad x = a, t > 0$$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial u_a(x,t)}{\partial x} = 0; \quad x = b, t > 0$$

$$u(x,0) = 0$$

La solución analítica de la ecuación (3.1), para este caso, será:

$$u_a(x,t) = \frac{U_0}{2} \left\{ \exp\left[\frac{x}{2D}(v - \sqrt{v^2 + 4Dk})\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{x - t\sqrt{v^2 + 4Dk}}{\sqrt{4Dt}}\right) + \exp\left[\frac{x}{2D}(v + \sqrt{v^2 + 4Dk})\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{x + t\sqrt{v^2 + 4Dk}}{\sqrt{4Dt}}\right) \right\}$$

A continuación se presentan algunas comparaciones de la solución analítica con ELLAM. En las figuras se indican los parámetros característicos de cada corrida. Se consideran los siguientes datos:

- $V = 1.0$
- $D = 0.2$
- $K = 0.01$
- $f(x,t) = 0$
- $\theta = 0.5$

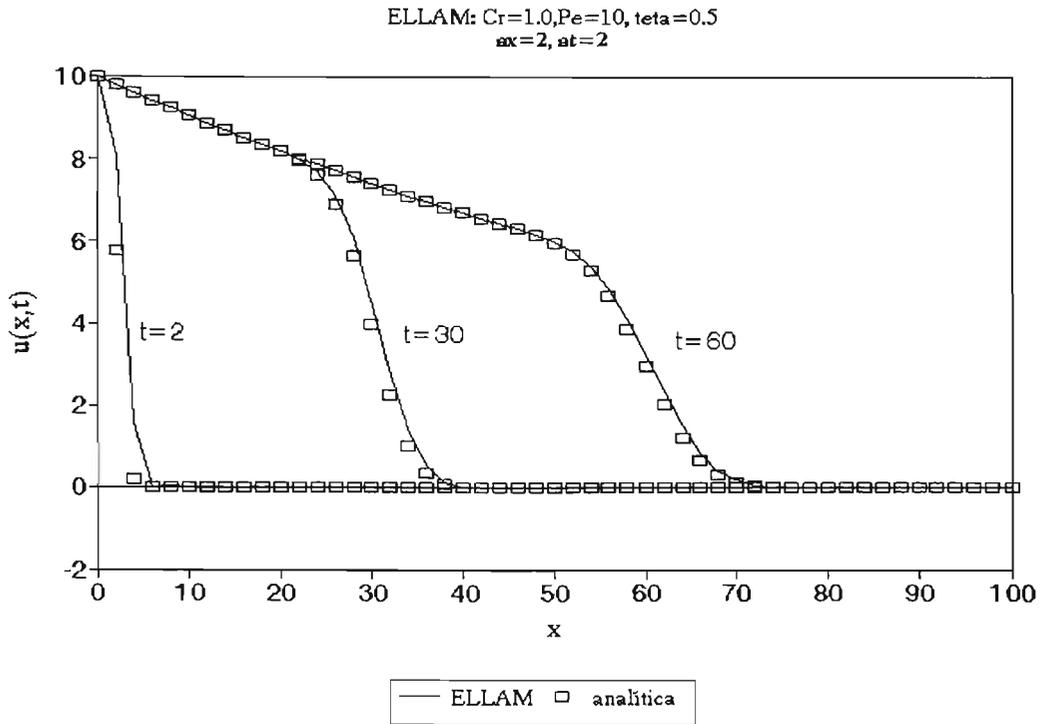


Figura 3.27a. Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.2 ( $Cr=1$ ).

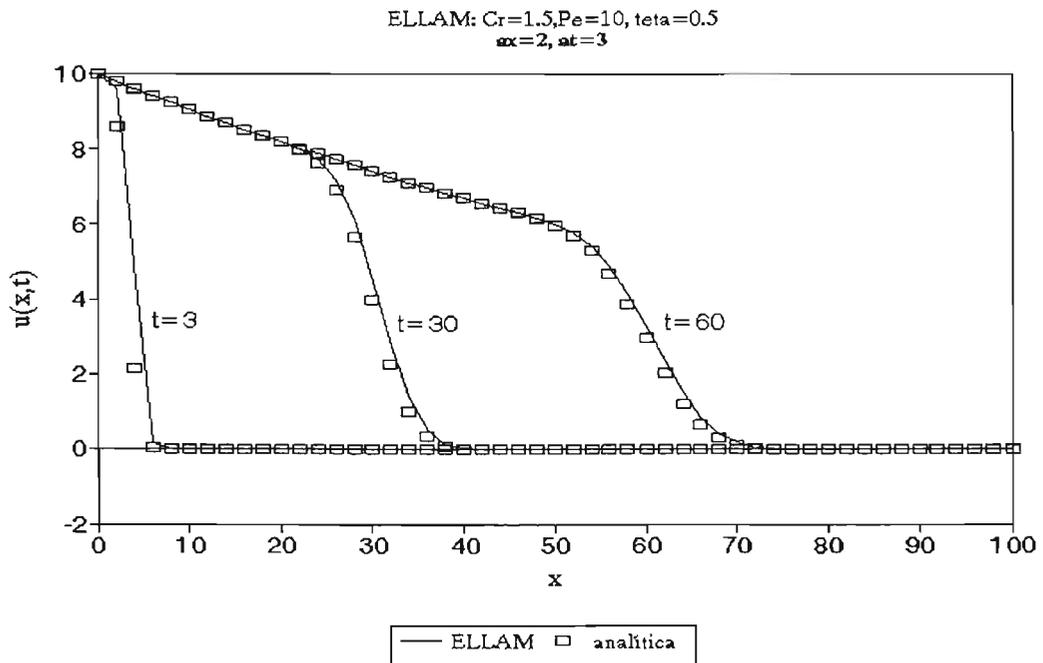


Figura 3.27b. Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.2 ( $Cr=1.5$ ).

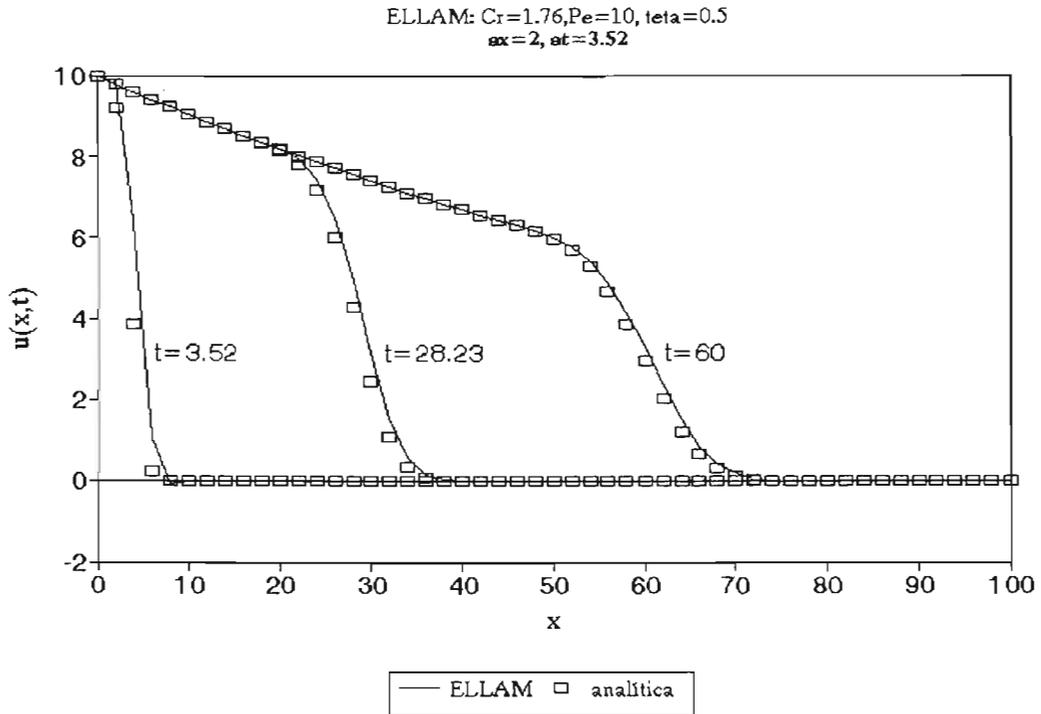


Figura 3.27c. Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.2 ( $Cr = 1.76$ ).

En este ejemplo se resuelve el caso de un transporte reactivo. Las figuras muestran las respectivas soluciones, empleando diferentes  $Cr$ . Se observa que ELLAM da soluciones exactas en la parte donde la componente reactiva es dominante, mientras que en el frente de avance existe una ligera desviación. Esto se debe principalmente a que para evaluar las integrales de frontera no se han empleado subintervalos en el intervalo de tiempo  $\Delta t$ . En todos los casos las soluciones de ELLAM son consistentes.

### Ejemplo 3.3.

Considérese ahora el mismo ejemplo 3.2, pero con  $k=0$ . Es decir que se considera el caso de un problema de transporte conservativo. Para ello sigue siendo válida la solución analítica. Los resultados obtenidos se muestran a continuación:

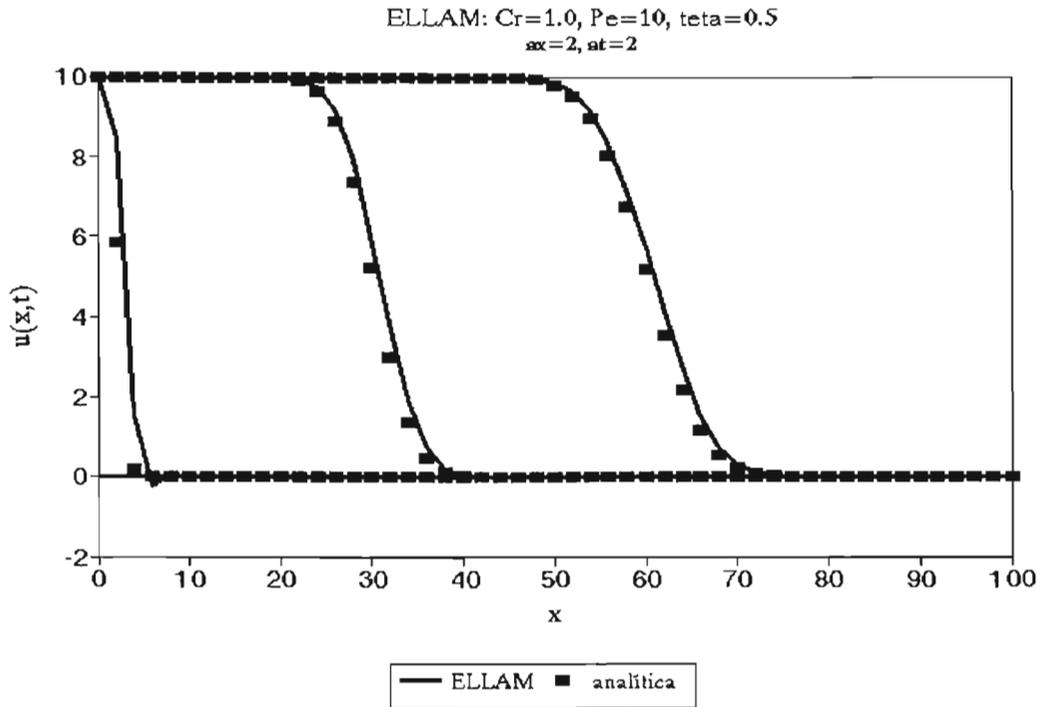


Figura 3.28a. Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.3 ( $Cr=1.0$ ).

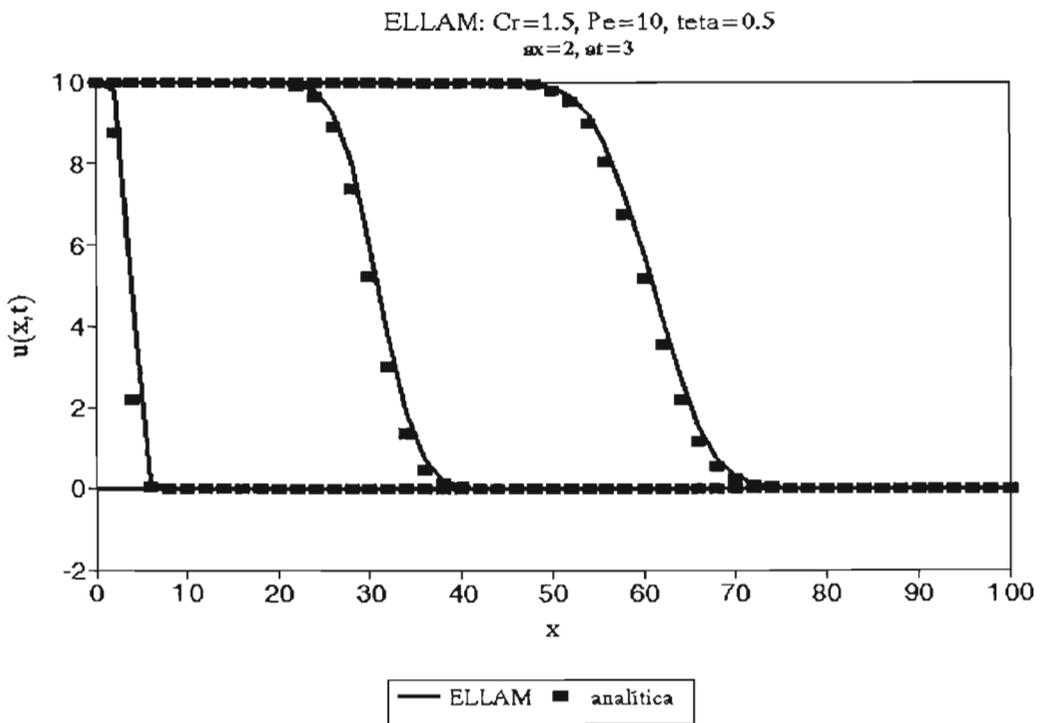


Figura 3.28b. Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.3 ( $Cr=1.5$ ).

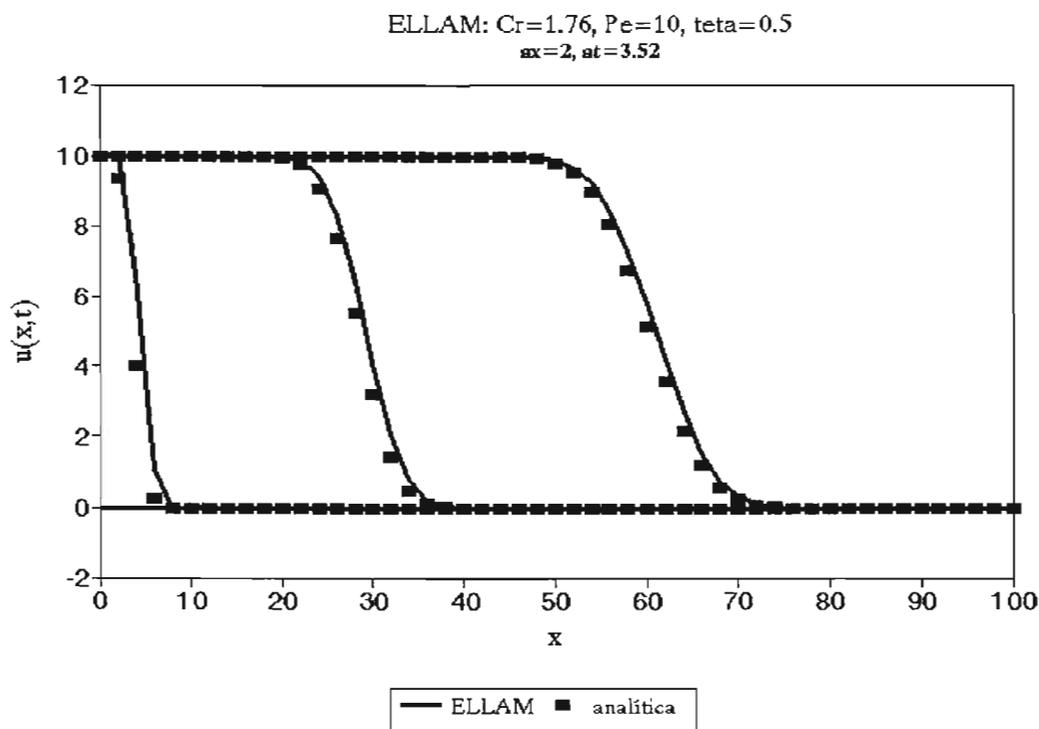


Figura 3.28c. Comparación de ELLAM con la solución analítica para el ejemplo 3.3 ( $Cr=1.76$ ).

Para este caso de transporte conservativo, las soluciones de ELLAM para todos los casos siguen siendo consistentes. De nuevo existe una ligera desviación en el frente de avance.

Un hecho importante en los ejemplos 3.2 y 3.3 es que de nuevo la función de peso captura la dinámica del problema (figuras 3.3-3.6). Es decir, que la función de peso satisface la ecuación adjunta (3.2) para  $k=0$  y  $k \neq 0$ .

En el capítulo 5 se resuelven otros ejemplos donde se emplean  $Cr$  y  $Pe$ , mucho mayores que los utilizados en este capítulo.

### 3.2. ELLAM en dos dimensiones

Como se comentó en el transcurso del inciso 3.1.7., FVELLAM da una metodología más sistemática para implementar ELLAM en problemas multidimensionales, y con un campo de velocidad variable. Por lo tanto, esta metodología será la que se use a continuación para implementar ELLAM en dos dimensiones.

#### 3.2.1. Planteamiento del problema

Considérese la ecuación de advección-difusión-reacción lineal, en dos dimensiones, escrita en forma vectorial:

$$\ell(c) \equiv \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{vc} - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c) + kc = f, (x, y) \in \Omega, t \in [0, T] \quad (3.82)$$

sujeta a cualquiera de las siguientes condiciones de frontera y condición inicial:

$$\begin{aligned} c(x, y, t) &= h_1(x, y, t), \\ -\mathbf{D}\nabla c \cdot \mathbf{n} &= h_2(x, y, t), \\ [\mathbf{vc} - \mathbf{D}\nabla c] \cdot \mathbf{n} &= h_3(x, y, t), (x, y) \in \partial\Omega, t \in (0, T] \\ c(x, y, 0) &= C_0, (x, y) \in \Omega \end{aligned} \quad (3.82a)$$

donde  $c$  es la concentración del soluto;  $\mathbf{v}$  es el vector de velocidades;  $\mathbf{D}$  el tensor de dispersión;  $k$  un coeficiente de reacción constante;  $\eta$ , un vector unitario perpendicular a la frontera  $\partial\Omega$ ,  $f$  una función que representa la pérdida o ganancia de masa.

Se demuestra que el operador adjunto asociado a la parte advectiva-reactiva del operador diferencial  $\ell(\bullet)$  de la ecuación (3.82) es:

$$\ell_{v-k}^*(\bullet) \equiv -\frac{\partial(\bullet)}{\partial t} - \nabla(\circ) \cdot \mathbf{v} + k \quad (3.83)$$

#### 3.2.2. Formulación ELLAM

ELLAM es un método de residuos pesados y se formula usando la primera forma débil de la ecuación (3.82) en relación con una función de peso arbitraria  $w(x, y, t)$ , a saber:

$$\int_0^{\infty} \int_{\Omega} [\ell(c) - f] w(x, t) d\Omega dt = 0 \quad (3.84)$$

Sustituyendo la ecuación (3.82) en (3.84), se obtiene:

$$\int_{\Omega} \int_0^T \left[ \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}c - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c) + kc - f \right] w d\Omega dt = 0 \quad (3.85)$$

Empleando en la ecuación (3.85) la fórmula de diferenciación:

$$(wc)' = wc' + cw' \quad (3.86)$$

se llega a:

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \mathbf{v}c)w &= \nabla \cdot (\mathbf{v}cw) - \mathbf{v}c \cdot \nabla w \\ [\nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c)]w &= \nabla \cdot [(\mathbf{D}\nabla c)w] - (\mathbf{D}\nabla c) \cdot \nabla w \end{aligned} \quad (3.87)$$

por lo tanto, la ecuación (3.85) se transforma en:

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} \ell(c - f) w d\Omega dt &= \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial(cw)}{\partial t} - c \frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}cw) - c(\mathbf{v} \cdot \nabla w) \right. \\ &\quad \left. - \nabla \cdot [(\mathbf{D}\nabla c)w] + \mathbf{D}\nabla c \cdot \nabla w + kcw - fw \right\} d\Omega dt = 0 \\ &= \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial(cw)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}cw) - \nabla \cdot [(\mathbf{D}\nabla c)w] + (\mathbf{D}\nabla c) \cdot \nabla w \right. \\ &\quad \left. + c \left[ -\frac{\partial w}{\partial t} - \mathbf{v} \cdot \nabla w + kw \right] - fw \right\} d\Omega dt = 0 \end{aligned} \quad (3.88)$$

Si se escoge una función de peso  $w(x, y, t)$  que satisfaga  $\ell_{v-k}^*(w) = 0$ , la ecuación (3.88) se reducirá a:

$$\int_0^T \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial(cw)}{\partial t} + \nabla \cdot [(\mathbf{v}c - \mathbf{D}\nabla c)w] + (\mathbf{D}\nabla c) \cdot \nabla w - fw \right\} d\Omega dt = 0 \quad (3.89)$$

La ecuación (3.89) sugiere dividir el intervalo  $[0, T]$ , en una suma finita de intervalos  $\sum_{n=0}^N [t^{n+1} - t^n]$ , tal que  $\Delta t = [t^{n+1} - t^n]$ . Por ello, esta ecuación aplicada a un intervalo  $[t^{n+1} - t^n]$  se escribe como:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial(cw)}{\partial t} + (\mathbf{D}\nabla c) \cdot \nabla w - fw \right\} d\Omega dt + B = 0 \quad (3.90)$$

donde el segundo término se ha convertido, a través de la fórmula de Green, en una integral de frontera definida por:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}c - \mathbf{D}\nabla c) \cdot \boldsymbol{\eta} w dS dt = 0 \quad (3.91)$$

$dS$  representa una diferencial de frontera. Esta integral representará asimismo la integral de flujo de frontera y se tratará como se indicó para el caso unidimensional.

Por otra parte, considérese el espacio dividido en un conjunto de celdas de dimensiones  $(\Delta x_i, \Delta y_j)$  centradas en el nodo  $(x_i, y_j)$ , tal que  $x_{i\pm 1/2} = x_i \pm \Delta x_i / 2$ ;  $y_{j\pm 1/2} = y_j \pm \Delta y_j / 2$ , de tal forma que a cada celda se asocia una función de peso  $w_{ij}(x, y, t)$  que se definirá más adelante. La región en  $t^{n+1}$  correspondiente a la celda  $i, j$  se denotará con  $\xi_{ij}$ . Al ser advectada hacia atrás en  $t^n$ , esta región se denotará con  $\xi_{ij}^*$  (figura 3.29).

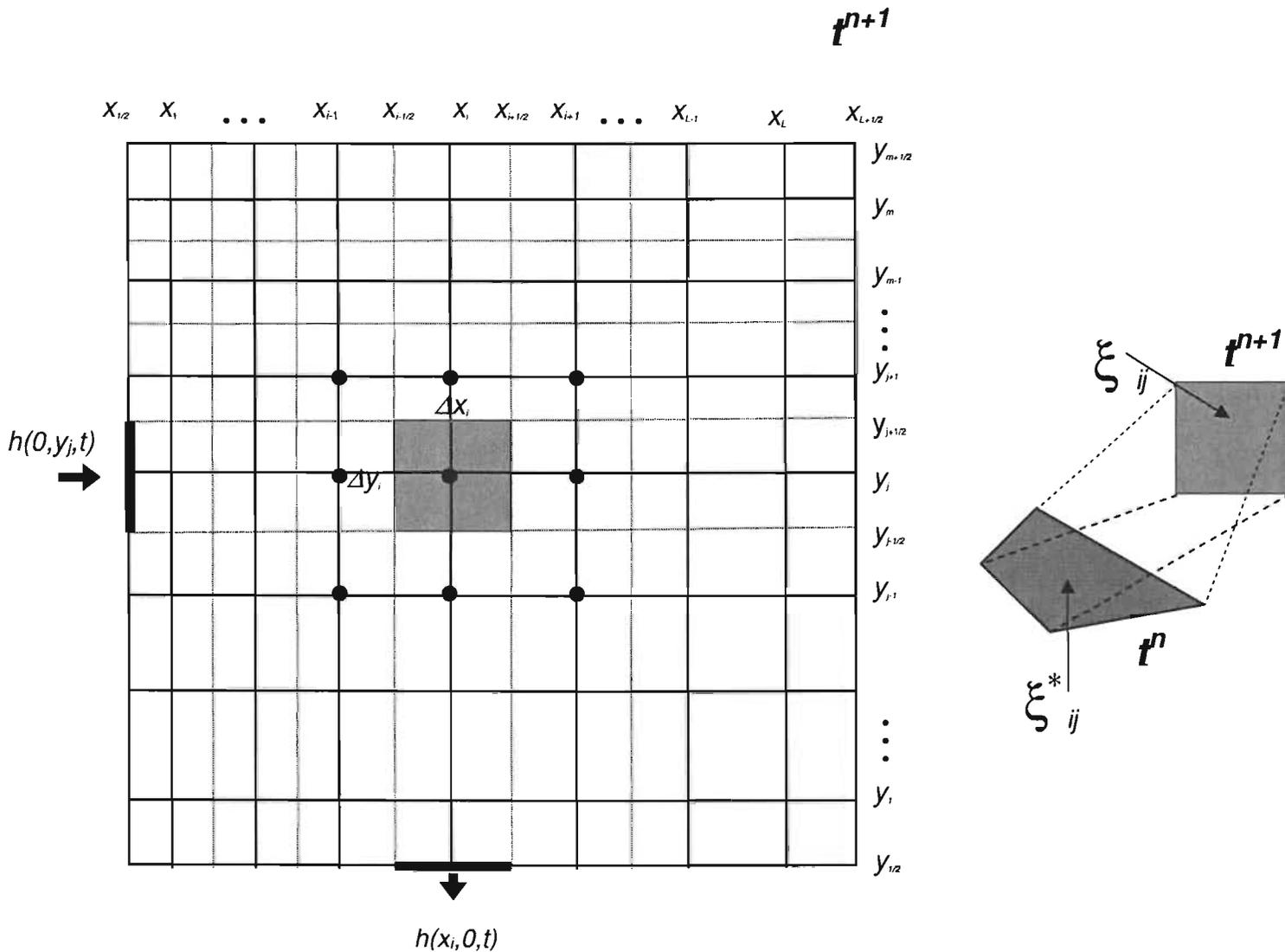


Figura 3.29. Geometría ELLAM en dos dimensiones.

Con las indicaciones mencionadas anteriormente, la ecuación (3.90) puede ser resuelta para la región  $\xi_{ij}$  de la forma siguiente:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left\{ \frac{\partial(cw_{ij})}{\partial t} + (\mathbf{D}\nabla c) \cdot \nabla w_{ij} - fw_{ij} \right\} dx dy dt + B = 0 \quad (3.92)$$

donde  $B$  es el flujo de frontera definido por la ecuación (3.91).

Empleando una aproximación totalmente implícita de la ecuación (3.92) se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [(cw_{ij})_{(x,y,t^{n+1})} - (cw_{ij})_{(x,y,t^n)}] dx dy \\
 & + \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [(\mathbf{D}\nabla c) \cdot \nabla w_{ij}]_{(x,y,t^{n+1})} \Delta t(x,y) dx dy \\
 & - \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [f(x,y,t^{n+1})w_{ij}(x,y,t^{n+1})] \Delta t(x,y) dx dy + B = 0
 \end{aligned} \tag{3.93}$$

Para las dimensiones  $x, y$ , en la ecuación (3.93) el término difusivo queda definido de la forma siguiente:

$$[(\mathbf{D}\nabla c) \cdot \nabla w] = \frac{\partial w}{\partial x} \left[ D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial c}{\partial y} \right] + \frac{\partial w}{\partial y} \left[ D_{xy} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right] \tag{3.94}$$

Sustituyendo la ecuación (3.94) en (3.93), se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [c(x,y,t^{n+1})w_{ij}(x,y,t^{n+1})] dx dy \\
 & + \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ \frac{\partial w}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \Delta t(x,y) + \frac{\partial w}{\partial y} \left( D_{xy} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \Delta t(x,y) \right]_{(x,y,t^{n+1})} dx dy \\
 & - \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [f(x,y,t^{n+1})w_{ij}(x,y,t^{n+1})] \Delta t(x,y) dx dy + B = \int_{\xi_{ij}} c^n(x,y,t^n)w_{ij}(x,y,t^n) d\xi^*
 \end{aligned} \tag{3.95}$$

La ecuación (3.95) es la aplicación de ELLAM a la ecuación (3.82), y será la ecuación base para la solución numérica. Está ecuación es la versión bidimensional de la ecuación (3.43). De nuevo, la primera integral será referida como la integral en el tiempo  $t^{n+1}$ ; la segunda como integral del término difusivo; la tercera como integral del término independiente, y la primera integral del segundo miembro será la integral en el tiempo  $t^n$ .

### 3.2.3. Elección de la función de peso y líneas características

De manera análoga al inciso 3.1.3 (para el caso unidimensional), la función de peso debe anular el operador adjunto asociado a la parte advectiva-reactiva, el cual está definido según la ecuación (3.83). Por lo tanto, la función de peso  $w(x,y,t)$  varía en forma exponencial a lo largo de las líneas características. Si a cada nodo del dominio se le asocia una función de peso  $w_{ij}(x,y,t)$ , ésta será definida de la forma siguiente: dado un punto  $P = (x_0, y_0, t_0)$ , la ecuación diferencial ordinaria:

$$P' = v(x(t), y(t), t); x(t_0) = x_0, y(t_0) = y_0 \quad (3.96)$$

describirá las líneas características desde el punto  $P$ . Se denotará la solución de esta ecuación diferencial en el tiempo  $t$  por:

$$X(t; x_0, y_0, t_0) \quad (3.97)$$

donde  $X$  puede encontrarse hacia adelante o hacia atrás en el tiempo, a lo largo de las líneas características. En particular, se definirán:

$$\begin{aligned} (x^*, y^*) &= X(t^{n+1}; x, y, t^n) \\ (\hat{x}, \hat{y}) &= X(t^n; x, y, t^{n+1}) \end{aligned} \quad (3.98)$$

De acuerdo con esto,  $(x, y)$  en  $t^{n+1}$  definirá a  $(x^*, y^*)$  en  $t^n$ . Contrariamente,  $(x, y)$  en  $t^n$  definirá a  $(\hat{x}, \hat{y})$  en  $t^{n+1}$ . Por lo tanto, existe un número infinito de funciones que cumplen este requerimiento, la función más sencilla estará definida como sigue:

$$w_{ij}(x, y, t) = \begin{cases} \exp[k(t - t^n)] & , X(t^{n+1}; x, y, t) \in \xi_{ij}, \quad t \in [t^n, t^{n+1}] \\ 0 \text{ de otra forma} & \end{cases} \quad (3.99)$$

### 3.2.4. Evaluación de las integrales

De acuerdo con la definición de la función de peso dada por la ecuación (3.99),  $\partial w / \partial x$ ,  $\partial w / \partial y$  serán una función delta de Dirac. Por lo tanto, de forma similar a como ocurrió en la ecuación (3.44), la (3.95) se transforma en:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x, y) \exp(k\Delta t) dx dy \\
 & + \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \left[ \left( D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{i-(1/2), j}^{n+1} \Delta t(x_{i-1/2}, y_j) - \left( D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{i+(1/2), j}^{n+1} \Delta t(x_{i+1/2}, y_j) \right] \exp(k\Delta t) dy \\
 & + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ \left( D_{xy} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{i, j-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, y_{j-1/2}) - \left( D_{xy} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{i, j+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, y_{j+1/2}) \right] \exp(k\Delta t) dx \\
 & - \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x, y, t^{n+1}) \exp(k\Delta t) \Delta t(x, y) dx dy + B = \int_{\xi_{ij}^n} c(x, y, t^n) w_{ij}(x, y, t^n) d\xi
 \end{aligned}
 \tag{3.100}$$

donde, en forma análoga a como se indica en la ecuación (3.47), los  $\Delta t(x_i, y_j)$  estarán definidos por:

$$\begin{aligned}
 \Delta t(x_i, y_j) &= t^{n+1} - t^*(x_i, y_j) \\
 \Delta t(x_{i-(1/2)}, y_j) &= t^{n+1} - t^*(x_{i-(1/2)}, y_j) \\
 \Delta t(x_i, y_{j-(1/2)}) &= t^{n+1} - t^*(x_i, y_{j-(1/2)})
 \end{aligned}
 \tag{3.101}$$

siendo:  $t^*(x_i, y_j)$ ;  $t^*(x_{i-(1/2)}, y_j)$ ;  $t^*(x_i, y_{j-(1/2)})$  los tiempos en que una característica pudiera interceptar una frontera desde  $(x_i, y_j, t^{n+1})$ ;  $(x_{i-(1/2)}, y_j, t^{n+1})$ ;  $(x_i, y_{j-(1/2)}, t^{n+1})$ , respectivamente.

En general, en la ecuación (3.100) los términos evaluados en  $t^{n+1}$  pueden ser aproximarse mediante técnicas estándar de diferencias finitas. Por otra parte más adelante será descrito un tratamiento para evaluar  $B$  y la integral en el tiempo  $t^n$ .

### 3.2.4.1. Integral en el tiempo $t^{n+1}$

De aquí en adelante, sea  $C_{i,j}^n$  una aproximación discreta de la función continua  $c(x_i, y_j, t_n)$ , tal que:  $x=i\Delta x$ ,  $y=j\Delta y$  y  $t=n\Delta t$ , se admitirá que entre dos nodos sucesivos la variación de  $C_{i,j}^n$  es lineal. Además, la designación de los nodos será como se indica en la figura 3.30.

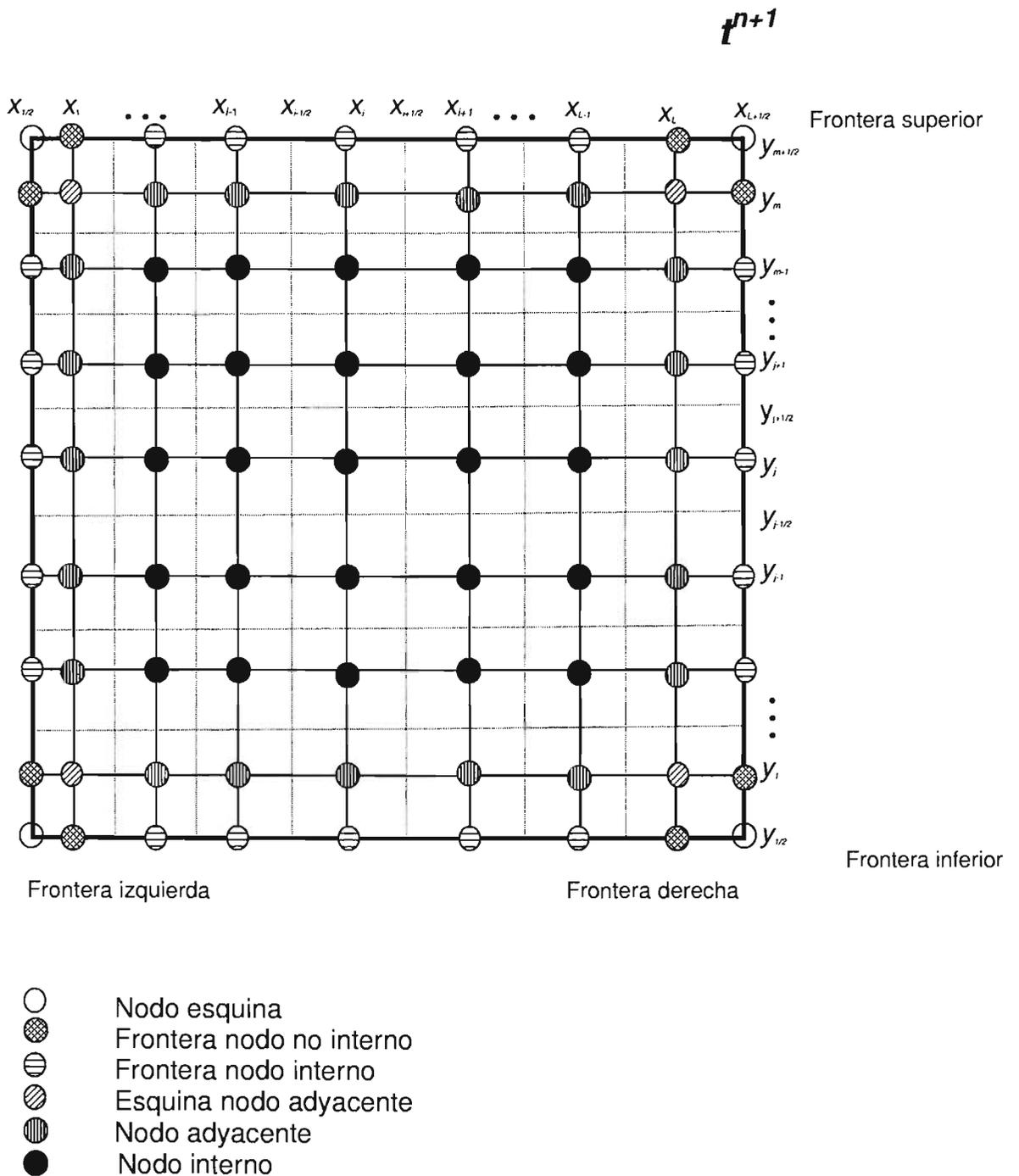


Figura 3.30. Nomenclatura de los nodos para ELLAM en dos dimensiones.

Si siguiendo un procedimiento similar al usado en el inciso (3.1.7.1.), la integral en el tiempo  $t^{n+1}$  se aproxima (empleando la regla del trapecio en dos dimensiones) de las siguientes formas:

Para nodos internos:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x,y) \exp(k\Delta t) dx dy = \\
 & \frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ 9C_{i,j}^{n+1} + \frac{3}{2}C_{i-1,j}^{n+1} + \frac{3}{2}C_{i+1,j}^{n+1} + \frac{3}{2}C_{i,j-1}^{n+1} + \frac{1}{4}C_{i-1,j-1}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{4}C_{i+1,j-1}^{n+1} + \frac{3}{2}C_{i,j+1}^{n+1} + \frac{1}{4}C_{i-1,j+1}^{n+1} + \frac{1}{4}C_{i+1,j+1}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.102}$$

Para nodos adyacentes de la izquierda:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x,y) \exp(k\Delta t) dx dy = \\
 & \frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ \frac{15}{2}C_{i,j}^{n+1} + 3C_{0,j}^{n+1} + \frac{3}{2}C_{i+1,j}^{n+1} + \frac{5}{4}C_{i,j-1}^{n+1} + \frac{1}{2}C_{0,j-1}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{4}C_{i+1,j-1}^{n+1} + \frac{5}{4}C_{i,j+1}^{n+1} + \frac{1}{4}C_{i+1,j+1}^{n+1} + \frac{1}{2}C_{0,j+1}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.103}$$

Para nodos adyacentes de la derecha:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x,y) \exp(k\Delta t) dx dy = \\
 & \frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ \frac{15}{2}C_{i,j}^{n+1} + \frac{3}{2}C_{i-1,j}^{n+1} + 3C_{L+(1/2),j}^{n+1} + \frac{5}{4}C_{i,j-1}^{n+1} + \frac{1}{4}C_{i-1,j-1}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2}C_{L+(1/2),j-1}^{n+1} + \frac{5}{4}C_{i,j+1}^{n+1} + \frac{1}{4}C_{i-1,j+1}^{n+1} + \frac{1}{2}C_{L+(1/2),j+1}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.104}$$

Para nodos adyacentes inferiores:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x,y) \exp(k\Delta t) dx dy = \\
 & \frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ \frac{15}{2}C_{i,j}^{n+1} + \frac{5}{4}C_{i-1,j}^{n+1} + \frac{5}{4}C_{i+1,j}^{n+1} + 3C_{i,0}^{n+1} + \frac{1}{2}C_{i-1,0}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2}C_{i+1,0}^{n+1} + \frac{6}{4}C_{i,2}^{n+1} + \frac{1}{4}C_{i-1,2}^{n+1} + \frac{1}{4}C_{i+1,2}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.105}$$

Para nodos adyacente superior:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x, y) \exp(k\Delta t) \, dx dy = \\
 & \frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ \frac{15}{2} C_{i,M}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{i-1,M}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{i+1,M}^{n+1} + \frac{3}{2} C_{i,M-1}^{n+1} + \frac{1}{4} C_{i-1,M-1}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{4} C_{i+1,M-1}^{n+1} + 3 C_{i,M+(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{i-1,M+(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{i+1,M+(1/2)}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.106}$$

Para nodo de la esquina superior izquierda:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x, y) \exp(k\Delta t) \, dx dy = \\
 & \frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ \frac{25}{4} C_{1,M}^{n+1} + \frac{5}{2} C_{0,M}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{2,M}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{1,M-1}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{0,M-1}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{4} C_{2,M-1}^{n+1} + \frac{5}{2} C_{1,M+(1/2)}^{n+1} + C_{0,M+(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{2,M+(1/2)}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.107}$$

Para nodo de la esquina superior derecha:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x, y) \exp(k\Delta t) \, dx dy = \\
 & \frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ \frac{25}{4} C_{L,M}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{L-1,M}^{n+1} + \frac{5}{2} C_{L+(1/2),M}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{L,M-1}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{L+(1/2),M-1}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{4} C_{L-1,M-1}^{n+1} + \frac{5}{2} C_{L,M+(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{L-1,M+(1/2)}^{n+1} + C_{L+(1/2),M+(1/2)}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.108}$$

Para nodo de la esquina inferior izquierda:

$$\begin{aligned}
 & \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x, y) \exp(k\Delta t) \, dx dy = \\
 & \frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ \frac{25}{4} C_{1,1}^{n+1} + \frac{5}{2} C_{0,1}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{2,1}^{n+1} + \frac{5}{2} C_{1,0}^{n+1} + C_{0,0}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} C_{2,0}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{1,2}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{0,2}^{n+1} + \frac{1}{4} C_{2,2}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t)
 \end{aligned} \tag{3.109}$$

Para nodo de la esquina inferior derecha:

$$\int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} c^{n+1}(x,y) \exp(k\Delta t) dx dy =$$

$$\frac{\Delta x \Delta y}{16} \left\{ \frac{25}{4} C_{L,1}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{L-1,1}^{n+1} + \frac{5}{2} C_{L+(1/2),1}^{n+1} + \frac{5}{2} C_{L,0}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{L-1,0}^{n+1} \right.$$

$$\left. + C_{L+(1/2),0}^{n+1} + \frac{5}{4} C_{L,2}^{n+1} + \frac{1}{4} C_{L-1,2}^{n+1} + \frac{1}{2} C_{L+(1/2),2}^{n+1} \right\} \exp(k\Delta t) \quad (3.110)$$

### 3.2.4.2. Integrales del término difusivo

Para el cálculo de estas integrales, las derivadas se evalúan mediante una aproximación en diferencias centrada, de forma análoga a como se indica en la ecuación (3.53), y las integrales se calculan mediante la regla del trapecio. El análisis se efectúa de forma similar a como se procedió para el cálculo de la integral en el tiempo  $t^{n+1}$ . Estos desarrollos se muestran junto con los del inciso 3.2.4.1. en el anexo A, los cuales corresponden a la evaluación de la ecuación (3.100) para los diferentes nodos mostrados en la figura 3.30.

### 3.2.4.3. Integral en el tiempo $t^n$

El cálculo de los términos en el nivel de tiempo  $n$  es un paso crítico en ELLAM. La integración puede ser ejecutada hacia atrás o hacia adelante siguiendo las líneas características. La dificultad en la evaluación de estos términos radica en conocer la forma geométrica de la región  $\xi_{ij}^*$ . Mientras que la región  $\xi_{ij}$  tiene una geometría regular en  $t^{n+1}$ , la forma de  $\xi_{ij}^*$  puede ser totalmente irregular, debido a la variación del campo de velocidades que lleva la región  $\xi_{ij}$  a la región  $\xi_{ij}^*$  ( figura 3.29).

Una técnica de integración hacia atrás aplica una integración en  $t^{n+1}$ , y traza hacia atrás cada punto de integración  $(x_i, y_j, t^{n+1})$  a lo largo de las líneas características, hasta el punto  $(x_i^*, y_j^*, t^n)$ . El valor para  $c(x_i^*, y_j^*, t^n)$  es determinado por interpolación lineal. Esta técnica de integración hacia atrás se usa en aplicaciones unidimensionales y también en el método modificado de las características. Sin embargo, esta técnica ha presentado problemas cuando las características pegan en las fronteras, además de que no siempre se asegura que haya conservación de masa.

La técnica de integración hacia adelante aplica una integración en  $t^n$  y traza hacia adelante cada punto de integración  $(x_i, y_j, t^n)$ , a lo largo de las líneas características. La masa es distribuida desde el tiempo  $t^n$  hasta el

tiempo  $t^{n+1}$  de acuerdo con la función de peso aproximada  $W_{ij}(x, y, t)$ . De acuerdo con esto, se usan valores estándar para  $c^n$  pero la función de peso es calculada como:

$$w_{ij}(x, y, t) \cong W_{ij}(x, y, t^n) \cong W_{ij}(X(t^{n+1}; x, y, t^n), t^{n+1}) \quad (3.111)$$

Obsérvese que la ecuación (3.111) no es que la ecuación (3.36) en forma bidimensional. La función de peso es calculada de acuerdo con la proyección hacia adelante de los puntos de integración desde  $t^n$  hasta  $t^{n+1}$ , siguiendo las líneas características. Al igual que en el caso unidimensional, se definirá  $NS$  como el número de subintervalos espaciales (en cada dirección  $x, y$ ) en los que la celda básica de integración es dividida. El mínimo valor de  $NS$  es 2, el cual da nueve puntos de integración, como se muestra en la figura 3.31.

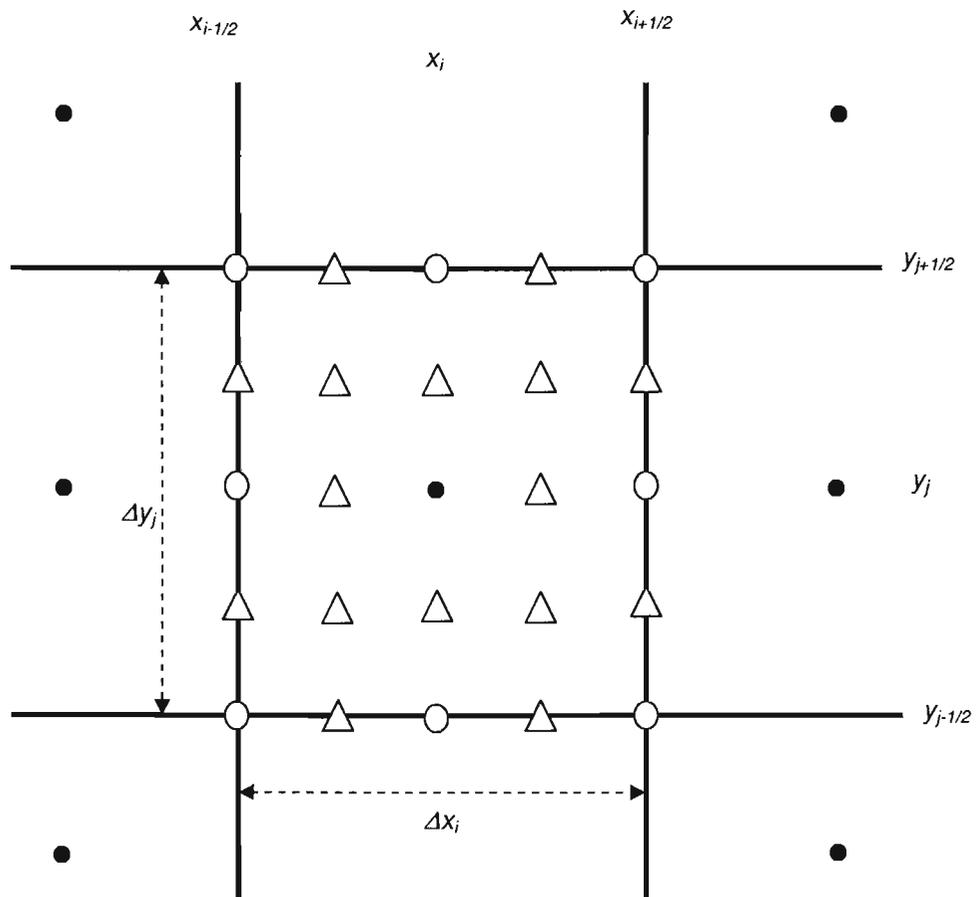


Figura 3.31. Localización de los puntos de integración en una celda básica de integración en función de  $NS$ . Los círculos indican los puntos para  $NS=2$ , y los triángulos los puntos agregados para  $NS=4$ .

Para muchas aplicaciones, nueve puntos de integración no serán suficientes para delinear la región  $\xi^*$ , por lo que  $NS$  debe de incrementarse. Adicionalmente, se propone a estos puntos de integración puntos estratégicos de integración (*SSIP*, por sus siglas en inglés), los cuales se determinan en posiciones donde la función de aproximación  $W_{ij}(\bar{x}, t^{n+1})$  cambia de pendiente, y corresponden a puntos proyectados hacia atrás en  $t^n$ , de puntos donde hay un cambio de pendiente (en ambas direcciones  $x, y$ ) de  $W_{ij}$  en  $t^{n+1}$ . Esto se hace principalmente para evitar problemas de conservación de masa local. Por lo tanto, el número total de puntos de integración ( $M$ ) por cada celda básica de integración se determina por  $M=(NS+SSIP+1)^2$ .

De acuerdo con lo anterior, la integral que aparece en el segundo miembro de la ecuación (3.100) se calcula como:

$$\int_{\xi_{ij}^*} c(x, y, t^n) w_{ij}(x, y, t^n) d\xi x' \cong \int_{\Omega} c(x, y, t^n) W_{ij}(\bar{x}, t^{n+1}) d\Omega \quad (3.112)$$

donde la función de peso aproximada,  $W_{ij}$ , puede tomar valores no nulos para  $(x, y, t^n) \notin \xi_{ij}^*$ . Por ello cambian los límites de integración. Para evaluar la integral (3.112), se utiliza la regla del trapecio. Otros métodos de integración de mayor orden, como la regla de Simpson o Lobatto, producen inconsistencias (Healy y Rusell 1993). Esto lleva a evaluar la integral como:

$$\int_{\Omega} c^n(x, y) W_{ij}^{n+1}(X, t^{n+1}) d\Omega = \sum_{m=1}^M c(x_m, y_m, t^n) U(x_m, y_m) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_m, y_m, t^n), t^{n+1}) \quad (3.113)$$

donde:

$$U(x_m, y_m) = U(x_m)U(y_m)$$

$$U(x_m) = \begin{cases} \frac{1}{2}(x_{k+1} - x_k); k = 1 \\ \frac{1}{2}(x_{k+1} - x_{k-1}); 1 < k < M_x \\ \frac{1}{2}(x_k - x_{k-1}); k = M_x \end{cases}$$

$$U(y_m) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y_{l+1} - y_l); l = 1 \\ \frac{1}{2}(y_{l+1} - y_{l-1}); 1 < l < M_y \\ \frac{1}{2}(y_l - y_{l-1}); l = M_y \end{cases}$$

$M$ , es el número total de puntos de integración;  $M_x$  el número de puntos de integración en  $x$ ;  $M_y$  el número de puntos de integración en  $y$ ;  $k$  un contador en  $x$  e  $l$  un contador en  $y$ . Nótese que la ecuación (3.313) no es sino la ecuación (3.38) en dos dimensiones.

Respecto de la nomenclatura de la figura 3.30, la aplicación de la ecuación (3.113) para  $NS=2$  a cada celda básica de integración lleva a cada una de las ecuaciones (A.13-A.21) del anexo A.

### Selección de la función de peso aproximada $W_{ij}(\mathbf{x}, t^{n+1})$

De forma similar al caso unidimensional (inciso 3.1.6.), la función de peso aproximada debe ser continua en el dominio espacio-temporal en la que la ecuación (3.99) es definida; debe ser no nula en  $[t^n, t^{n+1}]$ , y satisfacer que  $\sum_j W_{ij}(\bar{x}, t^{n+1}) = 1$  para  $(x, y) \in \Omega$ ,  $t \in [t^n, t^{n+1}]$ . Además, esta función de peso aproximada debe asegurar que no haya difusión numérica para cuando el número de Courant ( $Cr$ ) sea cero (por ejemplo, para esta condición se observa que la integral en el tiempo  $t^{n+1}$  debe ser idéntica a la integral en el tiempo  $t^n$ ); por ello, la función  $W_{ij}(\bar{x}, t^{n+1})$  debe ser también una función del número de subintervalos  $NS$  (como lo fue para el caso unidimensional). Heally y Rusell (1993) proponen que la función de peso se determine de la forma siguiente:

$$W_{ij}(x, y, t) = W_{ij}^x(x, y, t) W_{ij}^y(x, y, t) \quad (3.114)$$

donde  $W_{ij}^x(x, y, t)$  y  $W_{ij}^y(x, y, t)$  son equivalentes a la función de peso  $W_i$  unidimensional, definida según la ecuaciones (3.40). Por ejemplo, para el caso de  $NS=2$ ,  $W_{ij}$  será una familia de dos funciones bilineales tipo triangular, como se muestra en las figuras 3.18 y 3.19 para  $NS=2$ . El uso de la función de peso aproximada, junto con la regla del trapecio, asegura que no se tenga difusión numérica. Esta es la primera razón para usar la regla del trapecio en vez de técnicas de integración de mayor orden (Heally y Rusell, 1998). La regla del trapecio también da los mejores resultados de estabilidad en métodos euleriano-lagrangianos (Morton *et al.*, 1988).

#### 3.2.4.4. Evaluación de la integral de flujo de frontera

En la ecuación (3.100),  $B$  representa la integral de flujo de frontera y está definida por la expresión:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}c - \mathbf{D}\nabla c) \cdot \boldsymbol{\eta} w dS dt = 0 \quad (3.115)$$

Si se hace uso de la ecuación (3.111), se permite expresar la ecuación anterior en función de la función de peso aproximada de la forma siguiente:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}c - \mathbf{D}\nabla c) \cdot \boldsymbol{\eta} W_{ij} dS dt = 0 \quad (3.116)$$

Esta integral será no nula solamente para las celdas adyacentes a las fronteras, y cuando las líneas características las intercepten. En este caso,  $B$  se evaluará dependiendo del tipo de frontera, como se indica a continuación:

#### *Frontera de entrada*

Una frontera de entrada se toma en cuenta cuando una línea característica, desde  $(x, y)$  en  $t^{n+1}$ , intercepta la frontera de entrada en el tiempo  $t_{(x,y)}^* > t^n$ . En este caso,  $B$  será no nula y pasará información a la celda interior de acuerdo a la condición de frontera en  $\partial\Omega$ . En lo que sigue, se supondrá que existe una frontera de entrada vertical en  $x=x_{1/2}=0$  y  $[y_{j-(1/2)}, y_{j+(1/2)}]$ , la cual introduce masa al interior del dominio  $\Omega_e$  (figura 3.32a). En este caso, el vector normal,  $\boldsymbol{\eta}$ , es  $(-1,0)$ ; y  $dS=dy$  en la ecuación (3.116).

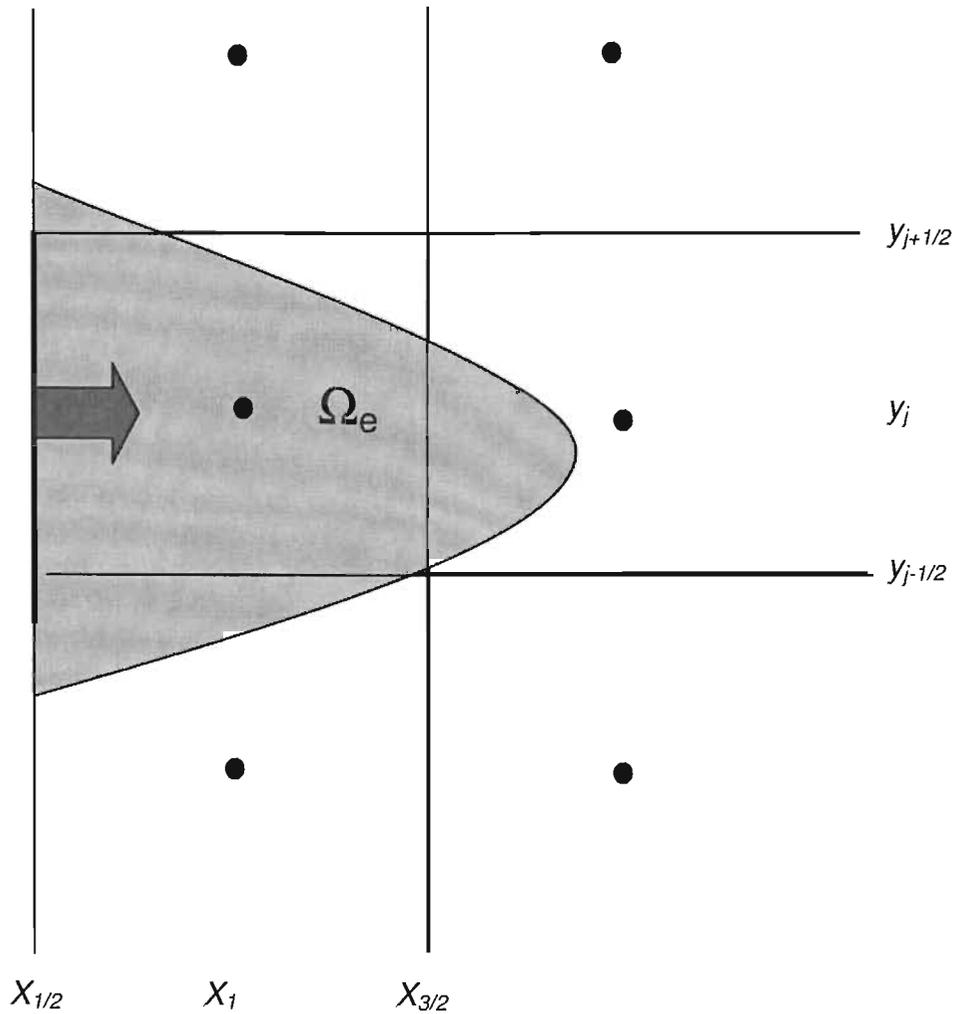


Figura 3.32a. La región  $\Omega_e$  recibe masa desde la frontera de entrada localizada en  $x=x_{1/2}$ ,  $y=(y_{j-1/2}, y_{j+1/2})$ .

*Frontera de entrada tipo Dirichlet*

De acuerdo a la ecuación (3.82a), para el caso de una frontera de este tipo la integral de flujo de frontera es:

$$B = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-(1/2)}}^{y_{j+(1/2)}} \left[ v_x h_t - \left( D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right]_{(0,y,t)} W_j(x(t^{n+1}; 0, y, t), t^{n+1}) dy dt \quad (3.117)$$

Procediendo de la misma forma que en la ecuación (3.54), al aplicar la regla del trapecio a cada subintervalo y sumarlos, la ecuación (3.117) queda como se muestra en la ecuación (A.10) del anexo A.

*Frontera de entrada tipo Neumann*

Para el caso de una frontera de segundo tipo (tipo Neumann), de acuerdo con la notación de la ecuación (3.82a),  $B$  se transforma en:

$$B = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{y_{j-(1/2)}}^{y_{j+(1/2)}} (v_x c)_{(0,y,t)} W_{ij}(X(t^{n+1}; 0, y, t), t^{n+1}) dy dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} h_2(0, y_j, t) W_{ij}(X(t^{n+1}; 0, y, t), t^{n+1}) dt \quad (3.118)$$

donde  $h_2$  es la condición de frontera de segundo tipo dada por:

$$h_2(0, y_j, t) = - \int_{y_{j-(1/2)}}^{y_{j+(1/2)}} D \nabla c(0, y, t) \bullet ndy = \int_{y_{j-(1/2)}}^{y_{j+(1/2)}} \left( D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{(0,y,t)} dy \quad (3.119)$$

Para determinar  $B$ , según la ecuación (3.118) se requiere conocer  $c(0, y_j, t)$ , así como también es requerido este dato en la ecuación (3.100) para determinar la integral en el tiempo  $t^{n+1}$ . Por lo tanto, considerando que  $c(0, y_j, t)$  varía linealmente en la dirección  $y$ , y aplicando la regla del trapecio en la ecuación (3.119), se obtiene:

$$h_2(0, y_j, t) = - \frac{D_{xx} \Delta y_j}{2 \Delta x_j} [4c(0, y_j, t) - 3c(x_1, y_j, t) - 0.5(c(x_i, y_{j-1}, t) + c(x_i, y_{j+1}, t))] \quad (3.120)$$

Para el caso de  $N$  celdas adyacentes, se requerirá la solución simultánea de  $N$  ecuaciones similares a la ecuación (3.120).

Aplicando la regla del trapecio, una determinación más explícita de la ecuación (3.118) se da en ecuación (A.11) del anexo A.

*Frontera de entrada de tercer tipo*

Para el caso de una frontera de tercer tipo, de acuerdo con la notación de la ecuación (3.82a),  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} h_3(0, y_j, t) W_{ij}(X(t^{n+1}; 0, y, t), t^{n+1}) dt \quad (3.121)$$

donde  $h_3$  es la condición de frontera de tercer tipo dada por:

$$h_3(0, y_j, t) = - \int_{y_{j-(1/2)}}^{y_{j+(1/2)}} (vc - D \nabla c(0, y, t)) \bullet \eta dy = \int_{y_{j-(1/2)}}^{y_{j+(1/2)}} \left( -v_x c + D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{(0,y,t)} dy \quad (3.122)$$

Considerando que  $c(0, y_j, t)$  varía linealmente en la dirección  $y$ , y aplicando la regla del trapecio en la ecuación (3.122) se obtiene:

$$h_2(0, y_j, t) = c(0, y_j, t) \left[ -\frac{2D_{xx}\Delta y_j}{\Delta x_i} + \Delta y_j v_x(0, y_j, t) \right] + \frac{D_{xx}\Delta y_j}{2\Delta x_i} [3c(x_i, y_j, t) + 0.5(c(x_i, y_{j-1}, t) + c(x_i, y_{j+1}, t))] \quad (3.123)$$

Para el caso de  $N$  celdas adyacentes, se requerirá la solución simultánea de  $N$  ecuaciones similares a la ecuación (3.123).

Aplicando la regla del trapecio, una determinación más explícita de la ecuación (3.121) se da en ecuación (A.12) del anexo A.

*Frontera de salida*

Una frontera de salida se toma en cuenta cuando una línea característica, desde  $(x, y)$  en  $t^n$ , intercepta la frontera de salida en el tiempo  $t_{(x,y)}^* < t^{n+1}$ . En este caso,  $B$  será no nula.

Por otra parte, ahora se supondrá que existe una frontera de salida horizontal en  $y=y_{L+(1/2)}$  y  $[x_{i-(1/2)}, x_{i+(1/2)}]$ , la cual saca la masa del interior del dominio  $\Omega$  (figura 3.32b). En este caso, el vector normal,  $\eta$ , en la ecuación (3.116), es ahora  $(0, 1)$ , y  $dS=dx$ .

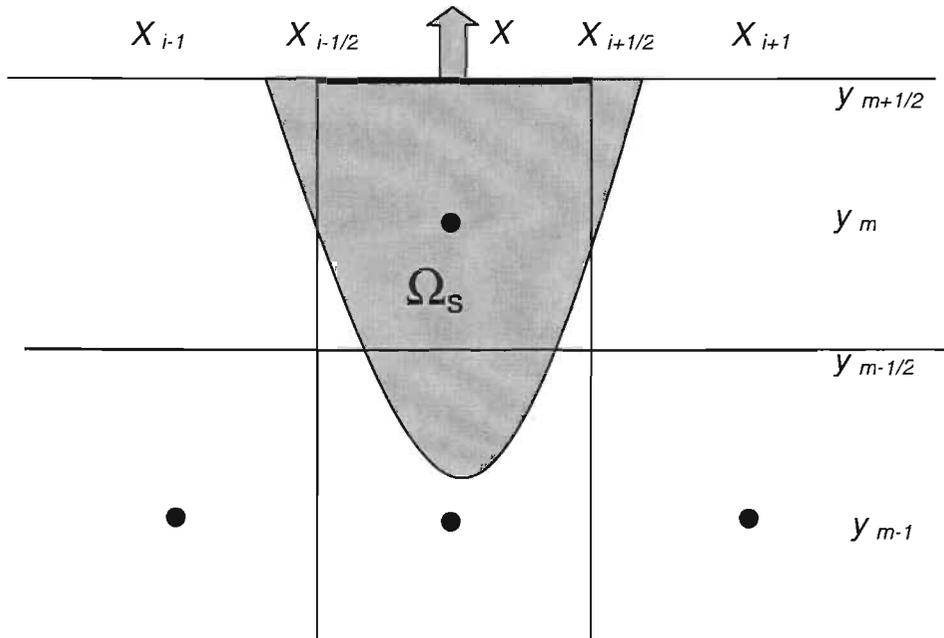


Figura 3.32b. La región  $\Omega_s$  contribuye a la salida de masa en la frontera de salida localizada en  $y= y_{m+1/2}$ ,  $x=(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ .

En la figura 3.32b,  $\Omega_s$  define la región que contribuye al flujo de masa en la frontera de salida. El borde de esta región,  $\partial\Omega_s$ , corresponde al conjunto de puntos en  $t^n$ , cuyas líneas características cruzan la frontera en exactamente  $t^{n+1}$ . De acuerdo con ello, los puntos de integración espacial que están dentro de  $\Omega_s$  contribuirán al flujo de masa en la frontera, mientras que todos los puntos que están fuera de  $\Omega_s$  llevarán masa al interior del dominio  $\Omega$ . Por lo tanto, al igual que como se procedió en el caso unidimensional, se requiere de una función de peso aproximada para la región  $\Omega_s$ , definida de la forma siguiente:

$$W_{i,L+1}(x, y, t) = W_{i,L+1}^x(x, y, t)W_{i,L+1}^y(x, y, t) \quad (3.124)$$

donde  $W_{i,L+1}^x(x, y, t)$  se determina según la ecuación (3.40) y  $W_{i,L+1}^y(x, y, t)$  por

$$\begin{aligned} W_{i,L+1}^y(x, y, t^{n+1}) &= 0; (x, y) \in \Omega_o \\ W_{i,L+1}^y(x, y_{L+(1/2)}, t) &= \exp[k(t - t^n)]; t^n \leq t \leq t^{n+1} \end{aligned} \quad (3.125)$$

La cual está en correspondencia con:

$$\begin{aligned} W_{iL}^y(x, y, t^{n+1}) &= 1; x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}], y \in [y_{L-1/2} + \Delta\bar{y}_L, y_{L+1/2}] \\ W_{iL}^y(x, y_{L+1/2}, t) &= 0; t \in [t^n, t^{n+1}] \end{aligned} \quad (3.126)$$

que se definió en la ecuación (3.40).

En la práctica, los puntos de integración espaciales son proyectados hacia adelante desde  $t^n$  hasta  $t^{n+1}$ , si las proyecciones interceptan la frontera de salida en un tiempo menor a  $t^{n+1}$ . Se consideran que estos puntos están dentro de  $\Omega_s$ . De esta forma se va determinando también  $\partial\Omega_s$ . La exactitud con que se haga esta determinación estará relacionada con el nivel de exactitud para conservar la masa localmente. Para el caso de problemas unidimensionales, esta determinación se puede hacer exactamente; pero en problemas bidimensionales puede resultar complejo, sobre todo si el campo de velocidades es muy variable.

*Frontera de salida tipo Dirichlet.* De acuerdo a la ecuación (3.82a), para el caso de una frontera de este tipo la integral de flujo de frontera es:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} \left[ v_y h_f - \left( D_{xy} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right]_{(x, y_{L+(1/2)}, t)} W_{ij}(X(t^{n+1}); x, y_{L+(1/2)}, t), t^{n+1} dx dt \quad (3.127)$$

Procediendo de la misma forma como en la ecuación (3.117), al aplicar la regla del trapecio a cada subintervalo y sumarlos, se obtiene una ecuación similar a la que se muestra en la ecuación (A.10) del anexo A.

*Frontera de salida tipo Neumann*

Para el caso de una frontera de segundo tipo (tipo Neumann), de acuerdo a la notación de la ecuación (3.82a),  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} (v_y c)_{(x, y_{L+(1/2)}, t)} W_{ij}(X(t^{n+1}; x, y_{L+(1/2)}, t), t^{n+1}) dx dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} h_2(x, y_{L+(1/2)}, t) W_{ij}(X(t^{n+1}; x, y_{L+(1/2)}, t), t^{n+1}) dt \quad (3.128)$$

donde  $h_2$  es la condición de frontera de segundo tipo dada por:

$$h_2(x, y_{L+(1/2)}, t) = - \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} \nabla c(0, y, t) \cdot \boldsymbol{\eta} dy = - \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} \left( D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{(x, y_{L+(1/2)}, t)} dx \quad (3.129)$$

Para determinar  $B$ , según la ecuación (3.128) se requiere conocer  $c(x_i, y_{L+(1/2)}, t)$  así como también es requerido este dato en la ecuación (3.100) para determinar la integral en el tiempo  $t^{n+1}$ . Por lo tanto, considerando que  $c(x_i, y_{L+(1/2)}, t)$  varía linealmente en la dirección  $x$ , y aplicando la regla del trapecio en la ecuación (3.129), se obtiene:

$$h_2(x_i, y_{L+(1/2)}, t) = - \frac{D_{yy} \Delta x_i}{2 \Delta y_L} [4c(x_i, y_{L+(1/2)}, t) - 3c(x_i, y_L, t) - 0.5(c(x_{i-1}, y_L, t) + c(x_{i+1}, y_L, t))] \quad (3.130)$$

Para el caso de  $N$  celdas adyacentes, se requerirá la solución simultánea de  $N$  ecuaciones similares a la ecuación (3.130).

Procediendo de la misma forma que en la ecuación (3.117), al aplicar la regla del trapecio a cada subintervalo y sumarlos, se obtiene para la ecuación (3.128) una expresión similar a la que se muestra en la ecuación (A.11) del anexo A.

*Frontera de salida de tercer tipo*

Para el caso de una frontera de tercer tipo, de acuerdo con la notación de la ecuación (3.82a),  $B$  se transforma en:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} h_3(x_i, y_{L+(1/2)}, t) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_i, y_{L+(1/2)}, t), t^{n+1}) dt \quad (3.131)$$

donde  $h_3$  es la condición de frontera de tercer tipo, dada por:

$$h_3(x_i, y_{L+(1/2)}, t) = \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} (\mathbf{vc} - \mathbf{D}\nabla c(x_i, y_{L+(1/2)}, t)) \cdot \mathbf{ndy} = \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} \left( v_y c - D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} - D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{(x_i, y_{L+(1/2)}, t)} dy \quad (3.132)$$

Considerando que  $c(x_i, y_{L+(1/2)}, t)$  varía linealmente en la dirección  $x$ ,  $y$  aplicando la regla del trapecio en la ecuación (3.132), se obtiene:

$$h_2(x_i, y_{L+(1/2)}, t) = -\frac{D_{yy}\Delta x_i}{2\Delta y_L} [4c(x_i, y_{L+(1/2)}, t) - 3c(x_i, y_L, t) - 0.5(c(x_{i-1}, y_L, t) + c(x_{i+1}, y_L, t))] + \Delta x_i v_y(x_i, y_{L+(1/2)}, t) c(x_i, y_{L+(1/2)}, t) \quad (3.133)$$

Para el caso de  $N$  celdas adyacentes, se requerirá la solución simultánea de  $N$  ecuaciones similares a la ecuación (3-133).

Aplicando la regla del trapecio a la ecuación (3.131) se obtiene una expresión similar a la ecuación (A.12) del anexo A.

### 3.2.5. Prueba de conservación de masa

Por claridad, se considera  $k=0$ . Si se aplica la ecuación (3.100) a cualquier arreglo geométrico, por ejemplo el mostrado en la figura 3.30, al aplicar se observa que si las características no cruzan ninguna frontera, los términos difusivos se eliminan mutuamente debido al cambio de signo. Además, para este caso la integral de frontera es nula ( $B=0$ ). Por el contrario, si las líneas características cruzan las fronteras, entonces la incorporación de las condiciones de frontera se realizan de acuerdo con la expresión (3.116) para cada celda básica de integración, donde las líneas características interceptan las fronteras. Por otra parte, de acuerdo con la propiedad de la función de peso aproximada:  $\sum_j \sum_i W_{ij}(x, t^{n+1}) = 1$  para  $(x, y) \in \Omega$ ,  $t \in [t^n, t^{n+1}]$ , se obtendrá al final una expresión de la forma siguiente:

$$\int_{\Omega} c(x, y, t^{n+1}) d\Omega - \int_{\Omega} c(x, y, t^n) d\Omega + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{vc} - \mathbf{D}\nabla c) \cdot \mathbf{ndS} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} f(x, y, t) d\Omega dt \quad (3.134)$$

la cual es una ley de conservación global de la ecuación (3.82). En la expresión (3.134) se observa que la conservación de masa se obtiene para cualquier tipo de frontera.

### 3.2.6. Proyección de líneas características y puntos de integración

El grado de exactitud con que se determina el valor de la integral en el tiempo  $t^n$ , y la integral del flujo de frontera, dependen del grado de exactitud con que se proyecten los puntos de integración a través de las líneas características.

En general, la proyección de las líneas características se efectúa a través de la ecuación (3.96). Por ejemplo, en el caso de un campo de velocidad constante la proyección de las líneas características, desde  $t^n$  hasta  $t^{n+1}$ , se realiza de manera exacta de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= x^* + v_x \Delta t \\ \hat{y} &= y^* + v_y \Delta t \end{aligned} \tag{3.135}$$

y desde  $t^{n+1}$  hasta  $t^n$  por:

$$\begin{aligned} x^* &= \hat{x} - v_x \Delta t \\ y^* &= \hat{y} + v_y \Delta t \end{aligned} \tag{3.136}$$

Para el caso de una velocidad variable, la determinación de estas proyecciones sólo puede hacerse de manera aproximada. Por ejemplo, al igual que en el caso unidimensional, se usa la fórmula (3.81) para ambas direcciones  $x$ ,  $y$ , en las cuales, se supone, que la velocidad es permanente y conocida en cada intercara de la celda básica de integración; además, dentro de ella la velocidad en  $x$  es lineal en la dirección  $x$  pero constante en la dirección  $y$  (en la dirección  $y$  ocurre lo contrario).

### 3.2.7. Estructura de la matriz

La aplicación de la ecuación (3.100) para cada celda de integración en que es dividido el dominio  $\Omega$ , produce un sistema de ecuaciones de la forma  $\mathbf{A} \mathbf{c}^{n+1} = \mathbf{r}$ , donde  $\mathbf{A}$  es la matriz de coeficientes indeterminados del vector de incógnitas  $\mathbf{c}^{n+1}$ , y  $\mathbf{r}$  el vector de términos conocidos que depende de  $\mathbf{c}^n$  y de los valores de frontera.

Para verificar la forma de la matriz  $\mathbf{A}$ , considérese que se tienen condiciones de frontera tipo Dirichlet para el arreglo geométrico mostrado en la figura 3.30. Por lo tanto, al aplicar la ecuación (3.100) para cada una de las celdas de integración, se tendrá que  $\mathbf{A}$  tiene la estructura mostrada en la figura 3.33. En general, esta forma cambiará de acuerdo a las condiciones de frontera impuestas.

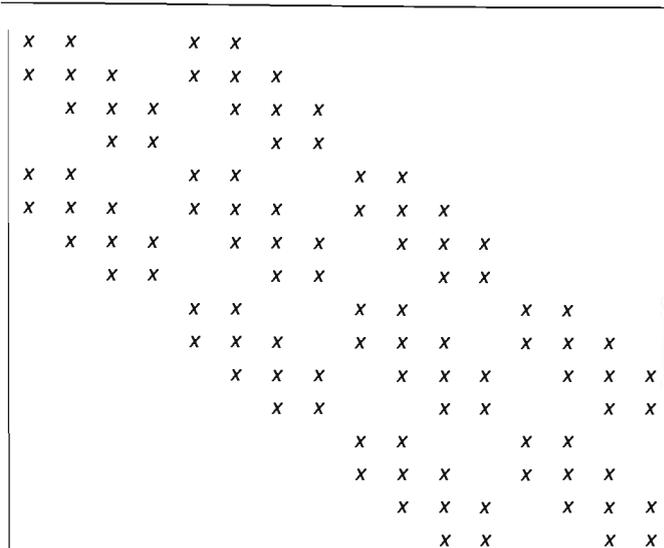


Figura 3.33. Estructura de la matriz de coeficientes indeterminados para ELLAM en dos dimensiones, considerando fronteras del primer tipo.

**3.2.8. Ejemplos de aplicación en 2D**

Con el fin de probar la metodología ELLAM para problemas de transporte en dos dimensiones, se mostrarán a continuación algunas aplicaciones para solucionar la ecuación (3.82) en la que por cuestiones de claridad, se considera que  $f=0$ .

*Ejemplo 3.4*

Considérese el caso de transporte de un contaminante conservativo en el que la condición inicial está dada por una ley Gaussiana. El campo de velocidades del flujo es tipo rotacional y está descrito por  $v_x(x,y)=-4y$ , así como  $v_y(x,y)=4x$ . El dominio espacial ( $x$ - $y$ ) es  $\Omega = (-0.5,-0.5) \times (0.5,0.5)$ . El intervalo de tiempo es  $[0, T]=[0, \pi/2]$ , o sea el necesario para dar una rotación completa. La condición inicial está dada por:

$$c_0(x,y) = \exp\left[-\frac{(x-x_c)^2 + (y-y_c)^2}{2\sigma^2}\right] \tag{3.137}$$

donde  $x_c$ ,  $y_c$ , y  $\sigma$  son los centros de la pluma de contaminante y la desviación estándar, respectivamente. La condición de frontera, en relación con la ecuación (3.82a), se considera que es  $h_3(x,y,t)=0$ , es decir, que se tiene una condición de no flujo (condición del tercer tipo). La solución analítica para la ecuación (3.82) con  $k=0$  y  $f=0$  es dada por (Wang *et al.*, 1996):

$$c(x,y,t) = \frac{2\sigma^2}{2\sigma^2 + 4Dt} \exp\left[-\frac{(\bar{x}-x_c)^2 + (\bar{y}-y_c)^2}{2\sigma^2 + 4Dt}\right] \tag{3.138}$$

donde  $\bar{x} = x \cos(4t) + y \sin(4t)$ ,  $\bar{y} = -x \sin(4t) + y \cos(4t)$ .

En el experimento numérico se toman en cuenta los siguientes datos:  $D=0.0001$ ,  $x_c = -0.25$ ,  $y_c = 0$ ,  $\sigma=0.047$ ,  $\Delta x=\Delta y=1/8$ ,  $\Delta t=\pi/10$ . Por lo tanto se tiene que el el número de Courant alcanza el valor de 5 mientras que el número de Péclet, de la malla, llega a ser de 2500.

A continuación se muestran los resultados numéricos obtenidos. La condición inicial se centra en  $(x,y)=(-0.25,0)$ , con un valor mínimo de 0 y un valor máximo de 1. En las figuras se muestran los contornos de la distribución de la pluma de contaminante para los tiempos indicados, a través de una vuelta completa.

Las figuras 3.34 y 3.35 corresponden a la solución analítica después de una vuelta completa tiene un valor máximo de 0.7777 y un valor mínimo de 0. De igual forma, en las figuras 3.36 y 3.37 se muestran los resultados correspondientes a una aplicación de ELLAM donde se obtiene un valor máximo de 0.7100 y un valor mínimo de 0. Para la solución mediante ELLAM se ha usado un valor de  $NS=2$ , el cual corresponde al nivel más bajo de precisión para el cálculo de la integral en  $t^{n+1}$ . En la figura 3.38, se da una comparación gráfica entre ELLAM y la solución analítica, para un corte que pasa por el centro de la pluma del contaminante. En estas gráficas se muestra que la solución mediante ELLAM está por debajo de la solución analítica, sin embargo estas diferencias, no corresponden a problemas de difusión numérica, sino a la precisión con que se evalúa la integral en el  $t^n$ . Las figuras 3.39 y 3.40 corresponden a una solución con elemento finito tipo Galerkin (GAL) y Petrov-Galerkin (P-G), reportadas por Wang *et al.*, (1996). Los resultados corresponden para una vuelta completa y para  $\Delta x=\Delta y=1/64$ ,  $\Delta t=\pi/200$ . Por ello, el número de Courant alcanza el valor de 2.84 mientras que el número de Péclet de la malla llega a ser de 400. Obsérvese que a pesar de que los incrementos en el espacio y en el tiempo son menores que los usados en ELLAM, las soluciones presentan severos problemas de difusión numérica y oscilaciones no físicas, los cuales carecen de sentido físico. En el cuadro 3.1 se muestra un resumen numérico en el que se destacan las principales características de los resultados.

Método	Valor máximo	Valor mínimo
analítico	0.7777	0
ELLAM	0.7100	0
GAL	0.6996	-0.1564
P-G	0.6197	-0.0978

Tabla 3.1. Valores máximo y mínimo después de una revolución para el problema 3.4, obtenida con diferentes métodos.

Distribución Gausiana:  $D=0.0001$   $2\sigma^2=0.004$   
 Solución Analítica

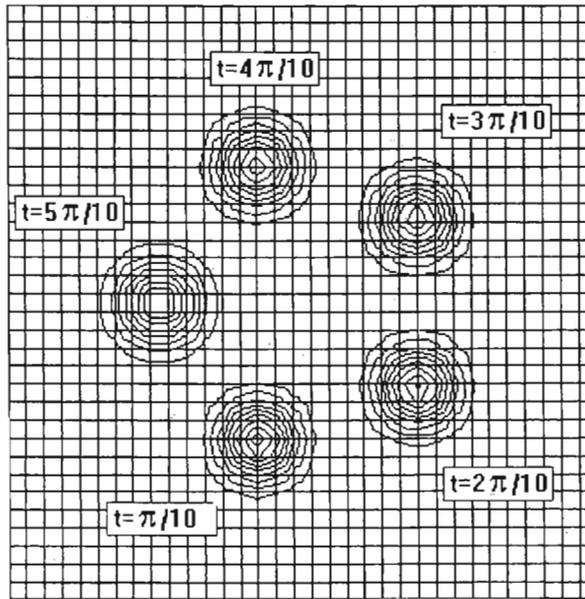


Figura 3.34. Solución analítica para el ejemplo 3.4. Vista en planta.

Distribución Gausiana:  $D=0.0001$   $2\sigma^2=0.004$   
 Solución Analítica

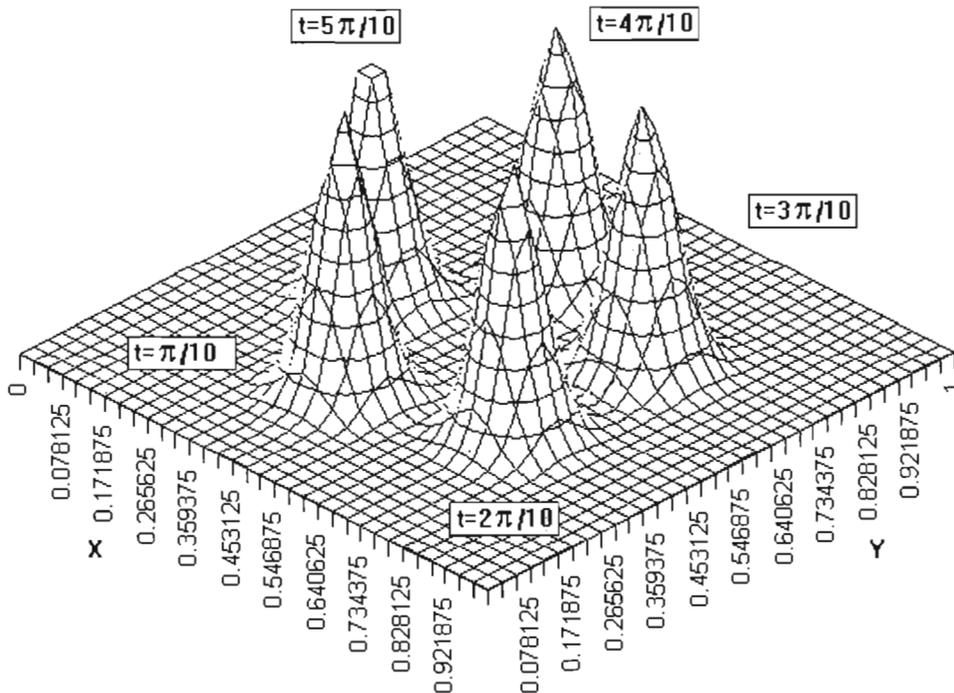


Figura 3.35. Solución analítica para el ejemplo 3.4. Vista en isométrico.

Distribución Gaussiana:  $D=0.0001$   $2\sigma^2=0.004$   
 Solución ELLAM2D

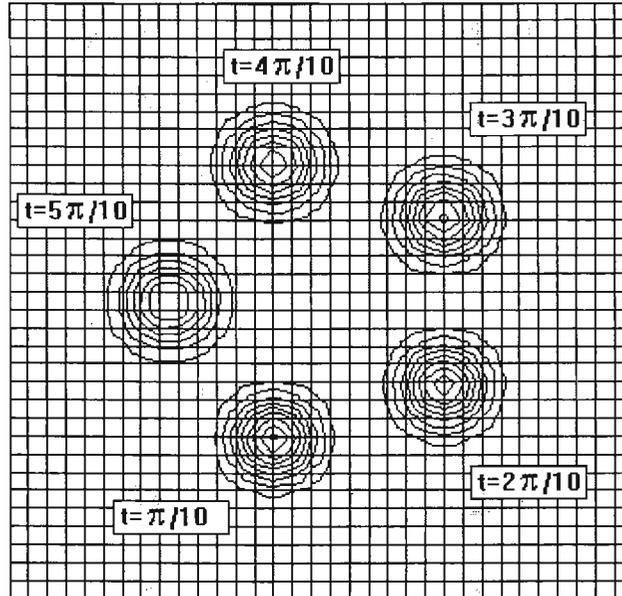


Figura 3.36. Solución con ELLAM para el ejemplo 3.4. Vista en planta.

Distribución Gaussiana:  $D=0.0001$   $2\sigma^2=0.004$   
 Solución ELLAM2D

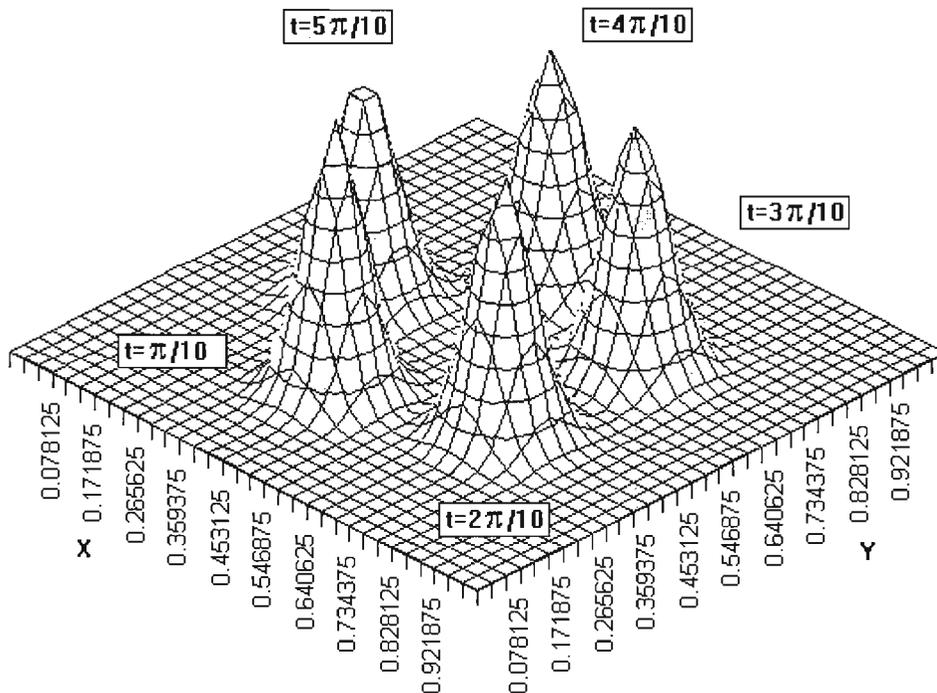


Figura 3.37. Solución con ELLAM para el ejemplo 3.4. Vista en isométrico.

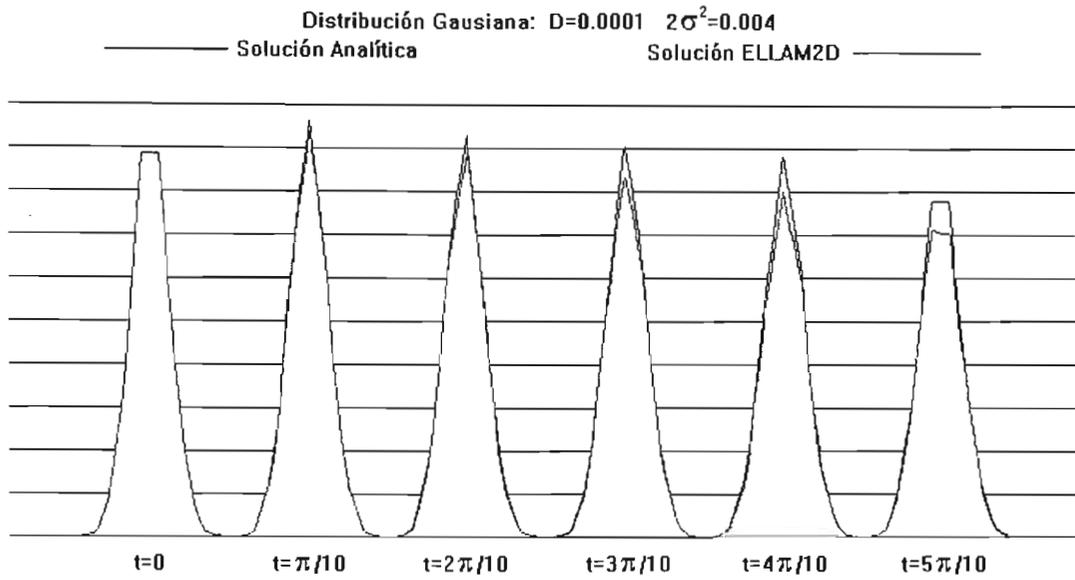


Figura 3.38. Comparación entre la solución analítica y la solución ELLAM para el ejemplo 3.4, para un corte que pasa por  $(-0.25,0)$ .

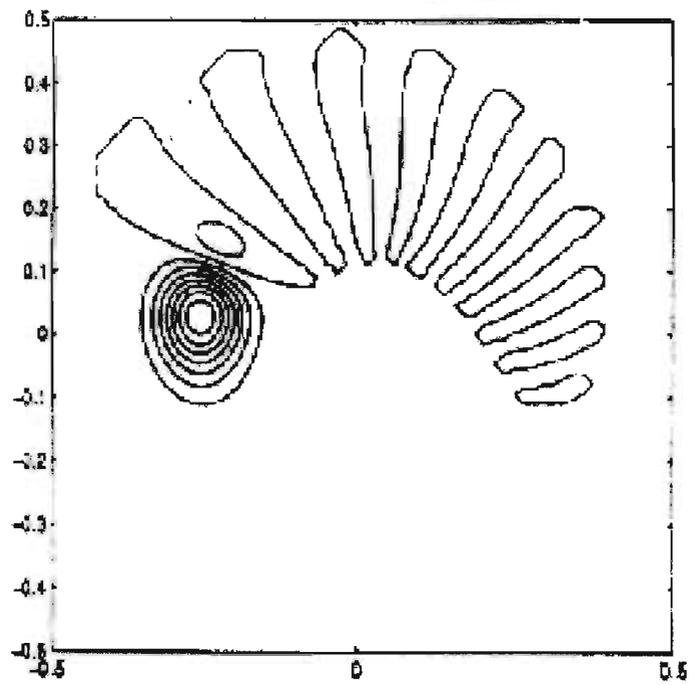


Figura 3.39. Solución en elemento finito tipo Galerkin para el ejemplo 3.4. Vista en planta (Wang *et al.*, 1996).

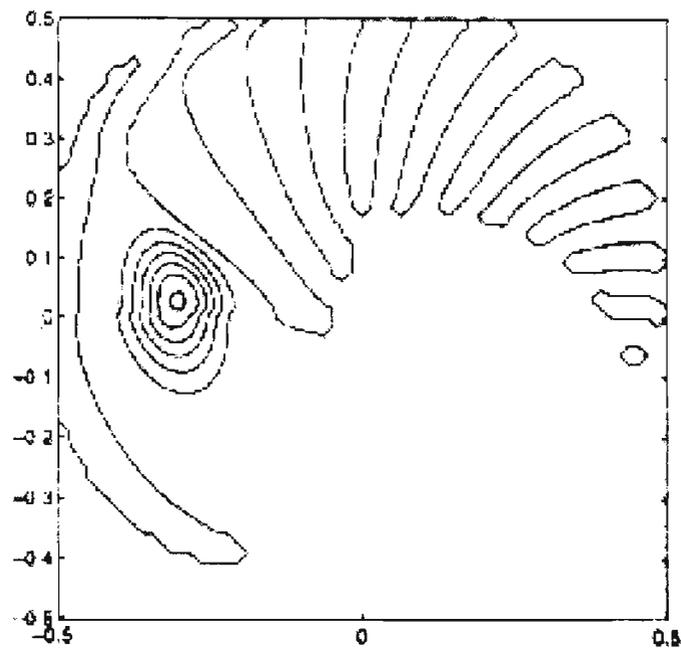


Figura 3.40. Solución en elemento finito tipo Petrov-Galerkin para el ejemplo 3.4. Vista en planta (Wang *et al.*, 1996).

### 3.3. Resumen

En este capítulo se presentó la implementación práctica de ELLAM en una y dos dimensiones, para la ecuación de transporte reactiva lineal. Se destaca que ELLAM tiene su fundamento teórico en encontrar el operador adjunto asociado al operador diferencial de la ecuación de transporte. Se comprueba que ELLAM es un método de residuos en el que la función de peso debe satisfacer que este operador adjunto sea nulo. Esta condición permite que todas las integrales se evalúen en las caras internas de los subdominios espacio-temporales en que es dividido el dominio de interés. Se verifica que, para fines prácticos, la función de peso lineal y constante son las formas más simples que satisfacen la nulidad del operador adjunto.

La función de peso constante es preferible para problemas en dos y tres dimensiones. Para el caso no reactivo, las funciones de peso son constantes en el tiempo, mientras que para el caso reactivo su variación es exponencial. En ELLAM la información entre el nivel de tiempo  $t^n$  y  $t^{n+1}$  viaja a través de las líneas características, las cuales quedan definidas por la componente advectiva-reactiva del operador diferencial adjunto. Para el caso de un campo de velocidad constante, las líneas características quedan definidas de manera exacta, mientras que si la velocidad es variable éstas sólo se pueden determinar aproximadamente. Además, para este caso la nulidad del operador adjunto no es satisfecha con exactitud.

Las integrales en el nivel de tiempo  $t^{n+1}$  son evaluadas a través de la regla del trapecio. Las integrales del término difusivo y del no homogéneo son aproximadas mediante una evaluación totalmente implícita. Mientras que generalmente para evaluar la integral en el tiempo  $t^n$  es necesario recurrir a dos técnicas, debido a que los límites de esta integral son difíciles de establecer. La primera técnica es una proyección hacia atrás la cual consiste en proyectar las celdas básicas de integración desde el nivel de tiempo  $t^{n+1}$  hasta el tiempo  $t^n$ , esta técnica presenta severas dificultades computacionales, debido a la complejidad de diseñar algoritmos que determinen apropiadamente los límites de integración. En dos o tres dimensiones, esta técnica es sumamente compleja de llevar a cabo. La segunda técnica que es preferible en la mayoría de las aplicaciones, consiste de una proyección hacia adelante, en la cual las celdas básicas de integración son proyectadas desde el tiempo  $t^n$  hasta el tiempo  $t^{n+1}$ , mediante el concepto de función de peso aproximada. Esta técnica asegura la conservación de la masa local.

Se ha comprobado que ELLAM conserva la masa para cualquier tipo de frontera, por lo que el grado de aproximación de las soluciones depende exclusivamente del grado de aproximación con que se determinen las integrales.

Por último, una desventaja de ELLAM es que sólo se aplica a operadores lineales, debido a que precisamente el operador adjunto solo existe para este tipo de operadores. Por lo tanto, para aplicar ELLAM a problemas no lineales es necesario recurrir a técnicas de linealización, como se explicará en el siguiente capítulo.

### 3.4. Referencias

Celia, M., T. Russell, T., I. Herrera, y R. Ewing, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation", *Adv. Water Res.*, 13, 1990, pp. 187-206.

Celia, M. A., "Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint method for contaminant transport simulations", *Proc. X Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 1, 1994, pp. 207-216.

Binning, P.J., Modelling Unsaturated Zone Flow and Contaminant Transport in the Air and Water Phases, *Ph.D. Thesis, Dept of Civil Engineering and Operations Research, Princeton University*, 1994, pp. 333.

Binning, P. y M. A. Celia, "A finite volume Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint method for solution of the contaminant transport equations in two-dimensional multiphase flow systems", *Water Res. Res.*, 32(1), 1996, pp. 103-114.

Binning, P. y M. A. Celia, "A three-dimensional forward particle tracking Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint method for solution of the contaminant transport equation", *Proc. XIII Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 2, 2000, pp. 611-618.

Goode, D. J., "A particle velocity interpolation in block-centred finite difference groundwater models", *Water Res. Res.*, 26(5), 1990, pp. 925-940.

Healy, R. W. y T. F. Russell, "A Finite-Volume Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint method for solution of the Advection-Dispersion Equation", *Water Res. Res.*, 29(7), 1993, pp. 2399-2413.

Healy, R. W. y T. F. Russell, "Solution of advection-dispersion equation in two dimensions by a finite-volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method", *Adv. in water Res.*, 21(1), 1998, pp. 11-26.

Herrera, I., Boundary methods, An algebraic theory. *Pitman Advanced Publishing Program, Boston, London, Melbourne*, 1984

Herrera, I., "Unified approach to numerical methods. Part 1. Green's formulas operators in discontinuous fields" *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 1 (1), 1985, pp. 12-37.

Herrera, I., Some unifying concepts in applied mathematics. The merging of disciplines: new directions in pure, applied and computational mathematics. In R. E. Ewing et al. (eds), *Springer Verlag, New York*, 1986, pp. 79-78.

Herrera, I., R. Ewing, M. A. Celia, y T. F. Russell, "Eulerian-Lagrangian localized adjoint method: the theoretical framework", *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 9 (4), 1993, pp. 431-457.

Herrera, G. & I. Herrera, "An Eulerian-Lagrangian method of cells, based on localized adjoint methods", *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 10, 1994, pp. 205-223.

Morton, K. W., A. Priestley, y E. Suli, "Stability of the Lagrange-Galerkin method with nonexact integration", *Model. Math. Anal. Numer.*, (22), 1988, pp. 625-653.

Pollock, D. W., "Semianalytical computation of path lines for finite difference models", *Ground water*, 26(6), 1988, pp. 743-750.

Wang, H., R. C. Sharpley, y S. Man, "An ELLAM scheme for advection-diffusion equations in multi-dimensions", *Proc. XI Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 2, 1996, pp. 99-106.

# CAPÍTULO 4

## LINEALIZACIÓN DE LA ECUACIÓN DE FLUJO Y TRANSPORTE

### Introducción

En el capítulo 3 se presentó el potencial del método localizado adjunto euleriano-lagrangiano (ELLAM) para la solución de problemas de transporte dominados por advección, el cual también ha sido mostrado por varios autores (Celia *et al.*, 1990; Celia y Zisman, 1990; Herrera y Herrera, 1994). Para el caso de problemas no lineales, en particular el transporte reactivo no lineal, se requiere aplicar previamente una técnica de linealización para usar ELLAM, debido a que el operador adjunto sólo existe para ecuaciones diferenciales lineales. Los métodos de linealización que han sido usados hasta ahora se basan en estrategias tipo Picard, en donde los coeficientes no lineales son evaluados en un paso de tiempo previo, siguiendo las líneas características (Vag *et al.*, 1996). Esta técnica puede llevar a un método no iterativo, con una precisión de primer orden en el tiempo, o a un método iterativo, que puede alcanzar una precisión de segundo orden, siempre y cuando se utilice un esquema de integración apropiado. Sin embargo, para problemas altamente no lineales, como son los casos del flujo en un medio poroso parcialmente saturado o el transporte en varias fases, aún no está claro como llevar a cabo la linealización. Esto es particularmente cierto cuando los términos no lineales son dominantes, lo cual puede provocar que las propiedades de convergencia en los algoritmos tipo Picard sean pobres (Paniconi, *et al.*, 1991; Aldama y Paniconi, 1992). En relación con lo anterior, en este capítulo se desarrolla una técnica de linealización a través del empleo de una expansión tipo Taylor-Fréchet

(Aldama y Paniconi, 1992; Milne, 1980) sobre el operador no lineal de advección-difusión-reacción (ADR) así como para la ecuación de flujo del agua en medios porosos representada por la ecuación de Richards. Esta expansión se realiza alrededor de valores de la variable dependiente en un paso de tiempo previo, a lo largo de las líneas características. En esta expansión, los términos de segundo orden son despreciados, generándose así un operador modificado lineal. Es posible así construir un problema lineal para el cual un operador adjunto puede ser determinado. Tal estrategia permite obtener una aproximación de segundo orden, independientemente de si se emplea una técnica iterativa o no iterativa. Asimismo, la expansión tipo Taylor-Fréchet se puede generalizar a otros problemas no lineales, lo cual permite construir algoritmos con propiedades de convergencia atractivas para la solución de problemas altamente no lineales.

Por cuestiones de claridad, se tratará en primer lugar la ecuación de transporte reactivo no lineal en una y dos dimensiones. Después, se explicará la técnica para la ecuación de Richards, asimismo en una y en dos dimensiones.

#### 4.1. Ecuación de transporte reactivo no lineal en una dimensión

##### 4.1.1. Planteamiento del problema

Considérese el siguiente problema no lineal de ADR:

$$N(c) \equiv \frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + k(c)c = f(x, t), \quad (x, t) \in \Omega \equiv [0, L] \times [0, T] \quad (4.1)$$

$$c(x, 0) = h(x), \quad c(0, t) = g(t), \quad \frac{\partial c}{\partial x}(L, t) = m(t)$$

donde  $N(\cdot) \equiv (\cdot)_t + v(\cdot)_x - D(\cdot)_{xx} + k(c)(\cdot)$  representa el operador no lineal ADR;  $c = c(x, t)$ , la concentración del soluto;  $v$ , la velocidad;  $D$ , el coeficiente de difusión (o dispersión hidrodinámica);  $k(c)$ , un coeficiente de decaimiento de primer orden, el cual es una función no lineal de la concentración  $c$ ;  $f$  es una función que indica la presencia de fuentes o sumideros en el dominio;  $x$  es la coordenada espacial;  $t$  el tiempo, y  $h$ ,  $g$  y  $m$  funciones conocidas. En lo sucesivo, se supone que  $v$  y  $D$  son constantes.

#### 4.1.2. Técnica de linealización tipo Picard

La técnica de linealización tipo Picard se usa ampliamente en la solución de problemas no lineales y es muy fácil de implementar en algoritmos para computadora. Esta técnica puede ser iterativa o no iterativa.

Para la ecuación (4.1) la técnica de linealización tipo Picard se puede escribir como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \bar{k}(c)c = 0, \quad (4.2)$$

donde  $\bar{k}(c)$  es una aproximación a  $k(c)$  definido por:

$$\bar{k}(c) = k(\bar{c}) \quad (4.3)$$

siempre y cuando  $\bar{c}$  sea un valor de  $c$  en un paso previo, o el valor previo a una iteración. En este sentido, la ecuación (4.1) es linealizada en términos de  $\bar{k}(c)$  y es reducida a la ecuación de transporte reactivo lineal en la cual se puede aplicar ELLAM.

Para un proceso no iterativo, la ecuación (4.3) se expresa por:

$$k[c(x, t^{n+1})] = \bar{k}[c(x, t^{n+1})] = k[\bar{c}(x, t^{n+1})] = k[c(x^*, t^n)] \quad (4.4)$$

donde  $c(x^*, t^n)$  es la proyección hacia atrás de  $c(x, t^{n+1})$ , siguiendo la línea característica. Si la proyección es en  $c(x, t^n)$ , también se tiene una versión linealizada de la ecuación (4.1). La cual es a menudo utilizada por los métodos clásicos de diferencias finitas y elemento finito.

Por el contrario, para un proceso iterativo la ecuación (4.3) es:

$$k[c^{m+1}(x, t^{m+1})] = \bar{k}[c^{m+1}(x, t^{m+1})] = k[\bar{c}^{m+1}(x, t^{m+1})] = k[c^m(x, t^{m+1})] \quad (4.5)$$

siendo  $m$  un contador que indica el número de iteración. Al sustituir la ecuación (4.5) en (4.1) se obtiene una versión linealizada de la ecuación de transporte reactivo respecto a las iteraciones, por lo que ELLAM puede ser aplicado. Obsérvese que para  $m=0$  se debe utilizar la ecuación (4.4).

Estas técnicas permiten obtener, para un proceso no iterativo, una precisión de primer orden; o una precisión de segundo orden para el proceso iterativo, siempre y cuando se utilice un esquema de integración apropiado.

### 4.1.3. Expansión de Taylor-Fréchet

El desarrollo presentado aquí se basa en un trabajo presentado por Aldama y Arroyo (1998).

Con relación a la ecuación (4.1), sea

$$c(x, t) = \bar{c}(x, t) + \check{c}(x, t), \quad \|\check{c}\|/\|\bar{c}\| \ll 1 \quad (4.6)$$

donde  $\bar{c}(x, t) = c(x - \xi, t - \tau)$ ,  $\xi = \int_{t-\tau}^t v dt = v\tau$ . La función  $\check{c}(x, t)$  será referida como la *función de corrección*. Como se observa,  $\bar{c}$  es determinada en función de un valor previo de  $c$ , siguiendo las líneas características. Asimismo, definir  $\xi$  mediante una integral permite generalizar el procedimiento cuando la velocidad,  $v$ , no es constante. En la práctica, el tiempo  $\tau$  se toma igual al incremento en el tiempo  $\Delta t$ ; de esta forma,  $\bar{c}$  representa la concentración del soluto para un instante previo, a lo largo de la línea característica que pasa a través del punto  $(x, t)$ .

Sustituyendo la ecuación (4.6) en la ecuación no lineal ADR  $N(c) = f(x, t)$ , y empleando una expansión tipo Taylor-Fréchet, se obtiene  $N(\bar{c} + \check{c}) = N(\bar{c}) + dN(\check{c}; \bar{c}) + O(\|\check{c}\|^2) = f(x, t)$ , donde  $dN(\check{c}; \bar{c})$  es la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $N(\cdot)$ , la cual, por definición, es un operador lineal en  $\check{c}$  y depende paramétricamente de  $\bar{c}$ . Tomando en cuenta la definición de  $N(\cdot)$ , se puede demostrar que  $dN(\check{c}; \bar{c})$  está dado por:

$$dN(\check{c}; \bar{c}) = \frac{\partial \check{c}}{\partial t} + v \frac{\partial \check{c}}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \check{c}}{\partial x^2} + \tilde{k}(\bar{c})\check{c} \equiv \tilde{N}(\check{c}) \quad (4.7)$$

donde  $\tilde{k}(\bar{c}) = k(\bar{c}) + k'(\bar{c})\bar{c}$ . Despreciando los términos de orden  $O(\|\check{c}\|^2)$  en la ecuación  $N(\bar{c} + \check{c}) = f(x, t)$ , resulta la siguiente ecuación lineal no homogénea para  $\check{c}$ :

$$\tilde{N}(\check{c}) = -N(\bar{c}) + f(x, t) \quad (4.8)$$

donde  $\tilde{N}(\cdot)$  es un operador lineal definido por la ecuación (4.7). En relación con lo anterior, se puede diseñar un procedimiento iterativo donde los valores para  $c$ ,  $\bar{c}$  y  $\check{c}$  son actualizados de acuerdo con el siguiente algoritmo:

$$\begin{aligned}
 & \text{Hacer } \bar{c} = c(x - \xi, t - \tau) \\
 & \text{Resolver } \tilde{N}(\bar{c}) = -N(\bar{c}) + f(x, t) \\
 & \text{Hacer } c^{(0)} = \bar{c} + \bar{c} \text{ (primera iteración)} \\
 & \text{Para } j := 1 \text{ hasta } n \text{ (} n = \text{máximo número de iteraciones)} \\
 & \quad \text{Hacer } \bar{c} = c^{(j-1)} \\
 & \quad \text{Resolver } \tilde{N}(\bar{c}) = -N(\bar{c}) + f(x, t) \\
 & \quad \text{Hacer } c^{(j)} = \bar{c} + \bar{c} \text{ (} j \text{ - ésima iteración)} \\
 & \quad \text{Si } \left| \frac{c^{(j)} - c^{(j-1)}}{c^{(j-1)}} \right| \leq \text{tolerancia, fin} \\
 & \text{Continuar}
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

Usando una expansión de Taylor, se demuestra que aun para la primera iteración se tiene,  $\bar{c} = O(\Delta t^2)$ . Por lo tanto, y a condición de que se use una precisión de segundo orden para evaluar numéricamente las integrales que aparecen en la ecuación (4.8), se espera una precisión del mismo orden aun si sólo una iteración es empleada en el algoritmo (4.9). Por otra parte, como la ecuación (4.8) es ahora lineal, puede emplearse ELLAM para solucionar esta ecuación.

En el **capítulo 6** se proponen algunas formas de solucionar la ecuación de transporte reactivo utilizando estas técnicas.

## 4.2. Ecuación de transporte reactivo no lineal en dos dimensiones

### 4.2.1. Planteamiento del problema

Considérese el siguiente problema no lineal de ADR en multidimensiones:

$$\ell(c) \equiv \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{vc} - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c) + k(c)c = f, (x, y) \in \Omega, t \in [0, T] \tag{4.10}$$

sujeta a cualquiera de las siguientes condiciones de frontera y condición inicial:

$$\begin{aligned}
 & c(x, y, t) = h_1(x, y, t), \\
 & -\mathbf{D}\nabla c \cdot \mathbf{n} = h_2(x, y, t), \\
 & [\mathbf{vc} - \mathbf{D}\nabla c] \cdot \boldsymbol{\eta} = h_3(x, y, t), (x, y) \in \partial\Omega; t \in (0, T] \\
 & c(x, y, 0) = C_0(x, y) \in \Omega
 \end{aligned} \tag{4.10a}$$

donde  $\ell(c)$  representa el operador no lineal ADR;  $c$  es la concentración del soluto;  $\mathbf{v}$  el vector de velocidades;  $\mathbf{D}$  el tensor de dispersión;  $k(c)$  es un coeficiente de reacción de primer orden, el cual es una función no lineal de

la concentración  $c$ ;  $\eta$  un vector unitario perpendicular a la frontera  $\partial\Omega$ , y  $f$  es una función que representa la pérdida o ganancia de masa. En lo sucesivo, se supone que  $\mathbf{v}$  y  $\mathbf{D}$  son constantes.

#### 4.2.2. Técnica de linealización tipo Picard

En forma similar a como se procedió en el caso de una dimensión, para la ecuación (4.10) la técnica de linealización tipo Picard es:

$$\ell(c) \equiv \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}c - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c) + \bar{k}(c)c = f, (x, y) \in \Omega, t \in [0, T] \quad (4.11)$$

donde  $\bar{k}(c)$  es una aproximación a  $k(c)$ , definido de nuevo por la ecuación (4.3). Por lo tanto, para un proceso no iterativo o iterativo, las expresiones que se usan son las ecuaciones (4.4) y (4.5) respectivamente, con la salvedad de que ahora la concentración  $c(x^*, t^n)$  queda definida en dos o más dimensiones, según sea el caso.

#### 4.2.3. Expansión de Taylor-Fréchet

En forma análoga a como se procedió en el inciso 4.1.3, al aplicar la relación (4.6) en la ecuación (4.10) se obtiene:

$$\ell(\bar{c} + \tilde{c}) = \ell(\bar{c}) + d\ell(\tilde{c}; \bar{c}) + O(\|\tilde{c}\|^2) = f(x, t) \quad (4.12)$$

donde  $d\ell(\tilde{c}; \bar{c})$  es la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $\ell(\cdot)$ , la cual, por definición, es un operador lineal en  $\tilde{c}$  y depende paramétricamente de  $\bar{c}$ . Tomando en cuenta la definición de  $\ell(\cdot)$ , se puede demostrar que  $d\ell(\tilde{c}; \bar{c})$  está dado por:

$$d\ell(\tilde{c}; \bar{c}) = \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}\tilde{c} - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla \tilde{c}) + \tilde{k}(\bar{c})\tilde{c} \equiv \tilde{\ell}(\tilde{c}) \quad (4.13)$$

donde  $\tilde{k}(\bar{c}) = k(\bar{c}) + k'(\bar{c})\bar{c}$ . Despreciando los términos de orden  $O(\|\tilde{c}\|^2)$  en la ecuación  $\ell(\bar{c} + \tilde{c}) = f(x, t)$ , resulta la siguiente ecuación lineal no homogénea para  $\tilde{c}$ :

$$\tilde{\ell}(\tilde{c}) = -\ell(\bar{c}) + f(x, t) \quad (4.14)$$

donde  $\tilde{\ell}(\cdot)$  es un operador lineal definido por la ecuación (4.13). Como en el caso unidimensional, se puede diseñar un procedimiento iterativo donde los valores para  $c$ ,  $\bar{c}$  y  $\tilde{c}$  también son actualizados con algoritmo (4.9). De esta forma, como ahora la ecuación (4.14) es lineal, puede ser

resuelta mediante ELLAM. En el capítulo 6 serán mostradas algunas aplicaciones de este procedimiento.

### 4.3. Ecuación de Richards en una dimensión

#### 4.3.1. Planteamiento del problema

Considérese la ecuación de Richards en su versión para la presión (base  $\psi$ ), en la dirección vertical, como (Arroyo, 1994):

$$N(\psi) \equiv S(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - K' \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0; \quad (4.15)$$

$$\text{donde : } S(\psi) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi}; \quad K' = \frac{\partial K}{\partial \psi}$$

sujeta a las siguiente condiciones subsidiarias

$$z \in \Omega_z = [0, L]$$

$$t \in \Omega_t = [0, T]$$

$$(z, t) \in \Omega_{z,t} \equiv \Omega_z \times \Omega_t$$

(4.15a)

$$\psi(z, 0) = g(z)$$

$$\psi(0, t) = f_1(t); \quad \theta \frac{\partial \psi}{\partial z}(0, t) = f_2(t); \quad \theta - K \left[ \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right]_{(0,t)} = q_0(t);$$

$$\psi(L, t) = f_3(t); \quad \theta \frac{\partial \psi}{\partial z}(L, t) = f_4(t); \quad \theta - K \left[ \frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right]_{(L,t)} = q_L(t);$$

$N(\bullet)$ , es un operador no lineal;  $\theta(z, t)$  es el contenido de humedad volumétrico;  $\psi(z, t)$  el potencial de presión;  $K(\psi)$  la conductividad hidráulica;  $S(\psi)$  la capacidad capilar o capacidad específica;  $z$  la coordenada espacial orientada positivamente hacia arriba, y  $t$  el tiempo. Se considera a priori que están definidas las relaciones:  $\psi(\theta)$ ,  $K(\psi)$ ,  $S(\psi)$ .

Obsérvese que la ecuación (4.15) tiene la forma de la ecuación (4.1) para  $k(c)=0$ ; sin embargo, la dependencia de los coeficientes del potencial de presión la hacen una ecuación altamente no lineal.

### 4.3.2. Técnica de linealización tipo Picard

De manera análoga al inciso 4.1.2, un procedimiento de linealización tipo Picard para la ecuación (4.15) se puede describir para un proceso no iterativo como:

$$N(\psi(z, t^{n+1})) \equiv S(\psi(z^*, t^n)) \frac{\partial \psi(z, t^{n+1})}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi(z^*, t^n)) \frac{\partial \psi}{\partial z}(z, t^{n+1}) \right) - K'(\psi(z^*, t^n)) \frac{\partial \psi(z, t^{n+1})}{\partial z} = 0 \quad (4.16)$$

en donde  $\psi(z^*, t^n)$  es la proyección hacia atrás de  $\psi(z, t^{n+1})$  siguiendo la línea característica. También se puede usar la proyección en  $\psi(z, t^n)$ .

Por el contrario, para un proceso iterativo la ecuación (4.15) se expresa por:

$$N(\psi(z, t^{n+1, m+1})) \equiv S(\psi(z, t^{n+1, m})) \frac{\partial \psi(z, t^{n+1, m+1})}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi(z, t^{n+1, m})) \frac{\partial \psi}{\partial z}(z, t^{n+1, m+1}) \right) - K'(\psi(z^*, t^{n+1, m})) \frac{\partial \psi(z, t^{n+1, m+1})}{\partial z} = 0 \quad (4.17)$$

siendo  $m$  un contador que indica el número de iteración. Obsérvese que para  $m=0$  se debe aplicar la ecuación (4.16).

De esta forma, las ecuaciones (4.16) y (4.17) son ahora lineales, por lo que se puede aplicar ELLAM.

### 4.3.3. Expansión de Taylor-Fréchet

El desarrollo que se muestra a continuación se basa en un trabajo presentado por Arroyo y Aldama (2000, 2002).

En relación con la ecuación (4.15), sea:

$$\psi(z, t) = \Psi(z, t) + \Psi(z, t), \quad \|\Psi\|/\|\Psi\| \ll 1 \quad (4.18)$$

donde  $\Psi(z, t) = \psi(z - \xi, t - \tau)$ ,  $\xi = \int_{t-\tau}^t v dt$ . La función  $\Psi(z, t)$  es la *función de corrección*. Como se observa,  $\Psi$  es determinada en función de un valor previo de  $\psi$ , siguiendo las líneas características, siempre y cuando la velocidad  $v$  sea apropiadamente elegida. En la práctica, el tiempo  $\tau$  se

toma igual al incremento en el tiempo  $\Delta t$ ; de esta forma,  $\psi$  representa la presión para un instante previo, a lo largo de la línea característica que pasa por el punto  $(z, t)$ .

Por otra parte, una expansión tipo Taylor-Fréchet sobre el operador no lineal  $N(\bullet)$  de la ecuación (4.15) será:

$$N(\Psi + \psi) = -N(\Psi) + dN(\psi; \Psi) + O(\|\psi\|^2) = 0 \quad (4.19)$$

donde  $dN(\psi; \Psi)$  es la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $N(\cdot)$ , la cual, por definición, es un operador lineal en  $\psi$  y depende paraméricamente de  $\Psi$ .

De igual forma, una expansión tipo Taylor-Fréchet, para cada uno de los coeficientes de la ecuación (4.15) es:

$$\begin{aligned} S(\psi) &= S(\Psi + \psi) = S(\Psi) + \psi S'(\Psi) + O(\|\psi\|^2) \\ K(\psi) &= K(\Psi + \psi) = K(\Psi) + \psi K'(\Psi) + O(\|\psi\|^2) \\ K'(\psi) &= K'(\Psi + \psi) = K'(\Psi) + \psi K''(\Psi) + O(\|\psi\|^2) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Sustituyendo la ecuación (4.20) en la ecuación (4.15), y despreciando los términos  $O(\|\psi\|^2)$ , se obtiene:

$$\begin{aligned} S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\Psi) + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] \\ + S(\Psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \psi + K(\Psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] + \bar{S} \psi = 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\text{donde } \bar{K} = K'(\Psi) \left( 1 + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right); \quad \bar{S} = S'(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

Observando la ecuación (4.19), se ve claramente que la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $N(\cdot)$  está dada por:

$$dN(\psi; \Psi) = S(\Psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \psi + K(\Psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] + \bar{S} \psi \quad (4.22)$$

la cual, por definición, es un operador lineal en  $\Psi$  y depende paramétricamente de  $\psi$ . Despreciando los términos de orden  $O(\|\Psi\|^2)$  en la ecuación (4.19), resulta la siguiente ecuación lineal no homogénea para  $\Psi$ :

$$dN(\psi; \Psi) = -N(\psi) \tag{4.23}$$

Por lo tanto, se puede diseñar un procedimiento iterativo-no iterativo donde los valores para  $\psi$ ,  $\Psi$  y  $\Psi$  son actualizados de acuerdo con el siguiente algoritmo:

$$\begin{aligned} & \text{Hacer } \Psi = \psi(x - \xi, t - \tau) \\ & \text{Resolver } dN(\Psi) = -N(\Psi) \\ & \text{Hacer } \psi^{(0)} = \Psi + \Psi \text{ (primera iteración)} \\ & \text{Para } j := 1 \text{ hasta } n \text{ (} n = \text{máximo número de iteraciones)} \\ & \quad \text{Hacer } \Psi = \psi^{(j-1)} \\ & \quad \text{Resolver } dN(\Psi) = -N(\Psi) \\ & \quad \text{Hacer } \psi^{(j)} = \Psi + \Psi \text{ (} j \text{-ésima iteración)} \\ & \quad \text{Si } \left| \frac{\psi^{(j)} - \psi^{(j-1)}}{\psi^{(j-1)}} \right| \leq \text{tolerancia, fin} \end{aligned} \tag{4.24}$$

Continuar

Usando una expansión de Taylor, se demuestra que, aun para la primera iteración se tiene,  $\Psi = O(\Delta t^2)$ . Por lo tanto, y a condición de que se use una precisión de segundo orden para evaluar numéricamente las integrales que aparecen en la ecuación (4.23), se espera una precisión del mismo orden aun si sólo una iteración es empleada en el algoritmo (4.24). Por otra parte, como la ecuación (4.23) es ahora lineal, puede usarse ELLAM para solucionar esta ecuación, como se mostrará en el **capítulo 6**.

En el caso de tratar con la versión de Richards para el contenido humedad  $\theta$ , (base  $\theta$ ) dada por:

$$\begin{aligned} N(\theta) &\equiv \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) - K' \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0 \\ D(\theta) &= K(\theta) \frac{\partial \psi}{\partial \theta}; \quad K' = \frac{\partial K}{\partial \theta} \end{aligned} \tag{4.25}$$

siendo  $D(\theta)$ , el coeficiente de difusividad capilar o difusividad hidráulica, de manera análoga a como se procedió en este inciso, se comprueba que una expansión tipo Taylor-Fréchet transforma la ecuación (4.25) en:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\bar{\theta}) + D(\bar{\theta}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right] + \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \tilde{\theta} + D(\bar{\theta}) \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial z} \right] = 0 \quad (4.26)$$

$$\text{donde } \bar{K} = \left[ K'(\bar{\theta}) + D'(\bar{\theta}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right]$$

Observando la ecuación (4.26), se ve que ahora la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $N(\cdot)$  está dada por:

$$dN(\tilde{\theta}; \bar{\theta}) = \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \tilde{\theta} + D(\bar{\theta}) \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial z} \right] \quad (4.27)$$

la cual, por definición, es un operador lineal en  $\tilde{\theta}$  y depende paramétricamente de  $\bar{\theta}$ . Por lo tanto, despreciando los términos de orden  $O(\|\tilde{\theta}\|^2)$ , resulta la siguiente ecuación lineal no homogénea para  $\tilde{\theta}$ :

$$dN(\tilde{\theta}; \bar{\theta}) = -N(\bar{\theta}) \quad (4.28)$$

Asimismo, se puede diseñar un algoritmo como el mostrado en (4.24), en el que la ecuación (4.28) puede ser resuelta utilizando ELLAM.

#### 4.4. Ecuación de Richards en dos dimensiones

##### 4.4.1. Planteamiento del problema

Considérese la ecuación de Richards en su forma para la presión (base  $\psi$ ) en la dirección  $x$ - $z$  como:

$$N(\psi) \equiv S(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left( K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - K' \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0; \quad (4.29)$$

$$\text{donde } : S(\psi) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi}; \quad K' = \frac{\partial K}{\partial \psi}$$

sujeta a condiciones subsidiarias apropiadas.

$N(\bullet)$  es un operador no lineal;  $\theta(z,t)$  es el contenido de humedad volumétrico;  $\psi(z,t)$  el potencial de presión;  $K(\psi)$  la conductividad hidráulica;  $S(\psi)$  la capacidad capilar o capacidad específica;  $z$  la coordenada espacial orientada positivamente hacia arriba;  $x$ , la coordenada espacial, y  $t$  el tiempo. Se considera a priori que están definidas las relaciones:  $\psi(\theta)$ ,  $K(\psi)$ ,  $S(\psi)$ .

Como se observa en la ecuación (4.29), los desarrollos mostrados en el inciso 4.3 se aplican directamente para el caso bidimensional con la salvedad de que se debe agregar el término correspondiente a la coordenada  $x$ .

#### 4.4.2. Técnica de linealización tipo Picard

De manera análoga al inciso 4.3.2, un procedimiento de linealización tipo Picard para la ecuación (4.29) se puede describir para un proceso no iterativo como:

$$\begin{aligned} S(\psi(x^*, z^*, t^n)) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1})}{\partial t} = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi(x^*, z^*, t^n)) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1})}{\partial z} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left( K(\psi(x^*, z^*, t^n)) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1})}{\partial x} \right) + K'(\psi(x^*, z^*, t^n)) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1})}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (4.30)$$

en donde  $\psi(x^*, z^*, t^n)$  es la proyección hacia atrás de  $\psi(x, z, t^{n+1})$ , siguiendo la línea característica. También se puede usar la proyección en  $\psi(x, z, t^n)$ .

Por el contrario, para un proceso iterativo la ecuación (4.29) se expresa por:

$$\begin{aligned} S(\psi(x, z, t^{n+1, m})) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1, m+1})}{\partial t} = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi(x, z, t^{n+1, m})) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1, m+1})}{\partial z} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left( K(\psi(x, z, t^{n+1, m})) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1, m+1})}{\partial x} \right) + K'(\psi(x, z, t^{n+1, m})) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1, m+1})}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (4.31)$$

siendo  $m$  un contador que indica el número de iteración. Obsérvese que para  $m=0$  se debe aplicar la ecuación (4.30).

De esta forma, las ecuaciones (4.30) y (4.31) son ahora ecuaciones lineales, por lo que ELLAM se puede aplicar para su solución.

#### 4.4.3. Expansión de Taylor-Fréchet

Procediendo de manera análoga al inciso 4.2.3, en relación con la ecuación (4.29), sea

$$\psi(x, z, t) = \bar{\psi}(x, z, t) + \Psi(x, z, t), \|\Psi\| / \|\bar{\psi}\| \ll 1 \quad (4.32)$$

donde  $\bar{\psi}(x, z, t) = \psi(x - \xi_x, z - \xi_z, t - \tau)$ ;  $\xi_x = \int_{t-\tau}^t v_x dt$ ;  $\xi_z = \int_{t-\tau}^t v_z dt$ . La función  $\Psi(x, z, t)$  es la *función de corrección*. Como se observa,  $\bar{\psi}$  es determinada en función de un valor previo de  $\psi$ , siguiendo las líneas características, siempre y cuando la velocidad  $v$  sea apropiadamente elegida. En la práctica, el tiempo  $\tau$  se supone igual al incremento en el tiempo  $\Delta t$ ; de esta forma,  $\bar{\psi}$  representa la presión para un instante previo, a lo largo de la línea característica que pasa por el punto  $(x, z, t)$ .

Por otra parte, una expansión tipo Taylor-Fréchet sobre el operador no lineal  $N(\bullet)$  de la ecuación (4.29), será:

$$N(\bar{\psi} + \Psi) = -N(\bar{c}) + dN(\bar{\psi}; \Psi) + O(\|\Psi\|^2) = 0 \quad (4.33)$$

donde  $dN(\bar{\psi}; \Psi)$  es la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $N(\cdot)$ , la cual, por definición, es un operador lineal en  $\Psi$  y depende paramétricamente de  $\bar{\psi}$ .

De igual forma que para el caso unidimensional, sustituyendo la ecuación (4.20) en la ecuación (4.29), y despreciando los términos  $O(\|\Psi\|^2)$ , se obtiene:

$$\begin{aligned} & S(\bar{\psi}) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\bar{\psi}) + K(\bar{\psi}) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ K(\bar{\psi}) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] \\ & + S(\bar{\psi}) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \Psi + K(\bar{\psi}) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \bar{L} \Psi + K(\bar{\psi}) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] + \bar{S} \Psi = 0 \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\text{donde } \bar{K} = K'(\bar{\psi}) \left( 1 + \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial z} \right); \bar{L} = K'(\bar{\psi}) \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x}; \bar{S} = S'(\bar{\psi}) \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}.$$

Observando la ecuación (4.34), se ve que la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $N(\cdot)$  está dada por:

$$dN(\Psi; \Psi) = S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \Psi + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \bar{L} \Psi + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] + \bar{S} \Psi \quad (4.35)$$

la cual, por definición, es un operador lineal en  $\Psi$  y depende paramétricamente de  $\Psi$ . Despreciando los términos de orden  $O(\|\Psi\|^2)$  en la ecuación (4.33), resulta la siguiente ecuación lineal no homogénea para  $\Psi$ :

$$dN(\Psi; \Psi) = -N(\Psi) \quad (4.36)$$

Por lo tanto, se puede diseñar un procedimiento iterativo-no iterativo donde los valores para  $\psi$ ,  $\Psi$  y  $\Psi$  son actualizados también con el algoritmo (4.24).

Para el caso de la versión de Richards para el contenido humedad  $\theta$ , (base  $\theta$ ) dada por:

$$N(\theta) = \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left( D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - K' \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0 \quad (4.37)$$

$$D(\theta) = K(\theta) \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}; \quad K' = \frac{\partial K}{\partial \theta}$$

siendo  $D(\theta)$  el coeficiente de difusividad capilar o difusividad hidráulica.

Una expansión tipo Taylor-Fréchet transforma la ecuación (4.37) en:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\bar{\theta}) + D(\bar{\theta}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ D(\bar{\theta}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} \right] \\ & + \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \tilde{\theta} + D(\bar{\theta}) \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \bar{L} \tilde{\theta} + D(\bar{\theta}) \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial x} \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\text{donde } \bar{K} = \left[ K'(\bar{\theta}) + D'(\bar{\theta}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right]; \bar{L} = \left[ D'(\bar{\theta}) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} \right]$$

Observando la ecuación (4.36), se ve que ahora la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $N(\cdot)$  está dada por:

$$dN(\tilde{\theta}; \bar{\theta}) = \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K \tilde{\theta} + D(\bar{\theta}) \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ L \tilde{\theta} + D(\bar{\theta}) \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial x} \right] \quad (4.39)$$

la cual, por definición, es un operador lineal en  $\tilde{\theta}$  y depende paramétricamente de  $\bar{\theta}$ . Despreciando los términos de orden  $O(\|\tilde{\theta}\|^2)$ , resulta la siguiente ecuación lineal no homogénea para  $\tilde{\theta}$  :

$$dN(\tilde{\theta}; \bar{\theta}) = -N(\bar{\theta}) \quad (4.40)$$

Por lo tanto, también se puede diseñar un algoritmo como el mostrado en (4.24), en donde la ecuación (4.40) puede ser resuelta utilizando ELLAM.

#### 4.4 Resumen

En este capítulo se presentaron algunas formas de linealizar la ecuación de transporte y la ecuación de flujo. Las técnicas mostradas corresponden a procedimientos tipo Picard (ampliamente conocido) y un procedimiento nuevo que consiste en utilizar una expansión Taylor-Fréchet. En esta expansión, los términos de segundo orden son despreciados, generándose así un operador modificado lineal. Esto permite construir un problema lineal para el cual un operador adjunto puede ser determinado. Esta estrategia permite obtener una aproximación de segundo orden independientemente de si la técnica empleada es iterativa o no iterativa. Asimismo, la expansión tipo Taylor-Fréchet se puede generalizar a otros problemas no lineales, pudiéndose de esta forma construir algoritmos con propiedades de convergencia atractivas para la solución de problemas altamente no lineales.

Se observa que en el procedimiento tipo Picard se trata directamente con la forma original de la ecuación de transporte y flujo mientras que el procedimiento Taylor-Fréchet genera formas modificadas para ambas ecuaciones. Específicamente, para la ecuación de Richards con base en  $\psi$ , la ecuación se transforma de una ecuación de advección-difusión a una ecuación de advección-difusión-reacción para la función de corrección, mientras que para la ecuación con base en  $\theta$  se conserva la forma original. La aplicación de ambas técnicas se puede aplicar sin mayor complicación a tres dimensiones. Las ventajas y desventajas de usar estas técnicas de linealización serán analizadas en el capítulo 6.

#### 4.5. Referencias

Aldama, A. A., y V. Arroyo, "An Eulerian\_Lagrangian localized adjoint method for the nonlinear advection-diffusion-reaction equation", *Comput. Meth. Water Res. XII*, Burganos *et al.* eds., 1998.

Aldama, A. A., y C. Paniconi, "An analysis of the convergence of Picard iterations for implicit approximations of Richard's equation", *Comput. Meth. Water Res. VIII*, Gambolati *et al.* eds., 1992.

Arroyo, V. y A. A. Aldama, "Un método localizado adjunto euleriano-lagrangiano para la ecuación de Richards", *X Congreso Nacional de Irrigación, Chihuahua, Chih. México, 2000.*

Arroyo, V. y A. Aldama, "Simulación numérica del flujo del agua en suelos no saturados mediante ELLAM", *II Congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Guanajuato, Gto. México, 2002.*

Arroyo, V., Modelo unidimensional de simulación numérica para drenaje agrícola, *Tesis de maestría en Ingeniería Hidráulica, Facultad de Ingeniería, UNAM, 1994*, pp. 155.

Celia, M., T. Russell, I. Herrera, y R. Ewing, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation", *Adv. Water Res.*, 13, 1990, pp. 187-206.

Celia, M. y S. Zisman. "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for reactive transport in groundwater", *Comput. Meth. Water Res. VIII*, Gambolati *et al.* eds., 1990.

Herrera, G. y I. Herrera. "Eulerian-Lagrangian method of cells based on localized adjoint method", *Num. Meth. Partial Diff. Eqns.*, 10, 1994, pp. 205-223.

Paniconi, C., A. A. Aldama, y E.F. Wood, "Numerical Evaluation of iterative and noniterative methods for solution on nonlinear Richards equation", *Water Res. Res.*, 27 (6), 1991, pp. 1147-1163.

Milne, R. D., *Applied Functional Analysis: An introductory Treatment*, Pitman, Boston, MA, 1980.

Vag, E., Wang J. y D. Helge, "Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for system of nonlinear advective-diffusive-reactive transport equations", *Adv. Water Res.*, 19, 1996, pp. 297-315.

# CAPÍTULO 5

## PROPAGACIÓN DE PROPIEDADES DE ELLAM

### Introducción

En el capítulo 3 se mostró que ELLAM es una metodología para la solución de problemas de transporte dominados por advección. Esta metodología no tiene restricciones en el número de Courant ni en el número de Péclét de la malla, e incorpora de manera natural cualquier tipo de frontera asegurando siempre la conservación de la masa.

Muchos autores han aplicado ELLAM a la solución de problemas de transporte (Celia *et al.*, 1990, Binning y Celia 1996, Aldama y Arroyo 1998); donde comunmente la función de peso elegida es una función que varía en el espacio de forma lineal. Ésta se obtiene dividiendo la ecuación adjunta de advección-difusión-reacción en una componente advectiva-reactiva (no permanente), y en una componente difusiva (permanente), en la cual la función de peso satisface a ambas.

Herrera y Herrera (1993) han propuesto el uso de una función de peso en donde la variación espacial es constante, la cual también satisface la ecuación adjunta. Este tipo de función de peso parece ser más atractiva para problemas con coeficientes variables, no lineales y en múltiples dimensiones, ya que permite evaluar las integrales de una manera más fácil (Healy y Rusell, 1993).

En vista de ello, es relevante investigar el efecto de elegir la función de peso sobre la propagación de propiedades de ELLAM, a través del uso de un análisis de Fourier. Este análisis es útil para estudiar el comportamiento de soluciones numéricas, y es limitada para problemas de valor inicial puro y coeficientes constantes. Sin embargo, Aldama y colaboradores (Aldama y Paniconi, 1992; Aldama y Aguilar, 1996; Aparicio y Aldama, 1998) han mostrado que a través del uso de expansiones Taylor-Fréchet, del análisis de escala múltiple y localización, el análisis de Fourier puede ser aplicado al estudio de propagación de propiedades de coeficientes variables y problemas no lineales. Entre estos resultados, tales autores han encontrado que es suficiente considerar el comportamiento de problemas lineales de valor inicial puro y coeficientes constantes similares a los problemas de evolución.

En este capítulo se presenta un estudio de las propiedades de propagación de la solución numérica de la ecuación de advección-difusión-reacción vía ELLAM. Se consideran dos tipos de funciones de peso: lineal y constante. Los resultados se comparan con las técnicas que consideran un enfoque euleriano, como es el caso de diferencias finitas y elemento finito. El presente estudio permite establecer condiciones de estabilidad y de convergencia, de tal forma que ELLAM conserve las ventajas (en relación con las técnicas tradicionales) que ha mostrado en la solución de problemas lineales, cuando se aplica a la solución de problemas no lineales.

El siguiente desarrollo se basa en un trabajo de Aldama y Arroyo (2000).

### 5.1. Planteamiento del problema

Considérese el siguiente problema lineal de advección-difusión-reacción (ADR) de valor inicial puro en la dirección  $x$ :

$$\begin{aligned} \ell(c) &\equiv \frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + kc = 0 \\ x &\in (-\infty, \infty); \quad t \in \Omega_t = [0, \infty] \\ c(x, 0) &= h(x) \end{aligned} \tag{5.1}$$

donde,  $c$  es la concentración del soluto;  $v$  es la velocidad;  $D$  el coeficiente de dispersión;  $k$  un coeficiente de reacción de primer orden;  $t$  el tiempo, y  $x$  la coordenada espacial. En lo sucesivo,  $v$ ,  $D$ , y  $k$  se consideran constantes.

## 5.2. Solución vía ELLAM

Sea  $C_j^n$  una aproximación a  $c(x,t)$  tal que:  $t = n\Delta t$ ;  $x = j\Delta x$ . En el capítulo 3 se demostró que para nodos interiores cuyas características no cruzan las fronteras, al aplicar ELLAM a la ecuación (5.1) se llega al siguiente sistema algebraico de ecuaciones:

### 5.2.1. Para la función de peso lineal

$$(AE)C_{j-1}^{n+1} + (BE)C_j^{n+1} + (AE)C_{j+1}^{n+1} + (DE)C_{j-N_c-2}^n + (EE)C_{j-N_c-1}^n + (FE)C_{j-N_c}^n + (GE)C_{j-N_c+1}^n = 0 \quad (5.2)$$

donde:

$$\begin{aligned} AE &= \left[ \frac{1}{6} \exp(\kappa) - \rho \gamma \theta \right] \\ BE &= \left[ \frac{2}{3} \exp(\kappa) + 2\rho \gamma \theta \right] \\ DE &= \left[ -\left( \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{6} \right) - \rho \gamma (1-\theta)(1-\alpha) \right] \\ EE &= \left[ -\left( \frac{2}{3} - \alpha^2 + \frac{\alpha^3}{2} \right) + \rho \gamma (1-\theta)(2-3\alpha) \right] \\ FE &= \left[ -\left( \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{2} \right) + \rho \gamma (1-\alpha)(3\alpha-1) \right] \\ GE &= \left[ \left( \frac{-\alpha^3}{6} \right) - \rho \gamma (1-\theta)\alpha \right] \end{aligned} \quad (5.2 a)$$

### 5.2.2. Para la función de peso constante:

$$(AE)C_{j-1}^{n+1} + (BE)C_j^{n+1} + (AE)C_{j+1}^{n+1} + (DE)C_{j-N_c-2}^n + (EE)C_{j-N_c-1}^n + (FE)C_{j-N_c}^n + (GE)C_{j-N_c+1}^n = 0 \quad (5.3)$$

donde:

$$\begin{aligned}
 AE &= \left[ \frac{1}{8} - \rho \right] \exp(\kappa) \\
 BE &= \left[ \frac{3}{4} + 2\rho \right] \exp(\kappa) \\
 DE &= 0.5[-0.5 + (Cr - Nc)]^2; \text{ para } (Cr - Nc) > 0.5 \\
 DE &= 0; \text{ para } 0 \leq (Cr - Nc) \leq 0.5 \\
 EE &= 0.5[2.5 - (Cr - Nc)][(Cr - Nc) - 0.5] + 0.5[0.5 + (Cr - Nc)][1.5 - (Cr - Nc)]; \text{ para } (Cr - Nc) > 0.5 \\
 EE &= 0.5[0.5 + (Cr - Nc)]^2; \text{ para } 0 \leq (Cr - Nc) \leq 0.5 \\
 FE &= 0.5[1.5 - (Cr - Nc)]^2; \text{ para } (Cr - Nc) > 0.5 \\
 FE &= 0.5[1.5 - (Cr - Nc)][0.5 + (Cr - Nc)] + 0.5[1.5 + (Cr - Nc)][0.5 - (Cr - Nc)]; \text{ para } 0 \leq (Cr - Nc) \leq 0.5 \\
 GE &= 0; \text{ para } (Cr - Nc) > 0.5 \\
 GE &= 0.5[0.5 - (Cr - Nc)]^2; \text{ para } 0 \leq (Cr - Nc) \leq 0.5
 \end{aligned}
 \tag{5.3 a}$$

En las ecuaciones (5.2) y (5.3) se han definido los siguientes números adimensionales:

$$\begin{aligned}
 \kappa &= K\Delta t, \\
 \gamma &= \frac{\exp(\kappa) - 1}{\kappa} \\
 \alpha &= 1 - (Cr - Nc) \\
 \rho &= \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (\text{número de dispersión}) \\
 Cr &= \frac{V\Delta t}{\Delta x} (\text{número de Courant}) \\
 Pe &= \frac{Cr}{\rho} (\text{número de Peclet de la malla}) \\
 Nc &= INT(Cr) \\
 0 &\leq \theta \leq 1 \quad (\text{factor de peso para el tiempo})
 \end{aligned}
 \tag{5.4}$$

### 5.3. Representación en series de Fourier

#### 5.3.1. Representación de la solución analítica

Considérese que la solución general de la ecuación (5.1) se puede representar por la serie de Fourier (Bentley *et al.*, 1990):

$$c(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} U_m \exp(i\sigma_m x + i\beta_m t)
 \tag{5.5}$$

donde:

$\sigma_m = 2\pi/L_m$ , es el número de onda o frecuencia espacial;  $\beta_m$ , frecuencia de onda;  $L_m$ , la longitud de onda;  $i = \sqrt{-1}$ ;  $U$ , la amplitud del modo de Fourier asociado con el número de onda;  $t$ , el tiempo, y  $x$  la coordenada espacial.

Sin pérdida de generalidad como la ecuación (5.1) es lineal, se supondrá que la solución estará dada por un solo modo de Fourier, es decir:

$$c(x,t) = U_m \exp[i\sigma_m(x - vt) - t(D\sigma_m^2 + k)] \quad (5.6)$$

El factor de amplificación ( $G_m$ ) en el tiempo de la ecuación (5.6) es:

$$\begin{aligned} (G_m)_{anal} &= \exp[-i\sigma_m v \Delta t - \Delta t(D\sigma_m^2 + k)] \\ &= \exp[-\Delta t(D\sigma_m^2 + k)] [\cos(\sigma_m v \Delta t) - i \operatorname{sen}(\sigma_m v \Delta t)] \end{aligned} \quad (5.7)$$

Como la expresión anterior es un número complejo, el módulo de ( $G_m$ ) es:

$$r_{anal} = \exp[-\Delta t(D\sigma_m^2 + k)] \quad (5.8)$$

De igual forma, la fase de ( $G_m$ ) es:

$$\phi_{anal} = -\sigma_m v \Delta t \quad (5.9)$$

### 5.3.2. Representación de la solución numérica

Considérese que cada solución discreta de la ecuación (5.1) puede ser representada a través de la versión discreta de la serie de Fourier en la forma siguiente:

$$C_j^n = \sum_{m=0}^{P-1} U_m^n \exp(i\sigma_m j \Delta x) \quad (5.10)$$

$\sigma_m = 2\pi/L_m$  es el número de onda o frecuencia espacial;  $L_m$ , la longitud de onda;  $i = \sqrt{-1}$ ;  $U$ , es una constante compleja que captura la dependencia temporal;  $n$ , el índice temporal, tal que:  $t = n\Delta t$ ;  $j$ , el índice espacial, tal que:  $x = j\Delta x$ ;  $m$ , el índice de número de onda, y  $P+1$  el número total de nodos de discretización.

Una componente de onda de la ecuación (5.10) es:

$$C_j^n = U_m \exp(i\sigma_m j \Delta x + i\beta_m n \Delta t) \quad (5.11)$$

### 5.3.2.1. Función de peso lineal

Al sustituir la ecuación (5.11) en la (5.2) se tiene que el factor de amplificación numérico  $(G_m)_{num}$  es:

$$(G_m)_{num} = \frac{Re + i(Im)}{(AE)2 \cos(\sigma\Delta x) + (BE)} \quad (5.12)$$

donde:

$$\begin{aligned} Re = & -(DE) \cos[\sigma\Delta x(Nc + 2)] - (EE) \cos[\sigma\Delta x(Nc + 1)] \\ & - (FE) \cos[\sigma\Delta x Nc] - (GE) \cos[\sigma\Delta x(Nc - 1)] \end{aligned} \quad (5.12a)$$

$$\begin{aligned} Im = & (DE) \operatorname{sen}[\sigma\Delta x(Nc + 2)] + (EE) \operatorname{sen}[\sigma\Delta x(Nc + 1)] \\ & + (FE) \operatorname{sen}[\sigma\Delta x Nc] + (GE) \operatorname{sen}[\sigma\Delta x(Nc - 1)] \end{aligned}$$

Como  $(G_m)$  es un número imaginario, en la ecuación (5.12a) el módulo será:

$$r_{num} = \frac{[(Re)^2 + (Im)^2]^{1/2}}{(AE)2 \cos(\sigma\Delta x) + (BE)} \quad (5.13)$$

y la fase numérica es:

$$\phi_{num} = \tan^{-1}\left(\frac{Im}{Re}\right) \quad (5.14)$$

Los coeficientes que aparecen en las ecuaciones (5.12-5.13) están definidos por la ecuación (5.2a).

### 5.3.2.2. Función de peso constante

Para este caso, son válidas las expresiones (5.12-5.14), y los coeficientes están definidos por la ecuación (5.3a).

#### 5.4. Estabilidad

Para que el esquema sea estable, se necesita que en la ecuación (5.13) ( $r_{num} \leq 1$ ).

A fin de facilitar la interpretación geométrica de resultados, se utilizarán los siguientes números adimensionales:

$$\bar{L}_m = \frac{L_m}{\Delta x}, \text{ longitud de onda adimensional;} \quad (5.15)$$

$$\sigma_m = \sigma_m \Delta x = \frac{2\pi}{\bar{L}_m}, \text{ número de onda adimensional}$$

Haciendo uso de estos números adimensionales y los definidos en la expresión (5.4), la ecuación (5.8) se transforma en:

$$r_{anal} = \exp(-\rho \sigma_m^2 - \kappa) \quad (5.16)$$

Para encontrar la versión adimensional de  $r_{num}$ , basta con usar la expresión (5.15) en la ecuación (5.13).

#### 5.5. Precisión

Sea  $N_m$  el número requerido de pasos en el tiempo, para que una componente de onda se mueva una longitud de onda ( $L_m$ ) con velocidad ( $v$ ); es decir, se define la relación de amplitud ( $R_m$ ) como (Bentley, *et al.*, 1990):

$$R_m = \left( \frac{r_{num}}{r_{anal}} \right) \quad (5.17)$$

donde  $r_{num}$  está dada por la ecuación (5.13) en su versión adimensional, y  $r_{anal}$  por la ecuación (5.16). De esta forma,  $R_m$  es una medida del error de amplitud de una componente de onda de la solución numérica, después de que una componente de onda analítica se ha movido una longitud de onda.

Si  $R_m > 1$ , la solución numérica no es suficientemente amortiguada.

Si  $R_m < 1$ , la solución numérica presenta difusión.

De ello se deduce que la condición ideal para cualquier método numérico es  $R_m = 1$ .

Por otra parte, se define la relación de fase ( $\Omega_m$ ) como (Bentley, *et al.*, 1990):

$$\Omega_m = -N_m \phi_{num} + N_m \phi_{anal} \Rightarrow \Omega_m = N_m \tan^{-1} \left( \frac{\text{Im}(G_m)_{num}}{\text{Re}(G_m)_{num}} \right) - 2\pi \quad (5.18)$$

Si  $\Omega_m > 0$ , la solución numérica se propaga más rápidamente que la analítica.

Si  $\Omega_m < 0$ , la solución numérica se propaga más lentamente.

De ello se deduce también que la condición ideal para cualquier método numérico es  $\Omega_m = 0$ .

Las ecuaciones (5.13), (5.17), y (5.18) se utilizarán para realizar los retratos de amplitud, de relación de amplitud y relación de fase, respectivamente. De esta forma es posible analizar las características de estabilidad y precisión de las ecuaciones (5.2 y 5.3), en función de los parámetros adimensionales definidos en la expresión (5.4).

### 5.6. Pruebas numéricas

A fin de probar los resultados teóricos obtenidos en este capítulo, se resolverán tres problemas clásicos de transporte. En dos de ellos se conocen a priori las soluciones analíticas, y en el tercero la solución "exacta" es obtenida a través de una aproximación en diferencias finitas usando una malla muy fina.

#### Ejemplo 5.1

El primero de ellos es el problema de transporte de un escalón que se mueve por advección en forma conservativa, con un coeficiente de difusión excesivamente pequeño (el propósito es tener un problema dominado por advección). Matemáticamente, este problema queda descrito como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} &= 0 \\ x \in (-2, 2); \quad t \in \Omega_t &= [0, \infty] \\ c(x, 0) &= \begin{cases} 1; & x \in (-2, 2) \\ 0; & x \notin (-2, 2) \end{cases} \\ c(-2, t) &= 1; \\ c(2, t) &= 0 \end{aligned} \quad (5.19)$$

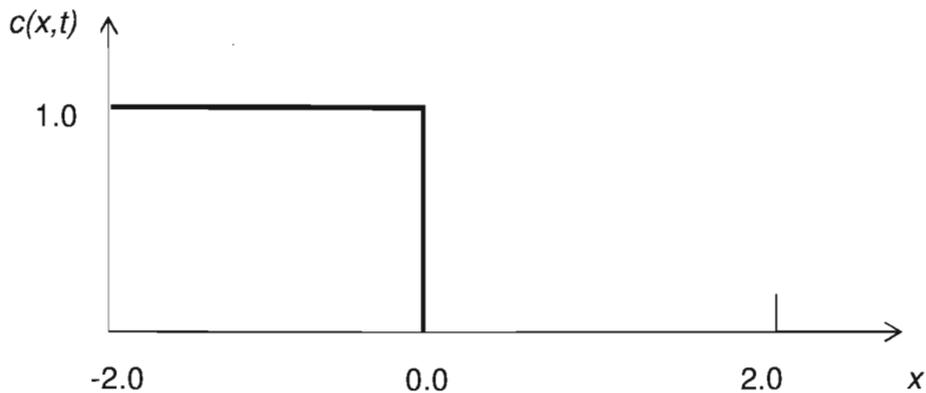


Figura 5.1. Condiciones iniciales para el problema del escalón.

Por el método de separación de variables, la solución analítica es:

$$c(x,t) = 0.5 - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^N \text{sen} \left[ (2k-1) \frac{\pi(x-Vt)}{L} \right] \frac{\exp \left[ -D(2k-1)^2 \pi^2 t / L^2 \right]}{2k-1} \quad (5.20)$$

Los parámetros de flujo considerados son:  $v=1$  y  $D=2 \times 10^{-6}$ . La figura 5.2 muestra la comparación de resultados obtenidos con ELLAM y una solución en diferencias finitas tipo Crank-Nicolson. También se muestran los respectivos errores de amplitud y de fase para ambas metodologías. Se observa que ELLAM, para ambas funciones de peso, da resultados exactos. Esto se muestra en los retratos de amplitud y de fase donde se verifica que no existe error para ninguna longitud de onda. Para el caso de diferencias finitas, eran de esperarse diferencias entre la solución numérica y la solución exacta. De nuevo, esto se verifica en los retratos de amplitud y de fase. Para este caso se observa que pese a no haber errores en la amplitud, existen grandes errores en la fase, donde casi todas las componentes de onda provocan desfases.

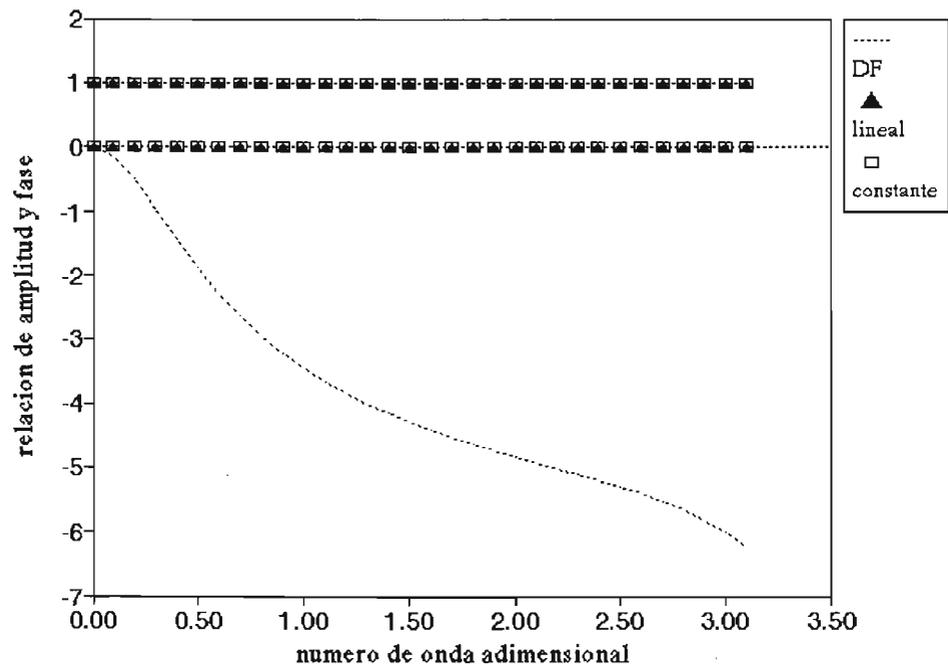
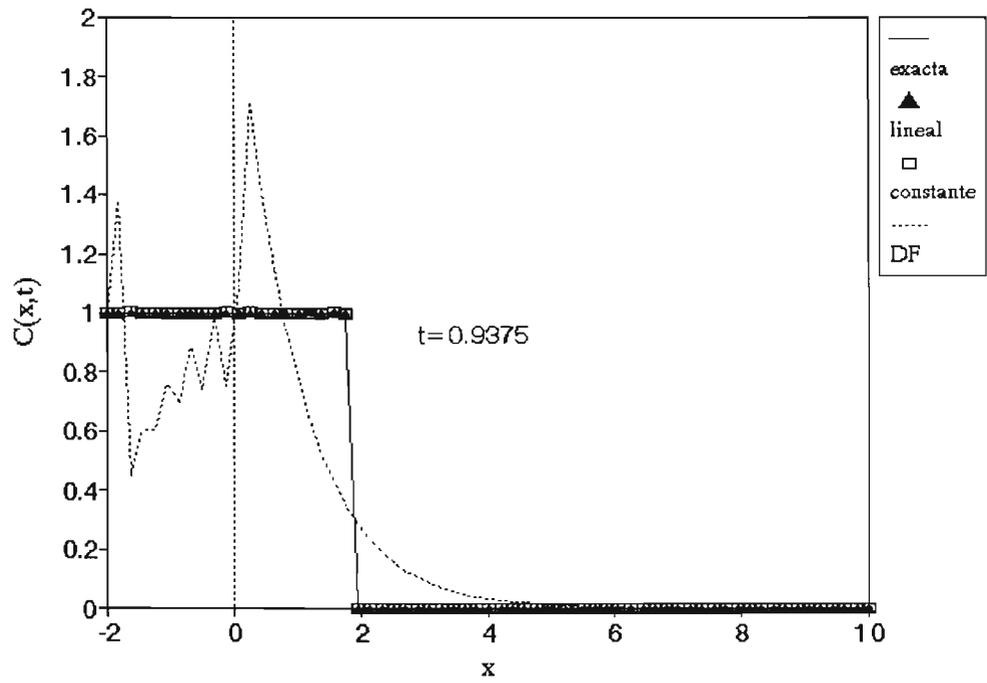


Figura 5.2. Caso conservativo:  $\kappa = 0, \rho = 5.33 \times 10^{-5}, Cr = 5, Pe = 93750$ .

Un dato más sobre este problema, es que para la solución numérica (sin que aparezcan oscilaciones espurias o difusión numérica) a través de un método de diferencias finitas o elemento finito totalmente implícito (incluso Crank-Nicholson), será necesario, en el mejor de los casos ( $Cr=5$ ,  $Pe=2$ ) dividir el espacio en un millón de nodos y el tiempo entre 47,000 incrementos; es decir que debe resolverse un sistema de ecuaciones de un millón de incógnitas 47,000 veces. En cambio, para un método explícito y en el mejor de los casos ( $Cr=1$ ,  $Pe=2$ ) se tendrá que dividir el tiempo entre 235000 incrementos. Esto pone de manifiesto que la solución de problemas de transporte dominados por advección mediante las metodologías tradicionales es prácticamente imposible.

### Ejemplo 5.2

El segundo problema consiste de un transporte reactivo, descrito en forma matemática como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + kc = 0$$

$$x \in (0,50); \quad t \in \Omega_t = [0,25]$$

$$c(x,0) = 0; \quad c(0,t) = 10; \quad \frac{\partial c}{\partial x}(50,t) = 0$$

(5.21)

Los parámetros del flujo son  $v=1$ ,  $D=0.2$  y  $k=0.01$ . En la figura 5.3 se muestran los resultados obtenidos con ELLAM y un método de diferencias finitas tipo Crank-Nicolson. Se observa que ELLAM, para ambas funciones de peso, da resultados casi exactos. Se observa también que las componentes de onda de longitud pequeña no son suficientemente amortiguadas, lo cual provocan que la solución numérica esté ligeramente por encima de la solución exacta. Esto va de acuerdo con los resultados que se muestran en la figura 5.3. De nuevo, ELLAM no tiene errores de fase. Para Crank-Nicolson, los errores en amplitud y de fase son considerables. Esto provoca, de nuevo, que la solución numérica tenga serios problemas de difusión y oscilaciones espurias antes y después del frente de avance.

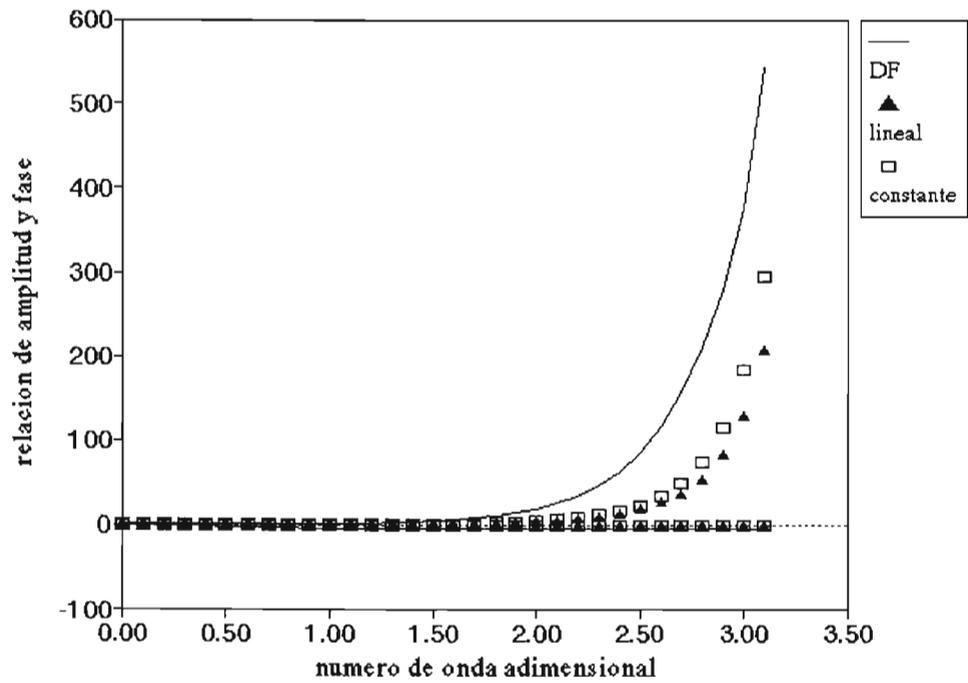
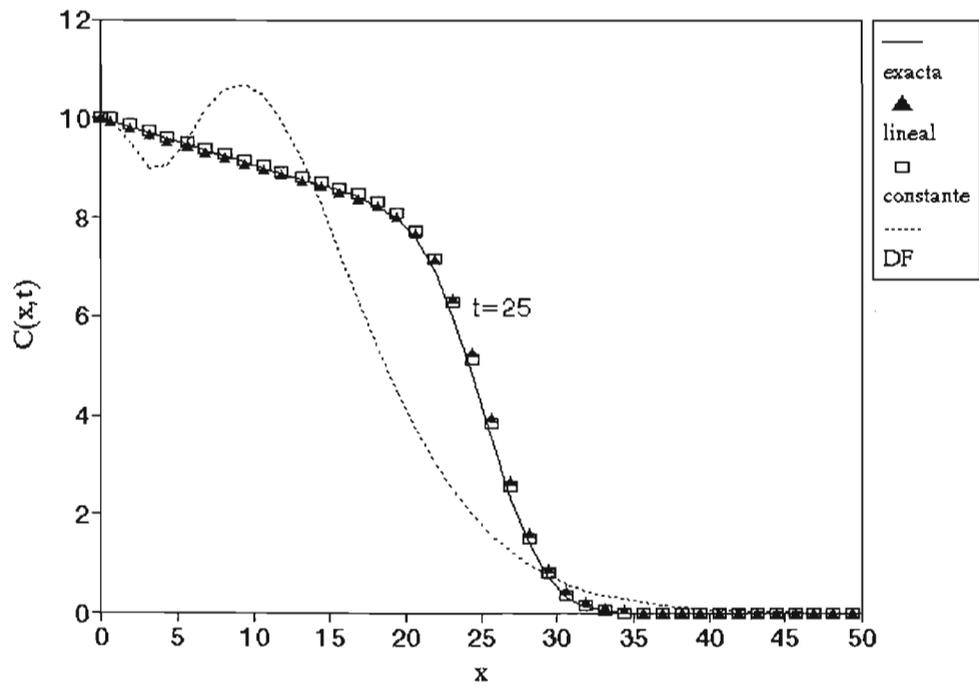


Figura 5.3. Caso no conservativo:  $\kappa = 0.0625, \rho = 0.8, Cr = 5, Pe = 6.25$

Ejemplo 5.3

El tercer problema es un problema con fronteras periódicas descrito matemáticamente por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + kc = 0$$

(5.22)

$$x \in (0,1); \quad t \in \Omega_t = [0,1]$$

$$c(x,0) = \text{Sen}(2\pi x/l); \quad c(0,t) = c(l=1,t) = \text{Sen } t$$

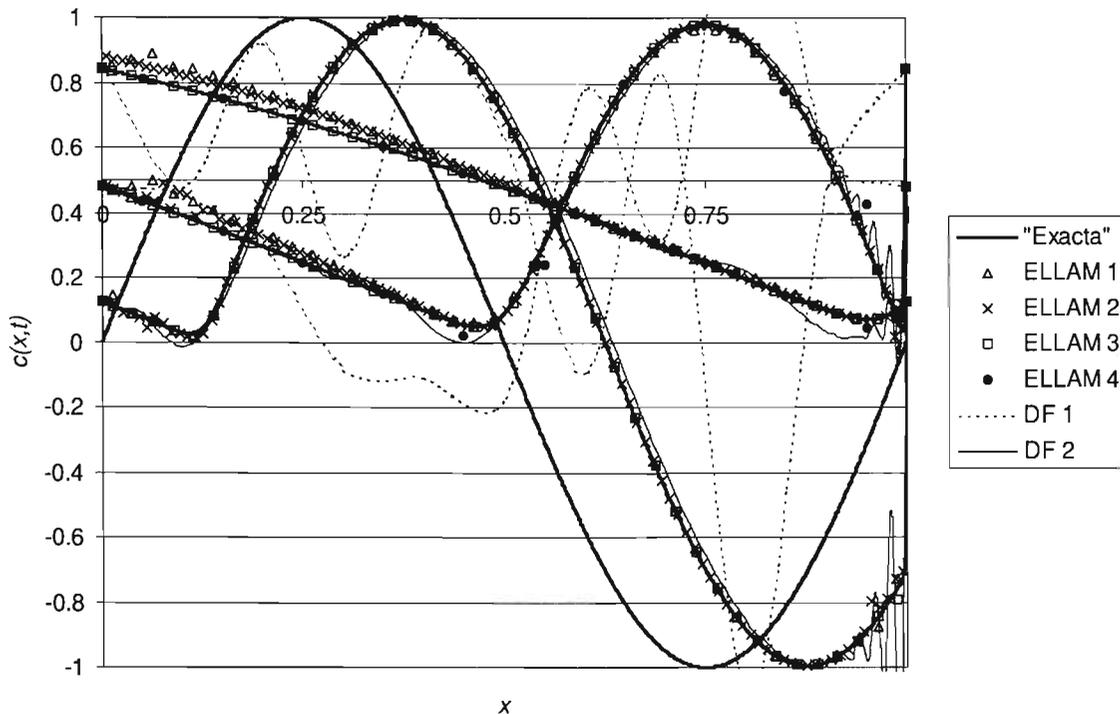


Figura 5.4. Caso no conservativo con funciones periódicas.

Los parámetros del flujo son  $v=1$ ,  $D=0.001$  y  $k=0.0$ . En la figura 5.4 se muestran los resultados obtenidos con ELLAM y un método de diferencias finitas tipo Crank-Nicolson (DF). Por cuestiones de comparación y debido a que no existe solución exacta ésta es sustituida con una solución numérica obtenida con el método de diferencias con una malla muy fina en donde:  $\Delta t=1/100000$ ,  $\Delta x=1/2000$ ,  $Cr=0.02$ , y  $Pe=0.5$ . Las soluciones de ELLAM fueron obtenidas usando funciones de peso constante y cinco mallas diferentes. En ELLAM1  $\Delta t=1/32$ ,  $\Delta x=1/40$ ,  $Cr=1.25$ ,  $Pe=25$ ; en ELLAM2  $\Delta t=1/32$ ,  $\Delta x=1/100$ ,  $Cr=3.125$ ,  $Pe=9.99$ ; en ELLAM3  $\Delta t=1/40$ ,  $\Delta x=1/40$ ,  $Cr=1.00$ ,  $Pe=25.0$ ; y en ELLAM4  $\Delta t=1/10$ ,  $\Delta x=1/10$ ,  $Cr=1.00$ ,

$Pe=10.0$ . En las soluciones para diferencias finitas DF1 y DF2 se usaron las mismas mallas que para ELLAM4 y ELLAM2, respectivamente.

Se observa que las soluciones para ELLAM con  $Cr$  fraccionario (ELLAM1 y ELLAM2) presenta ligeros problema cerca de las fronteras esto es debido a que en el cálculo de las integrales de frontera no se han empleado los puntos estratégicos de integración como son sugeridos en Healy y Rusell, 1993, y no son provocados por las componentes de onda de longitud pequeña. En las soluciones para ELLAM con  $Cr$  entero (ELLAM3 y ELLAM4) esto se corrige debido a que se están usando los puntos estratégicos de integración. Asimismo todas las soluciones en ELLAM no tiene errores de fase. Para la solución en diferencias finitas los errores en amplitud y de fase son considerables, lo cual provoca que la solución numérica tenga serios problemas de difusión y oscilaciones espurias antes y después del frente de avance. Respecto a la densidad de malla, por ejemplo en ELLAM 4 se ha usado un  $\Delta t$  diez mil veces más grande, y un  $\Delta x$  dos mil veces mayor, respecto a la solución "exacta" obtenida con diferencias finitas.

## 5.7. Resumen

En este capítulo se presenta un análisis de la propagación de propiedades numéricas para la solución de la ecuación lineal de advección-difusión-reacción vía ELLAM. Los resultados se comparan con un método en diferencias finitas tipo Crank-Nicolson. Los experimentos numéricos van de acuerdo con el análisis de los retratos de amplitud y de fase.

Se observa que, para ambas funciones de peso, y para el caso conservativo (problema del escalón), ELLAM da soluciones exactas, mientras que para el caso no conservativo los errores en la amplitud son comparables con los de diferencias finitas. Sin embargo, la gran ventaja para este caso, es que ELLAM no tiene errores de fase.

Se ha mostrado que ELLAM es capaz de solucionar de forma exacta problemas fuertemente dominados por advección, en donde las metodologías tradicionales de diferencias finitas y elemento finito fallan porque presentan grandes errores de fase, lo cual hace que las componentes de onda provoquen desfaseamientos en la solución. Esto fue mostrado a través de los retratos de fase y amplitud.

Por otra parte, también se observa que no existen diferencias apreciables en si se usa una función de peso constante o una de tipo lineal. Prácticamente los resultados son los mismos y esto permite que la función de peso constante se prefiera para problemas con coeficientes variables, no lineales y en múltiples dimensiones, ya que la evaluación de las

integrales que aparecen vía ELLAM, sean más sencillas de calcular.

Con estas consideraciones, en el capítulo seis, donde se muestran los desarrollos para solucionar las ecuaciones de transporte y flujo no lineales, la función de peso constante será elegida preferentemente sobre la función de peso lineal.

## 5.8. Referencias

Aldama, A. y A. Aguilar, "Stability analysis of a general Preissmann scheme", *Proc. XI Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 2, 1996, pp. 37-44.

Aldama, A. y V. Arroyo, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the nonlinear advection-diffusion-reaction equation", *Proc. XII Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 2, 1998, pp. 569-576.

Aldama, A. y V. Arroyo, "Propagation properties of Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods", *Proc. XIII Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 2, 2000, pp. 597-601.

Aldama, A. y J. Aparicio, "The effect of nonlinearities in the stability of numerical solutions of Richards equations", *Proc. XII Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 1, 1998, pp. 289-296.

Aldama, A. y C. Paniconi, "An analysis of the convergence of Picard iterations for implicit approximations of Richards equations", *Proc. IX Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 2, 1992, pp. 521-528.

Bentley, L.R., Aldama, A., y G. F. Pinder, "Fourier analysis of the Eulerian-Lagrangian least squares collocations method", *Int. Jour. for numerical methods in fluids* 11, 1990, pp. 427-444.

Binining, P. y M. Celia, "A finite volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method of the contaminant transport equations in two-dimensional multiphase flow systems", *Water Res. Res.*, 32(1), 1996, pp.103-114.

Celia, M., T. Russell, I. Herrera, y R. Ewing, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation", *Adv. Water Res.*, 13, 1990, pp.187-206.

Celia, M. y S. Zisman, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for reactive transport in groundwater", *Comput. Meth. Water Res. VIII*, Gambolati *et al.* eds, 1990.

Healy, R. W., y T. F. Rusell, "A finite\_Volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solution of the advection-diffusion equation, *Water Res. Res.*, 26(7), 1993, pp. 2399-2413.

Herrera, G. e I. Herrera, "Eulerian-lagrangian methods of cells based on localized adjoint method", *Num. Meth, Partial Diff. Eqns.*, (10), 1993, pp. 205-223.

# CAPÍTULO 6

## SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE Y FLUJO NO LINEALES VÍA ELLAM

### **Introducción**

En este capítulo se presentan las soluciones de las ecuaciones no lineales de advección-difusión-reacción y de la ecuación de Richards. Para ello, se utilizarán las versiones linealizadas obtenidas en el capítulo 4. Como estas ecuaciones son lineales, es posible aplicar ELLAM tal y como fue mostrado en el capítulo tres. En este capítulo se analizarán las ventajas y desventajas de aplicar ELLAM a problemas no lineales, así como las diferencias en el uso de las técnicas de linealización tradicionales de Picard y de las obtenidas a través de expansiones Taylor-Fréchet. Se analizarán varios ejemplos de interés práctico de flujo de agua y transporte no lineales en suelos.

## 6.1. Ecuación de transporte reactivo no lineal

### 6.1.1. En una dimensión

#### 6.1.1.1. Linealización tipo Picard

En el **subinciso 4.1.2 del capítulo 4** se mostró que la ecuación de transporte no lineal, a través de una técnica de linealización tipo Picard no iterativo, se escribe como:

$$N(c) \equiv \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + v \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} + k(c(x^*, t^n))c(x,t) = f(x,t) \quad (6.1)$$

donde ahora  $N(c)$  es un operador lineal y, por lo tanto, ELLAM puede aplicarse para solucionar la ecuación (6.1).

La primera forma débil de la ecuación (6.1) es:

$$\int_0^\infty \int_0^L [N(c) - f] w(x,t) dx dt = 0 \quad (6.2)$$

la cual corresponde a la **ecuación (3.3) del capítulo 3**. Por lo tanto, el desarrollo que sigue es igual al mostrado en ese capítulo donde se pueden usar una función de peso lineal o una de peso constante. Si se requiere implementar un procedimiento iterativo, la ecuación (6.1) y (6.2) siguen siendo válidas, con la salvedad de que ahora la ecuación (6.2) se resuelve para cada iteración.

Como se observa, la linealización tipo Picard ofrece una manera muy fácil y directa de aplicar ELLAM a la ecuación de transporte no lineal. Las ventajas y desventajas de usar esta técnica serán mostradas más adelante, en los ejemplos de aplicación.

#### 6.1.1.2. Linealización tipo Taylor-Fréchet

La ecuación (4.8) del capítulo 4 muestra la linealización de la ecuación de transporte reactivo usando una expansión Taylor-Fréchet, la cual está dada por:

$$\tilde{N}(\tilde{c}) = -N(\bar{c}) + f(x,t) \quad (6.3)$$

donde  $\tilde{N}(\cdot)$  es un operador lineal definido por la ecuación (4.7).

El procedimiento que se desarrolla a continuación se basa en en el trabajo de Aldama y Arroyo (1998).

La primera forma débil de la ecuación (6.3) es:

$$\int_0^T \int_0^L \tilde{N}(\tilde{c}) w(x,t) dx dt = - \int_0^T \int_0^L N(\bar{c}) w(x,t) dx dt + \int_0^T \int_0^L f(x,t) w(x,t) dx dt \quad (6.4)$$

donde  $w(x,t)$  es la función de peso. La ecuación (6.4) puede resolverse usando una función de peso lineal o constante.

Por ejemplo, para el caso de usar una función de peso lineal se procede de la forma siguiente. Consideremos el dominio  $\Omega$  subdividido en un número de subdominios  $\Omega_i^{n+1} = [x_{i-1}, x_{i+1}] \times [t^n, t^{n+1}] \equiv [(i-1)\Delta x, (i+1)\Delta x] \times [n\Delta t, (n+1)\Delta t]$ , donde  $i$  y  $n$  son enteros. De esta forma, asumiendo que  $w = w_i^{n+1}$  sea nula fuera de  $\Omega_i^{n+1}$ . Al integrar por partes dos veces la ecuación (6.4), se obtiene:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \tilde{c}(x, t^{n+1}) w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \tilde{c}(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\ & - D \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \tilde{c}(x'_i(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_i(t)} dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \tilde{c}(x'_c(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_c(t)} dt \right. \\ & \left. + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \tilde{c}(x'_r(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r(t)} dt \right] + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \tilde{c}(x, t) N'(w_i^{n+1}) dx dt = \\ & - \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \bar{c}(x, t^{n+1}) w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) dx + \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \bar{c}(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\ & + D \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \bar{c}(x'_i(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_i(t)} dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \bar{c}(x'_c(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_c(t)} dt \right. \\ & \left. + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \bar{c}(x'_r(t), t) \left\langle \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} \right\rangle_{x_r(t)} dt \right] - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \bar{c}(x, t) N'(w_i^{n+1}) dx dt \\ & - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} k'(\bar{c}) \bar{c}^2 w_i^{n+1} dx dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, t) w_i^{n+1} dx dt \end{aligned} \quad (6.5)$$

El primer miembro de la ecuación (6.5) se expresa, para cada instante, en términos de la función de corrección  $\tilde{c}$  (incógnita), y el miembro de la derecha en términos de la función de referencia  $\bar{c}$  (que es conocida). Si se emplea una estrategia no iterativa, la ecuación (6.5) se resuelve directamente para  $\tilde{c}$ , mientras que si el algoritmo (4.9) del capítulo 4 es usado para aplicar un procedimiento iterativo, la ecuación (6.5) debe

aplicarse para encontrar  $\tilde{\alpha}$  en las respectivas iteraciones. En la ecuación (6.5) el símbolo  $\langle \cdot \rangle$  representa el "operador salto", definido como:  $\langle \cdot \rangle_{x_i} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [(\cdot)_{x_i+\varepsilon} - (\cdot)_{x_i-\varepsilon}]$ . Además, en esta misma ecuación el operador adjunto es  $N^*(\cdot) = -(\cdot)_t - v(\cdot)_x - D(\cdot)_{xx} - \tilde{k}(\bar{c})(\cdot)$ . En ELLAM, la función de peso  $w_i^{n+1}(x,t)$  se determina de tal forma que la ecuación adjunta  $N^*(w_i^{n+1}) = 0$  se satisfaga. La estrategia usada por Celia y Zisman (1990) sugiere dividir el operador  $N^*(\cdot)$  en su parte advectiva-reactiva y su parte difusiva; de esta forma, se debe encontrar  $w_i^{n+1}$  tal que:  $(w_i^{n+1})_t + v(w_i^{n+1})_x - \tilde{k}(\bar{c})w_i^{n+1} = 0$  y  $(w_i^{n+1})_{xx} = 0$ . No se puede encontrar una solución exacta de este sistema de ecuaciones. La solución empleada en este trabajo es similar a una usada por Celia y Zisman (1990), de tal forma que  $N^*(w_i^{n+1}) = O(\Delta t^2)$  (ver comprobación en el anexo G), donde la función de peso es:

$$w_i^{n+1} = \begin{cases} \left( \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x} + v \frac{t^{n+1} - t}{\Delta t} \right) \exp \left[ \int_{t^n}^t \tilde{k}(\bar{c}) d\tilde{t} \right]; & (x,t) \in [x_{i-1}, x_i] \times [t^n, t^{n+1}] \\ \left( \frac{x_{i+1} - x}{\Delta x} - v \frac{t^{n+1} - t}{\Delta t} \right) \exp \left[ \int_{t^n}^t \tilde{k}(\bar{c}) d\tilde{t} \right]; & (x,t) \in [x_i, x_{i+1}] \times [t^n, t^{n+1}] \\ 0 \text{ de otra forma.} \end{cases} \quad (6.6)$$

En la ecuación (6.6), el símbolo  $\tilde{t}$  representa una variable muda de integración. Considerando lo anterior en cuanto a la forma de aproximar el operador adjunto, las integrales en ambos miembros de la ecuación (6.5) son similares a las integrales de la (3.6), del capítulo 3. Por lo tanto, de aquí en adelante el procedimiento es el mismo, por lo que el lector deberá referirse, para el cálculo de las integrales, al subinciso 3.3.4 del capítulo 3.

Para el caso de usar una función de peso constante, el procedimiento a seguir es el siguiente: considérese el dominio  $\Omega$ , subdividido en un número de subdominios  $\Omega_i^{n+1} = [x_{i-(1/2)}, x_{i+(1/2)}] \times [t^n, t^{n+1}] \equiv [(i-(1/2))\Delta x, (i+(1/2))\Delta x] \times [n\Delta t, (n+1)\Delta t]$ , donde  $i$  y  $n$  son enteros. De esta forma, asumiendo que  $w = w_i^{n+1}$  sea nula fuera de  $\Omega_i^{n+1}$ , al integrar por partes una sola vez la ecuación (6.4), se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} \tilde{c}(x, t^{n+1}) w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} \tilde{c}(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left[ v\tilde{c} - D \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \right] \bullet \eta(\mathbf{x}) w_i^{n+1}(x, t) dS dt \\
 & - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} D \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} \tilde{c}(x, t) N_{v-k}^*(w_i^{n+1}) dx dt = \\
 & - \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} \bar{c}(x, t^{n+1}) w_i^{n+1}(x, t^{n+1}) dx + \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} \bar{c}(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\
 & - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left[ v\bar{c} - D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right] \bullet \eta(\mathbf{x}) w_i^{n+1}(x, t) dS dt \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \frac{\partial w_i^{n+1}}{\partial x} - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} \bar{c}(x, t) N_{v-k}^*(w_i^{n+1}) dx dt \\
 & - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} k'(\bar{c}) \bar{c}^2 w_i^{n+1} dx dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-(1/2)}^{x_{i+(1/2)}} f(x, t) w_i^{n+1} dx dt \tag{6.7}
 \end{aligned}$$

$dS$  indica un diferencial sobre  $\partial\Omega$ , y  $\eta(\mathbf{x})$  es el vector unitario, normal a  $\partial\Omega$ . En una dimensión, este vector consta de dos puntos. En general, esta integral representará flujos de frontera y será no nula solamente cerca de la frontera, y cuando las líneas características crucen a éstas.

De nuevo, el primer miembro de la ecuación (6.7) se expresa, para cada momento, en términos de la función de corrección  $\tilde{c}$  (incógnita), y el miembro de la derecha en términos de la función de referencia  $\bar{c}$  (que es conocida). Si se emplea una estrategia no iterativa, la ecuación (6.7) se resuelve directamente para  $\tilde{c}$ , mientras que si el algoritmo (4.9) del capítulo 4 es usado para aplicar un procedimiento iterativo, la ecuación (6.7) debe aplicarse para encontrar  $\tilde{c}$  en las respectivas iteraciones.

Además, en esta misma ecuación,  $N_{v-k}^*(\cdot) = -(\cdot)_t - v(\cdot)_x - \tilde{k}(\bar{c})(\cdot)$  representa la parte advectiva-reactiva del operador adjunto  $N^*(\cdot) = -(\cdot)_t - v(\cdot)_x - D(\cdot)_{xx} - \tilde{k}(\bar{c})(\cdot)$ . La función de peso  $w_i^{n+1}(x, t)$  se determina de tal forma que la ecuación  $N^*(w_i^{n+1}) = 0$  se satisfaga. Una alternativa es usar una función de peso que sea constante en el espacio y varíe exponencialmente en el tiempo. Por lo tanto, una función que satisfaga estos requerimientos quedará definida por:

$$w_i^{n+1} = \begin{cases} \exp\left[\int_{t^n}^t \tilde{k}(\bar{c}) d\tilde{t}\right]; (x, t) \in [x_{i-(1/2)}, x_{i+(1/2)}] \times [t^n, t^{n+1}] \\ 0 \text{ de otra forma.} \end{cases} \quad (6.8)$$

Sustituyendo la ecuación (6.8) en la (6.7), y utilizando una aproximación implícita para las integrales temporales, se obtiene:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} \bar{c}(x, t^{n+1}) \exp(\tilde{k}(\bar{c})\Delta t) dx - \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} \bar{c}(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\ & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega^-} \left[ v\bar{c} - D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right] \bullet \eta(x) w_i^{n+1}(x, t) dS dt - \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} D \frac{\partial \bar{c}(x, t^{n+1})}{\partial x} \frac{\partial w_i^{n+1}(x, t^{n+1})}{\partial x} \Delta t(x) dx = \\ & - \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} \bar{c}(x, t^{n+1}) \exp(\tilde{k}(\bar{c})\Delta t) dx + \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} \bar{c}(x, t^n) w_i^{n+1}(x, t^n) dx \\ & - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega^-} \left[ v\bar{c} - D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right] \bullet \eta(x) w_i^{n+1}(x, t) dS dt + \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} D \frac{\partial \bar{c}(x, t^{n+1})}{\partial x} \frac{\partial w_i^{n+1}(x, t^{n+1})}{\partial x} \Delta t(x) dx \\ & - \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} k'(\bar{c}(x, t^{n+1})) \bar{c}^2(x, t^{n+1}) \exp(\tilde{k}(\bar{c})\Delta t) \Delta t(x) dx + \int_{x_{i-(1/2)}}^{x_{i+(1/2)}} f(x, t^{n+1}) \exp(\tilde{k}(\bar{c})\Delta t) \Delta t(x) dx \end{aligned} \quad (6.9)$$

Obsérvese que la ecuación (6.9) es similar en ambos miembros a la ecuación (3.43) del capítulo 3. Por lo tanto, el desarrollo que sigue es igual al mostrado en ese capítulo. Así, el lector deberá referirse al procedimiento desde la ecuación (3.43) en adelante.

### 6.1.1.3. Ejemplos de aplicación

#### Ejemplo 6.1

A continuación se describe la solución numérica para un problema no lineal ADR, descrito por la ecuación (4.1) del capítulo 4. El dominio espacio-tiempo  $\Omega_{x,t}$  está definido por  $L=56$  y  $T=56$ . La condición inicial y las condiciones de frontera son:  $c(x,0)=3, c(0,t)=3$  y  $c_x(56,t)=0$ . La velocidad y el coeficiente de difusión son:  $v=1$ , y  $D=0.2$ . La función de decaimiento no lineal está dada por:  $k(c) = (0.1c)/(0.1+c)$ .

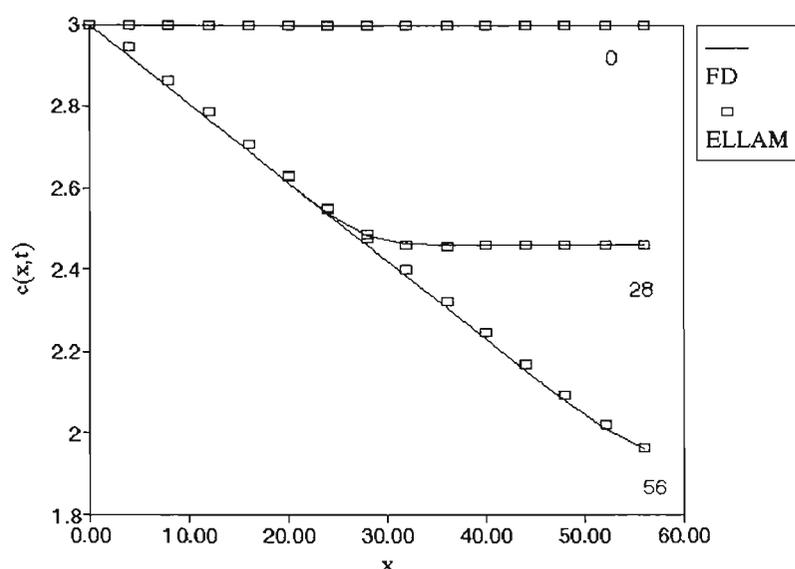


Figura 6.1a. Comparación entre una solución en diferencias finitas (FD) usando una malla fina, y la solución Taylor-Fréchet ELLAM (ELLAM). Los números cerca de las curvas indican valores del tiempo  $t$ .

Los resultados se comparan con una solución en diferencias finitas explícita, centrada en el espacio, donde se empleó una malla muy fina para asegurar que estos resultados puedan tomarse como la "solución exacta". Para el esquema explícito, el incremento en el espacio fue de 0.04 y el intervalo 0.0035. De esta forma los números de Courant y de Péclét fueron de 0.0875 y 0.2, respectivamente. Para el procedimiento Taylor-Fréchet ELLAM, el incremento espacial fue de 4 y el incremento en el tiempo también de 4. Los números de Courant y de Péclét fueron de 1 y 20, respectivamente. Como se observa en la figura 6.1a, existe una correspondencia muy satisfactoria entre ambos resultados. Si los resultados se visualizan en términos de la densidad de la malla, la malla que se usa en Taylor-Fréchet ELLAM en relación a diferencias finitas es 100 veces menos densa en el espacio y 1,142 menos densa en el tiempo.

A continuación se resuelven tres ejemplos donde se comparan las técnicas descritas de linealización. La linealización tipo Picard será referida como (Picard ELLAM) y la linealización Taylor-Fréchet será referida como (Taylor-Fréchet ELLAM). Los dos primeros ejemplos (6.2 y 6.3) resuelven el caso de una sola ecuación del tipo (4.1), mientras que el último ejemplo (6.3) resuelve un sistema de ecuaciones para simular el proceso de transporte con biodegradación de dos sustancias (Anexo F).

*Ejemplo 6.2*

El dominio espacio-tiempo  $\Omega_{x,t}$  está definido por  $L=12$  y  $T=6$ . La condición inicial y las condiciones de frontera son:  $c(x,0) = 0$ ,  $c(0,t) = 10$  y  $c_x(12,t) = 0$ . La velocidad y el coeficiente de difusión son:  $v=1$ , y  $D=0.1$ . La función de decaimiento no lineal está dada por:  $k(c) = c/(0.1+c)$ .

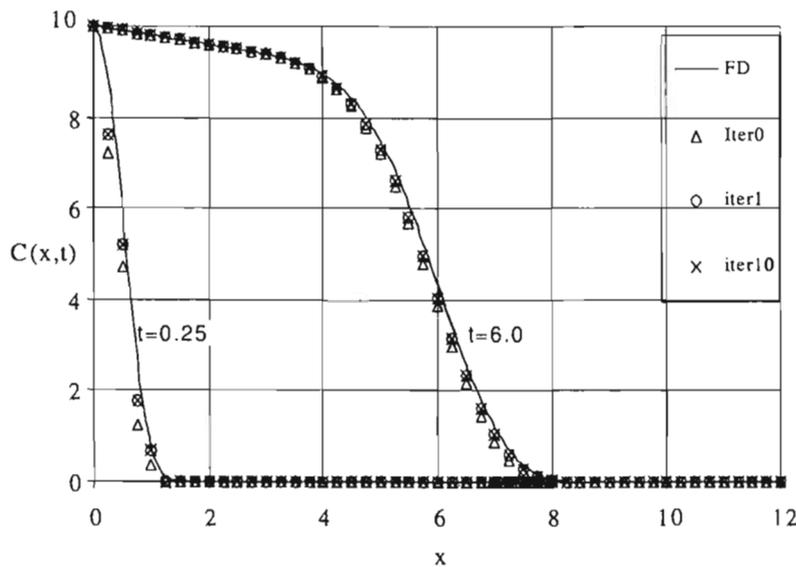


Figura 6.2a. Resultados del ejemplo 6.2 para Picard ELLAM.

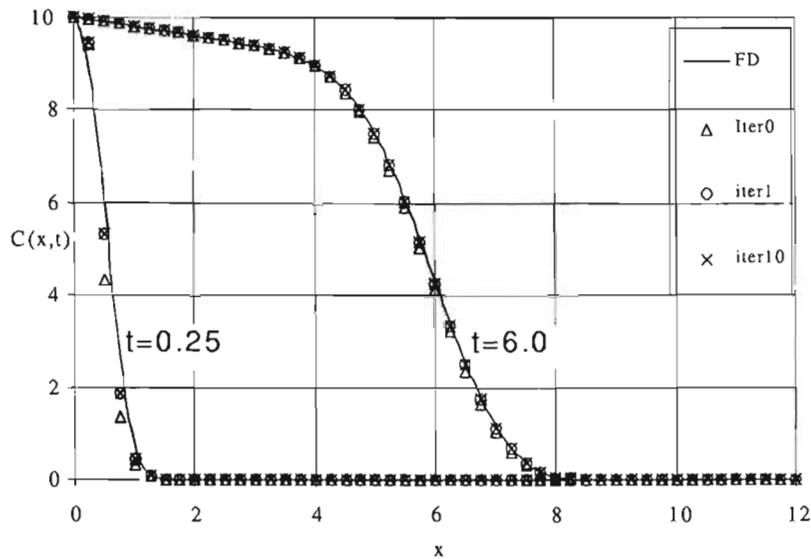


Figura 6.2b. Resultados del ejemplo 6.2 para Taylor-Fréchet ELLAM.

Los resultados fueron comparados con una solución en diferencias finitas explícita (FD), centrada en el espacio, donde se empleó una malla muy fina para asegurar que estos resultados puedan tomarse como la "solución exacta". Para el esquema explícito, el incremento en el espacio fue de 0.05 y el intervalo de 0.0025. De esta forma, los números de Courant y de Péclet fueron 0.05 y 0.5, respectivamente. Para el procedimiento Picard ELLAM (figura 6.2a) y Taylor-Fréchet ELLAM (figura 6.2b), el incremento espacial fue de 0.25 y el incremento en el tiempo de 0.25. Los números de Courant y de Péclet fueron de 1 y 2.5, respectivamente.

### Ejemplo 6.3

El dominio espacio-tiempo  $\Omega_{x,t}$  está definido por  $L=12$  y  $T=6$ . La condición inicial y las condiciones de frontera son:  $c(x,0) = 3$ ,  $c(0,t) = 3$  y  $c_x(12,t) = 0$ . La velocidad y el coeficiente de difusión son:  $v=1$  y  $D=0.025$ . La función de decaimiento no lineal está dada por:  $k(c) = 2c/(0.1+c)$ .

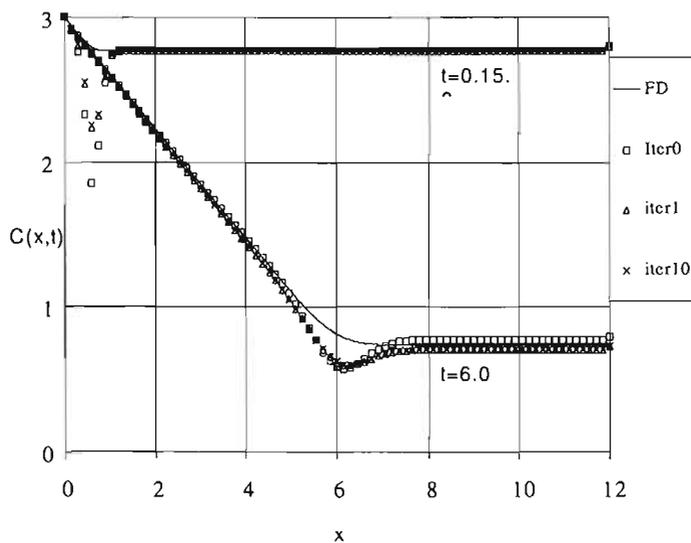


Figura 6.3a. Resultados del ejemplo 6.3 para Picard ELLAM.

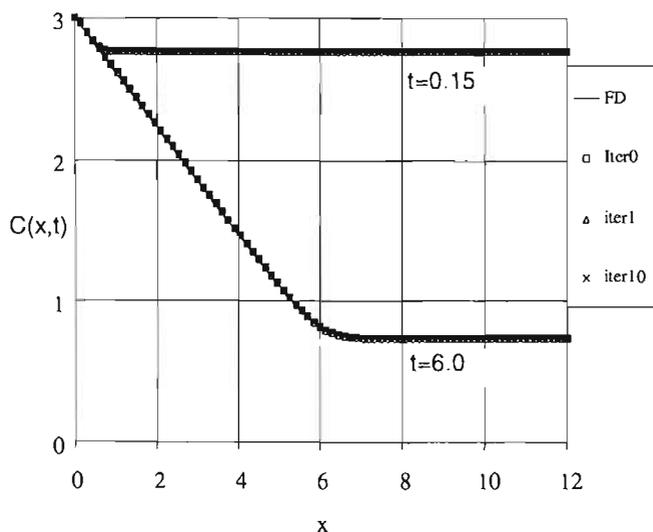


Figura 6.3b. Resultados del ejemplo 6.3 para Taylor-Fréchet ELLAM.

De nuevo, los resultados fueron comparados con una solución en diferencias finitas explícita(FD), centrada en el espacio, donde se empleó una malla muy fina para asegurar que estos resultados puedan tomarse como la "solución exacta". Para el esquema explícito, el incremento en el espacio fue de 0.0125 y el intervalo de 0.00125. De esta forma, los

números de Courant y de Péclet fueron de 0.01 y 0.5, respectivamente. Para el procedimiento Picard ELLAM (figura 6.3a) y Taylor-Fréchet ELLAM (figura 6.3b), el incremento espacial fue de 0.15 y el incremento en el tiempo de 0.15. Los números de Courant y de Péclet fueron de 1 y 6, respectivamente.

#### Ejemplo 6.4

La caracterización numérica es:

$$C_1(z,t) = 3mg / lt, \quad 0 \leq z \leq L = 100m, \quad t = 0$$

$$C_2(z,t) = 0mg / lt, \quad 0 \leq z \leq L = 100m, \quad t = 0$$

$$C_1(z,t) = 3mg / lt, \quad z = 0, \quad t > 0$$

$$C_2(z,t) = 10mg / lt, \quad z = 0, \quad t > 0$$

$$\frac{\partial C_1(z,t)}{\partial z} = 0, \quad z = 100, \quad t > 0$$

$$\frac{\partial C_2(z,t)}{\partial z} = 0, \quad z = 100, \quad t > 0$$

La velocidad y el coeficiente de difusión son

$$v = 1m / día$$

$$D = 0.2m^2 / día$$

Los parámetros de decaimiento no lineal están dados por:

$$V_m^i = 1 / día ; i = 1,2$$

$$K_h^i = 0.1mg / lt; i = 1,2$$

$$\kappa_{12} = 2$$

$$\kappa_{21} = 0.5$$

$$B_1 = 0.2mg / lt$$

Para más detalle de estos parámetros ver el Anexo F.

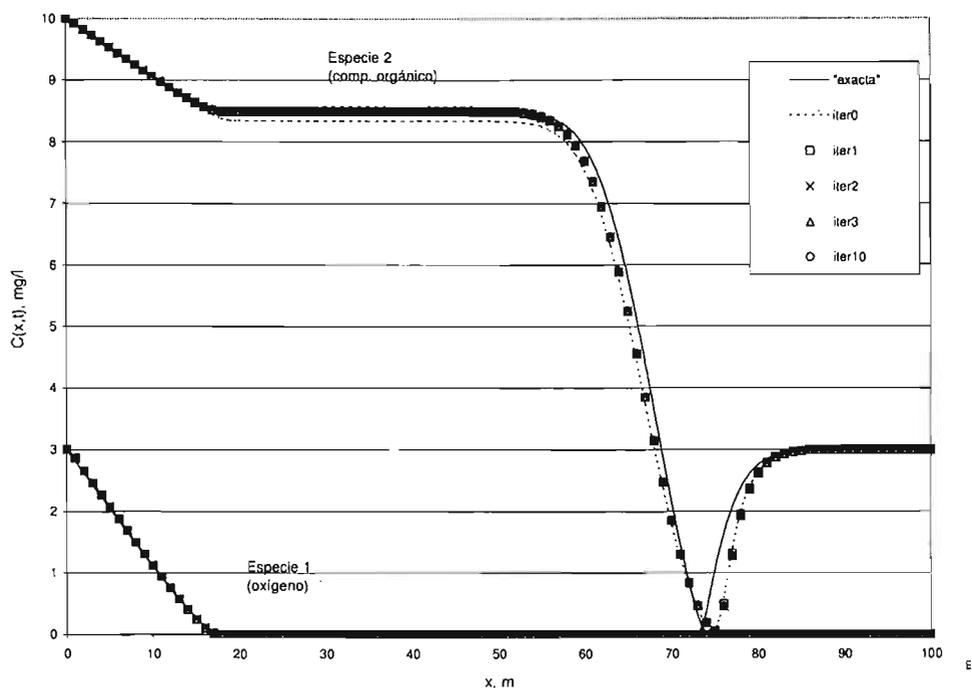


Figura 6.4. Resultados del ejemplo 6.4 para Taylor-Fréchet ELLAM,  $t = 68$  días.

	iter 0	iter1	iter2	iter3	iter10
<b>Gauss-Seidel</b> (Vag <i>et al.</i> , 1996)					
$\lambda = 0.5$	8.29638	8.42899	8.44523	8.44640	8.44753
$\lambda = 0.6$	8.31282	8.47270	8.49535	8.49712	8.49980
<b>Taylor-Fréchet ELLAM</b>	8.34168	8.48527	8.50314	8.50831	8.51072

Cuadro 6.1. Comparación de resultados para el ejemplo 6.4.

La interpretación física de los resultados es como sigue: inicialmente hay una concentración de 3 mg/l de oxígeno disuelto (especie 1), con una población constante de microorganismos (0.2mg/l). Estos microorganismos, al tomar por alimento al contaminante orgánico, empiezan a metabolizarlo de tal forma que sus requerimientos de oxígeno empiezan a ser mayores. Por lo tanto, cuando el contaminante empieza a moverse, los microorganismos comienzan a consumir simultáneamente los dos componentes.

El valor de  $\kappa_{12}=2$  significa que se consumirán dos unidades de oxígeno por cada unidad de compuesto orgánico. Es decir, como la concentración inicial de oxígeno es 3, esto sugiere que para un estado permanente, cuando la concentración del oxígeno sea nula, el valor del contaminante tendrá una concentración de 8.5. Como no existe solución exacta para tal

problema, este valor de 8.5 se podrá usar como una verificación para conocer la aproximación de la solución numérica. Asimismo en la figura 6.4 la solución “exacta” es obtenida a través de un esquema en diferencias finitas usando una malla muy fina con un incremento espacial de 0.125, y un incremento en el tiempo de 0.001. Los números de Courant y de Péclet fueron de 0.008 y 0.625 respectivamente.

Los resultados también se comparan con los reportados por (Vag *et al.*, 1996). Aquí se toma el criterio de que para un estado permanente, en donde el oxígeno ha sido consumido por completo, el contaminante orgánico toma un valor de 8.5. Por ello, en el cuadro 6.1 se muestran los valores de la concentración de la especie 2 para esta condición comparándolos con la técnica propuesta (Taylor-Fréchet ELLAM) con los mejores resultados obtenidos con una técnica de linealización Gauss-Seidel (G-S) y que son reportados en Vag *et al.*, 1999. En la figura 6.4 también se muestran los resultados obtenidos con Taylor-Fréchet ELLAM, donde el número delante de la leyenda “iter” indica el número de iteraciones realizadas. En todos estos resultados el incremento espacial fue de 1.0 y el incremento en el tiempo de 1.7. Los números de Courant y de Péclet fueron de 1.7 y 5 respectivamente. Como puede observarse en la figura 6.4, los resultados muestran un comportamiento muy aceptable (incluso en el procedimiento no iterativo) de acuerdo con lo mencionado anteriormente.

#### **6.1.1.4. Conclusiones**

Se presentó una comparación de la técnica de linealización tipo Picard, con la técnica de linealización Taylor-Fréchet, para resolver la ecuación de advección-difusión-reacción no lineal a través de ELLAM. La comparación se ilustra a través de tres ejemplos en donde uno de ellos es un sistema de dos ecuaciones que describen un proceso de biodegradación aerobia. En los ejemplos 6.2 y 6.3 se muestra la ventaja de la técnica propuesta cuando se compara con una técnica de linealización clásica tipo Picard, en donde se usa una aproximación del tipo:  $k(O_i^{n+1}) \approx k(O_i^n)$ . La diferencia se muestra sobre todo en el ejemplo 6.3, en donde la linealización tipo Picard presenta problemas de convergencia. En el ejemplo 6.4 la comparación se hace con una técnica de linealización Gauss-Seidel en donde las aproximaciones se hacen siguiendo las líneas características. Los resultados de la técnica desarrollada en esta tesis son mejores para procedimientos no iterativos, o con pocas iteraciones. La metodología puede ser aplicada a cualquier sistema ADR no lineal.

### 6.1.2. En dos dimensiones

Considérese la ecuación de advección-difusión-reacción no lineal, en dos dimensiones, escrita en forma vectorial como:

$$\ell(c) \equiv \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}c - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c) + k(c)c = f, (x, y) \in \Omega, t \in [0, T] \quad (6.10)$$

Sujeta a cualquiera de las siguientes condiciones de frontera y a la condición inicial:

$$\begin{aligned} c(x, y, t) &= h_1(x, y, t), \\ -\mathbf{D}\nabla c \cdot \boldsymbol{\eta} &= h_2(x, y, t), \\ [\mathbf{v}c - \mathbf{D}\nabla c] \cdot \boldsymbol{\eta} &= h_3(x, y, t), (x, y) \in \partial\Omega, t \in (0, T] \\ c(x, y, 0) &= C_0, (x, y) \in \Omega \end{aligned} \quad (6.10a)$$

donde  $c$  es la concentración del soluto;  $\mathbf{v}$ , el vector de velocidades;  $\mathbf{D}$ , es tensor de dispersión;  $k$ , un coeficiente de decaimiento de primer orden, el cual es una función no lineal de la concentración;  $\boldsymbol{\eta}$ , es un vector unitario perpendicular a la frontera  $\partial\Omega$  y  $f$  es una función que representa la pérdida o ganancia de masa.

#### Linealización tipo Picard

De manera análoga que en la ecuación (6.1), una técnica de linealización tipo Picard transforma la ecuación (6.10) en:

$$\ell(c) \equiv \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}c - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c) + k(c^*)c = f, (x, y) \quad (6.11)$$

donde  $c^* = c(x^*, y^*, t^n)$  indica que el coeficiente  $k$  está evaluado en un valor previo en el tiempo (o iteración), siguiendo las líneas características. De acuerdo con ello, el operador en la ecuación (6.11) es lineal.

La primera forma débil de la ecuación (6.11) es

$$\int_0^\infty \int_\Omega [\ell(c) - f] w(x, t) d\Omega dt = 0 \quad (6.12)$$

donde se observa que esta ecuación es análoga a la (3.84) del capítulo 3. Por lo tanto, el procedimiento que sigue es como se muestra desde la ecuación (3.84) en adelante.

Linealización tipo Taylor-Fréchet

Una expansión tipo Taylor-Fréchet en el operador no lineal  $\ell(\bullet)$  de la ecuación (6.10) será:

$$\ell(\bar{c} + \check{c}) = \ell(\bar{c}) + d\ell(\check{c}; \bar{c}) + O(\|\check{c}\|^2) + f(x, y) \quad (6.13)$$

donde  $d\ell(\check{c}; \bar{c})$  es la derivada de Fréchet de primer orden del operador  $\ell(\cdot)$ , la cual, por definición, es un operador lineal en  $\check{c}$  y depende paramétricamente de  $\bar{c}$ . Si en la ecuación (6.13) se desprecian los términos de orden  $\check{c}^2$ , la ecuación se transforma en:

$$d\ell(\check{c}; \bar{c}) = -\ell(\bar{c}) + f(x, y) \quad (6.14)$$

De manera análoga a como se desarrolló en el inciso 4.1.3 del capítulo 4, se comprueba que la ecuación (6.14) se transforma en:

$$\frac{\partial \check{c}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v} \check{c} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \check{c}) + \tilde{k}(\bar{c}) \check{c} = -\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{v} \bar{c} + \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \bar{c}) - k(\bar{c}) \bar{c} + f(x, y) \quad (6.15)$$

donde  $\tilde{k}(\bar{c}) = k(\bar{c}) + k'(\bar{c})\bar{c}$ . La ecuación (6.15) es lineal en  $\check{c}$ , por lo que ELLAM puede ser aplicado.

La primera forma débil de la ecuación (6.15) es:

$$\int_{\Omega} \int_0^T \left[ \frac{\partial \check{c}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v} \check{c} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \check{c}) + \tilde{k}(\bar{c}) \check{c} \right] w d\Omega dt = \int_{\Omega} \int_0^T \left[ -\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{v} \bar{c} + \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \bar{c}) - k(\bar{c}) \bar{c} + f(x, y) \right] w d\Omega dt \quad (6.16)$$

la cual es similar, en ambos miembros, a la ecuación (3.85) del capítulo 3. Por lo tanto, el procedimiento que sigue es como se indica a partir de la ecuación (3.85).

El primer miembro de la ecuación (6.16) se expresa, para cada paso en el tiempo, en términos de la función de corrección  $\check{c}$  (incógnita), y el miembro de la derecha en términos de la función de referencia  $\bar{c}$  (que es conocida). Si se emplea una estrategia no iterativa, la ecuación (6.16) se resuelve directamente para  $\check{c}$ , mientras que si el algoritmo (4.9) del capítulo 4 es usado para aplicar un procedimiento iterativo, la ecuación (6.16) debe de aplicarse para encontrar  $\check{c}$  en las respectivas iteraciones.

### 6.1.2.1. Ejemplos de aplicación

#### Ejemplo 6.5

El dominio espacio-tiempo  $\Omega_{x,y,t}$  está definido por un cuadrado de 200X200 y  $T=50$ . La condición inicial y las condiciones de frontera son (figura 6.5):

$$c(x,y,t=0) \begin{cases} 10 & x \in [0,10]; y \in [75,125]; t > 0 \\ 0 & \text{de otra manera} \end{cases}$$

$$c = 0; \quad x = 0, \quad y \notin [75,125], \quad t > 0$$

$$c_x = 0; \quad x = 200, \quad y \in [0,200], \quad t > 0$$

$$c_y = 0; \quad y = 200, \quad x \in [0,200], \quad t > 0$$

$$c_y = 0; \quad y = 0, \quad x \in [0,200], \quad t > 0$$

La velocidad y el coeficiente de difusión son:  $v_x=2, \quad v_y=0;$   
 $D_{xx} = D_{yy} = D_{xy} = D_{yx} = 0$ . El coeficiente de reacción es  $K=0$ .

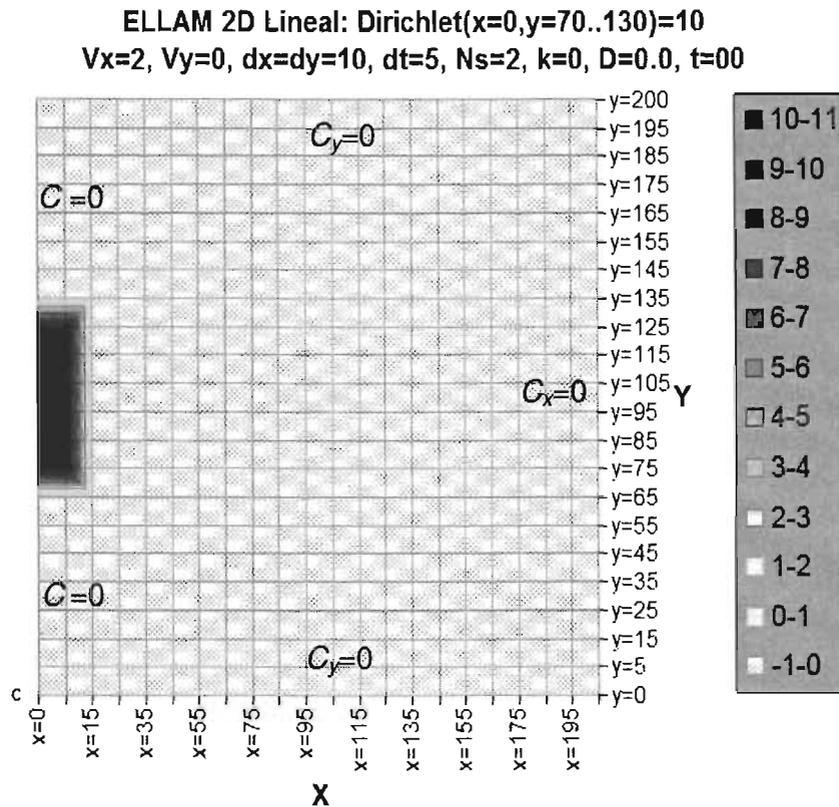


Figura 6.5. Condiciones iniciales y de frontera para el ejemplo 6.5.

Este problema corresponde a un problema de advección pura, en donde el pulso inicial se transportará a lo largo del eje  $x$  conservando su forma en todo momento. El objetivo de este ejemplo es probar el funcionamiento de la metodología bidimensional en la condición extrema ( $Pe=\infty$ ).

El dominio espacial se ha dividido en 20 elementos en ambas direcciones, de tal forma que se tienen 400 celdas. En el tiempo se han usado incrementos de 5 unidades.

La solución analítica para este ejemplo son del tipo  $x-vt$  la cual dará una forma muy sencilla de comprobar los resultados.

Los resultados obtenidos se muestran en las siguientes figuras:

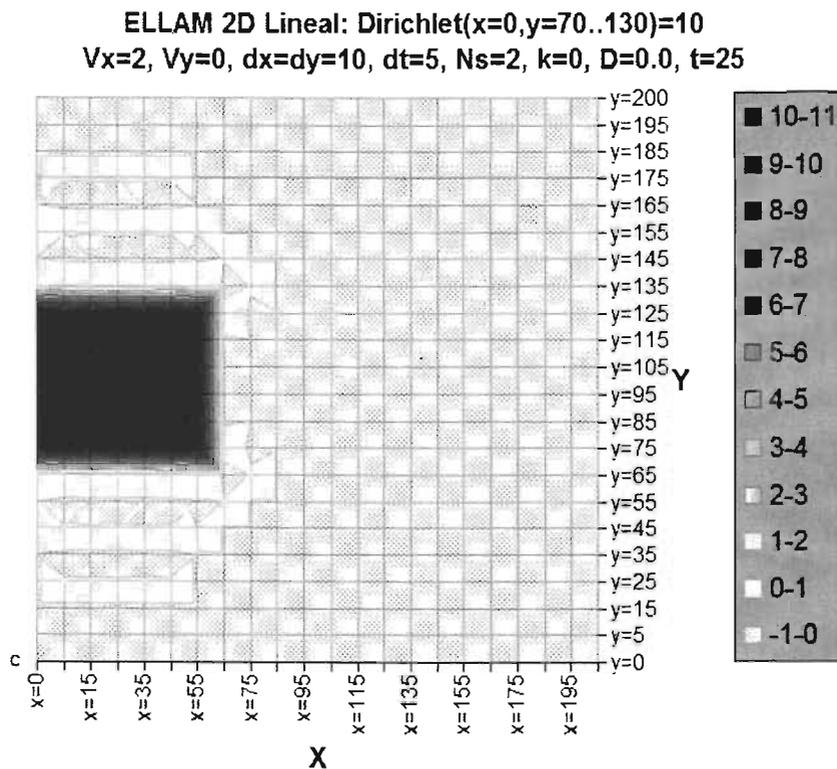


Figura 6.6. Resultados del ejemplo 6.5 para  $t=25$ , vista en planta.

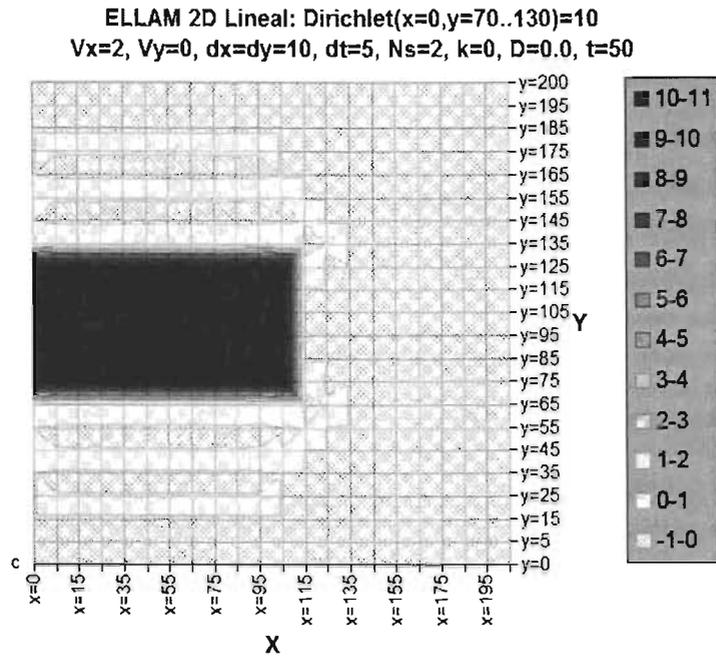


Figura 6.7. Resultados del ejemplo 6.5 para  $t=50$ , vista en planta.

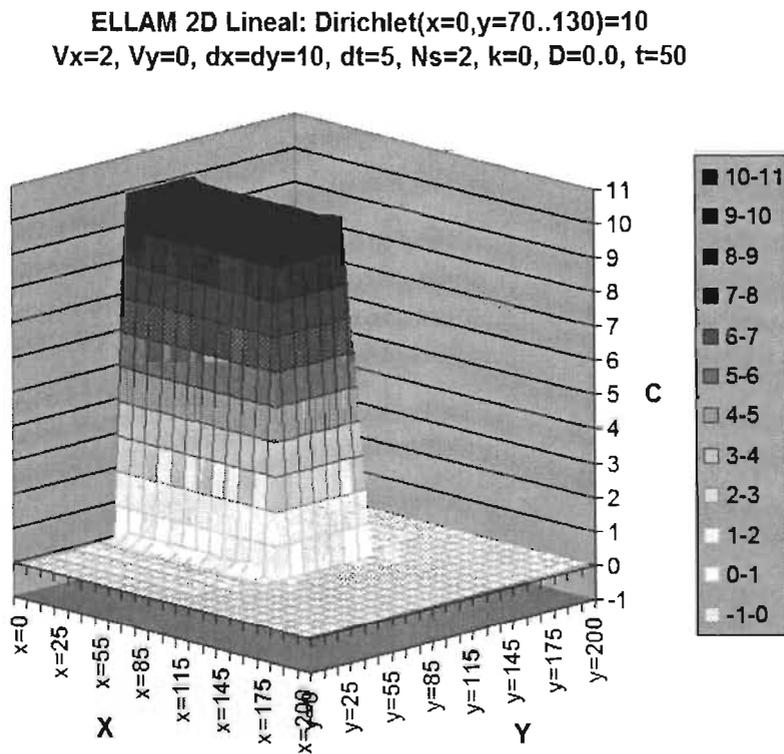


Figura 6.8. Resultados del ejemplo 6.5 para  $t=50$ , vista en isométrico.

En la figura 6.9 se realiza una comparación de los resultados anteriores con una solución en elemento finito (Tipo Galerkin y Crank-Nicholson). La gráfica corresponde al corte central a lo largo del eje x para el tiempo  $t=50$ .

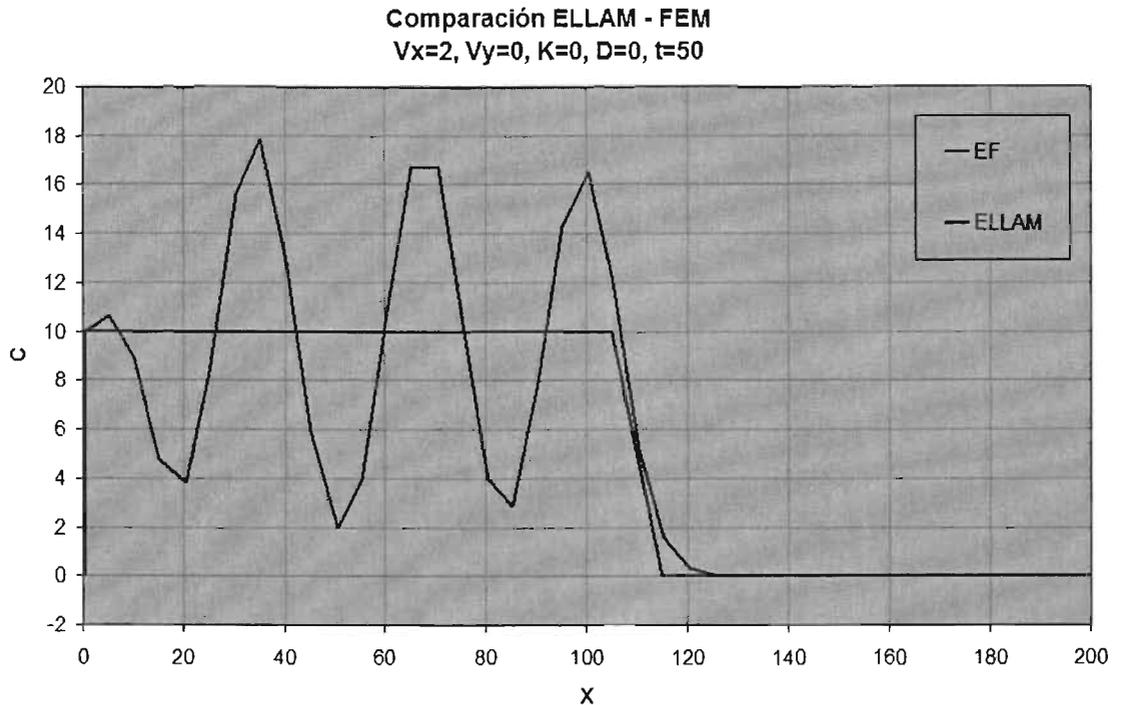


Figura 6.9. Comparación de resultados del ejemplo 6.5 con elemento finito para  $t=50$ .

Los parámetros de cálculo usados están indicados en el cuadro siguiente:

Solución	$\Delta t$	$\Delta z$
T-F ELLAM	5.0	10
EF (elemento finito)	$4.55 \times 10^{-5}$	10

T-F ELLAM está usando una malla en el espacio similar a la que usa elemento finito, sin embargo ELLAM usa una malla en el tiempo cien mil veces más grande que el método euleriano. Es decir, mientras que ELLAM utilizó 10 intervalos en el tiempo elemento finito utilizó alrededor de un millón de incrementos temporales.

Obsérvese que a pesar de que elemento finito usó una malla en el tiempo muy densa sus resultados oscilan alrededor del valor exacto. Esto era de esperarse, debido a que esta metodología presenta fuertes errores de fase como fué comprobado en el capítulo 5. Por el contrario, ELLAM da valores exactos en cada uno de los nodos.

Ejemplo 6.6

En este ejemplo se considerarán los mismos datos y condiciones del ejemplo 6.5 pero con la diferencia de que ahora el coeficiente de reacción  $k(c)$ , en la ecuación 6.10 está dada por:  $k(C) = 0.010002C/(C+0.001)$ , en consecuencia es un problema no lineal en donde la función de decaimiento está dada por  $k(C)$ .

La figura 6.10 muestra los resultados obtenidos con T-F ELLAM y con una solución en diferencias finitas del tipo explícito.

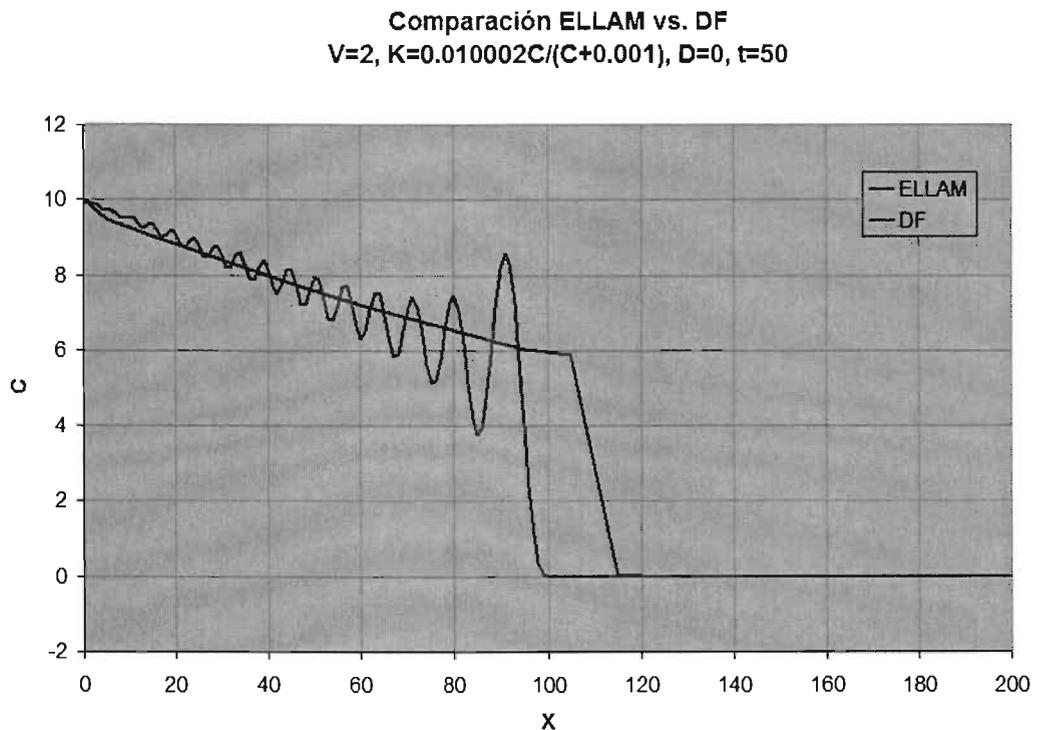


Figura 6.10. Comparación de resultados del ejemplo 6.6 con diferencias finitas para  $t=50$ .

Los parámetros de cálculo usados están indicados en el cuadro siguiente:

Solución	$\Delta t$	$\Delta z$
T-F ELLAM	5.0	10
DF (Diferencias finitas)	$5.0^{-4}$	1.0

De nuevo en este problema el método euleriano presenta fuertes oscilaciones alrededor del valor exacto. En este ejemplo la metodología en diferencias finitas utiliza una malla temporal diez mil veces más densa, y en

el espacio el incremento es diez veces menor respecto a la que utiliza T-F ELLAM.

#### **6.1.2.2. Conclusiones**

Se presentaron varios ejemplos que solucionan la ecuación de advección-difusión-reacción para problemas lineales y no lineales para la condición extrema de advección pura ( $D=0$ ). En todos los ejemplos, se mostró la ventaja de T-F ELLAM respecto a las metodologías tipo euleriano. Las soluciones proporcionadas por T-F ELLAM carecen de oscilaciones no físicas mientras que las de tipo euleriano están plagadas de este tipo de oscilaciones debido a errores de fase como fue probado en el capítulo 5. Estos problemas comprueban que ELLAM conserva sus ventajas para problemas no lineales al usar malla en el espacio y en el tiempo menos densas que las que usa diferencias finitas y elemento finito.

## 6.2. Ecuación de Richards

### 6.2.1. En una dimensión

#### 6.2.1.1. Linealización tipo Picard

En el inciso (4.2.2) se mostró que una técnica de linealización tipo Picard para la ecuación de Richards se puede escribir como:

$$N(\psi) \equiv S(\psi(z^*, t^n)) \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi(z^*, t^n)) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial K(\psi(z^*, t^n))}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0 \quad (6.17)$$

donde  $N(\psi)$  es un operador lineal.

La primera forma débil de la ecuación (6.17) es:

$$\int_0^\infty \int_0^L N(\psi) w(x, t) dz dt = 0 \quad (6.18)$$

la cual corresponde de nuevo a la ecuación (3.3) del capítulo 3. Por lo tanto, el desarrollo que sigue es igual al mostrado en ese capítulo. En él se puede usar una función de peso lineal o una función de peso constante. Si se requiere implementar un procedimiento iterativo, la ecuación (6.18) sigue siendo válida con la salvedad de que ahora esta ecuación se debe resolver para cada iteración. Obsérvese que la velocidad advectiva asociada con las líneas características es ahora  $\partial K / \partial \psi$ .

#### 6.2.1.2. Linealización tipo Taylor-Fréchet

El siguiente desarrollo se basa en un trabajo presentado por Arroyo y Aldama (2000), Arroyo y Aldama (2002).

En el inciso 4.2.3 del capítulo 4 se observó que una expansión de Taylor-Fréchet transforma la ecuación de Richards en:

$$S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\Psi) + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] + S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K \Psi + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] + \bar{S} \Psi = 0 \quad (6.19)$$

donde  $\bar{K} = K'(\Psi) \left( 1 + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)$ ;  $\bar{S} = S'(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ .

ELLAM considera la primera forma débil de la ecuación (6.19) obtenida como:

$$\int_0^T \int_0^L \left\{ S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \Psi + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] + \bar{S} \Psi \right\} w(z,t) dz dt = \int_0^T \int_0^L \left\{ S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\Psi) + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] \right\} w(z,t) dz dt \quad (6.20)$$

Al integrar por partes la ecuación (6.20) resulta:

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_0^L S(\Psi) \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} dz dt - \int_0^T \int_0^L \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \bar{K} \Psi + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) w \right] dz dt + \\ & \int_0^T \int_0^L K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} dz dt - \int_0^T \int_0^L \left[ S(\Psi) \frac{\partial w}{\partial t} - \bar{K} \frac{\partial w}{\partial z} - \bar{S} w \right] \Psi dz dt = \\ & \int_0^T \int_0^L -S(\Psi) \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} dz dt + \int_0^T \int_0^L \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( K(\Psi) + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) w \right] dz dt - \\ & \int_0^T \int_0^L \left[ \bar{K} \Psi - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] \frac{\partial w}{\partial z} dz dt \\ & + \int_0^T \int_0^L \left[ S(\Psi) \frac{\partial w}{\partial t} - \bar{K} \frac{\partial w}{\partial z} - \bar{S} w \right] \Psi dz dt + \int_0^T \int_0^L (\bar{S} w \Psi) dz dt \end{aligned} \quad (6.21)$$

Es conveniente hacer algunas observaciones respecto a la ecuación (6.21). ELLAM propone que la cuarta integral que aparece en ambos miembros de la ecuación se anule, eligiéndose sobre este hecho la función de peso  $w(z,t)$ . Por otra parte, la fórmula de Green transforma la segunda integral de ambos miembros en una integral de frontera. La última integral resulta de artificios algebraicos. De estas observaciones, la ecuación (6.21) se transforma en:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \int_0^L S(\Psi) \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} dz dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \left( \bar{K}\Psi + K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) \bullet w \eta(z) \partial\Omega dt + \\
 & \int_0^T \int_0^L K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} dz dt = \\
 & \int_0^T \int_0^L -S(\Psi) \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} dz dt + \int_0^T \int_{\partial\Omega} \left( K(\Psi) + K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) \bullet w \eta(z) \partial\Omega dt - \\
 & \int_0^T \int_0^L \left[ \bar{K}\Psi - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right] \frac{\partial w}{\partial z} dz dt + \int_0^T \int_0^L (\bar{S} w \Psi) dz dt
 \end{aligned} \tag{6.22}$$

en donde  $\eta(z)$  es un vector unitario normal dirigido hacia afuera en  $\partial\Omega$  (frontera del dominio), para un problema unidimensional,  $\partial\Omega$  consiste de dos puntos  $0$  y  $L$ , de tal forma que  $\eta(0) = -1$  y  $\eta(L) = 1$ .

Consideremos además que el dominio  $\Omega_{z,t}$ , está subdividido en un número de subdominios  $\Omega_i^{n+1} = [z_{i-1/2}, z_{i+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$  de longitud  $\Delta z_i$ , con nodo  $z_i$  en el centro, tal que  $z_{i\pm(1/2)} = z_i \pm (\Delta z_i / 2)$ , donde  $i$  y  $n$  son enteros. Según la ecuación (6.22), para cada subdominio se tiene que:

$$\begin{aligned}
 & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} S(\Psi) \frac{\partial(\Psi w_i)}{\partial t} dz dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left( \bar{K}\Psi + K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) \bullet w \eta(z) \partial\Omega dt + \\
 & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} dz dt = \\
 & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} -S(\Psi) \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} dz dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left( K(\Psi) + K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) \bullet w \eta(z) \partial\Omega dt - \\
 & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} \left[ \bar{K}\Psi - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right] \frac{\partial w}{\partial z} dz dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} (\bar{S} w \Psi) dz dt
 \end{aligned} \tag{6.23}$$

#### Elección de la función de peso $w(z,t)$

Consideremos que a cada subdominio  $i$  se le asigna una función de peso  $w_i(z,t)$ . Como se mencionó anteriormente, ELLAM propone que la función de peso satisfaga la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\bar{K}}{S(\Psi)} \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\bar{S}}{S(\Psi)} w = 0 \tag{6.24}$$

Nótese que si en la ecuación (6.24) se hace  $v = \bar{K} / S(\Psi)$  y  $\gamma = \bar{S} / S(\Psi)$ , ésta se puede escribir de la forma siguiente:

$$\frac{\partial w}{\partial t} - v \frac{\partial w}{\partial z} - \gamma w = 0 \quad (6.24a)$$

la cual es una ecuación de advección-reacción. Por lo tanto,  $v$  es la velocidad con que viajan las líneas características y  $\gamma$  es el término reactivo.

Existe un número infinito de funciones que satisfacen esta ecuación (6.24a); sin embargo, es conveniente seleccionar la función más sencilla. En la práctica, las funciones más sencillas son funciones que sean constantes en el espacio o que varíen linealmente. La elección de una u otra es por conveniencia, ya que en el capítulo 5 ha sido demostrado que las propiedades de propagación son similares. En general, en este trabajo se elegirá una función de peso constante en el espacio y exponencialmente variable en el tiempo, definida como:

$$w_i(z, t) = \begin{cases} \int_0^t \gamma d\bar{t} \\ e^{i^n} & ; (z, t) \in [z_{i-1/2}, z_{i+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}] \\ 0 \text{ de otra forma.} \end{cases} \quad (6.25)$$

Esta elección implica que en la ecuación (6.23),  $\partial w_i / \partial z$  sea una función delta en  $z_{i-1/2}$  y  $z_{i+1/2}$ . Además, considerando una aproximación totalmente implícita para las integrales temporales, la ecuación (6.23) se transforma en:

$$\begin{aligned} & \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} S_i^{n+1}(\Psi) \Psi(z, t^{n+1}) \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dz - \int_0^L S_i^{n+1}(\Psi) \Psi(z, t^n) W_i(z, t^n) dz - B1 \\ & + K_i^{n+1}(\Psi) \left[ \frac{\partial \Psi}{\partial z}(z_{i-1/2}, t^{n+1}) \Delta t(z_{i-1/2}) - \frac{\partial \Psi}{\partial z}(z_{i+1/2}, t^{n+1}) \Delta t(z_{i+1/2}) \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) = \\ & \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} - S_i^{n+1}(\Psi) \Psi(z, t^{n+1}) \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dz + \int_0^L S_i^{n+1}(\Psi) \Psi(z, t^n) W_i(z, t^n) dz + B2 + \\ & \left[ \bar{K}\Psi - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right]_{i-1/2}^{n+1} \Delta t(z_{i-1/2}) - \left[ \bar{K}\Psi - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right]_{i+1/2}^{n+1} \Delta t(z_{i+1/2}) \\ & + \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} (\bar{S}\Psi)^{n+1} \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) \Delta t(z) \end{aligned} \quad (6.26)$$

donde se ha hecho:

$$\begin{aligned}
 B1 &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \iint_{\partial\Omega} \left( K\psi + K(\Psi) \frac{\partial\psi}{\partial z} \right) \cdot W \eta(z) \partial\Omega dt \\
 B2 &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \iint_{\partial\Omega} \left( K(\Psi) + K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) \cdot W \eta(z) \partial\Omega dt
 \end{aligned}
 \tag{6.26a}$$

Obsérvese que en las ecuaciones (6.26) se ha introducido la función de peso aproximada  $W$  tal y como fue definida en la ecuación (3.36) del capítulo 3.

Por otra parte, se comprueba (Anexo B) que:

$$-B1 - B2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \iint_{\partial\Omega} q_z \cdot w\eta(z) \partial\Omega dt
 \tag{6.26b}$$

donde  $q_z$  es el flujo de Darcy.

Para simplificar la escritura de la ecuación (6.26), sean  $lc$  una variable que involucra integrales con la función de corrección  $\psi$ , e  $lr$  una variable que involucra integrales con la función de referencia  $\Psi$ , definidas de la forma siguiente:

$$\begin{aligned}
 lc &= \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} S_i^{n+1}(\Psi) \psi(z, t^{n+1}) \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dz + \\
 &K_i^{n+1}(\Psi) \left[ \frac{\partial\psi}{\partial z}(z_{i-1/2}, t^{n+1}) \Delta t(z_{i-1/2}) - \frac{\partial\psi}{\partial z}(z_{i+1/2}, t^{n+1}) \Delta t(z_{i+1/2}) \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) \\
 lr &= \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} -S_i^{n+1}(\Psi) \Psi(z, t^{n+1}) \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dz + \\
 &\left[ K\psi - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right]_{i-1/2}^{n+1} \Delta t(z_{i-1/2}) - \left[ K\psi - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right]_{i+1/2}^{n+1} \Delta t(z_{i+1/2}) \\
 &+ \int_{z_{i-1/2}}^{z_{i+1/2}} (\bar{S}\Psi)^{n+1} \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) \Delta t(z)
 \end{aligned}
 \tag{6.27}$$

por lo tanto la ecuación (6.26) se escribe como:

$$Ic + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} q_z \cdot w \eta(z) d\Omega dt = Ir + S_i^{n+1} \int_0^L (\Psi + \psi)^n W_i(z, t^n) dz \quad (6.28)$$

en donde se ha empleado la ecuación (6.26b).

De acuerdo a la nomenclatura usada en ELLAM, en la ecuación (6.28) en la integral de corrección ( $Ic$ ) e integral de referencia ( $Ir$ ) están contenidas las integrales en el tiempo  $t^{n+1}$ , así como las integrales de términos difusivos para la función de corrección y la función de referencia, respectivamente. El segundo término del primer miembro representa el flujo de frontera y será nulo cuando las líneas características no crucen las fronteras. El último término del segundo miembro es la integral en el tiempo  $t^n$ . El cálculo de estas integrales se realiza de manera análoga a como fue presentado en los subincisos 3.1.7.1 y 3.1.7.2 del capítulo 3. En el anexo C, se muestran los cálculos para los nodos internos y fronteras de entrada y salida.

### 6.2.1.3. Ejemplos de aplicación

#### *Ejemplo 6.7*

Considérese una columna de suelo de 20 cm de altura donde se tiene una carga de presión de -10 cm en la superficie. En la base de la columna la carga de presión es cero la cual corresponde a un estado de saturación.

Las características hidrodinámicas son: humedad residual,  $\theta_r = 0.026$ ; humedad de saturación,  $\theta_s = 0.35$ ; parámetro empírico,  $\psi_s = -7.69$  cm; índice de distribución de tamaños de poros,  $n = 7.94$ ; conductividad hidráulica a saturación,  $k_s = 0.281$  cm/s, y parámetro específico de almacenamiento,  $S_s = 0$ .

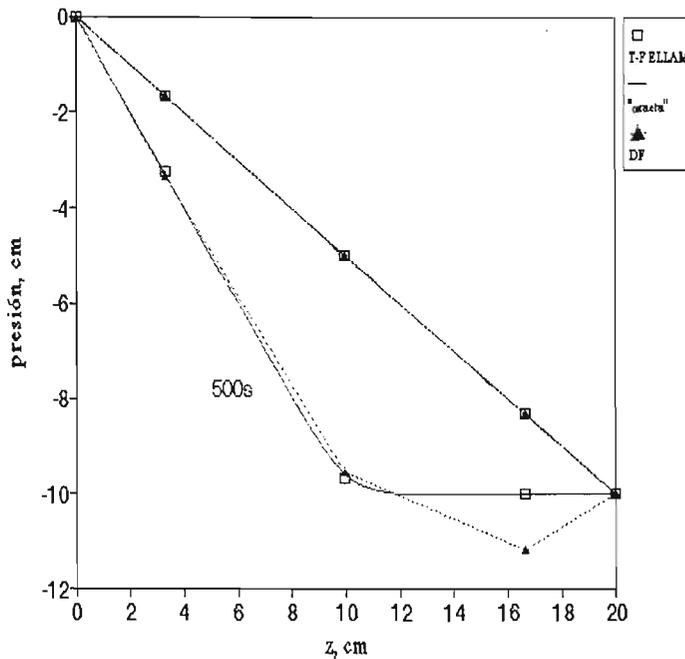


Figura 6.11. Comparación entre resultados Taylor-Fréchet ELLAM y diferencias finitas.

En la figura 6.11, se muestran los resultados obtenidos al solucionar la ecuación de Richards con ELLAM y con una técnica de diferencias finitas conocida como interpolación integral (Arroyo 1994). La solución "exacta" es obtenida con el mismo programa de diferencias finitas, pero utilizando una malla excesivamente fina.

Se observa que ELLAM da soluciones exactas, mientras que el método de interpolación integral para el mismo nivel de aproximación diverge de la solución.

ELLAM	6.666cm	2s
Dif. finitas		
"exacta"	0.4cm	0.1s

Cuadro 6.1. Parámetros de cálculo para el ejemplo 6.7

El cuadro 6.1 muestra los parámetros empleados en este ejemplo. ELLAM permite utilizar incrementos en el tiempo 20 veces más grandes mientras que los incrementos en el espacio son casi 17 veces mayores.

Ejemplo 6.8

Este ejemplo corresponde a un problema de redistribución (flujo nulo en la superficie) en un suelo de 5 metros de profundidad. La condición inicial es una condición muy cercana a la saturación  $-0.4\text{m}$  en la superficie y  $-0.0675\text{m}$  en la parte inferior. Las condiciones de frontera son tipo dirichlet en la parte inferior igual a  $-0.0675\text{m}$ , y en la superficie de tercer tipo (flujo de Darcy nulo).

Las características hidrodinámicas son: humedad residual,  $\theta_r = 0.15$ ; humedad de saturación,  $\theta_s = 0.38$ ; parámetro empírico,  $\psi_s = -1.2\text{m}$ ; índice de distribución de tamaños de poros,  $n = 4$ ; conductividad hidráulica a saturación,  $k_s = 0.01\text{m/h}$ , y parámetro específico de almacenamiento,  $S_s = 0.0001$ .

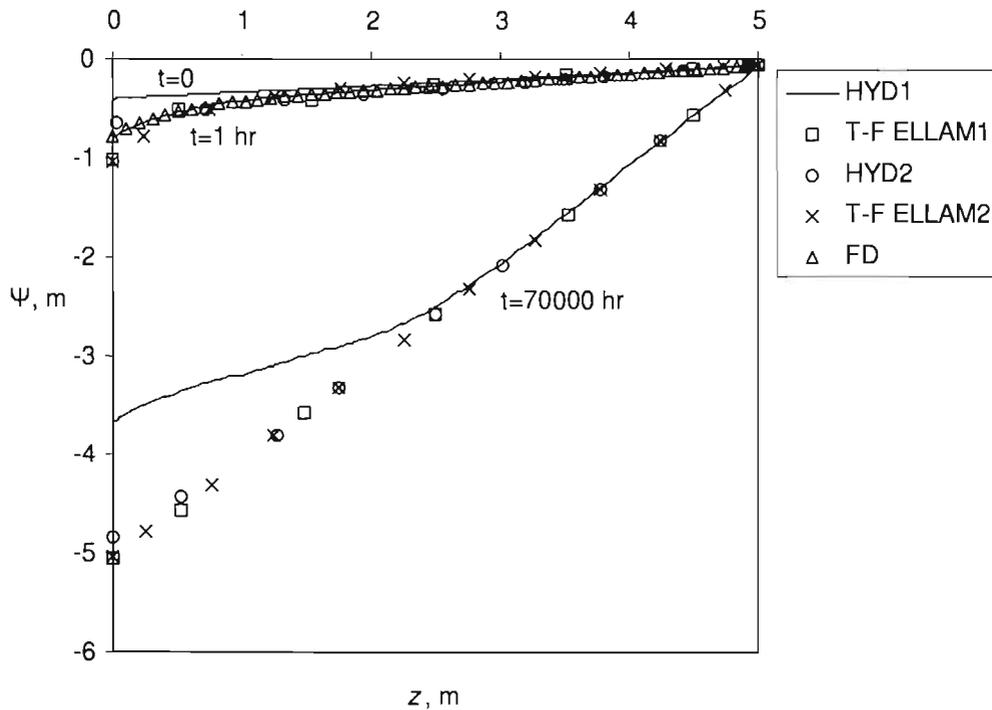


Figura 6.12. Comparación entre resultados Taylor-Fréchet ELLAM, diferencias finitas y elemento finito.

En la figura 6.12 las leyendas indican lo siguiente:

HYD corresponde al programa HYDRUS que utiliza elemento finito (paquete comercial). FD corresponde a un esquema en diferencias. T-F ELLAM corresponde a la metodología propuesta (Taylor-Fréchét ELLAM). Adicionalmente a estas leyendas se adicionaron otros términos los cuales se explican a continuación.

HYD1 corresponde a una malla fina (pero que no se puede considerar como exacta como se explica más adelante). HYD2 corresponde a una malla gruesa de las mismas dimensiones que T-F ELLAM1. FD corresponde a una malla fina. T-F ELLAM 2 corresponde a una malla un poco más fina que la usada en T-F ELLAM1.

Método	$\Delta t$ , hr	$\Delta z$ , m
HYD1	0.01	0.1
FD	0.1	0.1
T-F ELLAM1 HYD2	1	1
T-F ELLAM2	0.25	0.5

Cuadro 6.2. Parámetros de cálculo para el ejemplo 6.8.

De nuevo las dos soluciones T-F ELLAM son consistentes, tanto para el tiempo de 1 hora como el de 70000 horas.

Para los HYD los resultados son inconsistentes, siendo muy notoria para el tiempo de 70000.

El método FD da resultados igual al de HYD para 1 hora, pero en 70000 ya no se obtuvieron resultados porque se desestabilizó antes de que se llegara a este tiempo.

Con relación a HYD1 se esperaba que este se refiriera como la solución "exacta" pero muestra inconsistencias, incluso, ya para el tiempo de 70000 los resultados deben corresponder a un estado de equilibrio como es alcanzado por los T-F ELLAM. Por ello se concluye que los T-F ELLAM dan los resultados más satisfactorios.

### Ejemplo 6.9

Con el fin de ver el comportamiento de la soluciones de acuerdo a un número determinado de iteraciones se resuelve este ejemplo, en el cual se simula infiltración en una columna de suelo de 1.25 m con un contenido inicial de humedad y que corresponde a una carga de presión de  $-1.5$  m. La condición en la superficie es un flujo constante tipo Darcy de 0.0008 m/h. El tiempo de simulación es de 120 h. Los datos fueron obtenidos de Paniconi *et al.* (1991).

Las características hidrodinámicas son: humedad residual,  $\theta_r = 0.15$ ; humedad de saturación,  $\theta_s = 0.38$ ; parámetro empírico,  $\psi_s = -1.2$  m; índice de distribución de tamaños de poros,  $n = 4$ ; conductividad hidráulica a saturación,  $k_s = 0.0004$  m/h, y parámetro específico de almacenamiento,  $S_s = 0.0001$ .

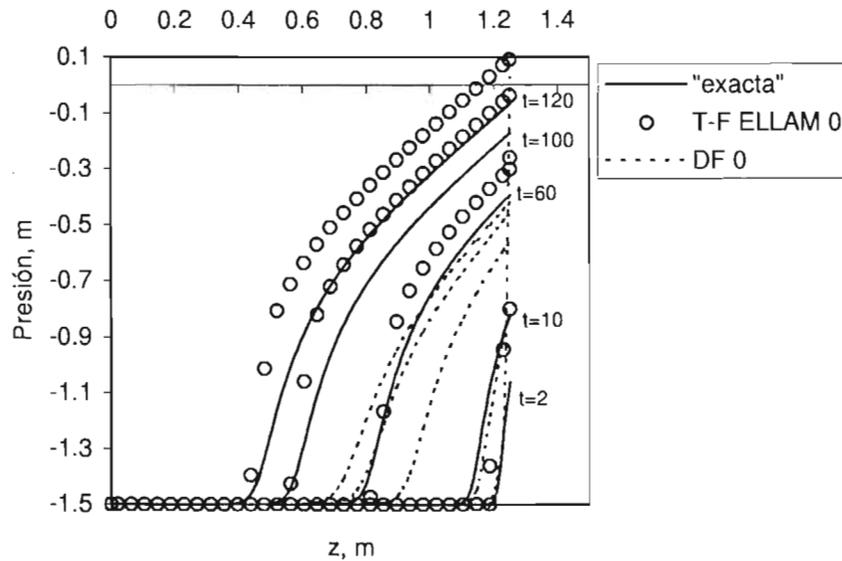


Figura 6.13. Resultados del ejemplo 6.9 sin iteraciones.

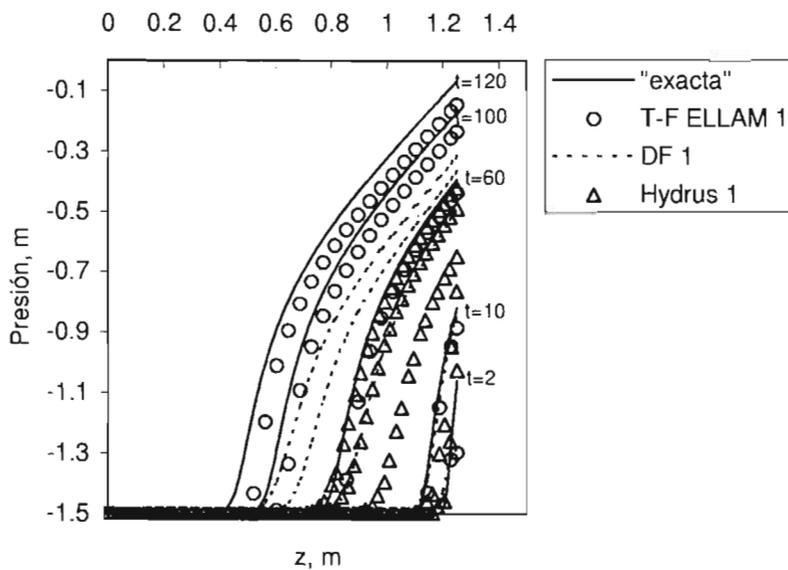


Figura 6.14. Resultados del ejemplo 6.9 con una iteración.

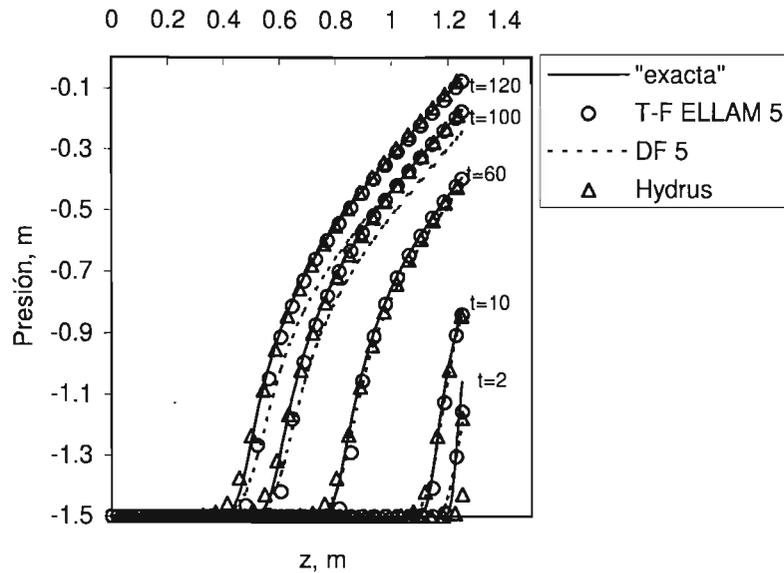


Figura 6.15. Resultados del ejemplo 6.9 con cinco iteraciones.

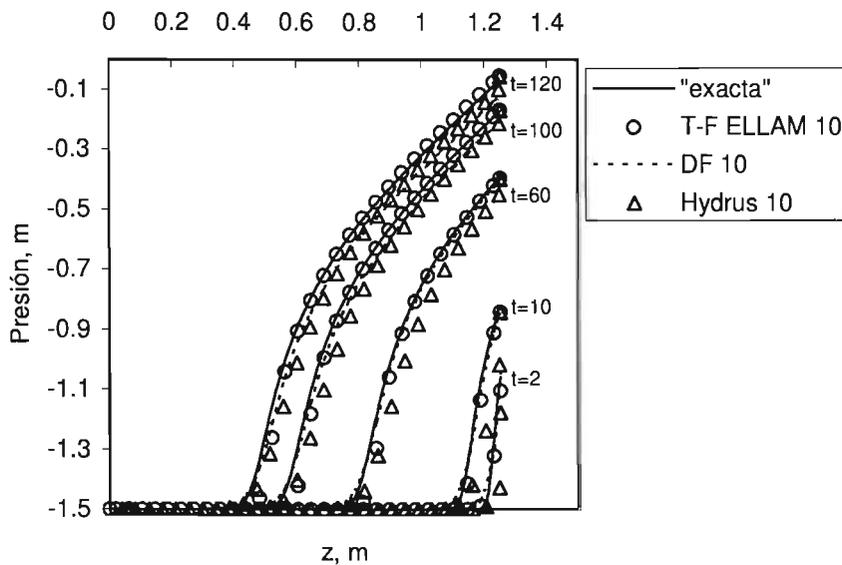


Figura 6.16. Resultados del ejemplo 6.9 con diez iteraciones.

En la figura 6.13–6.16, Hydrus corresponde al programa HYDRUS. FD corresponde al esquema en diferencias. T-F ELLAM corresponde a la metodología propuesta (Taylor-Fréchet ELLAM). El número delante de las leyendas indica el número de iteraciones efectuadas.

La solución "exacta" es obtenida a través del método de diferencias finitas con una malla muy fina y con 50 iteraciones. Los parámetros de cálculo se muestran a continuación:

Método	$\Delta t$ , hr	$\Delta z$ , m
"exacta"	0.01	0.00833
DF, EF	2	0.041
T-F ELLAM	2	0.041

Cuadro 6.3. Parámetros de cálculo para el ejemplo 6.9.

La figura 6.13 muestra los resultados sin efectuar iteraciones, se observa que diferencias finitas y T-F ELLAM tienen discrepancias (como era de esperarse) sin embargo la mejor aproximación se obtiene con T-F ELLAM. La solución DF presenta fuertes problemas de convergencia en la medida de que avanza el proceso de infiltración. Por otra parte, la solución HYD no se presenta debido a que el programa no contempla esta opción.

En la figuras de la 6.14 a la 6.16 se puede observar la rapidez de convergencia a la solución "exacta", mientras que T-F ELLAM da soluciones muy satisfactorias (incluso valores exactos) los otros dos métodos aún presentan algunas diferencias significativas.

#### *Ejemplo 6.10*

Este ejemplo es similar al ejemplo 6.9, la diferencia es que se están considerando algunas condiciones de frontera más extremas como se mencionan a continuación: La condición inicial corresponde a una carga de presión de -3.0 m (suelo más seco). La condición en la superficie es un flujo constante tipo Darcy de 0.0002 m/h (mayor intensidad de flujo). El tiempo de simulación es de 400 h.

Las características hidrodinámicas son: humedad residual,  $\theta_r = 0.15$ ; humedad de saturación,  $\theta_s = 0.38$ ; parámetro empírico,  $\psi_s = -1.2$  m; índice de distribución de tamaños de poros,  $n = 4$ ; conductividad hidráulica a saturación,  $k_s = 0.01$  m/h, y parámetro específico de almacenamiento,  $S_s = 0.0001$ .

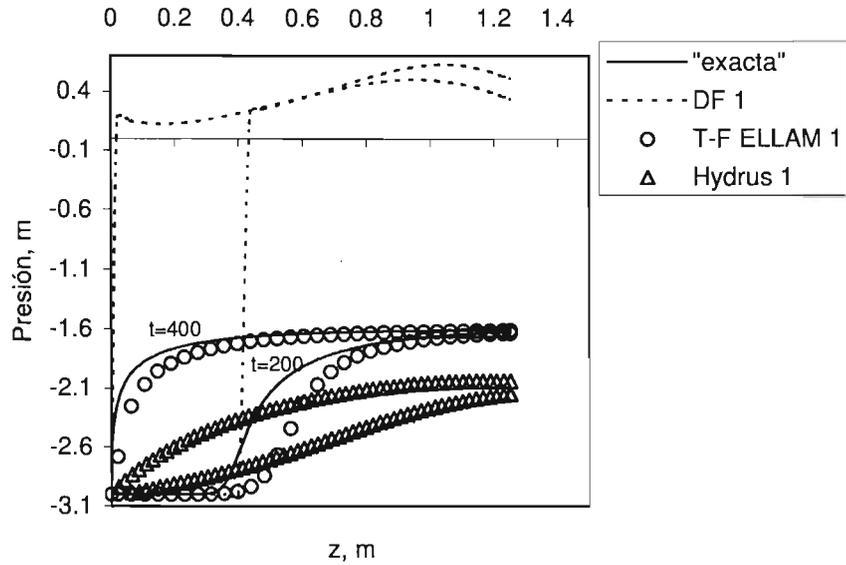


Figura 6.17. Resultados del ejemplo 6.10 con una iteración.

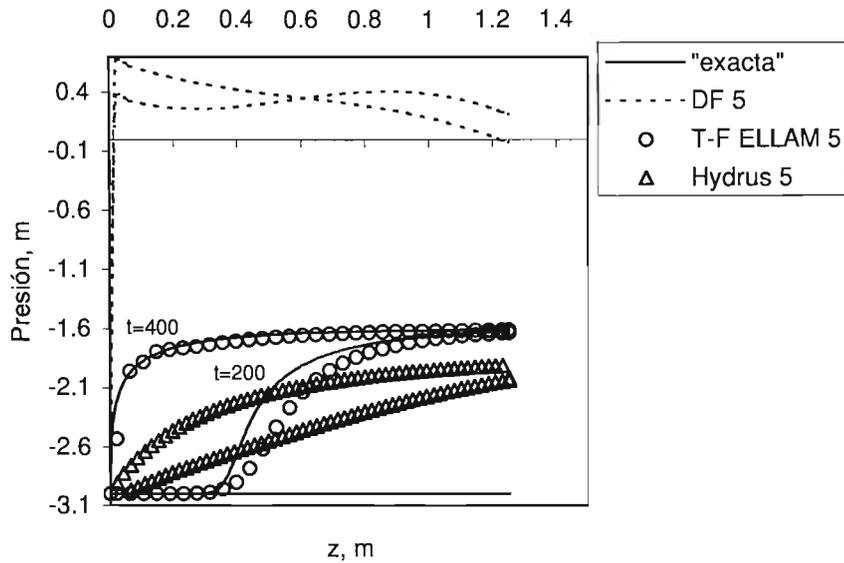


Figura 6.18. Resultados del ejemplo 6.10 con cinco iteraciones.

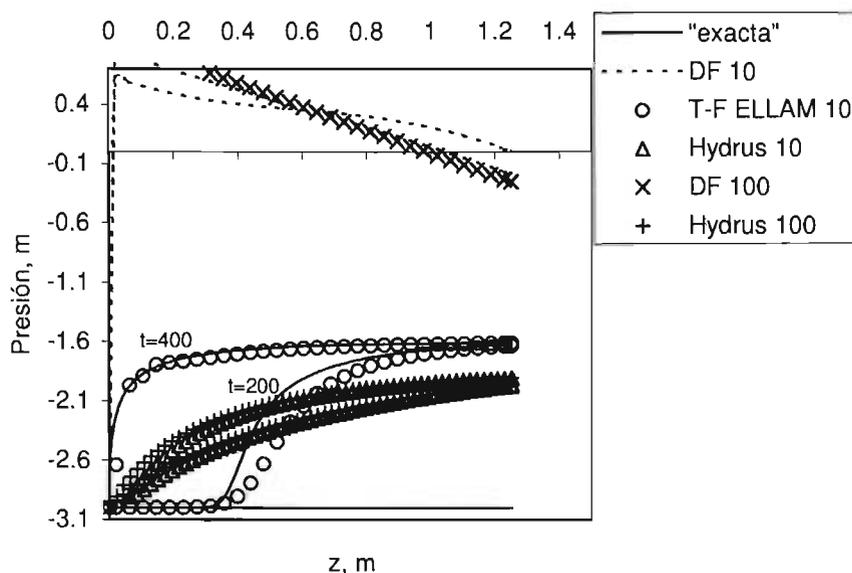


Figura 6.19. Resultados del ejemplo 6.10 con diez iteraciones.

En este tipo de problemas como la condición inicial corresponde a un suelo muy seco, cerca de la humedad residual  $\theta=0.15$ , los modelos numéricos requieren mallas excesivamente finas.

En el ejemplo anterior, las gráficas muestran ya algunos problemas de convergencia para los esquemas en diferencias finitas y elemento finito, sin embargo estas se mejoran en la medida que se aumenta el número de iteraciones. Hasta ahí pareciera que todo funciona bien y las ventajas de usar una u otra metodología se resuelve a realizar más o menos iteraciones. Pero que sucede si las condiciones iniciales y de frontera se vuelven más críticas, en este caso las metodologías de elemento finito y diferencias finitas ya no convergen, incluso si las iteraciones crecen excesivamente.

Lo anterior, se puede ver en las figuras 6.17-6.19, en donde se muestran los resultados para una, cinco, diez y cien iteraciones. En los resultados de diferencias finitas y elemento finito, los errores de discretización son tan grandes que las soluciones no convergen. Por ello se requiere que las mallas espacio-temporales sean muy finas. Las soluciones obtenidas por la metodología Taylor-Frechet ELLAM, desde una iteración ya muestra su propiedad de convergencia. Las diferencias que muestran los resultados obtenidos por T-F ELLAM y la solución "exacta", no es problema de convergencia sino la exactitud con la que se soluciona la integral de masa en el tiempo anterior entre las celdas internas que tiene que ver con el número de subintervalos de integración ( $NS$ ) y la incorporación de los puntos estratégicos de integración como se menciona en el capítulo 3. En

estos ejemplos se ha utilizado  $NS=2$  que corresponde al nivel más bajo de aproximación.

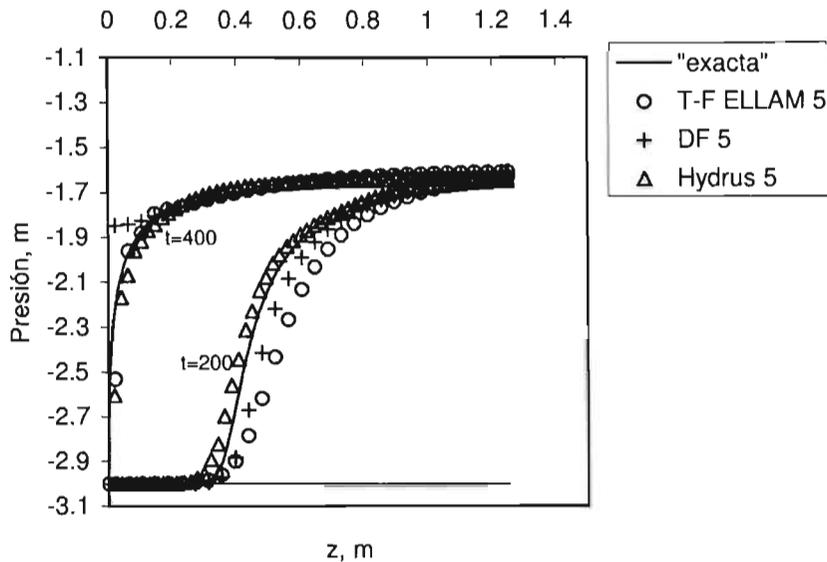
La solución "exacta" es obtenida a través del método de diferencias finitas con una malla muy fina y con 50 iteraciones. Los parámetros de cálculo se muestran a continuación:

Método	$\Delta t$ , hr	$\Delta z$ , m
"exacta"	0.01	0.00466
DF	20	0.041
T-F ELLAM	20	0.041

Cuadro 6.4. Parámetros de cálculo para el ejemplo 6.10.

En T-F ELLAM el incremento en el espacio es 10 veces mayor y en el tiempo 2000 veces mayor respecto a la solución "exacta".

Si mantenemos para la solución en diferencias finitas y elemento finito la misma malla en el espacio que la usada en los ejemplos anteriores ( $\Delta z=0.041$  m), y si utilizamos cinco iteraciones, se requerirá un incremento en el tiempo de una hora ( $\Delta t=1$  h) para tener el mismo nivel de aproximación que la obtenida con T-F ELLAM, es decir, se necesita una malla en el tiempo 20 veces más fina con diferencias finitas y elemento finito. Esto se ilustra en la figura 6.20, incluso se observan para la solución en diferencias finitas algunos puntos fuera de la solución. La solución en Hydrus se aproxima mejor.



**Figura 6.20.** Resultados del ejemplo 6.10 con el mismo grado de aproximación entre DF, Hydrus y T-F ELLAM.

#### **6.2.1.4. Conclusiones**

Se presentan varias soluciones numéricas de la ecuación de Richards en una dimensión mediante ELLAM. La ventaja de esta técnica en relación con las técnicas tradicionales de diferencias finitas y elemento finito es que permite manejar incrementos en el espacio e intervalos relativamente más grandes, sin presentar problemas de resolución espacial y de convergencia. Esta metodología puede ser generalizada a dos o tres dimensiones incorporando cualquier tipo de condición de frontera. En el siguiente inciso se verá la aplicación en dos dimensiones. Los resultados mostrados corresponden a una de las primeras aplicaciones de ELLAM para resolver la ecuación de Richards, lo que permite concluir que ELLAM se puede aplicar a la solución de problemas altamente no lineales, siempre y cuando la técnica de linealización sea apropiada.

### 6.2.2. En dos dimensiones

#### Linealización tipo Picard

Una versión linealizada de la ecuación de Richards en dos dimensiones, según la ecuación (4.25) del capítulo 4, se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \ell(\psi) \equiv & (S(\psi(x^*, z^*, t^n))) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1})}{\partial t} = \\ & \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\psi(x^*, z^*, t^n)) \frac{\partial \psi}{\partial z}(x, z, t^{n+1}) \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left( K(\psi(x^*, z^*, t^n)) \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, z, t^{n+1}) \right) + K'(\psi(x^*, z^*, t^n)) \frac{\partial \psi(x, z, t^{n+1})}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (6.29)$$

donde  $\psi(x^*, z^*, t^n)$  es la proyección hacia atrás de  $\psi(x, z, t^{n+1})$ , siguiendo la línea característica. También se puede usar la proyección en  $\psi(x, z, t^n)$ .

Para simplificar la escritura de la ecuación (6.29) se escribirá como:

$$\ell(\psi) \equiv S^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K^* \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left( K^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - K'^* \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0 \quad (6.30)$$

donde se ha hecho que  $S^* = S(\psi(x^*, z^*, t^n))$ ;  $K^* = K(\psi(x^*, z^*, t^n))$ ;  $K'^* = \partial K^* / \partial \psi$ .

Asimismo, en forma vectorial, la ecuación (6.30) se puede escribir como:

$$\ell(\psi) \equiv S^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{k}^* \psi \hat{\mathbf{k}} - \nabla \cdot (\mathbf{K}^* \nabla \psi) = 0, \quad (x, z) \in \Omega, t \in [0, T] \quad (6.30a)$$

donde  $\mathbf{K}^*$  es el tensor de conductividad hidráulica y  $\hat{\mathbf{k}}$  el vector unitario en la dirección vertical  $z$ .

En la ecuación (6.30),  $\ell(\psi)$  es un operador diferencial lineal, por lo que se puede aplicar ELLAM como se muestra a continuación:

La primera forma débil de la ecuación (6.30) es:

$$\int_0^\infty \int_\Omega [\ell(\psi)] w(x, z, t) d\Omega dt = 0 \quad (6.31)$$

Haciendo uso de la ecuación (6.30a), la ecuación (6.31) se transforma en:

$$\int_0^{\infty} \int_{\Omega} \left[ S * \frac{\partial \psi}{\partial t} - \nabla \cdot (k^{**} \psi \mathbf{k}) - \nabla \cdot (K * \nabla \psi) \right] w(x, z, t) = 0 \quad (6.32)$$

Empleando en la ecuación (6.32) la fórmula de diferenciación:

$$(w \psi)' = w \psi' + \psi w' \quad (6.33)$$

se llega a:

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot (k^{**} \psi \mathbf{k})) w &= \nabla \cdot (k^{**} \psi \mathbf{k} w) - k^{**} \psi \mathbf{k} \cdot \nabla w \\ [\nabla \cdot (K * \nabla \psi)] w &= \nabla \cdot [(K * \nabla \psi) w] - (K * \nabla \psi) \cdot \nabla w \end{aligned} \quad (6.34)$$

Por lo tanto, la ecuación (6.32) se transforma en:

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} \ell(\psi) w d\Omega dt &= \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ S * \frac{\partial(\psi w)}{\partial t} - S * \psi \frac{\partial w}{\partial t} - \nabla \cdot (k^{**} \psi \mathbf{k} w) + \psi (k^{**} \mathbf{k} \cdot \nabla w) \right. \\ &\quad \left. - \nabla \cdot [(K * \nabla \psi) w] + (K * \nabla \psi) \cdot \nabla w \right\} d\Omega dt = 0 \\ &= \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ S * \frac{\partial(\psi w)}{\partial t} - \nabla \cdot (k^{**} \psi \mathbf{k} w) - \nabla \cdot [(K * \nabla \psi) w] + (K * \nabla \psi) \cdot \nabla w \right. \\ &\quad \left. + \psi \left[ -S * \frac{\partial w}{\partial t} + k^{**} \mathbf{k} \cdot \nabla w \right] \right\} d\Omega dt = 0 \end{aligned} \quad (6.35)$$

Si se escoge que la función de peso  $w(x, z, t)$  anule el último término de la ecuación (6.35), esta ecuación se reduce a:

$$\int_0^T \int_{\Omega} \left\{ S * \frac{\partial(\psi w)}{\partial t} - \nabla \cdot [(k^{**} \psi \mathbf{k} + K * \nabla \psi) w] + (K * \nabla \psi) \cdot \nabla w \right\} d\Omega dt = 0 \quad (6.36)$$

La ecuación (6.36) sugiere dividir el intervalo  $[0, T]$  en una suma finita de intervalos  $\sum_{n=0}^N [t^{n+1} - t^n]$ , tal que  $\Delta t = [t^{n+1} - t^n]$ . Por ello, esta ecuación aplicada a un intervalo  $[t^{n+1} - t^n]$  se escribe como:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left\{ S * \frac{\partial(\psi w)}{\partial t} + (K * \nabla \psi) \cdot \nabla w \right\} d\Omega dt - B = 0 \quad (6.37)$$

donde el segundo término se ha convertido, a través de la fórmula de Green, en una integral de frontera definida por:

$$B = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} (k^* \psi \mathbf{k} + \mathbf{K}^* \nabla \psi) \cdot \eta \mathbf{w} dS dt = 0 \quad (6.38)$$

$dS$  representa una diferencial de frontera. Esta integral representará la integral de flujo de frontera.

Por otra parte, considérese el espacio dividido en un conjunto de celdas de dimensiones  $(\Delta x_i, \Delta z_j)$  centradas en el nodo  $(x_i, z_j)$ , tal que  $x_{i\pm 1/2} = x_i \pm \Delta x_i / 2$ ;  $z_{j\pm 1/2} = z_j \pm \Delta z_j / 2$ , de modo que a cada celda se asocia una función de peso  $w_{ij}(x, z, t)$ . La región en  $t^{n+1}$  correspondiente a la celda  $i, j$  se denotará con  $\xi_{ij}$ . Esta región, al ser advectada hacia atrás en  $t^n$ , se denotará con  $\xi_{ij}^*$  (figura 3.29).

Según estas indicaciones, la ecuación (6.37) puede ser resuelta para la región  $\xi_{ij}$  de la forma siguiente:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left\{ S^* \frac{\partial(\psi w)}{\partial t} + (\mathbf{K}^* \nabla \psi) \cdot \nabla w \right\} dx dz dt - B = 0 \quad (6.39)$$

donde  $B$  es el flujo de frontera definido por la ecuación (6.38).

Empleando una aproximación totalmente implícita de la ecuación (6.39), se obtiene:

$$\begin{aligned} & \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ S^{*n+1} \left[ (\psi w_{ij})_{(x,z,t^{n+1})} - (\psi w_{ij})_{(x,z,t^n)} \right] \right] dx dz \\ & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ (\mathbf{K}^* \nabla \psi) \cdot \nabla w_{ij} \right]_{(x,z,t^{n+1})} \Delta t(x, z) dx dz - B = 0 \end{aligned} \quad (6.40)$$

Para los ejes principales  $x, y, z$ , el tensor de la conductividad hidráulica queda definido por:

$$\begin{bmatrix} K_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & K_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (6.41)$$

Por lo tanto, el término de la conductividad hidráulica en la ecuación (6.40) para las direcciones  $x$ - $z$ , queda definido de la forma siguiente:

$$[(K^* \nabla \Psi) \bullet \nabla w] = \frac{\partial w}{\partial x} \left[ K^*_{xx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial w}{\partial z} \left[ K^*_{zz} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] \quad (6.42)$$

Sustituyendo la ecuación (6.42) en (6.40), se obtiene

$$\begin{aligned} & \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S^{*n+1} \Psi(x, z, t^{n+1}) w_{ij}(x, z, t^{n+1}) dx dz \\ & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ \frac{\partial w}{\partial x} \left( K^*_{xx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \Delta t(x, z) + \frac{\partial w}{\partial z} \left( K^*_{zz} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) \Delta t(x, z) \right]_{(x,z,t^{n+1})} dx dz \quad (6.43) \\ & - B = \int_{\xi_{ij}^*} S^{*n+1} \Psi^n(x, z, t^n) w_{ij}(x, z, t^n) d\xi_{ij}^* \end{aligned}$$

La ecuación (6.43) es la aplicación de ELLAM a la ecuación (6.30), y será la ecuación de base para la solución numérica. Esta ecuación es la versión bidimensional de la (6.17). De nuevo, la primera integral será referida como la integral en el tiempo  $t^{n+1}$ ; la segunda como integral del término difusivo, y la primera integral del segundo miembro será la integral en el tiempo  $t^n$ .

#### *Elección de la función de peso*

Como se mencionó en la ecuación (6.35), la función de peso debe satisfacer la siguiente ecuación:

$$-S^* \frac{\partial w}{\partial t} + k^* \mathbf{k} \bullet \nabla w = 0 \quad (6.44)$$

Al desarrollarla, queda:

$$-\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{k^*}{S^*} \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (6.44a)$$

Se escogerá la función de peso tipo constante definida por:

$$w_{ij}(x, z, t) = \begin{cases} 1, & X(t^{n+1}; x, z, t) \in \xi_{ij}, t \in [t^n, t^{n+1}] \\ 0 & \text{de otra manera.} \end{cases} \quad (6.45)$$

donde las líneas características viajarán con la velocidad  $k^*/S^*$ . Obsérvese en la ecuación (6.44) que a pesar de ser el problema bidimensional, las líneas características a tomarse en cuenta son las definidas en el plano  $t$ - $z$ .

*Evaluación de las integrales*

De acuerdo con la definición de la función de peso dada por la ecuación (6.45),  $\partial w / \partial x$  y  $\partial w / \partial z$  serán una función delta de Dirac. Por lo tanto, la ecuación (6.43) se transformará en:

$$\begin{aligned}
 & \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S^{*n+1} \psi^{n+1}(x, z) dx dz \\
 & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \left[ \left( K^*_{xx} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{i-(1/2), j}^{n+1} \Delta t(x_{i-1/2}, z_j) - \left( K^*_{xx} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_{i+(1/2), j}^{n+1} \Delta t(x_{i+1/2}, z_j) \right] dz \\
 & + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ \left( K^*_{zz} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)_{i, j-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j-1/2}) - \left( K^*_{zz} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)_{i, j+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j+1/2}) \right] dx \\
 - B & = \int_{\xi_{ij}^*} S^{*n+1} \psi(x, z, t^n) w_{ij}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned} \tag{6.46}$$

donde los  $\Delta t(x_i, z_j)$  estarán definidos por:

$$\begin{aligned}
 \Delta t(x_i, z_j) & = t^{n+1} - t^*(x_i, z_j) \\
 \Delta t(x_{i-(1/2)}, z_j) & = t^{n+1} - t^*(x_{i-(1/2)}, z_j) \\
 \Delta t(x_i, z_{j-(1/2)}) & = t^{n+1} - t^*(x_i, z_{j-(1/2)})
 \end{aligned} \tag{6.47}$$

siendo los tiempos:  $t^*(x_i, z_j)$ ;  $t^*(x_{i-(1/2)}, z_j)$ ;  $t^*(x_i, z_{j-(1/2)})$  los tiempos en que respectivamente, una característica pudiera interceptar una frontera desde  $(x_i, z_j, t^{n+1})$ ;  $(x_{i-(1/2)}, z_j, t^{n+1})$ ;  $(x_i, z_{j-(1/2)}, t^{n+1})$ .

En general, las integrales que aparecen en la ecuación (6.46) serán evaluadas de manera análoga a como se procedió en el inciso 3.4.6 del capítulo 3. En el Anexo D se muestran estos cálculos.

**Linealización tipo Taylor-Fréchet**

Se demuestra, según la ecuación (4.34) del capítulo 4, que una linealización tipo Taylor-Fréchet está dada por:

$$\begin{aligned}
 & S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\Psi) + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] \\
 & + S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \bar{K} \Psi + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \bar{L} \Psi + K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] + \bar{S} \Psi = 0
 \end{aligned} \tag{6.48}$$

donde  $\bar{K} = K'(\Psi) \left( 1 + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)$ ;  $\bar{L} = K'(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ ;  $\bar{S} = S'(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t}$

Considerando que la ecuación (6.48) debe resolverse para la función de corrección  $\Psi(x, z, t)$ , en forma vectorial esta ecuación se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
 \ell(\Psi) \equiv & S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{v} \Psi - \nabla \cdot (\mathbf{K}(\Psi) \nabla \Psi) + \bar{S} \Psi = \\
 & - S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{K}(\Psi) \nabla \Psi) + \frac{\partial K(\Psi)}{\partial z}, \quad (x, z) \in \Omega, t \in [0, T]
 \end{aligned} \tag{6.49}$$

donde se considera que el vector de velocidades en el plano  $x$ - $z$  está definido por:

$$\mathbf{v} = \bar{L} \mathbf{i} + \bar{K} \mathbf{k} \tag{6.50}$$

Obsérvese que la ecuación (6.49), para la función de corrección  $\Psi(x, z, t)$ , es una ecuación lineal de advección-difusión-reacción, como la ecuación (3.82) vista en el capítulo 3. Por lo tanto, se puede aplicar ELLAM para resolverla como a continuación se muestra.

ELLAM considera la primera forma débil de la ecuación (6.49) obtenida como:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \int_{\Omega} \left[ S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{v} \Psi - \nabla \cdot (\mathbf{K}(\Psi) \nabla \Psi) + \bar{S} \Psi \right] w(x, z, t) = \\
 & \int_0^T \int_{\Omega} \left[ - S(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{K}(\Psi) \nabla \Psi) + \bar{K} \mathbf{k} \right] w(x, z, t), \quad (x, z) \in \Omega, t \in [0, T]
 \end{aligned} \tag{6.51}$$

Empleando en la ecuación (6.51) la fórmula de diferenciación  $(w \Psi)' = w \Psi' + \Psi w'$ , se obtiene:

$$\begin{aligned}
 (\nabla \cdot \mathbf{v} \Psi) w &= \nabla \cdot (\mathbf{v} \Psi w) - \mathbf{v} \Psi \cdot \nabla w \\
 [\nabla \cdot (\mathbf{K}(\Psi) \nabla \Psi)] w &= \nabla \cdot [(\mathbf{K}(\Psi) \nabla \Psi) w] - (\mathbf{K}(\Psi) \nabla \Psi) \cdot \nabla w
 \end{aligned} \tag{6.52}$$

por lo tanto, la ecuación (6.51) se escribe como:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ S \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} + (\mathbf{K} \nabla \Psi) \cdot \nabla w - \nabla \cdot [(\mathbf{v} \Psi) + (\mathbf{K} \nabla \Psi) w] \right. \\
 & \left. - \Psi \left[ S \frac{\partial w}{\partial t} - \mathbf{v} \cdot \nabla w - \bar{S} w \right] \right\} d\Omega dt = \\
 & \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ -S \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} - (\mathbf{K} \nabla \Psi + \mathbf{K} \dot{\mathbf{K}}) \cdot \nabla w + \nabla \cdot [\mathbf{K}(\Psi) \dot{\mathbf{K}} w + (\mathbf{K} \nabla \Psi) w] - \bar{S} \Psi w - \mathbf{v} \Psi \cdot \nabla w \right. \\
 & \left. - \Psi \left[ S \frac{\partial w}{\partial t} - \mathbf{v} \cdot \nabla w - \bar{S} w \right] \right\} d\Omega dt
 \end{aligned} \tag{6.53}$$

Es conveniente hacer algunas observaciones respecto a la ecuación (6.53). ELLAM propone que la función de peso  $w(x,z,t)$  anule la última integral de ambos miembros de la ecuación. Por otra parte, la fórmula de Green transforma la tercera integral de ambos miembros en una integral de frontera. El cuarto y quinto término del miembro derecho resultan de artificios algebraicos. De estas observaciones, la ecuación (6.53) se transforma en:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ S \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} + (\mathbf{K} \nabla \Psi) \cdot \nabla w \right\} d\Omega dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} [(\mathbf{v} \Psi) + (\mathbf{K} \nabla \Psi)] \cdot \boldsymbol{\eta} w dS dt = \\
 & \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ -S \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} - (\mathbf{K} \nabla \Psi + \mathbf{K} \dot{\mathbf{K}}) \cdot \nabla w - \bar{S} \Psi w - \mathbf{v} \Psi \cdot \nabla w \right\} d\Omega dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} [(\mathbf{K}(\Psi) \dot{\mathbf{K}} + \mathbf{K} \nabla \Psi)] \cdot \boldsymbol{\eta} w dS dt
 \end{aligned} \tag{6.54}$$

$dS$  representa una diferencial de frontera y  $\boldsymbol{\eta}$  es un vector unitario perpendicular a la frontera  $\partial\Omega$ .

La ecuación (6.54) sugiere dividir el intervalo  $[0, T]$  en una suma finita de intervalos  $\sum_{n=0}^N [t^{n+1} - t^n]$ , tal que  $\Delta t = [t^{n+1} - t^n]$ . Por ello, esta ecuación, aplicada a un intervalo  $[t^{n+1} - t^n]$  se escribe como:

$$\begin{aligned}
 & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left\{ S \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} + (\mathbf{K} \nabla \Psi) \cdot \nabla w \right\} d\Omega dt - B1 = \\
 & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \left\{ -S \frac{\partial(\Psi w)}{\partial t} - (\mathbf{K} \nabla \Psi + \mathbf{K} \dot{\mathbf{K}}) \cdot \nabla w - \bar{S} \Psi w - \mathbf{v} \Psi \cdot \nabla w \right\} d\Omega dt + B2
 \end{aligned} \tag{6.55}$$

donde se ha hecho:

$$\begin{aligned}
 B1 &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} [(\mathbf{v}\Psi) + (\mathbf{K}\nabla\Psi)] \cdot \boldsymbol{\eta} w dS dt \\
 B2 &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} [(K(\Psi)\mathbf{k} + \mathbf{K}\nabla\Psi)] \cdot \boldsymbol{\eta} w dS dt
 \end{aligned}
 \tag{6.56}$$

Por otra parte, considérese el espacio dividido en un conjunto de celdas de dimensiones  $(\Delta x_i, \Delta z_j)$  centradas en el nodo  $(x_i, z_j)$ , tal que  $x_{i\pm 1/2} = x_i \pm \Delta x_i / 2$ ;  $z_{j\pm 1/2} = z_j \pm \Delta z_j / 2$ . De tal forma que a cada celda se asocia una función de peso  $w_{ij}(x, z, t)$ . La región en  $t^{n+1}$  correspondiente a la celda  $i, j$  se denotará con  $\xi_{ij}$ . Esta región al ser advectada hacia atrás en  $t^n$ , se denotará con  $\xi_{ij}^*$  (figura 3.29).

Con estas indicaciones la ecuación (6.55) puede ser resuelta para la región  $\xi_{ij}$  de la forma siguiente:

$$\begin{aligned}
 \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left\{ S \frac{\partial(\Psi w_{ij})}{\partial t} + (\mathbf{K}\nabla\Psi) \cdot \nabla w_{ij} \right\} dx dz dt - B1 = \\
 \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left\{ -S \frac{\partial(\Psi w_{ij})}{\partial t} - (\mathbf{K}\nabla\Psi + \mathbf{K}\mathbf{k}) \cdot \nabla w_{ij} - \bar{S}\Psi w_{ij} - \mathbf{v}\Psi \cdot \nabla w_{ij} \right\} dx dz dt + B2
 \end{aligned}
 \tag{6.57}$$

donde  $B1$  y  $B2$  están definidas por la ecuación (6.56).

Empleando una aproximación totalmente implícita de la ecuación (6.57), se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S^{n+1} [(\Psi w_{ij})_{(x,z,t^{n+1})} - (\Psi w_{ij})_{(x,z,t^n)}] dx dz \\
 + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [(\mathbf{K}\nabla\Psi) \cdot \nabla w_{ij}]_{(x,z,t^{n+1})} \Delta t(x, z) dx dz - B1 = \\
 \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -S^{n+1} [(\Psi w_{ij})_{(x,z,t^{n+1})} - (\Psi w_{ij})_{(x,z,t^n)}] dx dz \\
 + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [(-\mathbf{v}\Psi - \mathbf{K}\nabla\Psi - \mathbf{K}\mathbf{k}) \cdot \nabla w_{ij} - \bar{S}\Psi w_{ij}]_{(x,z,t^{n+1})} \Delta t(x, z) dx dz + B2
 \end{aligned}
 \tag{6.58}$$

Para los ejes principales  $x, y, z$ , el tensor de la conductividad hidráulica queda definido como se indica en la expresión (6.41). Por lo tanto, el

término de la conductividad hidráulica, en la ecuación (6.58) y para las direcciones x-z queda definido de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} [(\mathbf{K}\nabla\psi)\cdot\nabla w_{ij}] &= \frac{\partial w_{ij}}{\partial x} \left[ K_{xx} \frac{\partial\psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial w_{ij}}{\partial z} \left[ K_{zz} \frac{\partial\psi}{\partial z} \right] \\ [(\mathbf{K}\nabla\psi + \mathbf{K}\hat{\mathbf{k}})\cdot\nabla w_{ij}] &= \frac{\partial w_{ij}}{\partial x} \left[ K_{xx} \frac{\partial\psi}{\partial x} \right] + \frac{\partial w_{ij}}{\partial z} \left[ K_{zz} \frac{\partial\psi}{\partial z} \right] + K_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} \end{aligned} \quad (6.59)$$

Y, para el término de la velocidad, según la expresión (6.50), es:

$$\mathbf{v}\psi\cdot\nabla w_{ij} = \bar{L}\psi \frac{\partial w_{ij}}{\partial x} + \bar{K}\psi \frac{\partial w_{ij}}{\partial z} \quad (6.60)$$

Sustituyendo la ecuación (6.59) y (6.60) en la ecuación (6.58), se obtiene:

$$\begin{aligned} &\int_{z_{j-1/2}^{X_{j-1/2}}}^{z_{j+1/2}^{X_{j+1/2}}} \int_{x_{j-1/2}^{X_{j-1/2}}}^{x_{j+1/2}^{X_{j+1/2}}} S^{n+1} [(\psi w_{ij})_{x,z,t^{n+1}} - (\psi w_{ij})_{x,z,t^n}] dx dz \\ &+ \int_{z_{j-1/2}^{X_{j-1/2}}}^{z_{j+1/2}^{X_{j+1/2}}} \int_{x_{j-1/2}^{X_{j-1/2}}}^{x_{j+1/2}^{X_{j+1/2}}} \left[ \frac{\partial w_{ij}}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{\partial\psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial w_{ij}}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{\partial\psi}{\partial z} \right) \right]_{(x,z,t^{n+1})} \Delta t(x,z) dx dz - B1 = \\ &\int_{z_{j-1/2}^{X_{j-1/2}}}^{z_{j+1/2}^{X_{j+1/2}}} \int_{x_{j-1/2}^{X_{j-1/2}}}^{x_{j+1/2}^{X_{j+1/2}}} -S^{n+1} [(\psi w_{ij})_{x,z,t^{n+1}} - (\psi w_{ij})_{x,z,t^n}] dx dz \\ &+ \int_{z_{j-1/2}^{X_{j-1/2}}}^{z_{j+1/2}^{X_{j+1/2}}} \int_{x_{j-1/2}^{X_{j-1/2}}}^{x_{j+1/2}^{X_{j+1/2}}} \left[ \frac{\partial w_{ij}}{\partial x} \left( -\bar{L}\psi - K_{xx} \frac{\partial\psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial w_{ij}}{\partial z} \left( -\bar{K}\psi - K_{zz} \frac{\partial\psi}{\partial z} - K_{zz} \right) - \bar{S}\psi w_{ij} \right]_{(x,z,t^{n+1})} \Delta t(x,z) dx dz + B2 \end{aligned} \quad (6.61)$$

La ecuación (6.61) representa la aplicación de ELLAM a la ecuación (6.48), y será la ecuación de base para la solución numérica. Esta ecuación es la versión bidimensional de la ecuación (6.23).

### *Elección de la función de peso*

Como se mencionó a propósito de la ecuación (6.53), la función de peso debe satisfacer la siguiente ecuación:

$$S \frac{\partial w}{\partial t} - \mathbf{v}\cdot\nabla w - \bar{S}w = 0 \quad (6.62)$$

Considerando la ecuación (6.50) al desarrollar la ecuación (6.62), se obtiene:

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\bar{L}}{S} \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\bar{K}}{S} \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\bar{S}}{S} w = 0 \quad (6.63)$$

Si en la ecuación (6.63) se hace  $v_x = \bar{L} / S(\Psi)$ ,  $v_z = \bar{K} / S(\Psi)$  y  $\gamma = \bar{S} / S(\Psi)$ , la misma ecuación se puede escribir de la forma siguiente:

$$\frac{\partial w}{\partial t} - v_x \frac{\partial w}{\partial x} - v_z \frac{\partial w}{\partial z} - \gamma w = 0 \quad (6.63a)$$

la cual es una ecuación de advección-reacción. Por lo tanto,  $v_x$  es la velocidad a la que viajan las líneas características en la dirección  $x$ ,  $v_z$  es la velocidad a la que viajan las líneas características en la dirección  $z$ , y  $\gamma$  es el término reactivo. Es importante observar que a diferencia de la ecuación (6.44), obtenida en la linealización tipo Picard, en la ecuación (6.63) las líneas características en los planos  $t$ - $x$  y  $t$ - $z$  son tomadas en cuenta, como era de esperarse.

De manera análoga a como se ha mostrado anteriormente, se elegirá una función de peso constante en el espacio y exponencialmente variable en el tiempo, definida como:

$$w_{ij}(x, z, t) = \begin{cases} \int_{t^n}^t \gamma d\bar{t} \\ e^{\gamma \bar{t}} & ; (x, z, t) \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [z_{j-1/2}, z_{j+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}] \\ 0 & ; \text{de otra forma} \end{cases} \quad (6.64)$$

Esta elección implica que en la ecuación (6.61)  $\partial w_{ij} / \partial x$ ;  $\partial w_{ij} / \partial z$  sea una función delta. Además, considerando una aproximación totalmente implícita para las integrales temporales, la ecuación (6.61) se transforma en:

$$\begin{aligned}
 & \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} S_{ij}^{n+1} \Psi(x, z, t^{n+1}) \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dx dz - \int_{\Omega} S_{ij}^{n+1} \Psi(x, z, t^n) W_{ij}(x, z, t^n) d\Omega \\
 & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \left[ \left( K_{xx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_{i-(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i-(1/2)}, z_j) - \left( K_{xx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_{i+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ \left( K_{zz} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)_{i,j-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j-(1/2)}) - \left( K_{zz} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)_{i,j+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dx \\
 & - B1 = \\
 & \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -S_{ij}^{n+1} \Psi(x, z, t^{n+1}) \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dx dz - \int_{\Omega} S_{ij}^{n+1} \Psi(x, z, t^n) W_{ij}(x, z, t^n) d\Omega \\
 & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \left[ \left( -\bar{L}\Psi + K_{xx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_{i-(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i-(1/2)}, z_j) - \left( -\bar{L}\Psi + K_{xx} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_{i+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ \left( -\bar{K}\Psi + K_{zz} \frac{\partial \Psi}{\partial z} + K_{zz} \right)_{i,j-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j-(1/2)}) - \left( -\bar{K}\Psi + K_{zz} \frac{\partial \Psi}{\partial z} + K_{zz} \right)_{i,j+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [-\bar{S}\Psi]_{(x,z)}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) dx dz + B2
 \end{aligned} \tag{6.65}$$

donde:

$$\begin{aligned}
 B1 &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} [(\mathbf{v}\Psi) + (\mathbf{K}\nabla\Psi)] \cdot \boldsymbol{\eta} W_{ij} dS dt \\
 B2 &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} [(K(\Psi)\hat{\mathbf{k}} + \mathbf{K}\nabla\Psi)] \cdot \boldsymbol{\eta} W_{ij} dS dt
 \end{aligned} \tag{6.65a}$$

obsérvese que en la ecuaciones (6.65) se ha introducido la función de peso aproximada  $W_{ij}$ , tal y como fue definida en la ecuación (3.36) del capítulo 3. Los  $\Delta t(x_i, z_j)$  están definidos por la relación (6.47).

Por otra parte, se comprueba (Anexo B) que:

$$-B1 - B2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{w}\boldsymbol{\eta}(z) d\Omega dt \tag{6.66}$$

donde  $\mathbf{q}$  es el flujo de Darcy.

En general, las integrales que aparecen en la ecuación (6.65) serán evaluadas de manera análoga a como se procedió en el inciso 3.4.6 del capítulo 3. En el Anexo E se muestran estos cálculos.

### 6.2.2.1. Ejemplos de aplicación

#### Ejemplo 6.11

Con el fin de depurar el código del programa en dos dimensiones, se resuelve este ejemplo. El cual corresponde a un problema en una dimensión.

Esta aplicación simula infiltración en una columna de suelo de 1.25 m x 1.25 m de ancho. La condición inicial es una condición uniforme de humedad en toda la columna que corresponde a una presión de  $-3\text{m}$ , la condición de frontera en la superficie es una condición tipo Dirichlet con un valor de la presión de  $-1.0\text{m}$ . En la parte inferior ( $z=0$ ) la condición de frontera es también tipo Dirichlet con un valor de la presión de  $-3.0\text{m}$ .

Las características hidrodinámicas son: humedad residual,  $\theta_r = 0.15$ ; humedad de saturación,  $\theta_s = 0.38$ ; parámetro empírico,  $\psi_s = -1.2\text{ m}$ ; índice de distribución de tamaños de poros,  $n = 4$ ; conductividad hidráulica a saturación,  $k_s = 0.0004\text{ m/h}$ , y parámetro específico de almacenamiento,  $S_s = 0.0001$ .

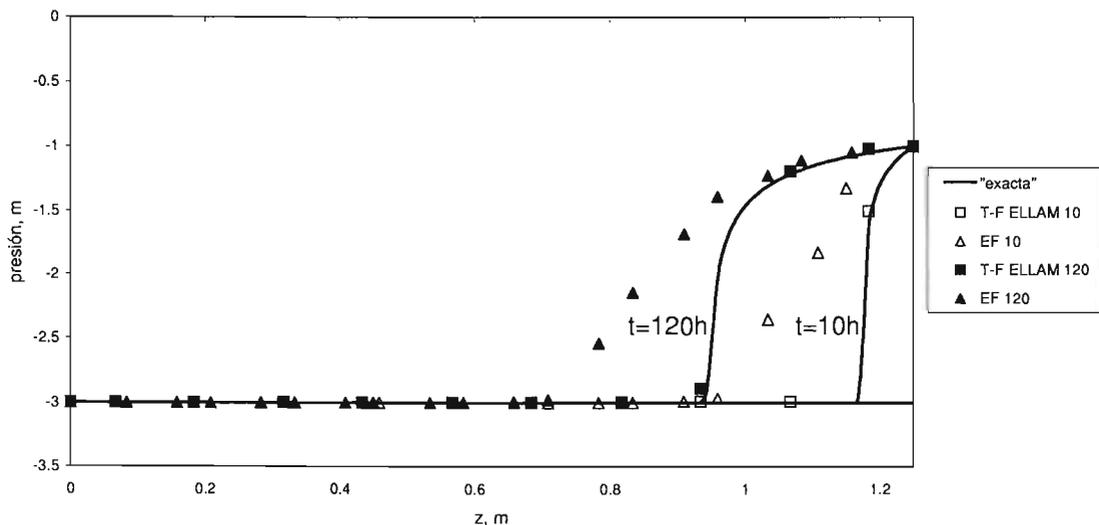


Figura 6.21. Comparación entre resultados Taylor-Fréchet ELLAM, diferencias finitas y elemento finito del ejemplo 6.11.

En la figura 6.21 las leyendas indican lo siguiente:

“exacta”, corresponde a una solución en diferencias finitas para una malla muy fina para los tiempos de 10 h y 120 h.

T-F ELLAM 10, corresponde a la solución para un tiempo de 10 horas obtenida a través de la metodología Taylor-Fréché ELLAM.

T-F ELLAM 120, corresponde a la solución para un tiempo de 120 horas obtenida a través de la metodología Taylor-Fréché ELLAM

EF 10, es la solución para un tiempo de 10 horas obtenida a través de elemento finito (hydrus).

EF 120, es la solución para un tiempo de 120 horas obtenida a través de elemento finito (hydrus).

Solución	$\Delta t$ , hr	$\Delta z$ , m
exacta	0.01	0.00833
T-F ELLAM 10, 120	1.0	0.125
EF 10, 120	1.0	0.125

Cuadro 6.3. Parámetros de cálculo para el ejemplo 6.11.

Observando las gráficas se muestra que las soluciones obtenidas con T-F ELLAM concuerdan muy satisfactoriamente con los valores "exactos" en los nodos correspondientes, mientras que las soluciones obtenidas con elemento finito presentan una fuerte discrepancia.

El cuadro de parámetros de cálculo indica que las soluciones de T-F ELLAM y de elemento finito son cien veces menos densas en el tiempo y quince veces menos densas en el espacio. Sin embargo, las soluciones obtenidas con elemento finito dejan de ser satisfactorias.

### *Ejemplo 6.12*

Este ejemplo en dos dimensiones corresponde a una infiltración de una lámina parcial de agua en una columna de suelo de 5.0 m x 5.0 m. La condición inicial es una condición uniforme de humedad en toda la columna que corresponde a una presión de  $-1.0$  m. La condición de frontera en la superficie ( $z=5$ ) es una condición tipo Neumann con un flujo de Darcy de 0.01 m/h dada en la porción que ocupa la lámina central, fuera de la región de la lámina la condición es de flujo nulo. En la cara inferior ( $z=0$ ) la condición de frontera es tipo Dirichlet con un valor de la presión de  $-1.0$  m. En las demás fronteras la condición es un gradiente nulo. La lámina parcial de agua mide 1.0 m de ancho y es simétrica respecto al centro de la columna.

Las características hidrodinámicas son: humedad residual,  $\theta_r = 0.15$ ; humedad de saturación,  $\theta_s = 0.38$ ; parámetro empírico,  $\psi_s = -1.2$  m; índice de distribución de tamaños de poros,  $n = 4$ ; conductividad hidráulica a saturación,  $k_s = 0.01$  m/h, y parámetro específico de almacenamiento,  $S_s = 0.0001$ .

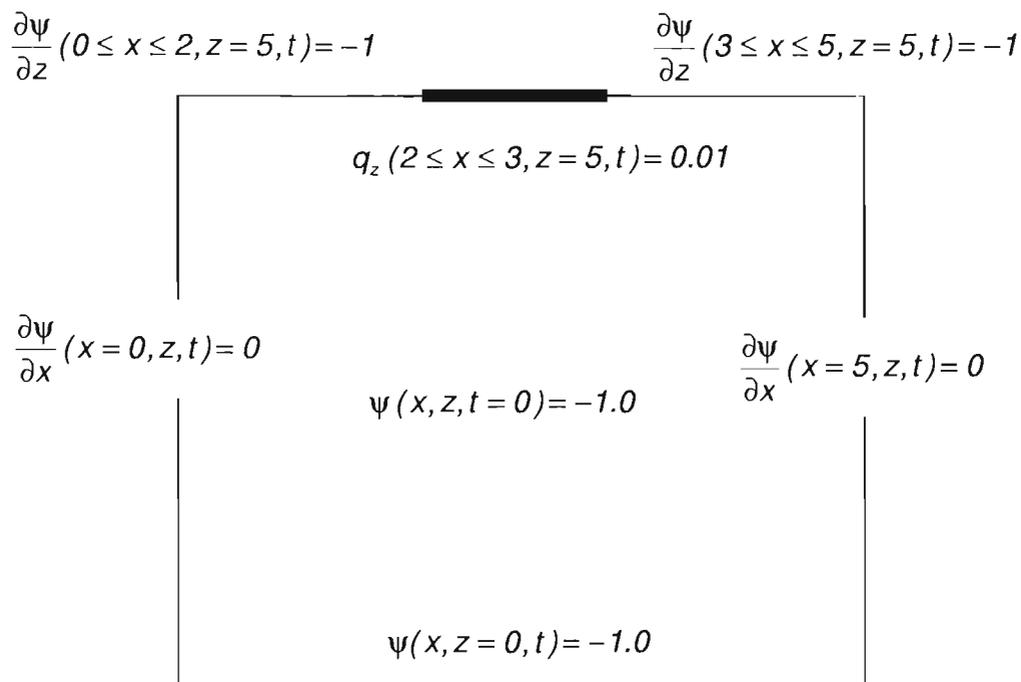


Figura 6.22. Condiciones iniciales y de frontera del ejemplo 6.12.

La solución "exacta" fue obtenida con una solución en diferencias finitas centrada en el espacio y totalmente implícita en el tiempo. Con el fin de no emplear mucho tiempo de máquina para la obtención de esta solución (en una computadora personal una solución muy fina puede tardar varios días, incluso algunas semanas) se eligió la aproximación obtenida con la malla espacio temporal menos densa para la cual la diferencia en los resultados fueran no significativos respecto a una malla más fina. El procedimiento fué el siguiente.

Fijo un intervalo de tiempo  $\Delta t$ , se obtuvieron las soluciones variando el incremento espacial ( $\Delta x = \Delta z$ ). Para cada uno de los cortes y para una serie de tiempos elegidos, se obtuvo la integral del cuadrado de las diferencias dividida por la longitud del corte y sumada ésta para el número total de cortes y tiempos elegidos (este resultado es llamado parámetro de diferencia). Este parámetro se obtuvo entre dos intervalos espaciales contiguos. Se realizó una gráfica entre el parámetro de diferencia

(ordenada) y el incremento del tiempo,  $\Delta t$  (abcisa). El número de cortes fueron cuatro: dos verticales ( $x=0$ ,  $x=2.5$ ), y dos horizontales ( $z=2.5$ ,  $z=5.0$ ). El número de tiempos elegidos fueron tres ( $t=10$ ,  $20$  y  $30$ ). Los resultados son mostrados en la figura 6.23.

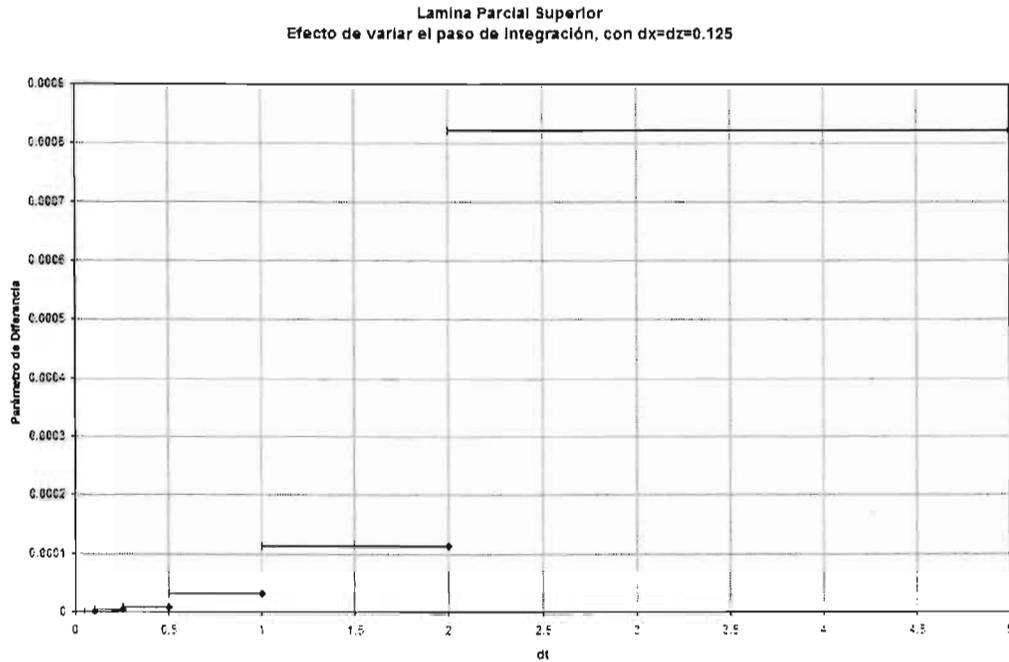


Figura 6.23. Elección del incremento temporal del ejemplo 6.12.

En la figura anterior se puede ver que entre un incremento en el tiempo de 0.125 y 0.25 la diferencia es la mínima, por lo tanto la solución numérica empleando un  $\Delta t=0.25$  corresponde a la malla temporal menos densa para la cual la diferencia de los resultados, respecto a una malla temporal más fina, no es significativa.

Seleccionando  $\Delta t=0.25$ , se realizó el mismo procedimiento pero ahora variando el incremento espacial  $\Delta x=\Delta z$ . Los resultados se muestran en la figura 6.24, en donde se observa que el valor es  $\Delta x=\Delta z=0.125$ .

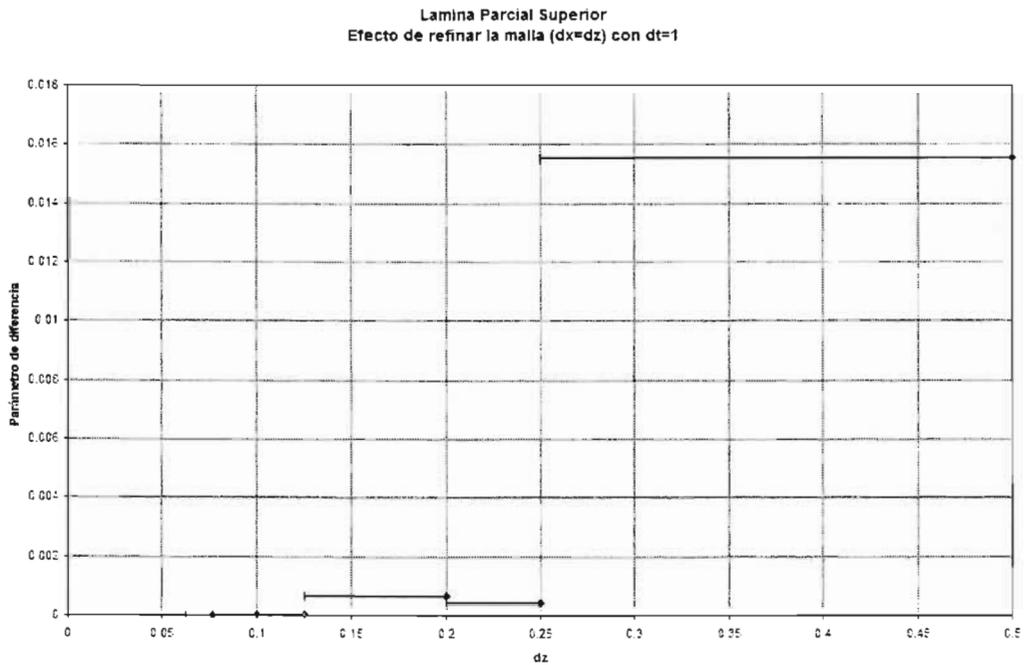


Figura 6.24. Elección del incremento espacial en el ejemplo 6.12.

A continuación se muestran las soluciones obtenidas con diferencias finitas ("solución exacta"), y las obtenidas con ELLAM y elemento finito para diferentes tiempos.

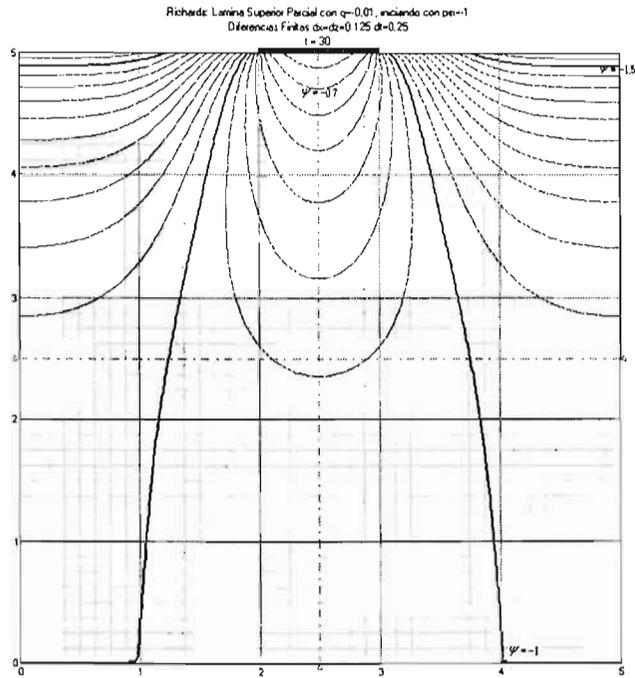


Figura 6.25. Solución "exacta" del ejemplo 6.12 para  $t=30$  h.

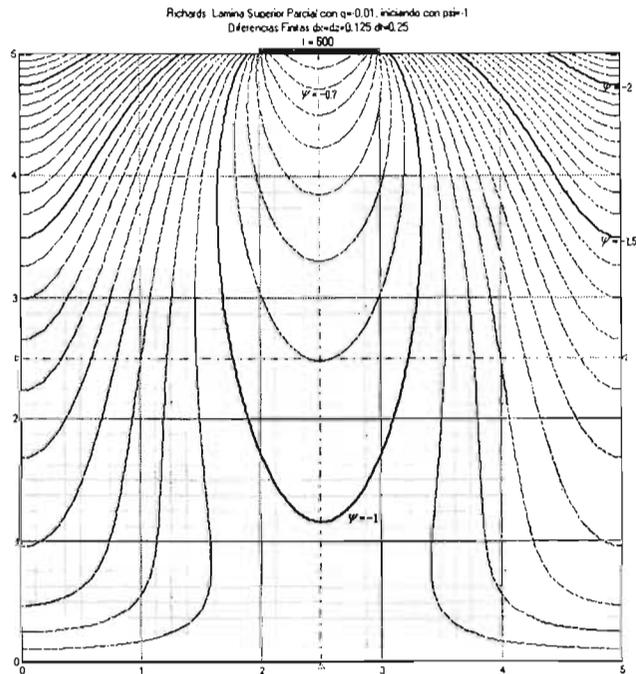


Figura 6.26. Solución "exacta" del ejemplo 6.12 para  $t=500$  h.

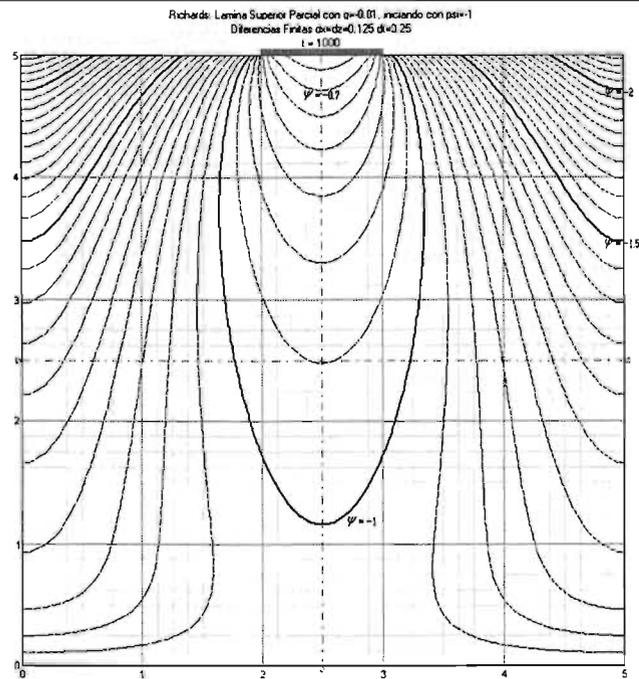


Figura 6.27. Solución "exacta" del ejemplo 6.12 para  $t=1000$  h.

Como se puede observar en las figuras 6.26 y 6.27 el fenómeno alcanza un estado prácticamente permanente. Para estos tiempos se compararon la metodología propuesta y una solución en elemento finito obtenida a través de *Hydrus*. Los resultados son los siguientes:

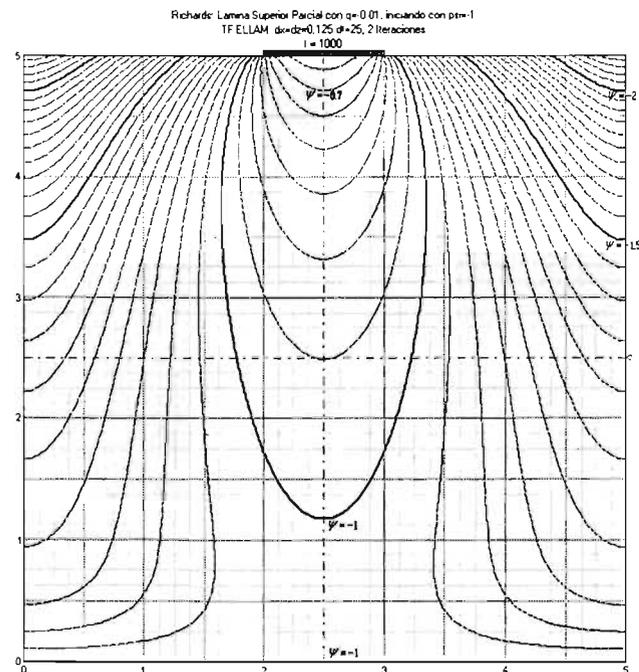


Figura 6.28. Solución del ejemplo 6.12 con T-F ELLAM y dos iteraciones.

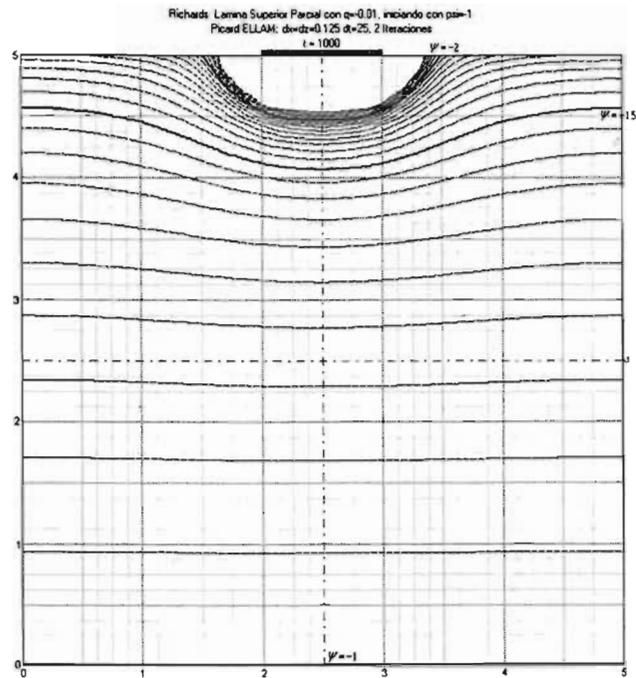


Figura 6.29. Solución del ejemplo 6.12 con Picard ELLAM y dos iteraciones.

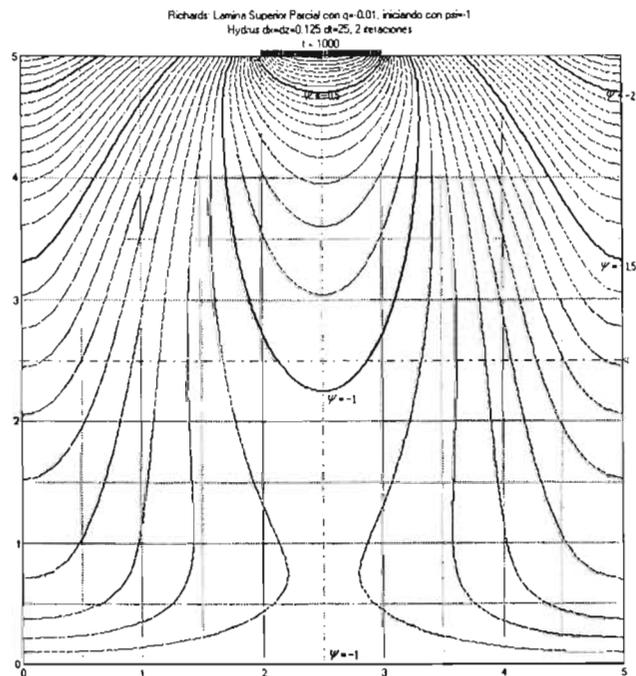


Figura 6.30. Solución del ejemplo 6.12 con Elemento finito y dos iteraciones.

Al comparar los resultados anteriores para un corte vertical en  $x=2.5$  y un corte horizontal en  $z=5$  en el tiempo  $t=1000$ , se obtiene:

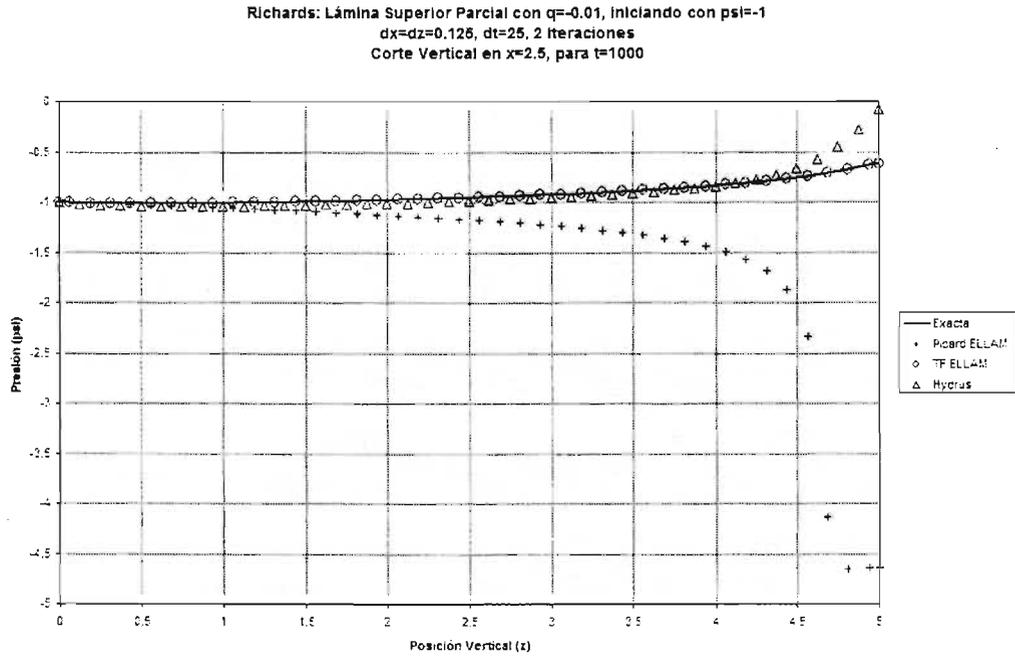


Figura 6.31. Comparación de resultados del ejemplo 6.12 para un corte vertical en  $x=2.5$ .

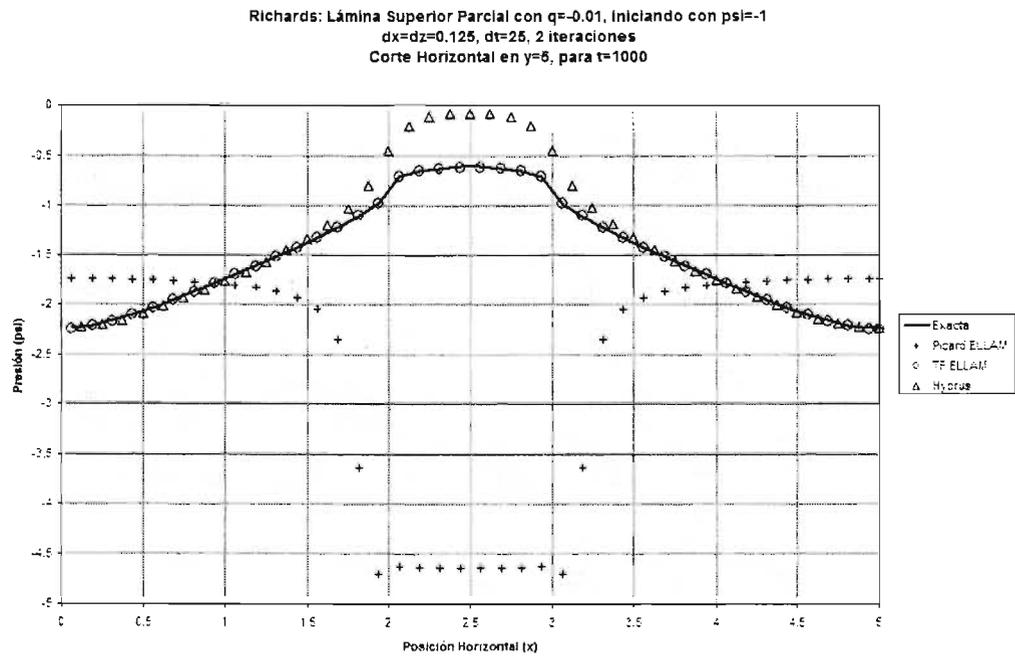


Figura 6.32. Comparación de resultados del ejemplo 6.12 para un corte horizontal en  $z=5$ .

Para la obtención de estos resultados se utiliza un incremento en el tiempo cien veces mayor respecto al usado en la solución exacta. Como se observa en las figuras anteriores, para T-F ELLAM las soluciones son idénticas con la "exacta" con solo dos iteraciones. La solución con elemento finito (Hydrus) presenta diferencias apreciables. Sorprenden las soluciones obtenidas con ELLAM cuando se usa una linealización tipo Picard, al respecto esto se explica con más detalle en el anexo H.

### Ejemplo 6.13

En este ejemplo las propiedades hidrodinámicas y las condiciones iniciales del suelo son reportadas en Celia *et al.*, (1987), y están obtenidas de mediciones en campo. Las expresiones son:

$$K(\psi) = \begin{cases} 1343 |\psi|^{-3.3095} & \psi < -29.48 \\ 0.3589 |\psi|^{-0.97814} & \psi \geq -29.48 \end{cases}$$

$$\theta(\psi) = \begin{cases} 0.6829 - 0.09524 \ln|\psi| & \psi < -29.48 \\ 0.4531 - 0.02732 \ln|\psi| & \psi \geq -29.48 \end{cases}$$

$$\theta(x, z, 0) = \begin{cases} 0.2 - (0.05) \left( \frac{z-5}{60} \right) & 5 \leq z \leq 65 \\ 0.2 & z \leq 5 \end{cases}$$

Las unidades de longitud y tiempo son centímetros y minutos respectivamente. La columna de suelo mide 50 cm de ancho y 65 cm de alto. A la columna se le aplica una lámina parcial en el extremo superior izquierdo con las siguientes condiciones de frontera.

$$\theta(0 \leq x \leq 8, z = 65, t) = 0.38 \quad \frac{\partial \psi}{\partial z}(8 \leq x \leq 50, z = 65, t) = -1$$

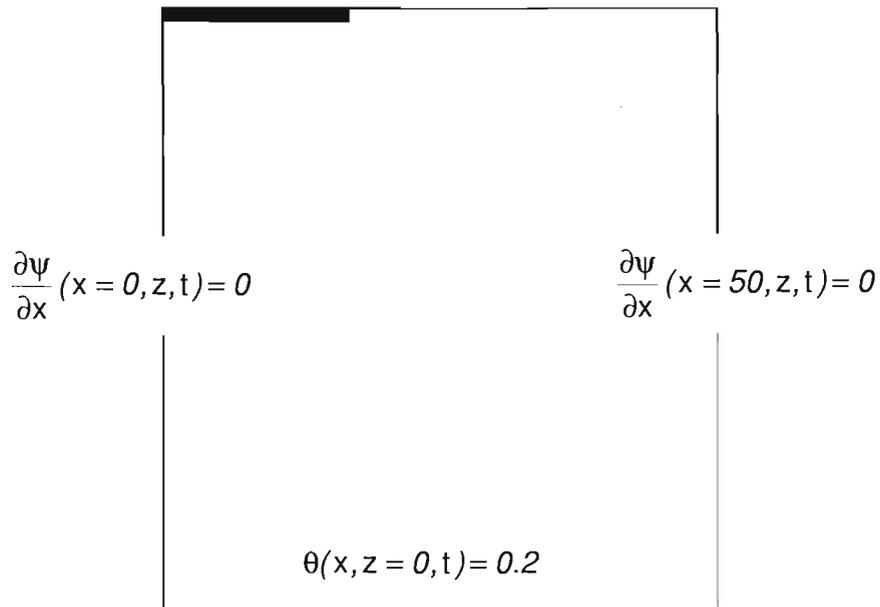


Figura 6.33. Condiciones de frontera del ejemplo 6.13.

Al igual que el ejemplo anterior, la solución "exacta" fue elegida con el mismo procedimiento. Los resultados de éste se muestran a continuación.

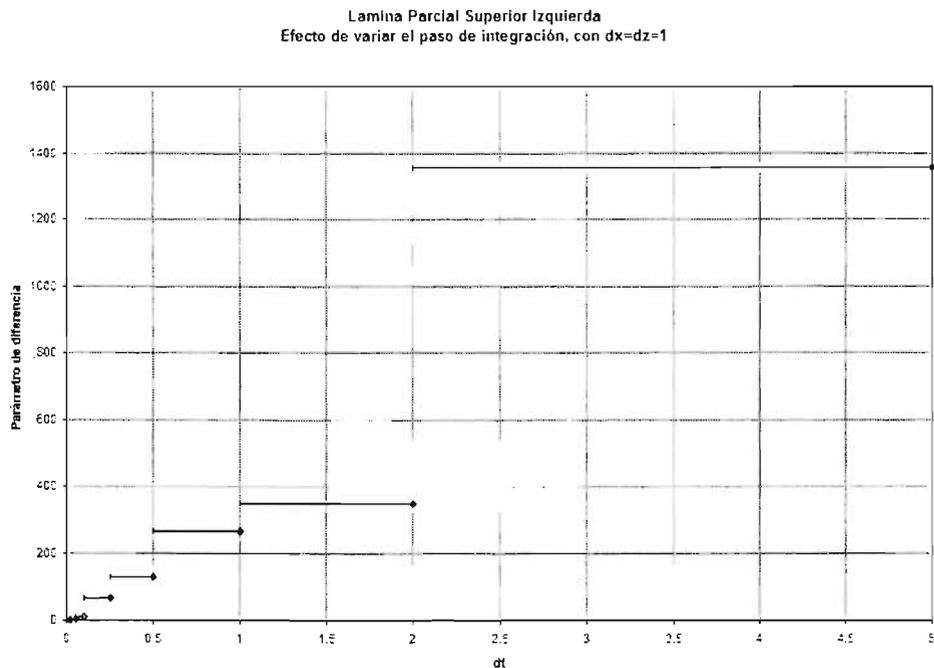


Figura 6.34. Elección del incremento temporal del ejemplo 6.13.

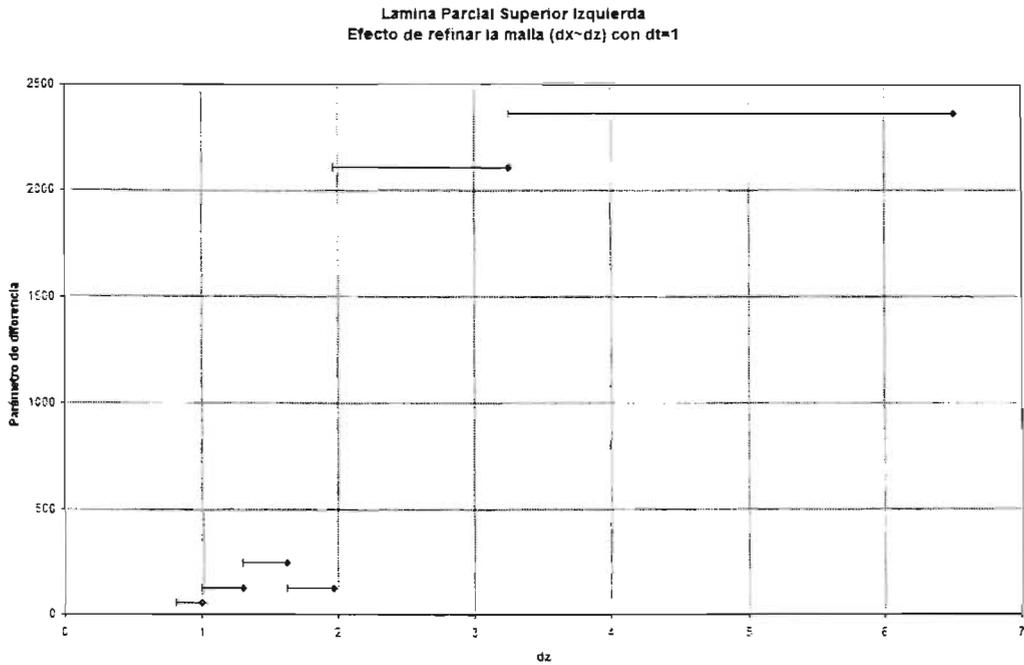


Figura 6.35. Elección del incremento espacial del ejemplo 6.13.

A continuación se muestran las soluciones obtenidas con diferencias finitas ("solución exacta"), y las obtenidas con ELLAM. Con elemento finito no se muestran los resultados debido a que no se tiene la opción de introducir las propiedades hidrodinámicas como fueron mencionadas anteriormente.

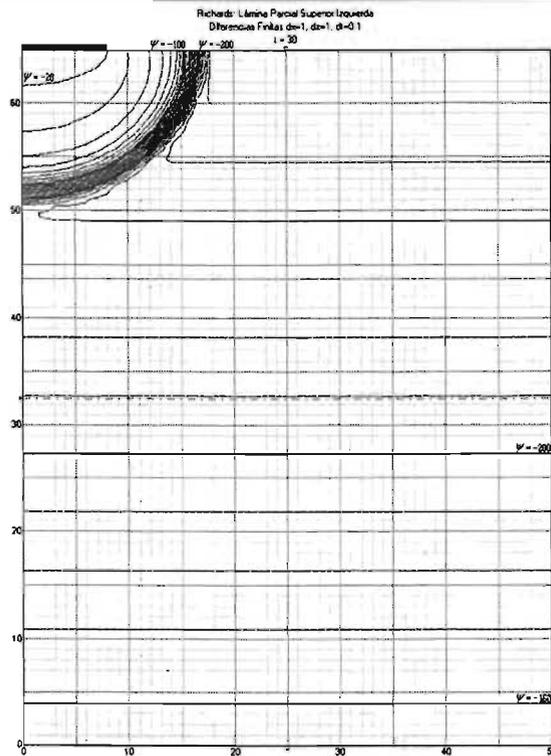


Figura 6.36. Solución "exacta" del ejemplo 6.13 para  $t=30$  min.

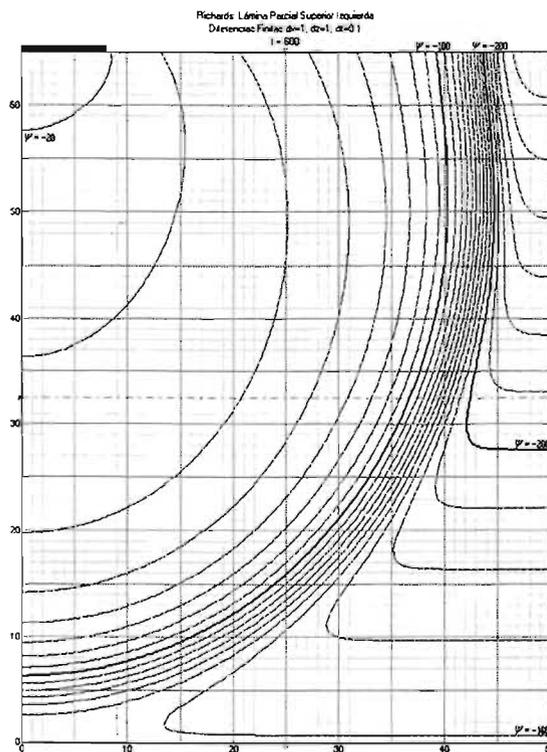


Figura 6.37. Solución "exacta" del ejemplo 6.13 para  $t=600$  min.

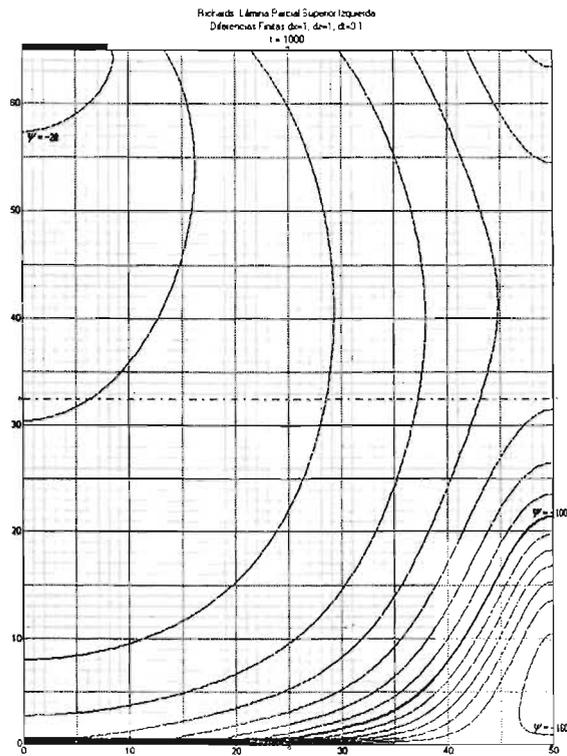


Figura 6.38. Solución "exacta" del ejemplo 6.13 para  $t=1000$  min.

Los resultados siguientes son obtenidos con T-F ELLAM, Picard ELLAM y con diferencias finitas empleando únicamente dos iteraciones. El incremento espacial se conserva y el incremento temporal se aumenta cien veces. Los resultados se comparan en dos cortes ( $x=0$  y  $z=65$ ) para un tiempo de  $t=1000$  min.

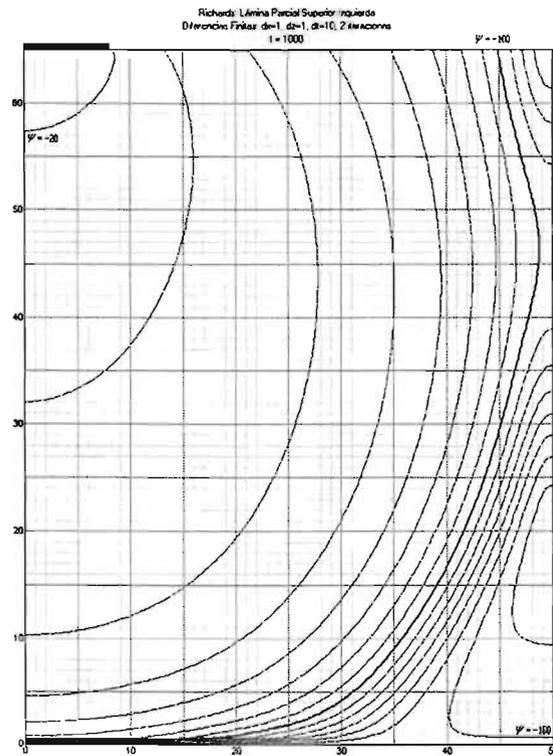


Figura 6.39. Solución del ejemplo 6.13 con diferencias finitas y dos iteraciones.

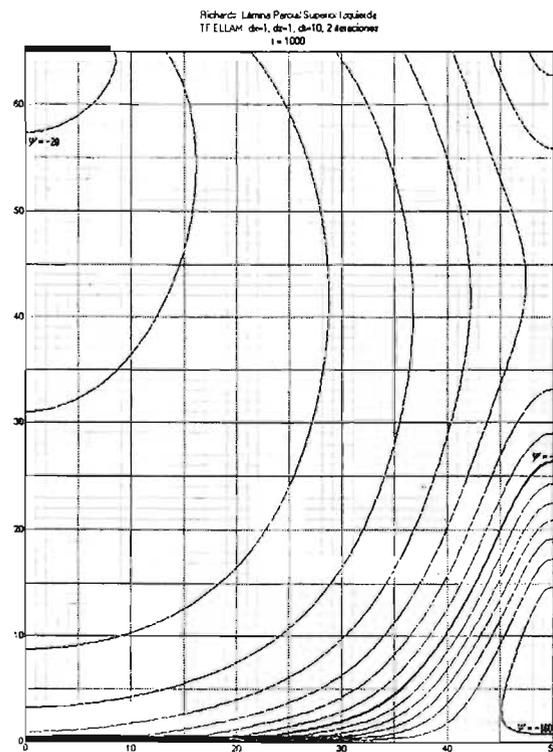


Figura 6.40. Solución del ejemplo 6.13 con T-F ELLAM y dos iteraciones.

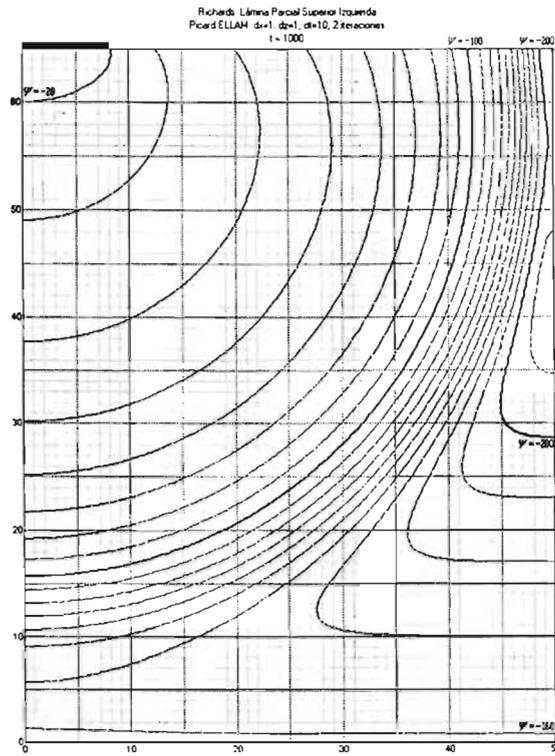


Figura 6.41. Solución del ejemplo 6.13 con Picard ELLAM y dos iteraciones.

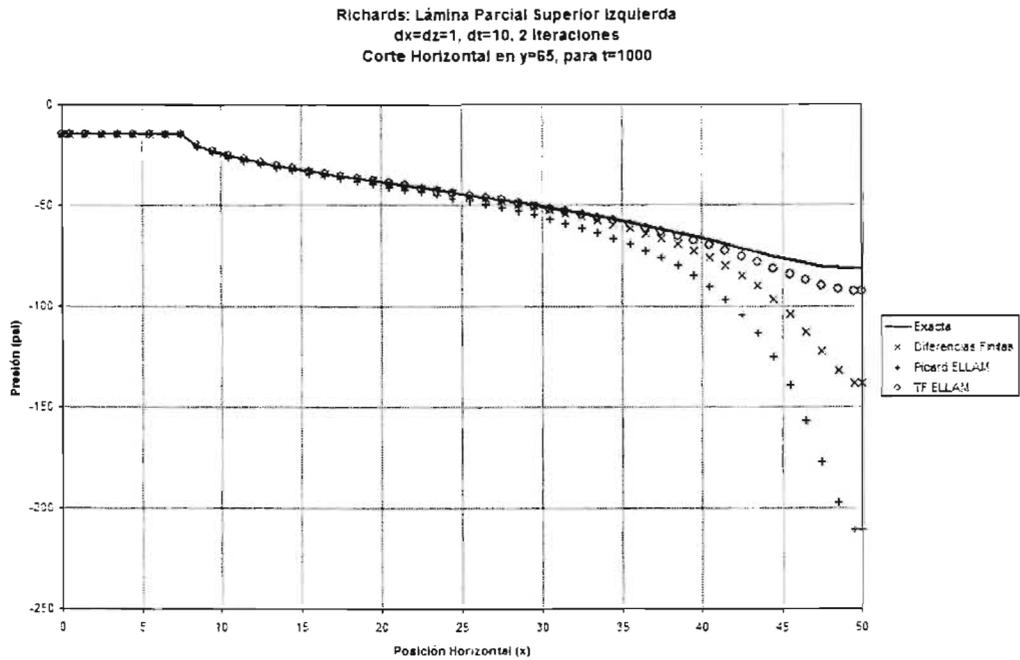


Figura 6.42. Comparación de resultados del ejemplo 6.13 para un corte horizontal en  $z=65$ .

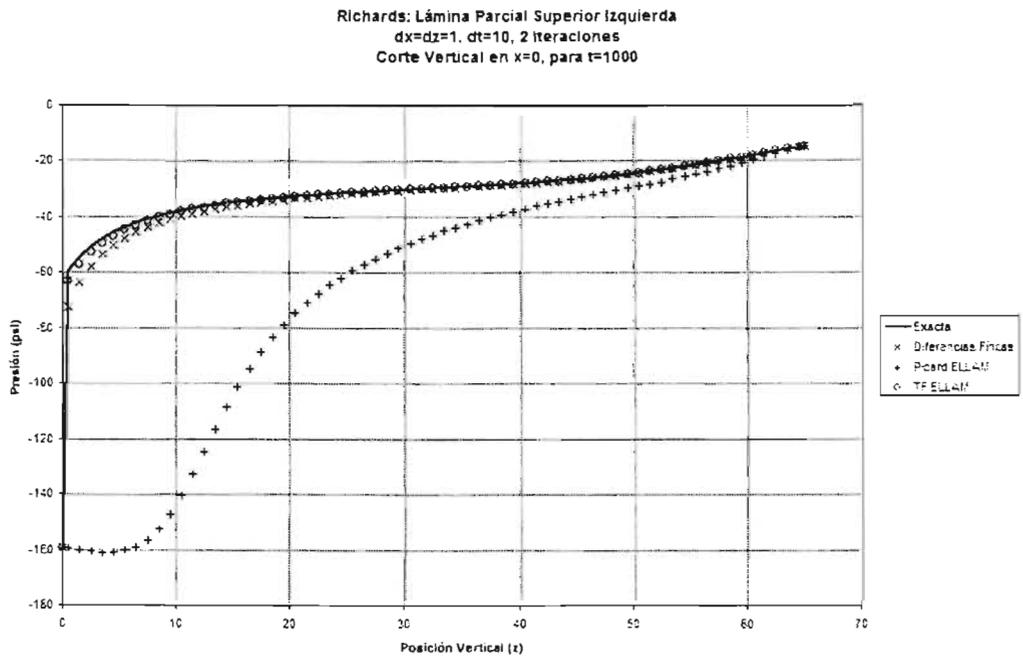


Figura 6.43. Comparación de resultados del ejemplo 6.13 para un corte vertical en  $x=0$ .

Las gráficas 6.42 y 6.43 muestran que T-F ELLAM da los mejores resultados, mientras que los obtenidos con diferencias finitas y Picard ELLAM presentan diferencias considerables. De nuevo sorprende los resultados obtenidos con Picard ELLAM.

### **6.2.2.2. Conclusiones**

Se solucionaron ejemplos en dos dimensiones. En este tipo de fenómenos con suelos inicialmente secos resulta interesante por el hecho de que las metodologías tradicionales requieren mallas en el tiempo y en el espacio muy densas debido a que el frente húmedo cambia abruptamente. Esto origina que la derivada de la conductividad hidráulica respecto a la presión sean muy grandes lo cual hace que se tenga un problema dominado fuertemente por "advección".

Estos resultados vienen a confirmar que para problemas de este tipo los métodos eulerianos tienen problemas de convergencia, mientras que T-F ELLAM sigue conservando sus ventajas. También estos resultados confirman que en ELLAM, si la técnica de linealización no captura apropiadamente los términos de la conductividad hidráulica se tienen problemas de convergencia, tal como se comprueba en el inciso H.

### **Referencias**

Aldama, A. A., y V. Arroyo, "A Eulerian\_Lagrangian localized adjoint method for the nonlinear advection-diffusion-reaction equation", *Comput. Meth. Water Res. XII*, Burganos et al. eds., 1998.

Aldama, A. y V. Arroyo, "Propagation properties of Eulerian Lagrangian localized adjoint methods", *Proc. XIII Int. Conf. Computational Methods in Water Resources*, 2, 2000, pp. 597-601.

Arroyo, V., y A. A. Aldama, "Un método localizado adjunto euleriano-lagrangiano para la ecuación de Richards", *X Congreso Nacional de Irrigación*, 2000.

Arroyo, V., y A. A. Aldama, "Simulación numérica del flujo del agua en suelos no saturados mediante ELLAM", *II Congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas*, E. Oñate et al., Eds. 1, 2002, pp. 805-814.

Celia, M. y S. Zisman. "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for reactive transport in groundwater", *Comput. Meth. Water Res. VIII*, Gambolati et al. eds., 1990.

Celia, M., Laipat R. Ahuja, and George F. Pinder. "Orthogonal collocation and alternating-direction procedures for unsaturated flow problems", *Adv. Water Res.*, 10, 178-187, 1987.

Vag, J.E., Wang, H., and Dahle, H.K., Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for systems of nonlinear advective-diffusive-reactive transport equations, *Adv. Water Res.*, 5, 297-315, 1996

## **CAPÍTULO 7 CONCLUSIONES**

En este trabajo de tesis se ha investigado la aplicación de ELLAM para problemas altamente no lineales en medios porosos, con particular interés en la ecuación de advección-difusión-reacción no lineal y de la ecuación de Richards. El cual fue el objetivo primordial como se mencionó en el capítulo uno.

Para implementar ELLAM a estas ecuaciones, se requirió aplicar previamente una técnica de linealización debido a que el operador adjunto sólo existe para ecuaciones diferenciales lineales. Los métodos de linealización que se usaron se basan en el empleo de una expansión tipo Taylor-Fréchet sobre el operador no lineal de advección-difusión-reacción. Esta expansión se realizó alrededor de valores de la variable dependiente en un paso de tiempo previo, a lo largo de las líneas características. En esta expansión, los términos de segundo orden se despreciaron, generándose así un operador modificado lineal. Esto permitió construir un problema lineal para el cual se pudo determinar un operador adjunto. Con

esta estrategia se obtuvo una aproximación de segundo orden, independientemente de si se emplea una técnica iterativa o no iterativa. Asimismo, la expansión tipo Taylor-Fréchet se puede aplicar a otros problemas no lineales, permitiéndose de esta forma construir algoritmos con propiedades de convergencia, atractivas para la solución de este tipo de problemas.

Se destacó que en la linealización tipo Picard se trata directamente con la forma original de la ecuación de transporte y flujo, mientras que el procedimiento Taylor-Fréchet genera formas modificadas para ambas ecuaciones. Específicamente, para la ecuación de Richards con base en la presión  $\psi$ , la ecuación se transforma de una ecuación de advección-difusión a una ecuación de advección-difusión-reacción para la función de corrección; mientras que para la ecuación con base en la humedad  $\theta$ , se conserva la forma original.

Se presentó por primera vez un análisis de la propagación de propiedades numéricas para la solución de la ecuación lineal de advección-difusión-reacción vía ELLAM. Se observó que, para ambas funciones de peso, y para el caso conservativo (problema del escalón), ELLAM da soluciones exactas, mientras que para el caso no conservativo los errores en la amplitud son comparables con los de diferencias finitas. Sin embargo, la gran ventaja para este caso, es que ELLAM no tiene errores de fase. Se concluyó que no existen diferencias apreciables en si se usa una función de peso constante o una de tipo lineal. Prácticamente los resultados son los mismos. Esto permitió que la función de peso constante se empleara para problemas con coeficientes variables, no lineales y en múltiples dimensiones, ya que la evaluación de las integrales que aparecen vía ELLAM, son más sencillas de calcular.

Con el fin de verificar las ventajas y desventajas de la metodología propuesta se realizaron comparaciones de la técnica de linealización tipo Picard, con la técnica de linealización Taylor-Fréchet, para resolver la ecuación de advección-difusión-reacción no lineal a través de ELLAM. La comparación se ilustró a través de varios ejemplos en donde uno de ellos es un sistema de dos ecuaciones que describen un proceso de biodegradación aerobia. En algunos ejemplos, como se indica en el cuadro de ejemplos se mostró que la linealización tipo Picard presentó problemas de convergencia (ejemplos 6.1, 6.2 y 6.3). En otros, se mostró que los resultados de la técnica desarrollada fueron obtenidos empleando incrementos temporales y espaciales mucho mayores que los usados con diferencias finitas y elemento finito (ejemplos 6.5, 6.6 y 6.7).

Igualmente para la ecuación de flujo (ecuación de Richards) se presentaron varios ejemplos en donde se comprobó la ventaja de esta técnica con relación a las técnicas tradicionales de diferencias finitas y

elemento finito lo que permite manejar incrementos en el espacio e intervalos relativamente más grandes, sin presentar problemas de resolución espacial y de convergencia (ejemplos 6.7-6.13). Esta metodología puede ser generalizada, sin mayor complicación, a dos o tres dimensiones incorporando cualquier tipo de frontera. Los resultados mostrados corresponden a la primera aplicación de ELLAM para resolver la ecuación de Richards, lo cual permite concluir que ELLAM se puede aplicar a la solución de problemas altamente no lineales, siempre y cuando la técnica de linealización sea apropiada.

Todas las metodologías presentadas fueron programadas en un lenguaje de computación C++ cuya estructura general se puede ver en el anexo I.

### **Trabajo a futuro**

A pesar de que el objetivo de esta investigación se cumplió cabalmente, se han delineado algunos temas que deben ser investigados con mayor detalle. A continuación se destacan algunos de ellos.

En problemas no lineales el uso de mallas dinámicas debe ser implementado para ser más eficiente el proceso de cálculo. El uso de estas mallas permitirá colocar discretizaciones más finas en los frentes abruptos, mientras que fuera de estos frentes los espaciamientos entre nodos pueden ser más grandes. Esto implica modificar las ecuaciones presentadas en el capítulo tres. Aunque esto es sencillo, la codificación en computadora debe realizarse con mucho cuidado, sobre todo debe verificarse que para nodos internos en donde las características no cruzan las fronteras, entre éstos las características no deben cruzarse.

Independientemente al uso de mallas dinámicas otro aspecto es mejorar las subrutinas para calcular la integral de masa en el tiempo  $t^n$  y la integral de flujo, se ha visto que si estas integrales no son bien evaluadas las soluciones presentan oscilaciones o pueden desestabilizar la solución. Para ello es conveniente adicionar puntos internos de integración dentro de cada celda básica de integración, por ejemplo, se ha comprobado (Healy y Rusell, 1993) que al agregar puntos de integración en los lugares donde la función de peso cambia de pendiente los resultados mejoran considerablemente, sin embargo si se adicionan muchos puntos de integración el tiempo de cálculo aumenta sobre todo en problemas bidimensionales con un proceso iterativo.

Por otro lado, se observa también que la técnica de linealización de Taylor-Fréché en forma implícita intensifica el proceso de cálculo, en realidad esto es una desventaja con relación a las técnicas tradicionales tipo Picard. Por ejemplo, la técnica de Taylor Fréché aumenta dos veces el número de integrales (unas relacionadas con la función de corrección y otras relacionadas con la función de referencia) respecto a las que contiene la técnica tipo Picard. Por ello es conveniente profundizar en analizar si existe

una equivalencia para salvar el cálculo de las integrales de la función de referencia.

Con relación a la ecuación de Richards es importante seguir investigando las ventajas y desventajas de aplicar la metodología propuesta en este trabajo a otras formas de representar esta ecuación. Por ejemplo, en el capítulo cuatro se verificó que para la ecuación con base en la presión la metodología de linealización la transforma a una ecuación de advección-difusión-reacción, mientras que para la ecuación con base en la humedad su forma se conserva. Podría investigarse la forma mixta (presión-humedad). Respecto a esto, la literatura reporta que la forma mixta de la ecuación de Richards presenta ventajas numéricas sobre las otras dos, claro está, esto se ha investigado con las técnicas tradicionales de diferencias finitas o elemento finito.

Lo comentado anteriormente tiene algo en común y es el hecho de que ELLAM intensifica de manera considerable los procesos de cálculo en una computadora. Esto en la práctica se manifiesta en que a pesar de que ELLAM maneja mallas menos finas con respecto a las técnicas tradicionales tipo euleriano, pudiera en un momento dado para ciertos problemas consumir más tiempo de cálculo. Sin embargo esto podría salvarse estructurando los programas de tal forma de utilizar varios procesadores. Por ejemplo, un procesador podría exclusivamente calcular la integral de flujo, otro la integral de masa en el tiempo  $t^n$ , otro el seguimiento de las líneas características, y otro finalmente la solución del sistema de ecuaciones. Esto sería conveniente explorarlo.

Finalmente se comenta que las recomendaciones anteriores pueden realizarse en un futuro inmediato, sin embargo aún faltarían otras que quizás no son tan inmediatas, como por ejemplo empezar a investigar la aplicación de ELLAM para el caso de medios heterogéneos, con dominios irregulares, y con discontinuidades en el medio.

## **ANEXO A**

En este anexo se desarrollan los cálculos de las integrales de la ecuación (3.100) para  $NS=2$ , y un arreglo de nodos como se indica en la figura 3.30. La aproximación de estas integrales se realiza a través del método del trapecio.

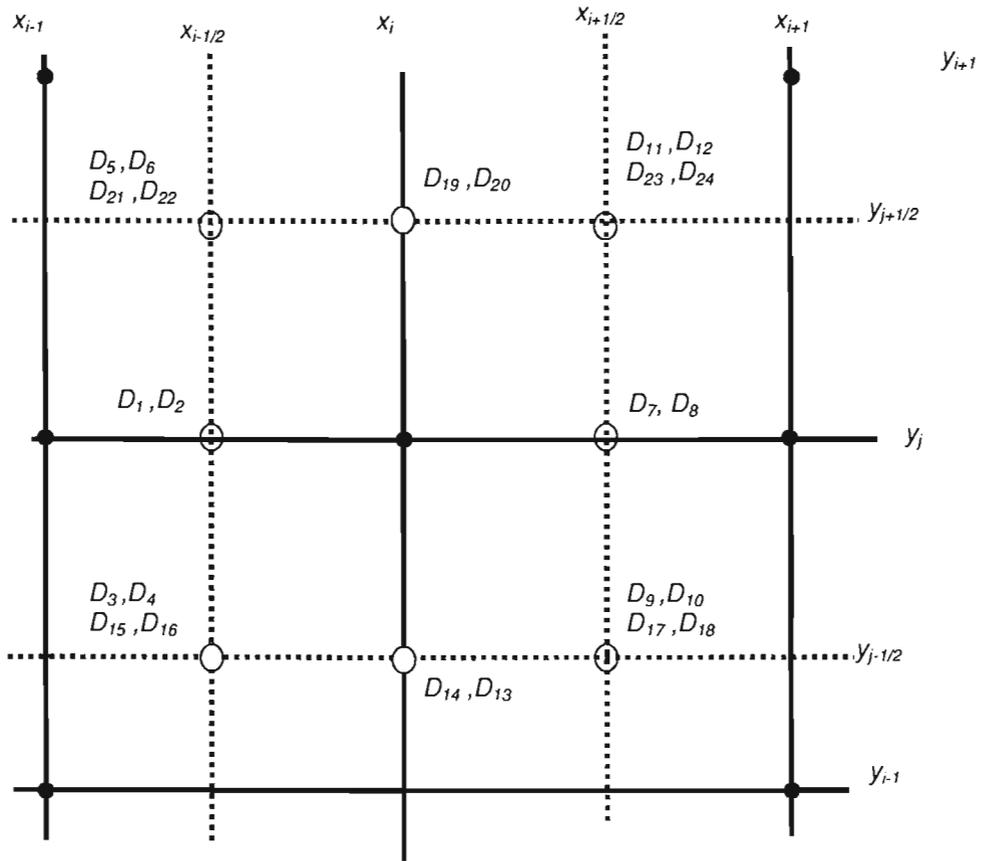


Figura que muestra la disposición de los coeficientes de difusión y que se usan en las ecuaciones siguientes.

**Nodos internos:**

$$\begin{aligned}
 & C_{i,j}^{n+1} \left[ \frac{9\Delta x \Delta y}{16} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_3 \Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{D_4 \Delta t_4}{2\Delta y} + \frac{D_5 \Delta t_5}{2\Delta x} - \frac{D_6 \Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{D_9 \Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10} \Delta t_{10}}{2\Delta y} - \frac{D_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} - \frac{D_{12} \Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2D_{14} \Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{2\Delta x} + \frac{D_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta y} - \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{2\Delta x} + \frac{D_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2D_{20} \Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21} \Delta t_{21}}{2\Delta x} - \frac{D_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta y} - \frac{D_{23} \Delta t_{23}}{2\Delta x} - \frac{D_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{i-1,j}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta y}{32} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{D_3 \Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{D_4 \Delta t_4}{2\Delta y} - \frac{D_5 \Delta t_5}{2\Delta x} - \frac{D_6 \Delta t_6}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19} \Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{21} \Delta t_{21}}{2\Delta x} - \frac{D_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{2\Delta x} + \frac{D_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{i+1,j}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta y}{32} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{D_9 \Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10} \Delta t_{10}}{2\Delta y} + \frac{D_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} - \frac{D_{12} \Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{2\Delta x} + \frac{D_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19} \Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{D_{23} \Delta t_{23}}{2\Delta x} - \frac{D_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{i,j-1}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta y}{32} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_2 \Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_3 \Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{D_4 \Delta t_4}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_8 \Delta t_8}{2\Delta y} - \frac{D_9 \Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{D_{10} \Delta t_{10}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2D_{14} \Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{2\Delta x} - \frac{D_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta y} - \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{2\Delta x} - \frac{D_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{i-1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_2 \Delta t_2}{4\Delta y} - \frac{D_3 \Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{D_4 \Delta t_4}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{2\Delta x} - \frac{D_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + C_{i+1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_8 \Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_9 \Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{D_{10} \Delta t_{10}}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{2\Delta x} - \frac{D_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + C_{i,j+1}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta y}{32} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_2 \Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_5 \Delta t_5}{2\Delta x} + \frac{D_6 \Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_8 \Delta t_8}{2\Delta y} - \frac{D_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} + \frac{D_{12} \Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2D_{20} \Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21} \Delta t_{21}}{2\Delta x} + \frac{D_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta y} - \frac{D_{23} \Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{i-1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_2 \Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_5 \Delta t_5}{2\Delta x} + \frac{D_6 \Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19} \Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{21} \Delta t_{21}}{2\Delta x} + \frac{D_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + C_{i+1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_8 \Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} + \frac{D_{12} \Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19} \Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{D_{23} \Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + B = \iint_{\Omega} f^{n+1} \Delta t(x, y) d\Omega + \iint_{\xi^*} C^n(x, y) \omega_{i,j}^{n+1}(x, y, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(A.1)

Nodo adyacente izquierdo:

$$\begin{aligned}
 & C_{1,j}^{n+1} \left[ \frac{15}{32} \Delta x \Delta y + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{4D_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_3 \Delta t_3}{\Delta x} + \frac{D_5 \Delta t_5}{\Delta x} \right) \right. \\
 & - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{D_9 \Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10} \Delta t_{10}}{2\Delta y} - \frac{D_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} - \frac{D_{12} \Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{2D_{14} \Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{\Delta x} - \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{2\Delta x} + \frac{D_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19} \Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{2D_{20} \Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21} \Delta t_{21}}{\Delta x} - \frac{D_{23} \Delta t_{23}}{2\Delta x} - \frac{D_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{2,i}^{n+1} \left[ \frac{3}{32} \Delta x \Delta y - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{D_9 \Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10} \Delta t_{10}}{2\Delta y} + \frac{D_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} + \frac{D_{12} \Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{2\Delta x} + \frac{D_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta y} - \frac{D_{19} \Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{23} \Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{5}{64} \Delta x \Delta y + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_3 \Delta t_3}{\Delta x} + \frac{D_8 \Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_9 \Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10} \Delta t_{10}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{2D_{14} \Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{\Delta x} - \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{2\Delta x} - \frac{D_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{2,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_8 \Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_9 \Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{D_{10} \Delta t_{10}}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{2\Delta x} - \frac{D_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_5 \Delta t_5}{\Delta x} - \frac{D_8 \Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} - \frac{D_{12} \Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19} \Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{2D_{20} \Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21} \Delta t_{21}}{\Delta x} - \frac{D_{23} \Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{2,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_8 \Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} + \frac{D_{12} \Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19} \Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{D_{23} \Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + B = \iint_{\Omega} f^{n+1} \Delta t(x, y) d\Omega + \iint_{\xi} c^n(x, y) W_{i,j}^{n+1}(x, y, t^n) d\xi
 \end{aligned}$$

(A.2)

Nodo adyacente derecho:

$$\begin{aligned}
 & C_{L,j}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x\Delta y}{32} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_1\Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_3\Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{D_4\Delta t_4}{2\Delta y} + \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} - \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{4D_7\Delta t_7}{\Delta x} - \frac{2D_9\Delta t_9}{\Delta x} - \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{2D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{2\Delta x} + \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{2\Delta y} - \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{\Delta x} \right) \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{2D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} - \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{\Delta x} \right) \right] \\
 & + C_{L-1,j}^{n+1} \left[ \frac{3}{32} \Delta x\Delta y + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_1\Delta t_1}{\Delta x} - \frac{D_3\Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{D_4\Delta t_4}{2\Delta y} - \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} - \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{2\Delta x} + \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} - \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{L,j-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_3\Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{D_4\Delta t_4}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_9\Delta t_9}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{2D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{2\Delta x} - \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{2\Delta y} - \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{\Delta x} \right) \right] \\
 & + C_{L-1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_3\Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{D_4\Delta t_4}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{2\Delta x} - \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{L,j+1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} + \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_{11}\Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{2D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} + \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{\Delta x} \right) \right] \\
 & + C_{L-1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} + \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{\Delta x} - \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{\Delta x} + \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{\Delta y} \right) \right] \\
 & + B = \iint_{\Omega} f^{n+1}(x, y)\Delta t(x, y)d\Omega + \iint_{\xi^*} C^n(x, y)W_{i,j}^{n+1}(x, y, t^n)d\xi^*
 \end{aligned}
 \tag{A.3}$$

Nodo adyacente inferior:

$$\begin{aligned}
 & C_{i,1}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta y}{32} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_1\Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_4\Delta t_4}{\Delta y} + \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} - \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_7\Delta t_7}{\Delta x} + \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{\Delta y} - \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{2\Delta x} - \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{\Delta y} + \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} - \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{2\Delta x} - \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{i-1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_1\Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_4\Delta t_4}{\Delta y} - \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} - \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} - \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{i+1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_7\Delta t_7}{\Delta x} + \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{\Delta y} + \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{2\Delta x} - \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{2\Delta x} - \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{i,2}^{n+1} \left[ \frac{6\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} + \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} - \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{2\Delta x} + \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} + \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{\Delta x} \right) \right] \\
 & + C_{i-1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta y \Delta x}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} + \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} + \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{i+1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{2\Delta x} + \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + B = \int_{\Omega} f^{n+1}(x, y) \Delta t(x, y) d\Omega + \int_{\xi} C^n(x, y) W_{i,j}^{n+1}(x, y, t^n) d\xi
 \end{aligned}$$

(A.4)

Nodo adyacente superior:

$$\begin{aligned}
 & C_{i,M}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x\Delta y}{32} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_1\Delta t_1}{\Delta x} - \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_3\Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{D_4\Delta t_4}{2\Delta y} - \frac{D_6\Delta t_6}{\Delta y} \right) \right. \\
 & - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_7\Delta t_7}{\Delta x} - \frac{D_9\Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{2\Delta y} - \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{\Delta y} - \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} \right) \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{2\Delta x} + \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{2\Delta y} - \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{2\Delta x} + \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} - \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{\Delta y} - \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{i-1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_1\Delta t_1}{\Delta x} - \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_3\Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{D_4\Delta t_4}{2\Delta y} - \frac{D_6\Delta t_6}{\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{2\Delta x} + \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{22}\Delta t_{22}}{\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{i+1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x\Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_7\Delta t_7}{\Delta x} + \frac{D_9\Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{2\Delta y} - \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{\Delta y} - \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{2\Delta x} + \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{24}\Delta t_{24}}{\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{i,M-1}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x\Delta y}{32} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_3\Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{D_4\Delta t_4}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} - \frac{D_9\Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{2\Delta x} - \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{2\Delta y} - \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{2\Delta x} - \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{i-1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_3\Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{D_4\Delta t_4}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{2\Delta x} - \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + C_{i+1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x\Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_9\Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{2\Delta x} - \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + B = \iint_{\Omega} f^{n+1}(x,y)\Delta t(x,y)d\Omega + \iint_{\xi^*} C^n(x,y)W_{i,j}^{n+1}(x,y,t^n)d\xi^*
 \end{aligned}$$

(A.5)

Nodo esquina adyacente superior izquierda:

$$\begin{aligned}
 & C_{1,M}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{4D_1\Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_3\Delta t_3}{\Delta x} \right) \right. \\
 & - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_7\Delta t_7}{\Delta x} - \frac{2D_8\Delta t_8}{2\Delta y} - \frac{D_9\Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{2\Delta y} - \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{\Delta y} \right) \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{2D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{\Delta x} - \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{2\Delta x} + \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} - \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{2,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_7\Delta t_7}{\Delta x} - \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_9\Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{2\Delta y} - \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{2\Delta x} + \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{24}\Delta t_{24}}{\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_3\Delta t_3}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} - \frac{D_9\Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{2D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15}\Delta t_{15}}{\Delta x} - \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{2\Delta x} - \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{2,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta y} + \frac{D_9\Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{2\Delta y} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{13}\Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{D_{17}\Delta t_{17}}{2\Delta x} - \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + B = \iint_{\Omega} f^{n+1}(x,y) d\Omega + \iint_{\xi^*} C^n(x,y) W_{i,j}^{n+1}(x,y) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(A.6)

Nodo esquina superior derecha:

$$\begin{aligned}
 & C_{L,M}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{D_2 \Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_3 \Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{D_4 \Delta t_4}{2\Delta y} - \frac{D_6 \Delta t_6}{\Delta y} \right) \right. \\
 & - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{4D_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{D_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} + \frac{2D_{14} \Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{2\Delta x} + \frac{D_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta y} - \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{\Delta x} \right) \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4D_{20} \Delta t_{20}}{\Delta y} - \frac{D_{22} \Delta t_{22}}{\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{L-1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{D_2 \Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_3 \Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{D_4 \Delta t_4}{2\Delta y} - \frac{D_6 \Delta t_6}{\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{2\Delta x} + \frac{D_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{22} \Delta t_{22}}{\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + C_{L,M-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_2 \Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_3 \Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{D_4 \Delta t_4}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{2D_{14} \Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{2\Delta x} - \frac{D_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta y} - \frac{D_{17} \Delta t_{17}}{\Delta x} \right) \left. \right] \\
 & + C_{L-1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_2 \Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_3 \Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{D_4 \Delta t_4}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{13} \Delta t_{13}}{2\Delta x} - \frac{D_{15} \Delta t_{15}}{2\Delta x} - \frac{D_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta y} \right) \left. \right] \\
 & + B = \iint_{\Omega} f^{n+1}(x,y) \Delta t(x,y) dx dy + \iint_{\xi^*} C^n(x,y) W_{i,j}^{n+1}(x,y) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(A.7)

Nodo esquina adyacente inferior izquierda:

$$\begin{aligned}
 & C_{1,1}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{4D_1\Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_5\Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_7\Delta t_7}{\Delta x} + \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta x} + \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{\Delta y} - \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{2\Delta x} - \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{2D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{\Delta x} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{2\Delta x} - \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{2,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_7\Delta t_7}{\Delta x} + \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta x} + \frac{D_{10}\Delta t_{10}}{\Delta y} + \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{2\Delta x} - \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{18}\Delta t_{18}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{2\Delta x} - \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{1,2}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_5\Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta x} - \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{2\Delta x} + \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{2D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{\Delta x} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{2,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_8\Delta t_8}{2\Delta x} + \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{2\Delta x} + \frac{D_{12}\Delta t_{12}}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{2\Delta x} + \frac{D_{24}\Delta t_{24}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + B = \iint_{\Omega} f^{n+1}(x, y) \Delta t(x, y) d\Omega + \iint_{\xi^*} C^n(x, y) W_{i,j}^{n+1}(x, y, t) d\xi^*
 \end{aligned}
 \tag{A.8}$$

Nodo esquina adyacente inferior derecha:

$$\begin{aligned}
 & C_{L,1}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2D_1\Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_4\Delta t_4}{\Delta y} + \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} - \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{4D_7\Delta t_7}{\Delta x} - \frac{D_{11}\Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4D_{14}\Delta t_{14}}{\Delta y} + \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{2D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} - \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{\Delta x} \right) \right] \\
 & + C_{L-1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{2D_1\Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_4\Delta t_4}{\Delta y} - \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} - \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{D_{16}\Delta t_{16}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} - \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + C_{L,2}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} + \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} + \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta y}{4} \left( -\frac{D_{11}\Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} + \frac{2D_{20}\Delta t_{20}}{\Delta y} + \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} + \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} - \frac{D_{23}\Delta t_{23}}{\Delta x} \right) \right] \\
 & + C_{L-1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x\Delta y}{64} + \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{D_2\Delta t_2}{2\Delta y} - \frac{D_5\Delta t_5}{2\Delta x} + \frac{D_6\Delta t_6}{2\Delta y} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{D_{19}\Delta t_{19}}{2\Delta x} - \frac{D_{21}\Delta t_{21}}{2\Delta x} + \frac{D_{22}\Delta t_{22}}{2\Delta y} \right) \right] \\
 & + B = \iint_{\Omega} f^{n+1}(x,y)\Delta t(x,y)d\Omega + \iint_{\xi^*} C^n(x,y)W_{i,j}^{n+1}(x,y,t^n)d\xi^*
 \end{aligned}
 \tag{A.9}$$

Valor del flujo de frontera para el caso de frontera de primer tipo (Dirichlet):

$$\begin{aligned}
 B = & \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} \sum_{m=1}^{NSY-1} \alpha(x_0, y_m, t_k) \left[ -v_x(x_0, y_m, t_k) - 2 \frac{D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t_k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \alpha(x_1, y_j, t^n) \left\{ \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \left[ \sum_{m=1}^{NSY/2} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{1}{2} + \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t_k), t^{n+1}) \right. \right. \\
 & \left. \left. + \sum_{m=\frac{NSY+1}{2}}^{NSY-1} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( 1 - \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t_k), t^{n+1}) \right] \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \frac{D_{xx}}{\Delta x} [W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t_k), t^{n+1}) + W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t_k), t^{n+1})] \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{NSY/2} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{1}{2} + \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{m=\frac{NSY+1}{2}}^{NSY-1} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( 1 - \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{1}{4} \frac{D_{xx}}{\Delta x} [W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t^n), t^{n+1}) + W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t^n), t^{n+1})] \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \alpha(x_1, y_j, t^{n+1}) \left\{ \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \left[ \sum_{m=1}^{NSY/2} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{1}{2} + \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t_k), t^{n+1}) \right. \right. \\
 & \left. \left. + \sum_{m=\frac{NSY+1}{2}}^{NSY-1} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( 1 - \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t_k), t^{n+1}) \right] \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \frac{D_{xx}}{\Delta x} [W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t_k), t^{n+1}) + [W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t_k), t^{n+1})] \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{NSY/2} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{1}{2} + \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{m=\frac{NSY+1}{2}}^{NSY-1} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( 1 - \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{1}{4} \frac{D_{xx}}{\Delta x} [W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) + W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t^{n+1}), t^{n+1})] \right\}
 \end{aligned}$$

(A.10)

Ecuación (A.10). *Continuación (1)*:

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} c(x_1, y_{j-1}, t^n) \left\{ \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \sum_{m=1}^{NSY/2} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{1}{2} - \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t_k), t^{n+1}) \right. \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \frac{D_{xx}}{\Delta x} W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t_k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{NSY/2} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{1}{2} - \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t^n), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{1}{4} \frac{D_{xx}}{\Delta x} W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t^n), t^{n+1}) \right\} \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} c(x_1, y_{j-1}, t^{n+1}) \left\{ \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \sum_{m=1}^{NSY/2} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{1}{2} - \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t_k), t^{n+1}) \right. \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \frac{D_{xx}}{\Delta x} W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t_k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{NSY/2} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{1}{2} - \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{1}{4} \frac{D_{xx}}{\Delta x} W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) \right\} \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} c(x_0, y_{j-1/2}, t_k) \left[ -v_x(x_0, y_{j-1/2}, t_k) - \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t_k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} c(x_0, y_{j+1/2}, t_k) \left[ -v_x(x_0, y_{j+1/2}, t_k) - \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t_k), t^{n+1})
 \end{aligned}$$

Ecuación (A.10).Continuación (2):

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} c(x_1, y_{j+1}, t^n) \left\{ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \frac{D_{xx}}{\Delta x} W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t_k), t^{n+1}) \right. \\
 & + \frac{1}{4} \frac{D_{xx}}{\Delta x} W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_m, t_k), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{1}{2} \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_m, t^n), t^{n+1}) \right\} \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} c(x_1, y_{j+1}, t^{n+1}) \left\{ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \frac{D_{xx}}{\Delta x} W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t_k), t^{n+1}) \right. \\
 & + \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t_k - t^n}{\Delta t} \right) \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_m, t^k), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{1}{2} \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \left( \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) + \frac{1}{4} \frac{D_{xx}}{\Delta x} W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) \right\} \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=1}^{NSY-1} c(x_0, y_m, t^n) \left[ -v_x(x_0, y_m, t^n) - \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_m, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} c(x_0, y_{j-1/2}, t^n) \left[ -v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^n) - \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} c(x_0, y_{j+1/2}, t^n) \left[ -v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^n) - \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=1}^{NSY-1} c(x_0, y_m, t^{n+1}) \left[ -v_x(x_0, y_m, t^{n+1}) - \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} c(x_0, y_{j-1/2}, t^{n+1}) \left[ -v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^{n+1}) - \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_{j-1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} c(x_0, y_{j+1/2}, t^{n+1}) \left[ -v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^{n+1}) - \frac{2D_{xx}}{\Delta x} \right] W_{ij} (X(t^{n+1}, 0, y_{j+1/2}, t^{n+1}), t^{n+1})
 \end{aligned}$$

Valor del flujo de frontera para el caso de frontera de segundo tipo (Neumann):

$$\begin{aligned}
 B = & -c(x_0, y_j, t^n) \left\{ \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} \left[ \sum_{m=1}^{\frac{NSY}{2}} \left( \frac{1}{2} + \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) \left( 1 - \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) + \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \left( 1 - \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) \left( 1 - \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) \right] \right. \\
 & \cdot v_x(x_0, y_m, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j-1/2}, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j+1/2}, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=1}^{\frac{NSY}{2}} \left( \frac{1}{2} + \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) v_x(x_0, y_m, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \left( 1 - \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) v_x(x_0, y_m, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j-1/2}, t^n), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j+1/2}, t^n), t^{n+1}) \right\}
 \end{aligned}$$

(A.11)

Ecuación (A.11). *Continuación (1)*:

$$\begin{aligned}
 & -c(x_0, y_{j-1}, t^n) \left\{ \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} \sum_{m=1}^{\frac{NSY}{2}} \left( \frac{1}{2} - \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) \left( 1 - \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_m, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^k), t^{n+1}) \right. \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j-1/2}, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=1}^{\frac{NSY}{2}} \left( \frac{1}{2} - \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) v_x(x_0, y_m, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^n), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j-1/2}, t^n), t^{n+1}) \right\} \\
 & -c(x_0, y_j, t^{n+1}) \left\{ \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} \left[ \sum_{m=1}^{\frac{NSY}{2}} \left( \frac{1}{2} + \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) \left( \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) + \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \left( 1 - \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) \left( \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) \right] \right. \\
 & \cdot v_x(x_0, y_m, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j-1/2}, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j+1/2}, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=1}^{\frac{NSY}{2}} \left( \frac{1}{2} + \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) v_x(x_0, y_m, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \left( 1 - \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) v_x(x_0, y_m, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j-1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j+1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) \right\}
 \end{aligned}$$

Ecuación (A.11). Continuación (2):

$$\begin{aligned}
 & -c(x_0, y_{j-1}, t^{n+1}) \left\{ \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} \sum_{m=1}^{\frac{NSY}{2}} \left( \frac{1}{2} - \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) \left( \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_m, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^k), t^{n+1}) \right. \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j-1/2}, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=1}^{NSY/2} \left( \frac{1}{2} - \frac{y_m - y_{j-1/2}}{\Delta y} \right) v_x(x_0, y_m, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} v_x(x_0, y_{j-1/2}, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j-1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) \right\} \\
 & -c(x_0, y_{j+1}, t^n) \left\{ \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \left( \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) \left( 1 - \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_m, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^k), t^{n+1}) \right. \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \left( \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) v_x(x_0, y_m, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( 1 - \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j+1/2}, t^k), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j+1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) \right\} \\
 & -c(x_0, y_{j+1}, t^{n+1}) \left\{ \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{k=1}^{NST-1} \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \left( \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) \left( \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_m, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^k), t^{n+1}) \right. \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{NST-1} \left( \frac{t^k - t^n}{\Delta t} \right) v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j+1/2}, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{NSY} \sum_{m=\frac{NSY}{2}+1}^{NSY-1} \left( \frac{y_m - y_j}{\Delta y} \right) v_x(x_0, y_m, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_m, t^{n+1}), t^{n+1}) \\
 & \left. + \frac{\Delta t}{2NST} \frac{\Delta y}{2NSY} \frac{1}{2} v_x(x_0, y_{j+1/2}, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_{j+1/2}, t^{n+1}), t^{n+1}) \right\} \\
 & + \frac{\Delta t}{NST} \sum_{k=1}^{NST-1} h(x_0, y_j, t^k) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_j, t^k), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} h(x_0, y_j, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_j, t^n), t^{n+1}) \\
 & + \frac{\Delta t}{2NST} h(x_0, y_j, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}; x_0, y_j, t^{n+1}), t^{n+1})
 \end{aligned}$$

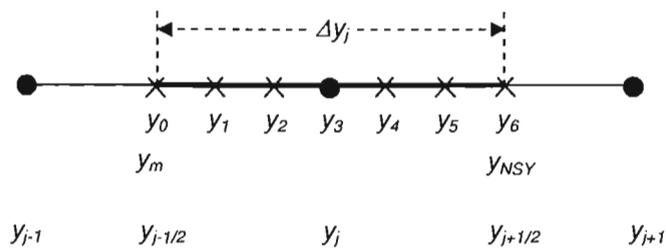
Valor del flujo de frontera para el caso de frontera de tercer tipo (Robin):

$$\begin{aligned}
 B &= \frac{\Delta t}{NST} \sum_{k=1}^{NST-1} h(0, y_j, t_k^*) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_j, t_k^*), t^{n+1}) \\
 &+ \frac{\Delta t}{2NST} h(0, y_j, t^n) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_j, t^n), t^{n+1}) \\
 &+ \frac{\Delta t}{2NST} h(0, y_j, t^{n+1}) W_{ij}(X(t^{n+1}, 0, y_j, t^{n+1}), t^{n+1})
 \end{aligned}
 \tag{A.12}$$

donde, para la ecuación (A.10, A.11, y A.12):

$$y_m = m \frac{\Delta y_j}{NSY} + y_{j-1/2}$$

$m$  es un contador que indica los puntos de integración en una celda básica de integración;  $NST$  es el número de subintervalos en los que se divide el intervalo  $\Delta t$  (figura 3.23 del capítulo 3), y  $NSY$  es el número de subintervalos en los que se divide el intervalo  $\Delta y_j$ . Las ecuaciones anteriores aceptan únicamente valores pares de  $NSY$ . En la figura siguiente se muestra el caso para  $NSY=6$ .



Integral en  $t^n$ , nodo interno:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} c(x, y, t^n) W_{ij}(x, t^{n+1}) dy dx = \\
 & C_{i-1,j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i-1,j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i,j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_{ij}(x_5, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i,j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i-1,j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) \right] + C_{i+1,j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i+1,j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i,j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i+1,j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right]
 \end{aligned}$$

(A.13)

Integral en  $t^n$ , nodo adyacente izquierdo:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_0}^{x_{3/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} c(x, y, t^n) W_j(x, t^{n+1}) dy dx = \\
 & C_{0,j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_j(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_j(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_j(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{0,j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_j(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_3, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_j(x_5, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_8, t^{n+1}) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_3, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_6, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{0,j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_j(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_9, t^{n+1}) \right]
 \end{aligned}$$

(A.14)

Integral en  $t^n$ , nodo esquina adyacente superior izquierdo:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_0}^{x_{3/2}} \int_{y_{m-1/2}}^{y_{m+1/2}} c(x, y, t^n) W_{ij}(x, t^{n+1}) dy dx = \\
 & C_{0,m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{0,m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_{ij}(x_5, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{0,m+1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,m+1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,m+1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right]
 \end{aligned}$$

(A.15)

Integral en  $t^n$ , nodo esquina adyacente inferior izquierdo:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_0}^{x_{3/2}} \int_{y_{1/2}}^{y_{3/2}} c(x, y, t^n) W_j(x, t^{n+1}) = C_{0,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_j(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{0,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_j(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_j(x_4, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{0,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_9, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_j(x_5, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_6, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{1,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_j(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_j(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_j(x_9, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_j(x_6, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{2,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_j(x_3, t^{n+1}) \right]
 \end{aligned}$$

(A.16)

Integral en  $t^n$ , nodo adyacente superior:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_{m-1/2}}^{y_{m+1/2}} c(x, y, t^n) W_{ij}(x, t^{n+1}) dx dy = C_{i-1, m-1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i-1, m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i-1, m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i, m-1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i, m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + \hat{C}_{i, m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i+1, m-1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i+1, m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i-1, m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i, m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_{ij}(x_5, t^{n+1}) \right] \\
 & + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \left] \right.
 \end{aligned}$$

(A.17)

Integral en  $t^n$ , nodo adyacente inferior:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_0}^{y_{3/2}} c(x, y, t^n) W_{ij}(x, t^{n+1}) dx dy = C_{i-1,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i-1,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i-1,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_{ij}(x_5, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i+1,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i+1,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{i+1,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right]
 \end{aligned}$$

(A.18)

Integral en  $t^n$ , nodo esquina adyacente inferior derecha:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{L-12}}^{x_{L+1/2}} \int_{y_0}^{y_{3/2}} c(x, y, t^n) W_{ij}(x, t^{n+1}) dx dy = C_{L-1,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L-1,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L-1,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_{ij}(x_5, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2,2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2,1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2,0}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right]
 \end{aligned}$$

(A.19)

Integral en  $t^n$ , nodo adyacente derecho:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{L-1/2}}^{x_{L+1/2}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} c(x, y, t^n) W_{ij}(x, t^{n+1}) dx dy = C_{L-1, j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L-1, j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L-1, j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L, j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L, j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_8, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_{ij}(x_5, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L, j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(x_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(x_2, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2, j+1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2, j}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_9, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(x_6, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2, j-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(x_3, t^{n+1}) \right]
 \end{aligned}$$

(A.20)

Integral en  $t^n$ , nodo esquina adyacente superior derecho:

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{L-1/2}}^{x_{L+1/2}} \int_{y_{m-1/2}}^{y_{m+1/2}} c(x, y, t^n) W_{ij}(\xi, t^{n+1}) dx dy = C_{L-1, m+1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(\xi_7, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L-1, m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(\xi_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(\xi_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L-1, m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(\xi_1, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L, m+1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(\xi_7, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(\xi_8, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L, m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(\xi_4, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(\xi_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{4} W_{ij}(\xi_5, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(\xi_2, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L, m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{64} W_{ij}(\xi_1, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(\xi_2, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2, m+1/2}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{16} W_{ij}(\xi_9, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2, m}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{8} W_{ij}(\xi_6, t^{n+1}) + \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(\xi_3, t^{n+1}) \right] \\
 & + C_{L+1/2, m-1}^n \left[ \frac{\Delta x \Delta y}{32} W_{ij}(\xi_3, t^{n+1}) \right]
 \end{aligned}$$

(A.21)

## **ANEXO B**

En este anexo se comprueba que los flujos parciales de frontera ( $B_1$  y  $B_2$ ), obtenidos al aplicar una expansión tipo Taylor-Fréchet a la ecuación de Richards, es el flujo de Darcy también al usar una expansión Taylor-Fréchet.

En una dimensión:

El flujo de Darcy para la dirección vertical  $z$  se representa por:

$$q_z = -K(\psi) \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \quad (\text{B.1})$$

Al emplear la relación (4.13) y (4.15) del capítulo 4, y despreciar los términos de orden  $O(|\Psi|^2)$ , la ecuación anterior se transforma en:

$$\begin{aligned} q_z &= -K(\Psi + \Phi) \frac{\partial(\Psi + \Phi + z)}{\partial z} \\ &= -[K(\Psi) + K'(\Psi)\Phi] \left[ \frac{\partial\Psi}{\partial z} + \frac{\partial\Phi}{\partial z} + 1 \right] \\ &= -\Phi \left[ \frac{\partial\Psi}{\partial z} K'(\Psi) + K'(\Psi) \right] - K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial\Phi}{\partial z} \\ &= -\bar{K}\Phi - K(\Psi) \frac{\partial\Phi}{\partial z} - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

donde se ha hecho:

$$\bar{K} = \frac{\partial\Psi}{\partial z} K'(\Psi) + K'(\Psi)$$

Por otra parte, a partir de la ecuación (6.26) del capítulo 6 se puede hacer lo siguiente:

$$-B1 - B2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left( -\bar{K}\Phi - K(\Psi) \frac{\partial\Phi}{\partial z} - K(\Psi) - K(\Psi) \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) \bullet W \eta(z) dS dt \quad (\text{B.3})$$

donde se observa que el integrando de la ecuación (B.3) es el último resultado de la expresión (B.2), por lo tanto se comprueba que:

$$-B1 - B2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} q_z \bullet w \eta(z) \partial S dt \quad (\text{B.4})$$

En dos dimensiones:

A partir de las ecuaciones (6.48) y (6.50) del capítulo (6) se obtiene:

$$\mathbf{v} = \bar{L}\mathbf{i} + \bar{K}\mathbf{k} = \left( K'(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \mathbf{i} + K'(\Psi) \left( 1 + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) \mathbf{k} \quad (\text{B.5})$$

Haciendo (-B1-B2) según la ecuación (6.56), resulta:

$$-B1 - B2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left[ \mathbf{v}\Psi + \mathbf{K}\nabla\Psi + \mathbf{K}\nabla\Phi + K(\Psi)\mathbf{k} \right] \cdot \boldsymbol{\eta} \, w dS dt \quad (\text{B.6})$$

Empleando la ecuación (B.5) en la ecuación (B.6), y agrupando, se obtiene:

$$-B1 - B2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \left[ K'(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi \mathbf{i} + K'(\Psi) \left( 1 + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) \Psi \mathbf{k} + \mathbf{K}\nabla(\Psi + \Phi) + K(\Psi) \right] \cdot \boldsymbol{\eta} \, w dS dt \quad (\text{B.7})$$

Por otra parte, el flujo de Darcy se puede escribir como:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla\Psi - K\mathbf{k} \quad (\text{B.8})$$

Al emplear la relación (4.13) y (4.15) del capítulo 4 y despreciar los términos de orden  $O(\|\Psi\|^2)$ , la ecuación (B.8), para los ejes  $x,y$ , se transforma en:

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= -[K(\Psi) + K'(\Psi)\Psi]\nabla(\Psi + \Phi) - [K(\Psi) + K'(\Psi)\Psi]\mathbf{k} \\ &= -[K(\Psi) + K'(\Psi)\Psi] \left[ \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] - K(\Psi) \left[ \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right] - [K(\Psi) + K'(\Psi)\Psi]\mathbf{k} \\ &= - \left[ K'(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi \mathbf{i} + K'(\Psi) \left( 1 + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) \Psi \mathbf{k} + \mathbf{K}\nabla(\Psi + \Phi) + K(\Psi)\mathbf{k} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

donde se observa que el último resultado de la ecuación (B.9) es el integrando de la ecuación (6.7). Por lo tanto se comprueba que:

$$-B1 - B2 = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\eta} \, w dS dt \quad (\text{B.10})$$

## **ANEXO C**

En este anexo se calculan las integrales correspondientes a la ecuación (6.28) para la ecuación de Richards en una dimensión. El cálculo se hace de acuerdo con la metodología mostrada en los subincisos 3.1.7.1 y 3.1.7.2 del capítulo 3, y a la nomenclatura mostrada en la figura C.1 de este anexo.

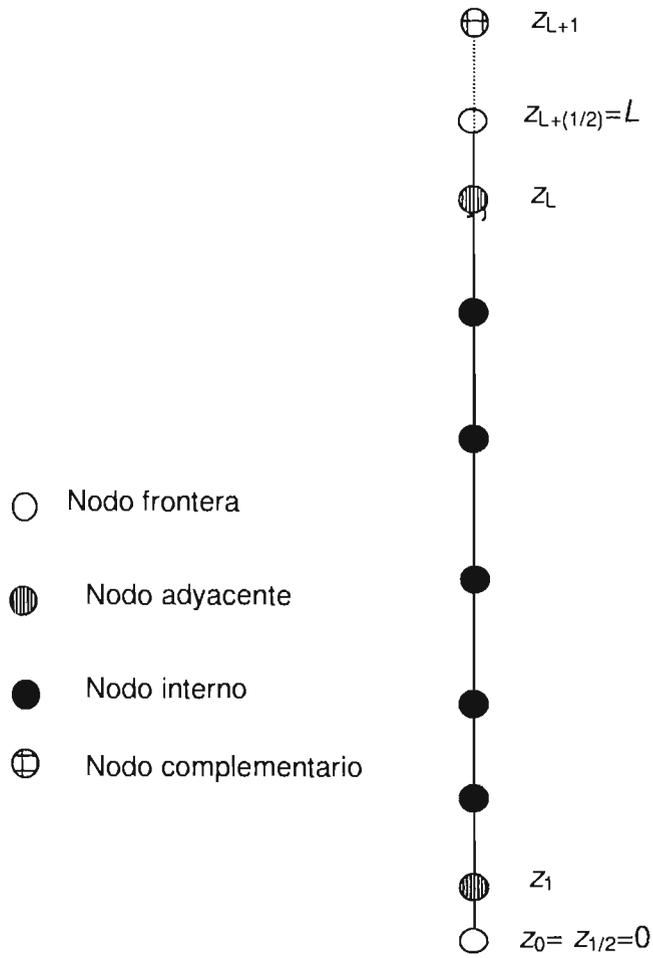


Figura C.1. Nomenclatura para la ecuación de Richards en una dimensión.

Nodos internos:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_i^{n+1} \left[ \frac{3}{4} \Delta z S_i^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{i-(1/2)})}{\Delta z} K_{i-(1/2)}^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{i+(1/2)})}{\Delta z} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_{i-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta z}{8} S_i^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{i-(1/2)})}{\Delta z} K_{i-(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_{i+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta z}{8} S_i^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{i+(1/2)})}{\Delta z} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial \Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_i^{n+1} \eta(z) dS dt = \\
 & \Psi_i^{n+1} \left[ -\frac{3}{4} \Delta z S_i^{n+1} + \frac{\Delta z}{2} \bar{S}_i^{n+1} \Delta t(z_i) + \frac{\Delta z}{8} \bar{S}_{i-(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{i-(1/2)}) + \frac{\Delta z}{8} \bar{S}_{i+(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{i+(1/2)}) + \right. \\
 & \left. \frac{\Delta t(z_{i-(1/2)})}{2} \bar{K}_{i-(1/2)}^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{i-(1/2)})}{\Delta z} K_{i-(1/2)}^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{i+(1/2)})}{2} \bar{K}_{i+(1/2)}^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{i+(1/2)})}{\Delta z} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_{i-1}^{n+1} \left[ -\frac{\Delta z}{8} S_i^{n+1} + \frac{\Delta z}{8} \bar{S}_{i-(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{i-(1/2)}) + \frac{\Delta t(z_{i-(1/2)})}{2} \bar{K}_{i-(1/2)}^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{i-(1/2)})}{\Delta z} K_{i-(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) \\
 & \Psi_{i+1}^{n+1} \left[ -\frac{\Delta z}{8} S_i^{n+1} + \frac{\Delta z}{8} \bar{S}_{i+(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{i+(1/2)}) - \frac{\Delta t(z_{i+(1/2)})}{2} \bar{K}_{i+(1/2)}^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{i+(1/2)})}{\Delta z} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) \\
 & \left[ -K_{i-(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{i-(1/2)}) + K_{i+(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{i+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + S_i^{n+1} \int_0^L (\Psi + \bar{\Psi})^n W_i(z, t^n) dz
 \end{aligned}
 \tag{C.1}$$

Nodo adyacente ( $z_1$ ):

$$\begin{aligned}
 & \Psi_0^{n+1} \left[ \frac{1}{4} \Delta z S_1^{n+1} \right] \exp(\gamma_1^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_1^{n+1} \left[ \frac{5\Delta z}{8} S_1^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{(3/2)})}{\Delta z} K_{(3/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_1^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_2^{n+1} \left[ \frac{\Delta z}{8} S_1^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{(3/2)})}{\Delta z} K_{(3/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_1^{n+1} \Delta t) + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} q_z \bullet W_1^{n+1} \eta(z) d\Omega dt = \\
 & \Psi_1^{n+1} \left[ -\frac{5}{8} \Delta z S_1^{n+1} + \frac{\Delta z}{2} \bar{S}_1^{n+1} \Delta t(z_1) + \frac{\Delta z}{8} \bar{S}_{(3/2)}^{n+1} \Delta t(z_{(3/2)}) \right. \\
 & \left. - \frac{\Delta t(z_{(3/2)})}{2} \bar{K}_{(3/2)}^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{(3/2)})}{\Delta z} K_{(3/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_1^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_0^{n+1} \left[ -\frac{\Delta z}{4} S_1^{n+1} \right] \exp(\gamma_1^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_2^{n+1} \left[ -\frac{\Delta z}{8} S_1^{n+1} + \frac{\Delta z}{8} \bar{S}_{(3/2)}^{n+1} \Delta t(z_{(3/2)}) - \frac{\Delta t(z_{(3/2)})}{2} \bar{K}_{(3/2)}^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{(3/2)})}{\Delta z} K_{(3/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_1^{n+1} \Delta t) + \\
 & \left[ K_{(3/2)}^{n+1} \Delta t(z_{(3/2)}) \right] \exp(\gamma_1^{n+1} \Delta t) + S_1^{n+1} \int_0^L (\Psi + \bar{\Psi})^n W_1(z, t^n) dz
 \end{aligned}$$

(C.2)

Nodo adyacente ( $z=z_L$ ):

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{L+(1/2)}^{n+1} \left[ \frac{1}{4} \Delta z S_L^{n+1} \right] \exp(\gamma_L^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_L^{n+1} \left[ \frac{5\Delta z}{8} S_L^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{L-(1/2)})}{\Delta z} K_{L-(1/2)}^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{L+(1/2)})}{\Delta z} K_{L+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_L^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_{L-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta z}{8} S_L^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{L-(1/2)})}{\Delta z} K_{L-(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_L^{n+1} \Delta t) + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} q_z \bullet W_L^{n+1} \eta(z) d\Omega dt = \\
 & \Psi_L^{n+1} \left[ -\frac{5}{8} \Delta z S_L^{n+1} + \frac{\Delta z}{2} \bar{S}_L^{n+1} \Delta t(z_L) + \frac{\Delta z}{8} \bar{S}_{L-(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{L-(1/2)}) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta t(z_{L-(1/2)})}{2} \bar{K}_{L-(1/2)}^{n+1} - \frac{\Delta t(z_{L-(1/2)})}{\Delta z} K_{L-(1/2)}^{n+1} - \frac{2\Delta t(z_{L+(1/2)})}{\Delta z} K_{L+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_L^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_{L+(1/2)}^{n+1} \left[ -\frac{\Delta z}{4} S_L^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \bar{S}_{L+(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{L+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_L^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_{L-1}^{n+1} \left[ -\frac{\Delta z}{8} S_L^{n+1} + \frac{\Delta z}{8} \bar{S}_{L-(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{L-(1/2)}) + \frac{\Delta t(z_{L-(1/2)})}{2} \bar{K}_{L-(1/2)}^{n+1} + \frac{\Delta t(z_{L-(1/2)})}{\Delta z} K_{L-(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_L^{n+1} \Delta t) + \\
 & \left[ K_{L+(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{L+(1/2)}) - K_{L-(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{L-(1/2)}) \right] \exp(\gamma_L^{n+1} \Delta t) + S_L^{n+1} \int_0^L (\Psi + \bar{\Psi})^n W_L(z, t^n) dz
 \end{aligned} \tag{C.3}$$

Nodo complementario ( $z=z_{L+1}$ ):

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{L+(1/2)}^{n+1} \left[ \frac{2\Delta t(z_{L+(1/2)})}{\Delta z} K_{L+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_{L+(1/2)}^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_L^{n+1} \left[ -\frac{2\Delta t(z_{L+(1/2)})}{\Delta z} K_{L+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_{L+(1/2)}^{n+1} \Delta t) + \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} q_z \bullet W_{L+1}^{n+1} \eta(z) d\Omega dt = \\
 & \Psi_L^{n+1} \left[ \frac{2\Delta t(z_{L+(1/2)})}{\Delta z} K_{L+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_{L+(1/2)}^{n+1} \Delta t) + \\
 & \Psi_{L+(1/2)}^{n+1} \left[ \Delta t(z_{L+(1/2)}) \bar{K}_{L+(1/2)}^{n+1} - \frac{2\Delta t(z_{L+(1/2)})}{\Delta z} K_{L+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_{L+(1/2)}^{n+1} \Delta t) - \\
 & \left[ K_{L+(1/2)}^{n+1} \Delta t(z_{L+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_{L+(1/2)}^{n+1} \Delta t) + S_{L+(1/2)}^{n+1} \int_0^L (\Psi + \bar{\Psi})^n W_{L+1}(z, t^n) dz
 \end{aligned} \tag{C.4}$$

## **ANEXO D**

En este anexo se calculan las integrales correspondientes a la ecuación (6.46) para la ecuación de Richards en dos dimensiones. El cálculo se hace de acuerdo con el procedimiento usado en el anexo A y la nomenclatura mostrada en la figura 3.30 del capítulo 3, donde se ha cambiado la coordenada ( $y$ ) por la coordenada ( $z$ ).

Nodos internos:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{i,j}^{n+1} \left[ \frac{9\Delta x \Delta z}{16} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i-1,j}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta t}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i+1,j}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i,j-1}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} - \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i-1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i+1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i,j+1}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i-1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i+1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_j^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{i,j}^{n+1} \iint_{\xi^*} \Psi^n(x, z) \omega_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(D.1)

Nodo adyacente izquierdo:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{1,j}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{4K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{2,j}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} + \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{2,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{\Delta x} + \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{2,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial \Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{i,j}^{n+1} \int_{\xi^*} \Psi^n(x,z) W_{i,j}^{n+1}(x,z,t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(D.2)

Nodo adyacente derecho:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{L,j}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{2K_9 \Delta t_9}{\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L-1,j}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L,j-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L-1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L,j+1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L-1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{L,j}^{n+1} \iint_{\xi^*} \Psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(D.3)

Nodo adyacente inferior:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{i,1}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \left. \right] \\
 & + \Psi_{i-1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i+1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i,2}^{n+1} \left[ \frac{6\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i-1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta z \Delta x}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i+1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_j^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{i,1}^{n+1} \iint_{\xi^*} \Psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}
 \tag{D.4}$$

Nodo adyacente superior:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{i,M}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i-1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i+1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i,M-1}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} - \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i-1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{i+1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{i,M}^{n+1} \int_{\xi^*} \Psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(D.5)

Nodo esquina adyacente superior izquierda:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{1,M}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{4K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{2,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{2,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{1,M}^{n+1} \iint_{\xi^*} \psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(D.6)

Nodo esquina superior derecha:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{L,M}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L-1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L,M-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L-1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_j^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{L,M}^{n+1} \iint_{\xi^*} \Psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(D.7)

Nodo esquina adyacente inferior izquierda:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{1,1}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{4K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{2,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{1,2}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{2,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{1,1}^{n+1} \int_{\xi^*} \Psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t) d\xi^*
 \end{aligned}
 \tag{D.8}$$

Nodo esquina adyacente inferior derecha:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{L,1}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L-1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L,2}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \Psi_{L-1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = S_{L,1}^{n+1} \iint_{\xi^*} \Psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(D.9)

## **ANEXO E**

En este anexo se calculan las integrales correspondientes a la ecuación (6.65) para la ecuación de Richards en dos dimensiones. El cálculo se hace de acuerdo con el procedimiento usado en el anexo A y la nomenclatura mostrada en la figura 3.30 del capítulo 3, donde se ha cambiado la coordenada ( $y$ ) por la coordenada ( $z$ ).

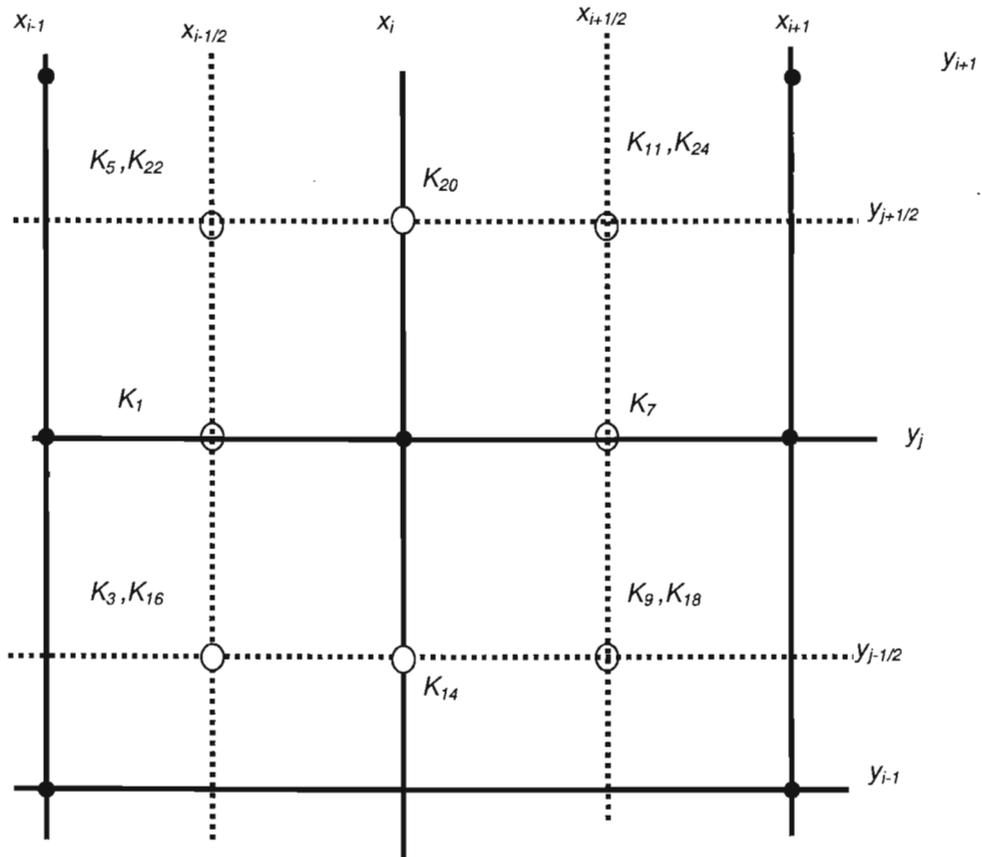


Figura que muestra la disposición de los coeficientes de conductividad hidráulica y que se usan en las ecuaciones siguientes.

Nodos internos:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{i,j}^{n+1} \left[ \Delta x \Delta z S_{i,j}^{n+1} + \Delta z \left( \frac{K_1 \Delta t_1}{\Delta x} \right) - \Delta z \left( -\frac{K_7 \Delta t_7}{\Delta x} \right) + \Delta x \left( \frac{K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} \right) - \Delta x \left( \frac{K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i-1,j}^{n+1} \left[ \Delta z \left( -\frac{K_1 \Delta t_1}{\Delta x} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i+1,j}^{n+1} \left[ -\Delta z \left( \frac{K_7 \Delta t_7}{\Delta x} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i,j-1}^{n+1} \left[ \Delta x \left( -\frac{K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i,j+1}^{n+1} \left[ -\Delta x \left( \frac{K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial \Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_j^{n+1} \eta(z) dS dt =
 \end{aligned}$$

(E.1)

Ecuación (E.1). *Continuación:*

$$\begin{aligned}
 &= -\bar{\Psi}_{i,j}^{n+1} \left[ \Delta x \Delta z S_{i,j}^{n+1} + \Delta z \left( \frac{K_1 \Delta t_1}{\Delta x} \right) - \Delta z \left( -\frac{K_7 \Delta t_7}{\Delta x} \right) + \Delta x \left( \frac{K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} \right) - \Delta x \left( \frac{K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 &- \bar{\Psi}_{i-1,j}^{n+1} \left[ \Delta z \left( -\frac{K_1 \Delta t_1}{\Delta x} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 &- \bar{\Psi}_{i+1,j}^{n+1} \left[ -\Delta z \left( \frac{K_7 \Delta t_7}{\Delta x} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 &- \bar{\Psi}_{i,j-1}^{n+1} \left[ \Delta x \left( -\frac{K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 &- \bar{\Psi}_{i,j+1}^{n+1} \left[ -\Delta x \left( \frac{K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 &+ \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \left[ (-\bar{L}\bar{\Psi})_{i-(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i-(1/2)}, z_j) - (-\bar{L}\bar{\Psi})_{i+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) dz \\
 &+ \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ (-\bar{K}\bar{\Psi} - K_z)_{i,j-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j-(1/2)}) + (-\bar{K}\bar{\Psi} + K_z)_{i,j+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) dx \\
 &+ \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [-\bar{S}\bar{\Psi}]_{x,z}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) dx dz + S_{i,j}^{n+1} \iint_{\xi^*} (\bar{\Psi} + \Psi)^n(x, z) \omega_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

Nodo adyacente izquierdo:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{i,j}^{n+1} \left[ \Delta x \Delta z S_{i,j}^{n+1} + \Delta z \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} \right) - \Delta z \left( -\frac{K_7 \Delta t_7}{\Delta x} \right) + \Delta x \left( \frac{K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} \right) - \Delta x \left( -\frac{K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{2,j}^{n+1} \left[ \Delta z \left( \frac{K_7 \Delta t_7}{\Delta x} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{1,j-1}^{n+1} \left[ \Delta x \left( -\frac{K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{1,j+1}^{n+1} \left[ -\Delta x \left( \frac{K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{i^n}^{i^{n+1}} \int_{z^n}^{z^{n+1}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{\bar{q}}^{n+1} \eta(z) dS dt = \bar{\Psi}_{0,j}^{n+1} \left[ \left( -\frac{2\Delta z K_1}{\Delta x} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) - \bar{\Psi}_{0,j}^{n+1} \left[ \left( -\frac{2\Delta z K_1}{\Delta x} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{1,j}^{n+1} \left[ \Delta x \Delta z S_{i,j}^{n+1} + \Delta z \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} \right) - \Delta z \left( -\frac{K_7 \Delta t_7}{\Delta x} \right) + \Delta x \left( \frac{K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} \right) - \Delta x \left( -\frac{K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{2,j}^{n+1} \left[ \Delta z \left( \frac{K_7 \Delta t_7}{\Delta x} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{1,j-1}^{n+1} \left[ \Delta x \left( \frac{K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{1,j+1}^{n+1} \left[ -\Delta x \left( \frac{K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \left[ (-\bar{L}\bar{\Psi})_{0,j}^{n+1} \Delta t(x_0, z_j) - (-\bar{L}\bar{\Psi})_{1+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{1+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_{1/2}}^{x_{1+1/2}} \left[ (-\bar{K}\bar{\Psi} - K_z)_{i,j-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j-(1/2)}) - (-\bar{K}\bar{\Psi} - K_z)_{i,j+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{1/2}}^{x_{1+1/2}} [-\bar{S}\bar{\Psi}]_{i,x,z}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) \exp(\gamma_{i,j}^{n+1} \Delta t) dx dz + S_{i,j}^{n+1} \int_{\xi^*} \int (\Psi + \bar{\Psi})^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}
 \tag{E.2}$$

Nodo adyacente derecho:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{L,j}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{2K_9 \Delta t_9}{\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L-1,j}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L,j-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L-1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L,j+1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L-1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = \\
 & - \Psi_{L,j}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{2K_9 \Delta t_9}{\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{L-1,j}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{L,j-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{L-1,j-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{L,j+1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{L-1,j+1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,j}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \left[ (-\bar{L}\Psi)_{L-(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{L-(1/2)}, z_j) - (-\bar{L}\Psi)_{L+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{L+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_{L-1/2}}^{x_{L+1/2}} \left[ (-\bar{K}\Psi + K_z)_{i,j-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j-(1/2)}) - (-\bar{K}\Psi + K_z)_{i,j+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{j+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{x_{L-1/2}}^{x_{L+1/2}} \left[ -\bar{S}\Psi \right]_{x,z}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\gamma_{L,j}^{n+1} \Delta t) dx dz + S_{L,j}^{n+1} \int_{\xi} \left[ (\Psi + \bar{\Psi})^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi \right.
 \end{aligned}$$

(E.3)

Nodo adyacente inferior:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{i,1}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i-1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i+1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i,2}^{n+1} \left[ \frac{6\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i-1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta z \Delta x}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i+1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_j^{n+1} \eta(z) dS dt = \\
 & - \Psi_{i,1}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{i-1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{i+1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{i,2}^{n+1} \left[ \frac{6\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{i-1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta z \Delta x}{64} S_{i,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{i+1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) - \Psi_{i+1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{z_0}^{z_{1+1/2}} \left[ (-\bar{L}\bar{\Psi})_{i-(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i-(1/2)}, z_j) - (-\bar{L}\bar{\Psi})_{i+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ (-\bar{K}\bar{\Psi} + K_z)_{i,0}^{n+1} \Delta t(x_i, z_0) - (-\bar{K}\bar{\Psi} + K_z)_{i,1+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{1+(1/2)}) \right] \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_0}^{z_{1+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [-\bar{S}\bar{\Psi}]_{(x,z)}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\Psi_{i,1}^{n+1} \Delta t) dx dz + S_{i,1}^{n+1} \int_{\xi^*} \int (\bar{\Psi} + \bar{\Psi})(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(E.4)

Nodo adyacente superior:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{i,M}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \left. \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i-1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i+1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i,M-1}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} - \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i-1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{i+1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) + \int_{i^n}^{i^{n+1}} \int_{z_0} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = \\
 & - \bar{\Psi}_{i,M}^{n+1} \left[ \frac{15\Delta x \Delta z}{32} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \left. \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{i-1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{i+1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{i,M-1}^{n+1} \left[ \frac{3\Delta x \Delta z}{32} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} - \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{i-1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{i+1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{i+1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{i,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{i,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{z_{M-(1/2)}}^{z_{M+1/2}} \left[ (-\bar{L}\bar{\Psi})_{i-(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i-(1/2)}, z_j) - (-\bar{L}\bar{\Psi})_{i+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{i+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left[ (-\bar{K}\bar{\Psi} + K_{zz})_{i,M-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{M-(1/2)}) - (-\bar{K}\bar{\Psi} + K_{zz})_{i,M+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{M+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_{M-(1/2)}}^{z_{M+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [-\bar{S}\bar{\Psi}]_{(x,z)}^{n+1} \Delta t(x,z) \exp(\gamma_{i,M}^{n+1} \Delta t) dx dz + S_{i,M}^{n+1} \iint_{\xi^*} (\bar{\Psi} + \bar{\Psi})^n(x,z) W_{i,j}^{n+1}(x,z,t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(E.5)

Nodo esquina adyacente superior izquierda:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{1,M}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{4K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{2,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{2,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial \Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_j^{n+1} \eta(z) dS dt = \\
 & - \Psi_{1,M}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{4K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{2,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{2,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{1,M}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_9 \Delta t_9}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{18} \Delta t_{18}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{z_{M-(1/2)}}^{z_{M+1/2}} \left[ (-\bar{L}\Psi)_{0,j}^{n+1} \Delta t(x_0, z_j) - (-\bar{L}\Psi)_{1+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{1+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_0}^{x_{1+1/2}} \left[ (-\bar{K}\Psi + K_{zz})_{i,M-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{M-(1/2)}) - (-\bar{K}\Psi + K_{zz})_{i,M+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{M+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_{M-(1/2)}}^{z_{M+1/2}} \int_{x_0}^{x_{1+1/2}} [-\bar{S}\Psi]_{x,z}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\gamma_{1,M}^{n+1} \Delta t) dx dz + S_{1,M}^{n+1} \int_{\xi^*} \int (\Psi + \bar{\Psi})^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(E.6)

Nodo esquina superior derecha:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{L,M}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L-1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L,M-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L-1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) + \int_{i^n}^{i^{n+1}} \int_{\partial \Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dS dt = \\
 & - \Psi_{L,M}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{4K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{L-1,M}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{L,M-1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_9 \Delta t_9}{\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} - \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{L-1,M-1}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,M}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_3 \Delta t_3}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{16} \Delta t_{16}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{z_{M-(1/2)}}^{z_{M+1/2}} \left[ (-\bar{L}\Psi)_{L-(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{L-(1/2)}, z_j) - (-\bar{L}\Psi)_{L+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{L+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_{L-(1/2)}}^{x_{L+1/2}} \left[ (-\bar{R}\Psi + K_{z,i,M-(1/2)})_{i,M-(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{M-(1/2)}) - (-\bar{R}\Psi + K_{z,i,M+(1/2)})_{i,M+(1/2)}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{M+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_{M-(1/2)}}^{z_{M+1/2}} \int_{x_{L-(1/2)}}^{x_{L+1/2}} [-\bar{S}\Psi]_{(x,z)}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\gamma_{L,M}^{n+1} \Delta t) dx dz + S_{L,M}^{n+1} \int_{\xi} \left[ (\Psi + \bar{\Psi})^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z) d\xi \right.
 \end{aligned}$$

(E.7)

Nodo esquina adyacente inferior izquierda:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{1,1}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{4K_4 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_4 \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_8 \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{2,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_8 \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{1,2}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{2,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) + \int_{\xi^i}^{i+1} \int_{z_0}^{z_{i+1/2}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_{ij}^{n+1} \eta(z) dz d\xi \\
 & - \Psi_{1,1}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{4K_4 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{K_5 \Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_4 \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_8 \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{2,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} - \frac{\Delta y}{4} \left( \frac{2K_7 \Delta t_7}{\Delta x} + \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_8 \Delta t_{18}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{1,2}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \Psi_{2,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{1,1}^{n+1} - \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_1 \Delta t_{11}}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{24} \Delta t_{24}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{z_0}^{z_{i+1/2}} \left[ (-\bar{L}\Psi)_{0,j}^{n+1} \Delta t(x_0, z) - (-\bar{L}\Psi)_{i+1/2,j}^{n+1} \Delta t(x_{i+1/2}, z) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{z_0}^{z_{i+1/2}} \left[ (-\bar{K}\Psi + K_{zz})_{i,0}^{n+1} \Delta t(x, z_0) - (-\bar{K}\Psi + K_{zz})_{i,i+1/2}^{n+1} \Delta t(x, z_{i+1/2}) \right] \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_0}^{z_{i+1/2}} \int_{x_0}^{x_{i+1/2}} [-\bar{S}\Psi]_{(x,z)}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\gamma_{1,1}^{n+1} \Delta t) dx dz - S_{1,1}^{n+1} \int_{\xi^i}^{i+1} \int_{z_0}^{z_{i+1/2}} \Psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t) d\xi^i
 \end{aligned}$$

(E.8)

Nodo esquina adyacente inferior derecha:

$$\begin{aligned}
 & \Psi_{L,1}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L-1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L,2}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \Psi_{L-1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial \Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}_i^{n+1} \eta(z) dS dt = \\
 & - \bar{\Psi}_{L,1}^{n+1} \left[ \frac{25\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} + \frac{D_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{4K_7 \Delta t_7}{\Delta x} - \frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & + \left. \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{4K_{14} \Delta t_{14}}{\Delta z} + \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} - \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{L-1,1}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{2K_1 \Delta t_1}{\Delta x} - \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) + \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{16} \Delta t_{16}}{\Delta z} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( -\frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{L,2}^{n+1} \left[ \frac{5\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( \frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_{11} \Delta t_{11}}{\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{2K_{20} \Delta t_{20}}{\Delta z} + \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & - \bar{\Psi}_{L-1,2}^{n+1} \left[ \frac{\Delta x \Delta z}{64} S_{L,1}^{n+1} + \frac{\Delta z}{4} \left( -\frac{K_5 \Delta t_5}{2\Delta x} \right) - \frac{\Delta x}{4} \left( \frac{K_{22} \Delta t_{22}}{2\Delta z} \right) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) \\
 & + \int_{z_0}^{z_{L+1/2}} \left[ (-\bar{L}\bar{\Psi})_{L-(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{L-(1/2)}, z_j) - (-\bar{L}\bar{\Psi})_{L+(1/2),j}^{n+1} \Delta t(x_{L+(1/2)}, z_j) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) dz \\
 & + \int_{x_{L-(1/2)}}^{x_{L+1/2}} \left[ (-\bar{K}\bar{\Psi} + K_{zz})_{i,0}^{n+1} \Delta t(x_i, z_0) - (-\bar{K}\bar{\Psi} + K_{zz})_{i,0}^{n+1} \Delta t(x_i, z_{M+(1/2)}) \right] \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) dx \\
 & + \int_{z_0}^{z_{L+1/2}} \int_{x_{L-(1/2)}}^{x_{L+1/2}} [-\bar{S}\bar{\Psi}]_{(x,z)}^{n+1} \Delta t(x, z) \exp(\gamma_{L,1}^{n+1} \Delta t) dx dz + S_{L,1}^{n+1} \int_{\xi^*} \Psi^n(x, z) W_{i,j}^{n+1}(x, z, t^n) d\xi^*
 \end{aligned}$$

(E.9)

## **ANEXO F**

Modelos conceptuales para la biodegradación

---

### *Biodegradación*

La biodegradación de compuestos químicos ha sido de interés en los últimos cuarenta años. Aunque inicialmente el estudio se enfocaba sobre la persistencia de los pesticidas en el suelo, este interés se ha ampliado a un gran número de compuestos químicos que se aplican a gran escala en la industria y la agricultura. Las necesidades de producción industrial y agrícola involucran el uso de grandes cantidades de contaminantes orgánicos. La liberación de estos compuestos químicos al aire, al agua y al suelo ha empezado a provocar serios problemas de contaminación ambiental.

Como regla, los compuestos químicos del suelo no se encuentran en forma aislada sino en mezclas simples o complejas que pueden ser asociadas a la liberación, almacenamiento o transporte de los compuestos químicos. Algunos de estos compuestos pueden degradarse o incorporarse por asimilación al sistema suelo-planta (nitrógeno, aceites, grasas o diversos compuestos orgánicos). Otros pueden emigrar sin descomponerse (los cationes inorgánicos y aniones). Y hay otros ni se descomponen ni emigran (metales pesados) (Iturbe, 1986).

Particularmente, cuando los ácidos, bases o sales se aplican a un sistema de suelo-planta, se presenta una respuesta o reacción inicial. Para los ácidos y bases (orgánicos o inorgánicos) tiene lugar una reacción de neutralización, de acuerdo con la capacidad del suelo y con la magnitud de la disociación del ácido o base aplicados; también reaccionan con el suelo por intercambio iónico y precipitación. El impacto de la respuesta de las sales depende de la capacidad de adsorción del suelo (capacidad de intercambio catiónico) y de la proporción relativa del sodio en el agua de riego. Después de esta reacción inicial, los ácidos y las bases orgánicas experimentan una biodegradación, convirtiéndose en gases ( $\text{CO}_2$ ) y materia orgánica. Por otra parte, los ácidos y bases inorgánicos se comportan como especies conservativas, en forma similar a las sales. Eventualmente, estos componentes emigran con el movimiento del agua, de manera análoga al movimiento de cationes y aniones.

La predicción del peligro de un compuesto orgánico para personas, animales y plantas, requiere de información tanto de su toxicidad como del tiempo de exposición en que pueda resultar dañino. Para determinar dicho tiempo de exposición es imprescindible conocer los mecanismos de transporte y comportamiento de estos compuestos. Así, desde su punto de liberación hasta una determinada distancia, un compuesto químico puede ser modificado estructuralmente o destruido por completo debido a mecanismos bióticos (reacciones enzimáticas) o abióticos. Reacciones fotoquímicas ocurren en la atmósfera y en las capas superficiales de cuerpos de agua, suelo y vegetación, originando modificaciones en diferentes tipos de compuestos orgánicos (Alexander, 1994). Algunas

reacciones no enzimáticas o no fotoquímicas son también importantes en los suelos y el agua subterránea; sin embargo, estos procesos raramente (o muy poco) transforman compuestos orgánicos en compuestos inorgánicos. En contraste, los procesos biológicos frecuentemente son capaces de transformar un compuesto orgánico en otro inorgánico. Aun así, algunas veces pueden transformarlo en un nuevo producto orgánico u ocasionalmente producir pocas modificaciones. Aunque las plantas, y en menor grado los animales y el hombre, pueden causar modificaciones a un gran número de productos químicos, son los microorganismos los principales agentes que producen la más importante transformación biológica de estos compuestos.

La biodegradación puede definirse como el proceso biológico catalítico de reducción. En el caso de componentes orgánicos, el proceso de biodegradación, con frecuencia aunque no necesariamente, lleva a la transformación de compuestos de C, N, P y S, y otros elementos en elementos puros (producto inorgánico). Este proceso de transformar un compuesto orgánico en uno inorgánico es conocido como mineralización. Por lo tanto, se puede decir que el proceso de mineralización es un proceso benéfico. Sin embargo, en contraste, algunos procesos de transformación (biológica o no biológica) pueden originar otros compuestos orgánicos aún más tóxicos (activación), o que no presenten ninguna respuesta inmediata.

Debido a que los microorganismos suelen desarrollarse con o sin oxígeno, la biodegradación suele ser aeróbica o anaeróbica. En estas circunstancias, los microorganismos son capaces de metabolizar y mineralizar una enorme cantidad de compuestos orgánicos. La falta de una acumulación significativa de un compuesto en condiciones naturales, sugiere que para cada compuesto hay un hábitat de microorganismos capaz de metabolizarlo y ponerlo a disposición de otro. Aunque ciertas bacterias actúan sobre una gran variedad de componentes orgánicos, aún no se conoce ningún microorganismo que sea suficientemente omnívoro.

Para que la biodegradación se efectúe deben reunirse algunas condiciones (alexander, 1994):

i) Los microorganismos deben tener las enzimas necesarias; ii) la población de organismos debe estar presente en el sitio donde se encuentra el compuesto químico; iii) el compuesto químico debe ser accesible al organismo (algunos compuestos pueden no mezclarse con sustancias que tienen acceso al proceso metabólico); iv) debido a que la cantidad de biomasa de bacterias es inicialmente pequeño, deben existir o generarse las condiciones para su proliferación.

La mayoría de los microorganismos usan compuestos sintéticos para su crecimiento. De estos compuestos obtienen su fuente de C, así como su energía y otros elementos necesarios para su proliferación, N, P, S. El

procedimiento que investiga la habilidad de un microorganismo para usar componentes orgánicos como fuente de C y energía para su crecimiento, se conoce como cultura del enriquecimiento (*enrichment-culture technique*). Como regla, la mineralización de compuestos orgánicos enlaza comúnmente el crecimiento de microorganismos con la biodegradación, en la cual el organismo convierte el substrato orgánico en CO<sub>2</sub>, biomasa, y productos típicos del proceso metabólico.

Cuando un compuesto orgánico entra en el suelo, hay un tiempo en que no hay pérdida del compuesto y su concentración permanece inalterable (no hay biodegradación). Este tiempo es llamado "periodo de aclimatación". Para cuestiones de salud pública y contaminación, este tiempo suele ser significativo, ya que el riesgo por algún compuesto químico puede ser crítico. El valor de este tiempo varía enormemente de un compuesto a otro y puede ser menor a una hora, hasta varios meses.

### Cinéticas

La cinética de la biodegradación de un compuesto es muy importante para evaluar la persistencia de un contaminante y llegar a determinar los riesgos para personas, animales y plantas. Una vez que el compuesto comienza a ser degradado, su comportamiento será función del compuesto mismo: su concentración y sus propiedades físicas y químicas. El dicho compuesto podrá variar de acuerdo con el ambiente y el microorganismo que interviene en el proceso. La cinética de biodegradación da información muy significativa, ya que caracteriza el comportamiento del contaminante en función del tiempo a la vez que permite conocer su concentración y el tiempo en que deberá desaparecer antes de que pueda causar daños.

El estudio de la cinética de los compuestos orgánicos ha puesto su atención en dos tópicos: *i*) determinar los factores que influyen en la biodegradación, de esto, hay información sobre la influencia de la temperatura, el pH, la humedad del suelo, y otras fuentes de C; *ii*) determinar analíticamente las curvas que describen la biodegradación y evaluar cuál de los patrones se ajusta mejor en pruebas de laboratorio o en el campo. Sobre este segundo tópico seguirá la siguiente descripción.

Muchos modelos han sido propuestos para representar las cinéticas de la biodegradación. Estos modelos son empíricos o teóricos siendo los modelos empíricos los que más se usan. Un ejemplo de un modelo empírico es (Hamaker, 1972):

$$-\frac{dC}{dt} = kC^n \quad (\text{F.1})$$

donde  $C$  es la concentración del sustrato;  $t$  el tiempo;  $k$  una constante que representa la tasa de reducción química y  $n$  un parámetro de ajuste: si  $n=0$ , la cinética será de orden cero; si  $n=1$ , se dice que la cinética es de primer orden. Esta representación pone de manifiesto el bajo nivel de conocimiento que se tiene aún sobre la influencia de los microorganismos en el proceso de biodegradación.

### *Cinéticas con crecimiento de biomasa*

La biodegradación de un compuesto orgánico puede ocurrir en diferentes formas: *i)* los microorganismos crecen a expensas del sustrato, usándolo como fuente de energía,  $C$ , u otro nutriente necesario para la proliferación; *ii)* los microorganismos crecen a expensas de otro sustrato orgánico, o de ambos, pero metabolizando el sustrato de interés; *iii)* los microorganismos no crecen mientras metabolizan el compuesto orgánico.

Monod (1949), formuló matemáticamente una cinética de crecimiento con las siguientes características: considérese el caso de microorganismos de una sola especie, que usan un componente orgánico como fuente de energía. Se asume que el compuesto orgánico no es tóxico, que es soluble en agua, que el entorno es suficientemente anaeróbico y que hay los suficientes compuestos inorgánicos necesarios para el crecimiento de los microorganismos. Entonces, para bajas concentraciones de  $C$  y otras fuentes de energía, el crecimiento de biomasa será también bajo debido a las bajas concentración del sustrato. A medida que el número de microorganismos y la concentración del sustrato se incrementan, la tasa de crecimiento se incrementará en proporción directa, hasta alcanzar un valor máximo asintótico.

Matemáticamente, lo anterior puede representarse a través de la siguiente relación:

$$\mu = \frac{\mu_{max} C}{K_s + C} \quad (F.2)$$

donde

$\mu$  es la tasa de crecimiento específico de biomasa;  $\mu_{max}$  es la máxima tasa de crecimiento específico (la cual ocurre para altas concentraciones de sustrato);  $C$  la concentración del sustrato, y  $K_s$  una constante que representa la concentración del sustrato cuando  $\mu = (1/2)\mu_{max}$ . Este valor de  $K_s$  representa la afinidad que los microorganismos tienen con el componente orgánico para crecer.

La expresión de Monod (ecuación F.2) representa gráficamente una hipérbola. Dependiendo de qué tan alejada esté la concentración inicial del sustrato  $C_0$ , de  $K_s$ , se tendrán en general tres diferentes comportamientos:  $C_0 \ll K_s$ ,  $C_0 \approx K_s$ ,  $C_0 \gg K_s$ .

Una cinética de biodegradación con crecimiento cuando  $C_0 \gg K_s$ , puede ser representada en forma logarítmica como (Simkins and Alexander, 1984):

$$\frac{dC}{dt} = \mu_{max}(C_0 + X_0 - C) \quad (F.3)$$

y que en su forma integral es:

$$C = C_0 + X_0[1 - \exp(\mu_{max} t)] \quad (F.4)$$

donde:

$C_0$  es la concentración inicial del sustrato;

$C$  la concentración del sustrato, y

$X_0$  la cantidad de sustrato requerido para producir la cantidad inicial de biomasa.

Este tipo de cinéticas han sido verificadas para la biodegradación de benzoatos con *Pseudomonas sp.* y, aparentemente, para la formación de  $\text{CO}_2$  a partir de C-labeled 2,4-D puesto en suelos a altas concentraciones (Kunc y Rybarova, 1983).

Cuando  $C_0 \ll K_s$ , puede usarse (Simkins and Alexander, 1984):

$$-\frac{dC}{dt} = kC(C_0 + X_0 - C) \quad (F.5)$$

o en su forma integral:

$$C = \frac{C_0 + X_0}{1 + \left(\frac{X_0}{C_0}\right) \exp[k(C_0 + X_0)t]} \quad (F.6)$$

donde:  $k = \mu_{max} / K_s$

Este tipo de cinéticas han sido observadas en la biodegradación (mineralización) de fenoles en lagos (Jones and Alexander, 1986).

Para el caso  $C_0 \approx K_s$ , la cinética se expresa a través de la cinética tipo Monod con crecimiento, representada como:

$$-\frac{dC}{dt} = \frac{\mu_{max} C(C_0 + X_0 - C)}{K_s + C} \quad (F.7)$$

que en su forma integral es:

$$K_s \ln\left(\frac{C}{C_0}\right) = (C_0 + X_0 + K_s) \ln\left(\frac{X}{X_0}\right) - (C_0 + X_0) \mu_{max} t \quad (F.8)$$

donde  $X$  es la cantidad de sustrato necesario para producir la cantidad de biomasa requerida. Estas cinéticas describen el metabolismo de benzoatos por *Pseudomonas sp.* (Simkins y Alexander, 1984), y la mineralización de 4-nitrofenol en lagos (Jones y Alexander, 1986).

En el caso de altas concentraciones ( $C_0 \gg K_s$ ), algunos contaminantes son tóxicos para muchos microorganismos que los usan como fuente de  $C$ . Para esos contaminantes, las relaciones típicas entre la tasa de crecimiento de microorganismos y su concentración se representa a través de la ecuación de Monod:

$$\mu = \frac{\mu_{max} C}{K_s + C + (C^2 / K_i)} \quad (F.9)$$

donde  $K_i$  es una constante de inhibición que suprime la tasa de crecimiento por el compuesto tóxico. Esta ecuación ha sido usada para describir la cinéticas de fenol y pentaclorofenol (Klecka y Maier, 1985; Rozich *et al.*, 1985). A continuación se dan más detalles de cinéticas cuando no hay crecimiento de biomasa.

#### *Cinéticas sin crecimiento de biomasa*

Para colonias de microorganismos con crecimiento apreciable, la cantidad de sustrato orgánico debe ser suficientemente alta en relación con la cantidad de biomasa. Si este contenido de sustrato es bajo, entonces el crecimiento de biomasa será limitado o prácticamente nulo. De tal modo, de nuevo se pueden considerar tres casos:  $C_0 \ll K_s$ ,  $C_0 \approx K_s$ ,  $C_0 \gg K_s$ . Entonces las cinéticas serán parecidas a las vistas anteriormente, con la única diferencia de que el crecimiento de biomasa no es permitido. Las cinéticas correspondientes son expresadas por la ecuación de Michaelis-Menten:

$$v = \frac{v_{max} C}{K_m + C} \quad (F.10)$$

donde

$v$ , es la tasa de consumo del substrato (L/T);

$v_{max}$  la máxima tasa de consumo (L/T), y

$K_m$  una constante llamada Constante de Michaelis (M/L<sup>3</sup>), comúnmente llamada constante de saturación media, y que representa la concentración del substrato cuando la tasa de extracción o de consumo es la mitad de  $v_{max}$ .

Esta ecuación representa la misma relación que la ecuación de Monod (ecuación F.2), donde se ha cambiado  $v$ ,  $v_{max}$  y  $K_m$  por  $\mu$ ,  $\mu_{max}$  y  $K_s$ , respectivamente. La diferencia básica entre estas ecuaciones es que en la de Michaelis-Menten la cantidad de material reactivo (enzimas) es constante, mientras que en la de Monod la cantidad de material reactivo se incrementa por la proliferación de microorganismos. Para obtener el consumo total del substrato, la tasa  $v$  debe multiplicarse por la cantidad de biomasa ( $B$ ).

*Cinéticas de primer orden:*

Cuando  $S_0 \ll K_s$ , las cinéticas son llamadas de primer orden, en correspondencia a lo dicho sobre la ecuación (F.1), y tienen la forma siguiente:

$$-\frac{dC}{dt} = k_1 C \quad (F.11)$$

o en su forma integral:

$$C = C_0 \exp(-k_1 t) \quad (F.12)$$

donde

$t$  es el tiempo;

$C$  la concentración del substrato en el tiempo, y

$$k_1 = \mu_{max} \left( X_0 / K_s \right).$$

El término  $k_1$  es una constante de primer orden expresado en unidades de (T)<sup>-1</sup>.

Las cinéticas de primer orden describen procesos de biodegradación cuando la concentración del compuesto químico es bajo, de tal forma que las colonias de microorganismos no se incrementan en forma significativa.

Este tipo de cinéticas han sido observadas en el metabolismo de la glucosa por *salmonella typhimurium*, biodegradación del *parathion* en agua de mar y en sedimentos en condiciones anaeróbicas, *dichlobenil* y clorosulfuros en suelos.

*Cinéticas de monod sin crecimiento:*

Cuando  $C_0 \approx K_s$ , las cinéticas son del tipo de la ecuación de Monod (ecuación F.2) de la forma siguiente:

$$-\frac{dC}{dt} = \frac{k_2 C}{K_s + C} \quad (F.13)$$

en forma integral es:

$$K_s \ln(C/C_0) + C - C_0 = -k_2 t \quad (F.14)$$

donde

$$k_2 = \mu_{max} X_0$$

Para expresar este tipo de cinéticas a través de las expresiones de Michaelis-Menten,  $K_s$  es sustituido por  $K_m$ , y  $k_2$  por  $(v_{max} B_0)$ . El término  $B_0$  es la densidad inicial de biomasa.

Este tipo de cinéticas han sido reportadas para describir procesos de biodegradación de *picloram* en suelos. Las cinéticas tipo Monod sin crecimiento (ecuaciones F.13 y F.14) a veces también describen la mineralización del fenol en lagos.

*Cinéticas de orden cero*

Cuando  $C_0 \gg K_s$ , el proceso de biodegradación se representa con:

$$-\frac{dC}{dt} = k_2 \quad (F.15)$$

que en forma integral es:

$$C = C_0 - k_2 t \quad (F.16)$$

Este tipo de cinéticas han sido observadas frecuentemente en procesos de biodegradación. Por ejemplo, en la biodegradación de glifosfato en suelos; fenol y 2,4-D en lagos; Tolueno en agua de mar, y algunos otros compuestos.

#### Factores de inhibición

La tasa del consumo de nutrientes puede ser suprimida por la presencia de factores de inhibición. Esta inhibición puede ser competitiva, no competitiva, o por acumulación de biomasa.

En general, el procedimiento para representar la inhibición es definir un factor de inhibición, el cual es usado para modificar los valores de  $v_{max}$ ,  $K_m$ , y biomasa ( $B$ ), en la expresión de Michaelis-Menten. Este factor se define como:

$$I = 1 + \frac{Q_i}{k_i} \quad (F.17)$$

donde

$Q_i$  es la concentración de la sustancia inhibidora (sea química o biomasa), y  $k_i$  una constante de inhibición (el subíndice  $i$  indica que dentro de  $I$  puede haber varios agentes inhibidores).

La función del factor ( $I$ ) puede ser multiplicar o dividir la cantidad que es afectada. Si  $Q_i \ll k_i$  ( $I \approx 1$ ), no hay inhibición. En el caso contrario, el consumo del substrato puede ser alterado considerablemente.

La inhibición por biomasa tiene la misma forma que la expresión (F.17). Este tipo de inhibición, puesto en la expresión de Michaelis-Menten, sera:

$$v = \frac{v_{max} CB}{(K_m + C) \left( 1 + \frac{B}{k_b} \right)} \quad (F.18)$$

donde  $B$  es la cantidad de biomasa y  $k_b$  el factor de inhibición.

## Procesos específicos de biodegradación

Como ya se ha mencionado, los microorganismos pueden degradar compuestos orgánicos en presencia de oxígeno (proceso aeróbico) o en ausencia de éste (proceso anaeróbico). Para sobrevivir y proliferar, estos microorganismos requieren fuentes de energía, un receptor de electrones (oxidante), así como C, y varios nutrientes inorgánicos (P, N, Fe, etc.). Entre los microorganismos más importantes en los procesos de biodegradación se encuentran las bacterias. En suelos en condiciones aeróbicas, los procesos de biodegradación son dominados por bacterias que consumen compuestos orgánicos como fuente de C y energía, así como oxígeno molecular como oxidante. Un grupo especial de bacteria aerobia llamada metanotrófica, usa metano o metanol como fuente primaria de energía y C. Por otra parte, cuando en el suelo el oxígeno es nulo o existe en poca cantidad, algunas bacterias pueden cambiar algunas formas de nitrógeno oxidado (nitrito) como agente oxidante. Cuando el oxígeno y el nitrógeno oxidado están presentes en el suelo, el grupo dominante serán bacterias anaerobias causantes de procesos de fermentación, las cuales vivirán en simbiosis con bacterias reductoras de sulfatos. Este tipo de bacterias pueden usar componentes orgánicos o hidrógeno molecular como fuente de energía, y componentes orgánicos, dióxido de carbono, o sulfato como oxidante. A continuación se dan algunas características específicas de estas formas de biodegradación.

### *Biodegradación aeróbica*

En medios bien aireados, donde existe oxígeno, el grupo dominante serán bacterias que emplean como agente oxidante a ese elemento. En campo, donde hay una gran cantidad de contaminantes orgánicos, se ha observado que el oxígeno es rápidamente consumido, de tal forma que la biodegradación aeróbica no es un proceso que domine ampliamente. También se ha visto que este proceso aeróbico se lleva a cabo alrededor de plumas de contaminante. Esto se debe a que en el exterior de la pluma existe oxígeno.

Como se mencionó, un grupo importante de bacterias aerobias son las metanotróficas. Este tipo de bacterias es de interés debido a su capacidad de cometabolizar (que no usa para su proliferación) algunos compuestos orgánicos comúnmente encontrados en aguas subterráneas (p.e. benzenos e isómeros, etcétera).

### *Bacteria reductora de nitrógeno (nitrificación)*

Cuando el oxígeno es escaso o nulo, algunas bacterias aerobias son capaces de emplear y usar concentraciones de nitrato ( $NO_3^-$ ), nitrito ( $NO_2^-$ ), o algunas otras formas de nitrógeno oxidado, como receptor de electrones (oxidante), en vez del oxígeno. Este proceso puede desarrollarse después

de que en una biodegradación aeróbica el oxígeno es rápidamente consumido. Si el nitrógeno oxidado es reducido a nitrógeno molecular, el proceso recibe el nombre de nitrificación. Se ha observado que algunas bacterias no son capaces de llevar a cabo este proceso de nitrificación, de tal forma que el nitrato es reducido a nitrito o amonio ( $NH_4^-$ ).

### *Fermentación*

La fermentación se da frecuentemente en zonas subsuperficiales. Este proceso es anaeróbico y ocurre cuando no hay disposición de oxígeno ni ninguna forma de nitrógeno oxidado, lo cual ocurre frecuentemente en problemas de contaminación de agua subterránea, ya sea por derrames o en terrenos que se utilizan para recibir residuos industriales. En estas situaciones en que hay una cantidad de residuos orgánicos, el oxígeno y el nitrógeno oxidado se consumen rápidamente originando condiciones favorables para que ocurra el proceso de fermentación.

Usualmente, la fermentación es reconocida por la presencia de la bacteria reductora de sulfato o por la de una clase llamada metanogénica (que produce metano), creándose una simbiosis entre ellas.

En muchas condiciones aeróbicas y anaeróbicas, la completa degradación de compuestos orgánicos complejos provoca la asociación de varios tipos de bacterias. Estas asociaciones de bacterias han sido observadas en procesos anaeróbicos en los que el proceso dominante ha sido la fermentación. La razón de la importancia de esta asociación de bacterias, es que cuando los compuestos no pueden ser degradados por la acción única de bacterias metanogénicas o bacterias reductoras de sulfato, son mineralizados o parcialmente degradados por la acción de estas asociaciones (fenoles, clorofenoles, tolueno, benceno, etcétera).

### Crecimiento de biomasa:

La tasa de crecimiento de biomasa puede relacionarse directamente con la cantidad de un sustrato limitativo. La cantidad de energía producida por varios sustratos varía de acuerdo con el proceso metabólico. En general, la energía producida en procesos aeróbicos es más alta que para procesos de reducción de nitrato, y a la vez ésta es también mayor que la producida en un proceso de fermentación.

Paralelamente al crecimiento de biomasa, muere un cierto porcentaje de microorganismos. Este porcentaje, alternativamente, puede ser referido a un coeficiente de permanencia ( $k_m$ ), y representará la cantidad de sustrato consumido (por unidad de biomasa) en el cual no hay producción de biomasa.

En relación con lo anterior, se puede establecer la producción de biomasa a través de la siguiente expresión:

$$\frac{dB}{dt} = (Yk_d C - k_m)B \quad (\text{F.19})$$

donde

$B$  es la biomasa ( $\text{M/L}^3$ );

$Y$  es el coeficiente de producción de biomasa ( $\text{L}^3/\text{M}$ );

$k_d$  es un coeficiente de primer orden, que representa el consumo del sustrato ( $1/\text{T}$ );

$C$  es la concentración del sustrato ( $\text{M/L}^3$ );

$k_m$  es el coeficiente de permanencia ( $1/\text{T}$ ), y

$t$  es el tiempo.

La solución analítica de la ecuación (F.19) es:

$$B = B_0 \exp[(Yk_d C - k_m)t] \quad (\text{F.20})$$

donde se supone que los parámetros son constantes.  $B_0$  es la cantidad inicial de biomasa.

### Incorporación de cinéticas de biodegradación en modelos de transporte

Considerando la importancia e influencia que tiene el proceso de biodegradación en el comportamiento de los compuestos orgánicos, es indudable la necesidad de incorporar éstos a los modelos matemáticos de transporte de solutos. Tal incorporación se hace precisamente a través de las cinéticas anteriormente descritas.

En relación con la ecuación (3.1) del capítulo 3, el transporte de un soluto sujeto a biodegradación estará dado por:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - k_d C = R \frac{\partial C}{\partial t} + k_c \quad (\text{F.21})$$

donde

$D$  es el coeficiente de dispersión ( $L^2/T$ );

$V$  es la velocidad ( $L/T$ );

$C$  es la concentración del soluto ( $M/L^3$ );

$k_d$  es el coeficiente de reacción de primer orden ( $1/T$ );

$k_c$  es el coeficiente de reacción de orden cero ( $M/L^3T$ );

$R = 1 + \frac{\rho_b k_p}{n}$  es el coeficiente de retardo;

$\rho_b$  es la densidad de suelo ( $M/L^3$ );

$n$  es el índice de porosidad del suelo;

$k_p$  es un coeficiente de separación ( $L^3/M$ ), definido como la concentración del soluto en la fase sólida dividido entre la concentración en solución. Se obtiene de la isoterma de adsorción.

Los coeficientes de reacción  $k_d$  y  $k_c$  son funciones no lineales, las cuales describen las biodegradación del soluto. Estos coeficientes se definen bajo la hipótesis de que el consumo de soluto por parte de las bacterias se obtiene solo del que se encuentra en la fase líquida; es decir, que la cantidad de soluto absorbida en la fase sólida no está disponible por parte de los microorganismos. De esta forma, los coeficientes de reacción se expresan de acuerdo con la ecuación de Michaelis-Menten (ecuación F.10) en la forma siguiente:

$$k_d = \frac{v_{max} B}{(K_m I_c + C)(I_b I_n)} \quad (\text{F.22})$$

donde

B es la biomasa;

$I_b$ ,  $I_c$  y  $I_n$  son factores de inhibición de biomasa, competitiva y no competitiva, respectivamente. Se definen de acuerdo con la ecuación (F.17).

El factor de orden cero se expresa como:

$$k_c = (Y_L / Y_C)K_L - \gamma_{P_{C,C}}K_{PC} - (1 / Y_C)k_m B \quad (\text{F.23})$$

donde

$Y_L$  es el coeficiente de producción de biomasa para el sustrato limitante;

$Y_C$  es el coeficiente de producción de biomasa para el sustrato;

$K_L$  es el consumo total del sustrato limitante;

$\gamma_{P_{C,C}}$  es la relación entre la concentración de sustrato (C), por unidad de nuevos componentes metabolizados, y

$k_m$  es el coeficiente de permanencia.

El primer término del lado derecho de esta ecuación (F.23), es para consumos de orden cero del sustrato C; si C es un sustrato limitante, este término es nulo. El segundo término es la cantidad de sustrato producido debido al metabolismo de nuevos componentes para formar C. Este término sólo aparece para componentes intermedios en el proceso de fermentación. El último término da cuenta de salidas de sustrato debido a bacterias muertas. Este término será nulo para el caso del transporte de un sustrato precursor.

Los coeficientes  $k_c$ , y  $k_d$  son términos de acoplamiento para cada uno de los componentes que intervienen en el proceso de transporte. El acoplamiento por  $k_c$  es debido a que este término incluye procesos que dependen de las tasas de consumo diferentes a C. El coeficiente  $k_d$  depende del consumo de biomasa, el cual es función de otros nutrientes. Este término, por lo tanto, enlaza ambas ecuaciones.

Modelos de transporte y biodegradación:

Tomando como base la ecuación (F.21), y considerando que los procesos biológicos afectan simultáneamente a diversos compuestos orgánicos, es necesario que no sólo se considere en los modelos de transporte al soluto mismo, sino también la influencia de otros componentes orgánicos (nutrientes) que pueden alterar el consumo del soluto y el crecimiento de la biomasa.

A continuación se presentan los modelos que abarcan desde procesos sencillos (biodegradación aeróbica), hasta situaciones más complicadas donde se involucran cuatro substratos y tres grupos de bacterias. De aquí en adelante, los superíndices se referirán a los tipos de bacterias consideradas, (1) bacterias aerobias, (2) considerando bacteria reductora de nitrato, (3) y (4) para bacterias anaerobias en consorcio.

### Biodegradación aeróbica

Para este tipo de proceso se supone que el crecimiento de biomasa y el consumo pueden ser limitados, ya sea por el compuesto orgánico ( $C_1$ ), o por el oxígeno molecular ( $O$ ). Para ello, se requiere resolver dos ecuaciones para los dos substratos, y otra ecuación para el crecimiento de bacterias. Si el oxígeno es el componente limitante, entonces se tiene que:

$$D \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_1}{\partial x} = R \frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{Y_o}{Y_1} \left[ \frac{v_{max}^1(O) B^1 / I_b}{K_m^1(O) + O} \right] O \quad (F.24)$$

$$D \frac{\partial^2 O}{\partial x^2} - V \frac{\partial O}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^1(O) B^1 / I_b}{K_m^1(O) + O} \right] O = \frac{\partial O}{\partial t} \quad (F.25)$$

$$\frac{dB^1}{dt} = \left( Y_o \left[ \frac{v_{max}^1(O) B^1 / I_b}{K_m^1(O) + O} \right] O - k_m \right) B^1 \quad (F.26)$$

donde

$v_{max}^1(O)$  y  $K_m^1(O)$  son los parámetros cinéticos de consumo de oxígeno por la bacteria 1;

$Y_o$  y  $Y_1$  son los coeficientes de producción para el oxígeno y el substrato  $C_1$ , respectivamente;

$I_b$  es el factor de inhibición para la biomasa;

$B^1$ , es la biomasa para condición aeróbica.

Para el caso en que el compuesto orgánico ( $C_1$ ) sea el substrato limitante, las ecuaciones (F.24-F.26) deben ser modificadas para reflejar este hecho. Es decir, se trasforman en la siguiente forma:

$$D \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_1}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^1(C_1) B^1 / I_b}{K_m^1(C_1) + C_1} \right] C_1 = R \frac{\partial C_1}{\partial t} \quad (F.27)$$

$$D \frac{\partial^2 O}{\partial x^2} - V \frac{\partial O}{\partial x} = \frac{\partial O}{\partial t} + \frac{Y_1}{Y_o} \left[ \frac{v_{max}^1(C_1)B^1 / I_b}{K_m^1(C_1) + C_1} \right] C_1 \quad (F.28)$$

$$\frac{dB^1}{dt} = \left( Y_1 \left[ \frac{v_{max}^1(C_1)B^1 / I_b}{K_m^1(C_1) + C_1} \right] C_1 - k_m \right) B^1 \quad (F.29)$$

$v_{max}^1(C_1)$  y  $K_m^1(C_1)$  son los parámetros cinéticos de consumo de  $C_1$  por la bacteria 1.

### Cometabolismo

La degradación de TCE (tricloroetileno), es un ejemplo de cometabolismo debido a bacterias metanotróficas. Para modelar este proceso, se debe agregar un segundo componente orgánico a las expresiones para el caso aeróbico (ecuaciones F.24-F.26), con la salvedad de que ahora  $C_1$  es metano. La ecuación del segundo compuesto es:

$$D \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_2}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^1(C_2)B^1 / I_b}{K_m^1(C_2) + C_2} \right] C_2 = R \frac{\partial C_2}{\partial t} \quad (F.30)$$

donde  $v_{max}^1(C_2)$  y  $K_m^1(C_2)$  son los parámetros cinéticos de consumo de  $C_2$  por la bacteria 1.

### Consumo de múltiples componentes orgánicos

En la mayoría de los suelos contaminados, se encuentran con frecuencia uno o varios componentes. Estos contaminantes pueden ser degradados por un mismo tipo de bacterias, y en esta situación puede ocurrir un proceso de biodegradación competitiva. En el caso de dos componentes orgánicos, se debe de nuevo agregar una tercera ecuación para el caso aeróbico (ecuaciones F.24-F.26), en la forma siguiente:

$$D \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_2}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^1(C_2)B^1 / I_b}{K_m^1(C_2)I_c + C_2} \right] C_2 = R \frac{\partial C_2}{\partial t} \quad (F.31)$$

donde  $I_c$ , es el factor de inhibición obtenido por la ecuación (F.17).

*Biodegradación aeróbica combinada con reducción de nitrato*

Una condición necesaria para que las bacterias empiecen a degradar el nitrato es que el suelo esté desprovisto de oxígeno. En estas condiciones el modelo de transporte se compone de las siguientes seis ecuaciones:

$$D \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_1}{\partial x} = R \frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{Y_o}{Y_1} \left[ \frac{v_{max}^1(O)B^1 / I_b}{K_m^1(O) + O} \right] O + \frac{Y_{NI}}{Y_1} \left[ \frac{v_{max}^2(NI)B^2 / (I_b I_n)}{K_m^2(NI) + NI} \right] NI \quad (F.32)$$

$$D \frac{\partial^2 O}{\partial x^2} - V \frac{\partial O}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^1(O)B^1 / I_b}{K_m^1(O) + O} \right] O = \frac{\partial O}{\partial t} \quad (F.33)$$

$$D \frac{\partial^2 NI}{\partial x^2} - V \frac{\partial NI}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^2(NI)B^2 / (I_b I_n)}{K_m^2(NI) + NI} \right] NI = \frac{\partial NI}{\partial t} \quad (F.34)$$

$$D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - V \frac{\partial N}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^1(N)B^1 / I_b}{K_m^1(N) + N} \right] N = \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{Y_{NI}}{Y_N} \left[ \frac{v_{max}^2(NI)B^2 / I_b}{K_m^2(NI) + NI} \right] NI - \frac{k_m}{Y_N} (B^1 + B^2) \quad (F.35)$$

$$\frac{dB^1}{dt} = \left( Y_N \left[ \frac{v_{max}^1(N)B^1 / I_b}{K_m^1(N) + N} \right] N - k_m \right) B^1 \quad (F.36)$$

$$\frac{dB^2}{dt} = \left( Y_{NI} \left[ \frac{v_{max}^2(NI)B^2 / I_b}{K_m^2(NI) + NI} \right] NI - k_m \right) B^2 \quad (F.37)$$

donde

$C_1$  es la concentración del componente orgánico;

$NI$  es la concentración del nitrato;

$N$  es la concentración del nitrógeno;

$v_{max}^1(N)$  y  $K_m^1(N)$  son los parámetros cinéticos de consumo de  $N$ ;  
 $v_{max}^2(NI)$  y  $K_m^2(NI)$  son los parámetros cinéticos de consumo de  $NI$ ;  
 $Y_{NI}$  es el coeficiente de producción para  $NI$ ;  
 $Y_N$  es el coeficiente de producción para  $N$ ;  
 $Y_{1.}$  es el coeficiente de producción anaerobia para  $C_1$ ;  
 $B^2$  es la biomasa correspondiente a la bacteria reductora de nitrato, e  
 $I_n$  es el factor de inhibición no competitiva por inhibición de oxígeno de  
enzimas reductoras de nitrato.  
Los otros parámetros ya se han definido anteriormente.

En las ecuaciones (F.32-F.34) se ha supuesto que el oxígeno es el limitante en la condición aeróbica, mientras que para el caso anaeróbico es el nitrato. En el caso de que el componente orgánico sea el substrato limitante en cada condición (aeróbica y anaeróbica), entonces los términos de biodegradación para  $S_1$ ,  $O$  y  $NI$  deben ser cambiadas en las ecuaciones para reflejar este hecho como se ha mostrado en los modelos anteriores. Además, las ecuaciones (F.35-F.37) se han escrito considerando el caso en que el nitrógeno ( $N$ ) limita el crecimiento de ( $B^1$ ), y el nitrato ( $NI$ ) el de ( $B^2$ ). Aunque algunas bacterias pueden reducir el nitrato a amonio para propósitos de asimilación, en las ecuaciones se supone que el nitrato se utiliza sólo para la generación de energía.

### Biodegradación aeróbica y fermentación

A continuación se presenta el modelo matemático para simular una biodegradación aerobia y una fermentación (biodegradación anaerobia) en la que actúan dos tipos de bacterias asociadas. Se considera que la fermentación es inhibida por la presencia de oxígeno a través de una inhibición no competitiva. En el modelo se incluye también el transporte y la biodegradación del nitrógeno ( $N$ ). El modelo es el siguiente:

$$D \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_1}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^1(C_1)B^1 / I_b}{K_m^1(C_1) + C_1} + \frac{v_{max}^3(C_1)B^3 / (I_b I_n)}{K_m^3(C_1) + C_1} \right] C_1 = R \frac{\partial C_1}{\partial t} \quad (F.38)$$

$$D \frac{\partial^2 O}{\partial x^2} - V \frac{\partial O}{\partial x} = \frac{\partial O}{\partial t} + \frac{Y_1}{Y_o} \left[ \frac{v_{max}^1(C_1)B^1 / I_b}{K_m^1(C_1) + C_1} \right] C_1 \quad (F.39)$$

$$D \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_2}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^4(C_2)B^4 / I_b}{K_m^4(C_2) + C_2} \right] C_2 = R_2 \frac{\partial C_2}{\partial t} \quad (F.40)$$

$$- Y_{1,2} \left[ \frac{v_{max}^3(C_1)B^3 / (I_b I_n)}{K_m^3(C_1) + C_1} \right] C_1$$

$$D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - V \frac{\partial N}{\partial x} - \left[ \frac{v_{max}^3(N)B^3 / I_b}{K_m^3(N) + N} \right] N = \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{Y_2}{Y_N} \left[ \frac{v_{max}^4(C_2)B^4 / I_b}{K_m^4(C_2) + C_2} \right] C_2 + \frac{Y_1}{Y_N} \left[ \frac{v_{max}^1(C_1)B^1 / I_b}{K_m^1(C_1) + C_1} \right] C_1 - \frac{k_m}{Y_N} (B^1 + B^3 + B^4) \quad (F.41)$$

$$\frac{dB^1}{dt} = \left( Y_1 \left[ \frac{v_{max}^1(C_1)B^1 / I_b}{K_m^1(C_1) + C_1} \right] C_1 - k_m \right) B^1 \quad (F.42)$$

$$\frac{dB^3}{dt} = \left( Y_N \left[ \frac{v_{max}^3(N)B^3 / I_b}{K_m^3(N) + N} \right] N - k_m \right) B^3 \quad (F.43)$$

$$\frac{dB^4}{dt} = \left( Y_2 \left[ \frac{v_{max}^4(C_2)B^4 / I_b}{K_m^4(C_2) + C_2} \right] C_2 - k_m \right) B^4 \quad (F.44)$$

donde

$\gamma_{1,2}$  es la relación que describe la cantidad de  $C_2$  producida por la cantidad fermentada de  $C_1$ ; los demás parámetros son los mismos que se han descrito anteriormente.

La forma en que se han escrito las ecuaciones (F.38-F.44) considera el caso en que el consumo de substrato por las bacterias 1 y 3 es limitado por  $C_1$ , y el consumo de la bacteria 4 es limitado por  $C_2$ . El consumo de nitrógeno ( $N$ ), y también el crecimiento, son limitados por el nitrógeno para la bacteria 3, y  $C_1$  y  $C_2$  para las bacterias 1 y 4, respectivamente. Como el proceso de fermentación no requiere de oxidante (receptor de electrones), entonces el consumo de  $C_1$  y  $C_2$  estará siempre limitado por la disponibilidad del substrato orgánico, a pesar de que el crecimiento puede ser limitado por otros substratos orgánicos o por el nitrógeno. El último término en la ecuación (F.40) representa la producción de  $C_2$  debido al metabolismo de  $C_1$ .

## Referencias

Alexander, M., Biodegradation and remediation, *Academic press*, 1994, pp. 302.

Borden, R.C., y P.B. Bedient, "Transport of dissolved hydrocarbons influenced by oxygen -limited biodegradation, 1, Theoretical development", *Water Resour. Res.*, 22, 1986, pp. 1973-1982.

Borden, R. C., P. B. Bedient, M. D. Lee, C. H. Ward, y J. Wilson, "Transport of dissolved hydrocarbons influenced by oxygen-limited biodegradation, 2, Field application", *Water Resour. Res.*, 22, 1986, pp. 1983-1990.

Celia, M. A., J. S. Kindred, e I. Herrera, "Contaminant transport and biodegradation, 1, A numerical model for reactive transport in porous media", *Water Resour. Res.*, 25, 1989, pp. 1141-1148.

Iturbe, R., Salinidad y disposición del agua en el suelo, *Series del Instituto de Ingeniería de la UNAM*, No. 500, 1986, 57pp.

Kindred, J. S. y, M. A. Celia, "Contaminant transport and biodegradation, 2, Conceptual model and test simulations", *Water Resour. Res.*, 25, 1989, pp. 1149-1159.

Ehrlich, C. C., D. F. Goerlitz, E. M. Godsy, y M. F. Hult, "Degradation of phenolic contaminants in groundwater by anaerobic bacteria: St. Louis Park, Minnesota", *Groundwater*, 20, 1982, pp. 703-710.

Ewing, R. E., y M. A. Celia, "Numerical methods for reactive transport and biodegradation", *Computational methods in water resources IX*. Vol. 1.

Jones, S.H., y M. Alexander, *Appl. Environ. Microbiol.*, 51,1 1986, pp. 891-897.

Klecka, G. M., y W. J. Maier, *Appl. Environ. Microbiol.*, 49, 1985, pp. 46-53.

Kunc, F., y J. Rybarova, *Soil Biol. Biochem.* 15, 1983, pp. 141-144.

Molz, F. J., M. A. Widdowson, y L. D. Benefield, "Simulation of microbial growth dynamics coupled to nutrient and oxygen transport in porous media", *Water Resour. Res.*, 22, 1986, pp. 1207-1216.

Monod, J., *Annu. Rev. Microbiol.* 3, 1949, pp. 371-394.

Nielsen, D. R., M. T. van Genuchten, y J. W. Biggar, "Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone", *Water Resour. Res.*, 22, 1986, pp. 895-1088.

Rozich, A. F., A. F. Gaudy Jr., y P. C. D' Adamo, *Water Res.* 19, 1985, pp. , 481-490.

Simkins, S., y M. Alexander, *Appl. Environ. Microbiol.*, 47, 1984, pp. 1299-1306.

Simkins, S., R. Mukherjee, y M. Alexander, *Appl. Environ. Microbiol.*, 51, 1986, pp. 1153-1160.

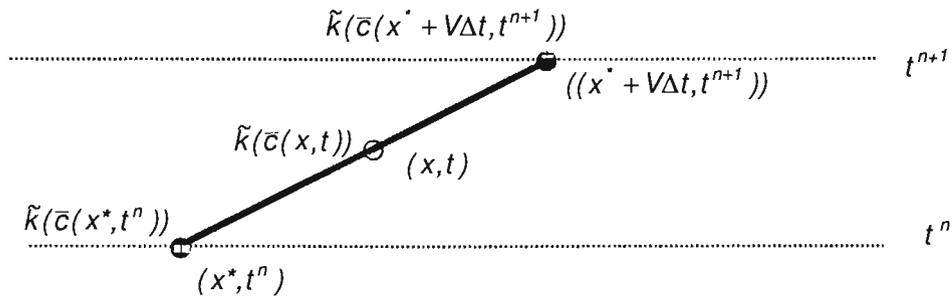
## **ANEXO G**

Se comprueba que  $N'(w_i^{n+1}) = O(\Delta t^2)$

Si en la función de peso (ecuación 6.6):

$$w_i^{n+1} = \begin{cases} \left( \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x} + V \frac{t^{n+1} - t}{\Delta t} \right) \exp \left[ \int_{t^n}^t \tilde{k}(\bar{c}) d\tilde{t} \right]; (x, t) \in [x_{i-1}, x_i] \times [t^n, t^{n+1}] \equiv \Omega_1 \\ \left( \frac{x_{i+1} - x}{\Delta x} - V \frac{t^{n+1} - t}{\Delta t} \right) \exp \left[ \int_{t^n}^t \tilde{k}(\bar{c}) d\tilde{t} \right]; (x, t) \in [x_i, x_{i+1}] \times [t^n, t^{n+1}] \equiv \Omega_2 \\ 0 \text{ de otra forma.} \end{cases} \quad (\text{G.1})$$

empleamos una aproximación lineal para  $\tilde{k}(\bar{c}) \equiv \tilde{k}(\bar{c}(x, t))$  a lo largo de la línea característica, y haciendo uso de la figura:



se llega a:

$$\tilde{k}(\bar{c}) \approx \tilde{k}(\bar{c}(x^*, t^n)) + [\tilde{k}(\bar{c}(x^* + V\Delta t, t^{n+1})) - \tilde{k}(\bar{c}(x^*, t^n))] \left[ \frac{t - t^n}{t^{n+1} - t^n} \right] \equiv \mathcal{R} \quad (\text{G.2})$$

Por otra parte, a lo largo de la línea característica la serie de Taylor permite expresar:

$$\tilde{k}(\bar{c}) = \tilde{k}(\bar{c}(x^*, t^n)) + \left( \frac{d\tilde{k}(\bar{c})}{dt} \right)_{(x^*, t^n)} (t - t^n) + O(t - t^n)^2 \quad (\text{G.3})$$

Despejando de la ecuación (G.3) el gradiente, se obtiene:

$$\left( \frac{d\tilde{k}(\bar{c})}{dt} \right)_{(x^*, t^n)} = \frac{\tilde{k}(\bar{c}) - \tilde{k}(\bar{c}(x^*, t^n))}{(t - t^n)} + O(t - t^n) \quad (\text{G.3 a})$$

Comparando las ecuaciones (G.2) - (G.3 a), y considerando que  $(t - t^n) \leq (t^{n+1} - t^n)$  para  $(x, t) \in (\Omega_1 + \Omega_2)$ , el máximo error se tendrá cuando  $t = t^{n+1}$ . Por lo tanto, la aproximación (G.2) es del orden  $O(t^{n+1} - t^n)^2$ , es decir:

$$\tilde{k}(\bar{c}) = \hat{K} + O(t^{n+1} - t^n)^2 = \hat{K} + O(\Delta t^2) \quad (G.4)$$

Ahora si empleamos la ecuación (G.1) en  $(x, t) \in \Omega_1$ , resulta:

$$\begin{aligned} (w_i^{n+1})_t &= -\frac{V}{\Delta x} \exp\left[\int_{t^n}^t \tilde{k}(\bar{c}) dt\right] + \tilde{k}(\bar{c}) w_i^{n+1} \\ V(w_i^{n+1})_x &= \frac{V}{\Delta x} \exp\left[\int_{t^n}^t \tilde{k}(\bar{c}) dt\right] \\ (w_i^{n+1})_{xx} &= 0 \\ \Rightarrow \\ N^*(w_i^{n+1}) &\equiv (w_i^{n+1})_t + V(w_i^{n+1})_x + (w_i^{n+1})_{xx} - \tilde{k}(\bar{c})w_i^{n+1} = 0 \end{aligned} \quad (G.5)$$

Asimismo si en la ecuación (G.1) se aproxima  $\tilde{k}(\bar{c}) \approx \hat{k}$ , entonces según la ecuación (G.4) se obtiene que:

$$\begin{aligned} (w_i^{n+1})_t &= -\frac{V}{\Delta x} \exp\left[\int_{t^n}^t \hat{k} dt\right] + \hat{k} w_i^{n+1} + O(\Delta t^2) \\ V(w_i^{n+1})_x &= \frac{V}{\Delta x} \exp\left[\int_{t^n}^t \hat{k} dt\right] + O(\Delta t^2) \\ (w_i^{n+1})_{xx} &= 0 \end{aligned} \quad (G.6)$$

en donde :

$$N^*(w_i^{n+1}) \equiv (w_i^{n+1})_t + V(w_i^{n+1})_x + (w_i^{n+1})_{xx} - \tilde{k}(\bar{c})w_i^{n+1} = O(\Delta t^2)$$

Lo cual indica que el error de aproximar  $\tilde{k}(\bar{c})$  por  $\hat{k}$  es del orden  $O(\Delta t^2)$ , es decir:

$$N^*(w_i^{n+1}) \equiv \tilde{k}(\bar{c}) - \hat{k} = O(\Delta t^2) \text{ l.c.q.d.} \quad (G.7)$$

## ANEXO H

Se analiza la influencia de la conductividad hidráulica ( $K$ ) y su derivada  $\left( K' = \frac{\partial K}{\partial \psi} \right)$  en las formas de expresar la ecuación de Richards.

Por cuestiones de claridad considérese la ecuación de Richards en la dimensión vertical:

$$S \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial K}{\partial z} = 0 \quad (\text{H.1})$$

Aplicando la regla de la cadena al último término se obtiene:

$$S \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - K' \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0 \quad (\text{H.2})$$

En la ecuación (H.1), en el término gravitatorio, se captura directamente la influencia de  $K$  mientras que en la ecuación (H.2) esta influencia se captura indirectamente a través de  $K'$ .

Si se solucionan numéricamente ambas ecuaciones a través de un método en diferencias finitas totalmente implícito en el tiempo y centrado en el espacio, para un nodo interno sin cruce de características en las fronteras las ecuaciones son:

Para la ecuación (H.1) es:

$$\begin{aligned} & \Psi_i^{n+1} \left[ \frac{S_i^{n+1}}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] + \Psi_{i-1}^{n+1} \left[ -\frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} \right] + \Psi_{i+1}^{n+1} \left[ -\frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \\ & = \Psi_i^n \left[ \frac{S_i^{n+1}}{\Delta t} \right] + \frac{1}{\Delta z} \left[ K_{i+(1/2)}^{n+1} - K_{i-(1/2)}^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (\text{H.3})$$

Para la ecuación (H.2) es:

$$\begin{aligned} & \Psi_i^{n+1} \left[ \frac{S_i^{n+1}}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] + \Psi_{i-1}^{n+1} \left[ -\frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} - \frac{1}{2\Delta z} K'_{i-1}^{n+1} \right] \\ & + \Psi_{i+1}^{n+1} \left[ -\frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{2\Delta z} K'_{i+1}^{n+1} \right] = \Psi_i^n \left[ \frac{S_i^{n+1}}{\Delta t} \right] \end{aligned} \quad (\text{H.4})$$

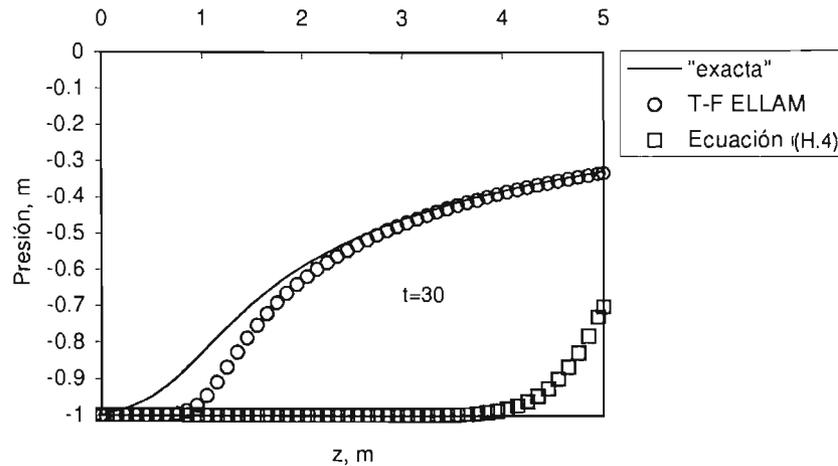
Como ELLAM no puede ser aplicado directamente a la ecuación (H.1), la aplicación se debe realizar a través de la ecuación (H.2). Por lo tanto aplicando una linealización tipo Picard se obtiene:

$$\begin{aligned} & \Psi_i^{n+1} \left[ \frac{S_i^{n+1}}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] + \Psi_{i-1}^{n+1} \left[ -\frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} \right] + \Psi_{i+1}^{n+1} \left[ -\frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \\ & = \Psi_i^n \left[ \frac{S_i^{n+1}}{\Delta t} \right] + \frac{S_i^{n+1}}{\Delta t \Delta z} \int_0^L (\Psi)^n W_i(z, t^n) dz \end{aligned} \quad (H.5)$$

Para una linealización Taylor-Fréchet se obtiene:

$$\begin{aligned} & \Psi_i^{n+1} \left[ \frac{S_i^{n+1}}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \\ & \Psi_{i-1}^{n+1} \left[ -\frac{\Delta t(z_{i-(1/2)})}{\Delta z} K_{i-(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \\ & \Psi_{i+1}^{n+1} \left[ -\frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) = \\ & \Psi_i^{n+1} \left[ -\frac{S_i^{n+1}}{\Delta t} + \frac{1}{2} \bar{S}_i^{n+1} + \bar{S}_{i-(1/2)}^{n+1} + \bar{S}_{i+(1/2)}^{n+1} + \right. \\ & \left. \frac{1}{2\Delta z} \bar{K}_{i-(1/2)}^{n+1} - \frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} - \frac{1}{2\Delta z} \bar{K}_{i+(1/2)}^{n+1} - \frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \\ & \Psi_{i-1}^{n+1} \left[ \frac{1}{2\Delta z} \bar{K}_{i-(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i-(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \\ & \Psi_{i+1}^{n+1} \left[ -\frac{1}{2\Delta z^2} \bar{K}_{i+(1/2)}^{n+1} + \frac{1}{\Delta z^2} K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \\ & \frac{1}{\Delta z} \left[ -K_{i-(1/2)}^{n+1} + K_{i+(1/2)}^{n+1} \right] \exp(\gamma_i^{n+1} \Delta t) + \frac{S_i^{n+1}}{\Delta z \Delta t} \int_0^L (\Psi + \bar{\Psi})^n W_i(z, t^n) dz \end{aligned} \quad (H.6)$$

Como ejemplo de aplicación considere la versión unidimensional del ejemplo 6.12 del capítulo 6. Considérese una malla muy fina con los siguientes parámetros:  $\Delta t=0.1$ ,  $\Delta z=0.1$ .



En esta figura se muestran los resultados que corresponden para un tiempo de 30 horas y empleando 5 iteraciones. Destacan los resultados obtenidos con la ecuación (H.4) en donde el atraso en los resultados se puede explicar de la forma siguiente: En la ecuación (H.3) se observa que en el último miembro del lado derecho la conductividad hidráulica queda capturada explícitamente, mientras que en la ecuación (H.4) este término queda capturado en forma implícita a través de la derivada de la conductividad, es decir la influencia de la gravedad en forma explícita queda nula (esto explica el atraso en las soluciones). Algo similar pero más drástico sucede en la ecuación (H.5), aquí el término gravitatorio queda nulo aún en forma implícita. En la ecuación (H.6) el término gravitatorio (penúltimo término en el segundo miembro) queda de nuevo capturado a través de  $\psi$ , es decir la técnica de linealización Taylor-Frechet logra incorporar la influencia de este término.

Lo anterior comprueba los resultados que se obtienen en la figura 6.29 del capítulo seis. En donde se muestra un atraso en las soluciones. Esto resulta importante por el hecho de que metodologías que traten con formas de la ecuación de Richards similares a la ecuación (H.2), y que son las formas con las que trata ELLAM, si la técnica de linealización no captura de forma adecuada la influencia de la conductividad hidráulica los resultados no pueden ser satisfactorios.

# **ANEXO I**

Descripción Funcional del Programa *ellam2dx*

## Diseño del Sistema

El programa *ellam2dx* forma parte de un sistema de programas cuyo objetivo es el análisis con ELLAM, con un uso sencillo e intuitivo. El diseño toma en cuenta las principales funciones requeridas, por lo que se cuenta con 3 programas principales: para la captura, para el procesamiento y para el despliegue de resultados. El encargado del procesamiento es precisamente *ellamd2x*.

La plataforma seleccionada para el sistema es Windows 9X en adelante, con interfaz gráfica. Sin embargo, dada la naturaleza de *ellamd2x*, éste tiene la particularidad de poder ser transportado a otros sistemas operativos como Unix o Linux.

Se utilizó una combinación de programación estructurada (C) con programación orientada a objetos (C++), según las necesidades.

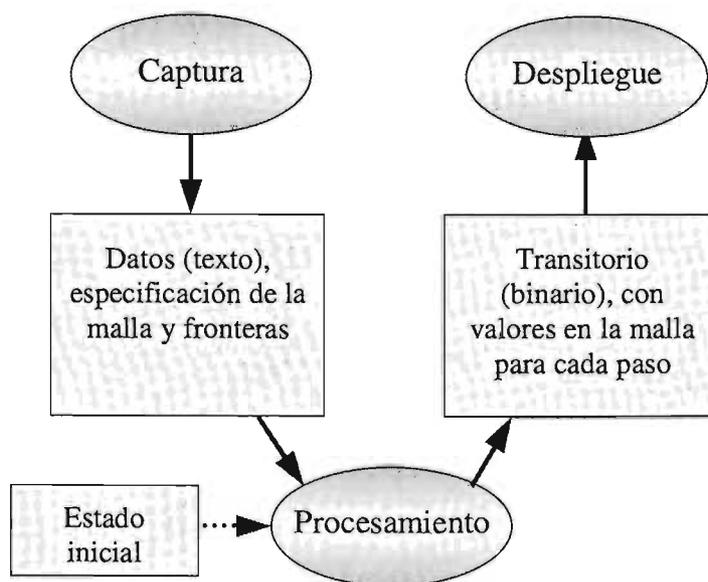


Figura G. 1. Diagrama Funcional del programa *ellam2dx*

## Detalles de Implementación

En este caso en particular, para *ellam2dx* se utiliza programación orientada a objetos (C++), dada la naturaleza de la metodología. Con este tipo de programación se "encapsulan" las propiedades (datos) y métodos (funciones) de los objetos, por lo que se reducen significativamente los errores de programación. Además, al probar

exhaustivamente el funcionamiento de una clase (de objetos), la atención se centra en el desarrollo de las descendientes.

Otra ventaja del lenguaje C++ es el "polimorfismo", que significa que un mismo método puede realizar tareas adicionales a las de su clase base, con variantes, o aún distintas. Esto es de suma utilidad para implementar las variantes de Lineal Conservativo, Lineal No Conservativo, No Lineal con la Metodología Tradicional, No Lineal con la Metodología Propuesta, etc.

Como se mencionó, este programa no tiene intervención del usuario. Esto significa que una vez que se haya leído la información, el proceso se ejecutará hasta el tiempo simulado, con reportes de avence y error. Por este motivo, se tomó la decisión de que en la implementación no se utilizaran características específicas de una plataforma, con el objeto de una eventual migración a otros sistemas operativos.

Para verificar el funcionamiento de etapas críticas, se realizaron distintas pruebas de validación.

- Función de peso. Se verificó que la suma de pesos para un punto vale 1.
- Se verificó el cálculo de la Integral en el tiempo anterior y de la Flujo de frontera. Esta prueba se realizó para condiciones de flujo uniforme tipo escalón. También Se observó el efecto de la función de peso (ns).
- Se verificó la simetría de la matriz. La matriz formada durante la etapas de "características" debe tener una cierta simetría, según su posición (interior/interior, inferior/izquierda, inferior/interior, etc.)

## Módulos

Cuando el tamaño del código de un programa así lo indica, éste se parte en varios módulos. Cada módulo es una unidad de compilación, que luego de superar esta etapa deriva en código objeto, que se juntan posteriormente en la etapa del enlace (link).

En lo posible, se implementó un módulo por clase, aunque hay excepciones en las que la cantidad de código hizo recomendable separarlo en varios. La siguiente tabla muestra la relación entre clases y módulos.

<b>Clase</b>	<b>Módulo(s)</b>
Boundary	boundary.cpp
TestFunc	testfunc.cpp
Knot	knot.cpp
KnotX (Knot)	knot.cpp
KnotY (Knot)	knot.cpp
KnotXY (Knot)	knot.cpp
Elem2d (Knot)	elem2d.cpp
Point2d	point2d.cpp
Field2d	field2d.cpp
BoundSpc	boundspc.cpp
Ellam2d	ellam2d.cpp ellam2db.cpp
Ellam2dN	ellam2dn.cpp
Ellam2dNP	ellam2dp.cpp
(varias)	gauss.cpp misc.cpp
(ejecutor)	ellam2dx.cpp

A continuación se hace un breve recorrido por cada una de las clases que intervienen.

#### Boundary

Para el manejo de fronteras se implementó una clase que incluye los tipos Dirichlet, Neumann y Flujo Total. Hay métodos para especificar y evaluar. *ellam2dx*.

#### TestFunc

Clase para manejar las funciones de peso. La base es unidimensional. Hay metodos para especificar y evaluar.

#### Knot

Clase base para manejo de variables en nudos de la malla. La variable básica es la velocidad, y banderas de cruce de fronteras.

#### KnotX

Clase de nudos laterales en las caras horizontales, derivada de Knot. Se requiere adicionalmente de los coeficiente de dispersión  $D_{xx}$  y  $D_{yy}$ .

### KnotY

Clase de nudos laterales en las caras verticales, derivada de Knot. Se requiere adicionalmente de los coeficiente de dispersión Dyy y Dxy.

### KnotXY

Clase de nudos en las esquinas de las celdas, derivada de Knot. Se requiere adicionalmente de los coeficiente de dispersión Dxx, Dyy, Dyx y Dxy

### Elem2d

Clase para el manejo de celdas o elementos en 2 dimensiones. Derivada de Knot (para información del nudo central de la celda) y emplea objetos de TestFunc para cálculo de funciones de peso bidimensionales. Cuenta con banderas para saber si en el tiempo anterior la celda estaba completamente fuera o dentro del dominio.

### Point2d

Puntos en 2 dimensiones, principalmente para evaluar la integral de "C" en el tiempo anterior. Cuenta con variables para la posición actual, el valor de "C" en el tiempo previo y el peso correspondiente. Tiene referencia al dominio completo (Ellam2d). Existen métodos para interpolar "C" hacia atrás o adelante en el tiempo.

### Field2d

Especificación de campos escalares en 2 dimensiones. Tiene información de la malla (tamaño, posiciones y valores del campo en los nudos) y métodos para leer de archivo y evaluación.

### BoundSpc

Especificación de fronteras. Maneja un arreglo de fronteras (Boundary) que se pueden especificar por rangos. Existe un método para leer de archivo.

### Ellam2d

Clase para manejo de proyectos en 2 dimensiones con ELLAM. Contiene información general (archivos, nombres, tamaños), posiciones, elementos, nudos, fronteras, etc., así como variables para agilizar los cálculos. Hay métodos para especificación y cálculo de posiciones, integrales de "C" y de flujo, características, y manejo del archivo del transitorio. Puede manejar proyectos lineales conservativos o no conservativos.

## Ellam2dN

Clase derivada de Ellam2dN para manejar proyectos no lineales, en los que existe un término equivalente al no conservativo que depende de la solución, con la metodología convencional.

## Ellam2dNP

Clase derivada de Ellam2dN para manejar proyectos no lineales con la metodología propuesta.

Existen además módulos que no implementan clases, sino que se trata de rutinas comunes. Estos son:

### gauss

Solución de ecuaciones lineales simultáneas con el método de Gauss.

### misc

Rutinas varias comunes a las distintas aplicaciones de ellam2d. Existen funciones genéricas de entrada y salida, así como algunas pruebas.

### ellam2dx

Cuerpo ejecutor del programa.

## Archivos

Como todo programa, existen archivos de entrada y salida. En este caso, solo existe un archivo de entrada que es el que define el proyecto ELLAM en 2 dimensiones. Su formato es:

- Ancho
- Alto
- Número de columnas
- Número de renglones
- Coeficientes de dispersión Dxx, Dyy, Dyx y Dyx
- Velocidad en dirección X y en dirección Y
- Paso de integración
- Tiempo máximo
- Opciones (ver adelante)
- Número de subdivisiones Ns
- Coeficiente K para caso No Conservativo
- Condición inicial

- 
- Frontera Izquierda
  - Frontera Derecha
  - Frontera Inferior
  - Frontera Superior

El campo de "Opciones" puede ser combinacion de:

- u Flujo uniforme
- r Flujo rotativo ( $V_x$  y  $V_y$  se consideran coeficientes para cálculo de velocidad)
- 1 Fronteras de 1er Orden: Dirichlet (default)
- 2 Fronteras de 2do Orden: Newman (default)
- 3 Fronteras de 3er Orden: FlujoTotal (default)
- + Forza a incluir integral en celdas que no estaban en tiempo anterior.
- No se incluye la integral en celdas que no estaban en tiempo anterior (def).
- t Descarta terminos "no" en celdas frontera.
- N No conservativo (especificar la constante despues de Ns)

La condición inicial se especifica como una malla, a partir de la que se interpola en todo el dominio, de la siguiente manera:

- Número de columnas
- Número de renglones
- Valores X de las columnas
- Valores Y de los renglones
- Valores de la condición inicial, iniciando con el renglón inferior de izquierda a derecha.

Por su parte, las fronteras se definen por rangos. En caso de no estar especificado una porción de frontera, se toma el tipo de frontera de default con valor de cero. El formato en este caso es:

- Número de rangos
- Limite inferior del 1er rango
- Tipo de frontera y valor para el 1er rango
- Limite inferior del 2do rango (superior del 1er rango)
- Tipo de frontera y valor para el 2do rango
- Limite inferior del último rango
- Tipo de frontera y valor para el último rango

Los archivos de resultados o salida son de tipo binario, con la un encabezado y un registro por paso de tiempo. El encabezado es:

- Identificador de 4 caracteres, siempre debe ser "E2T\0";
- Identificador del CPU en que se ejecuta, 1 byte;

- Nombre del proyecto, 80 caracteres;
- Nombre de la corrida, 80 caracteres;
- Número de variables en X (nVarX), entero de 4 bytes;
- Número de variables en Y (nVarY), entero de 4 bytes;
- Posición de las columnas (en X), nVarX flotantes de 4 bytes;
- Posición de los renglones (en Y), nVarY flotantes de 4 bytes por valor;
- Posición de las divisiones de celdas en X, (nVarX-1) flotantes de 4 bytes por valor;
- Posición de las divisiones de celdas en Y, (nVarY-1) flotantes de 4 bytes por valor;

Por su parte, cada registro incluye:

- Tiempo, flotante de 4 bytes;
- Valores de la variable en la malla, (nVarX\*nVarY) flotantes de 4 bytes;