

Modelación de la distribución de un contaminante líquido usando la ecuación de difusión en dos dimensiones

Modeling the distribution of a liquid contaminant using the diffusion equation in two dimensions

Roberth Cachay Torres*; José Roldan López; Jhenry F. Agreda-Delgado.

Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad Nacional de Trujillo, Av. Juan Pablo II s/n – Ciudad Universitaria, Trujillo, Perú.

* Autor correspondiente: rcachay@unitru.edu.pe (R. Cachay)

DOI: [10.17268/rev.cyt.2022.04.02](https://doi.org/10.17268/rev.cyt.2022.04.02)

RESUMEN

En este trabajo se emplea la ecuación de difusión en 2D para modelar el proceso de difusión de un contaminante en aguas poco profundas y tranquilas. El coeficiente de difusión se consideró espacialmente constante y solamente dependiente de la naturaleza de la sustancia. La idea y los esquemas numéricos (diferencia hacia adelante, hacia atrás y central) se aplicaron a un dominio en el plano XY de lado 1, donde se aprecia la distribución del contaminante. Se ha usado condiciones de frontera de Neumann igual a cero o flujo cero en la frontera, con el fin de hacer un corte en dicha frontera para la modelación. El programa computacional realizado permite mover la fuente de contaminante a cualquier punto del dominio y ver su distribución en tiempo real, además se puede añadir otras fuentes de contaminante y observar la difusión de estas. A medida que el valor de la concentración de contaminante se reduce en el tiempo, se aprecia una ralentización de la velocidad de la onda; la modelación permite hacer un seguimiento de la distribución del contaminante para todo tiempo. Por lo tanto, el modelo numérico desarrollado se puede utilizar para predecir la distribución de contaminantes en líquidos.

Palabras clave: Difusión; Diferencias finitas; Condiciones de frontera.

ABSTRACT

In this work, the 2D-diffusion equation is used to model the diffusion process of a pollutant in calm and shallow waters. The diffusion coefficient was considered spatially constant and only dependent on the nature of the substance. The idea and the numerical schemes (forward difference, backward difference and center difference) were applied to a domain in the XY plane of sideways 1, where the distribution of the contaminant can be seen. Neumann boundary conditions equal to zero or zero flow at the boundary have been used, in order to make a cut at said boundary for the modeling. The computational program carried out allows moving the contaminant source to any point of the domain and seeing its distribution in real time, it is also possible to add other contaminant sources and observe their diffusion. As the value of the contaminant concentration decreases over time, a slowdown in the speed of the wave is observed; the modeling allows monitoring the distribution of the contaminant for all time. Therefore, the developed numerical model can be used to predict the distribution of contaminants in liquids.

Keywords: Diffusion; Finite differences; Boundary conditions.

1. INTRODUCCIÓN

El concepto de difusión es ampliamente usado en diferentes campos tales como: Física (Xue et al., 2020; Oliveira et al., 2019), química (Mailler et al., 2020), biología (Polyanin et al., 2018), sociología (Zhang y Centola, 2019), economía (Comin y Nanda, 2019), entre otros.

Won y Ramkrishna (2019), describen que el proceso de difusión de una sustancia se extiende desde un lugar en el que existe una mayor concentración a una zona de menor concentración.

En física la difusión se entiende como el proceso por el cual partículas (átomos, iones, moléculas) son transportadas de una región de alta concentración a una región de baja concentración, impulsada por un gradiente de concentración (Granik et al., 2019).



La modelación de la difusión de contaminantes en aguas poco profundas (un lago o en el mar cercano a la costa), con el propósito de reducir el daño ecológico es un tema importante a ser estudiado (Hutomo et al., 2019). Se puede modelar haciendo uso de la ecuación de difusión bidimensional y aplicando métodos numéricos, donde es necesario implementar condiciones de frontera de Neumann iguales a cero para introducir condiciones cíclicas en los nodos que se encuentran fuera del dominio de interés.

La ecuación que modela el proceso de difusión surge de la ley de conservación de la masa (Lax, 1973). Las leyes de conservación (masa, energía, etc.) se describen mediante ecuaciones en derivadas parciales, donde algunas ecuaciones tienen solución analítica o exacta; en el resto de las ecuaciones obtener las soluciones requiere métodos numéricos. Por ejemplo, en nuestro caso hemos considerado un modelo bidimensional con condiciones de frontera de Neumann, donde el método de diferencias finitas es el más apropiado para obtener las soluciones dependientes del tiempo.

La ecuación de difusión bidimensional, tiene sus orígenes en la ley de Fick que se deriva de la ley de la conservación de la masa. La ley de Fick describe como partículas, energía o algunas otras cantidades físicas son transferidas dentro de un sistema, debido a dos procesos: advección y difusión. La solución de esta ecuación predice el comportamiento de algunos fenómenos como el transporte de contaminantes en aguas poco profundas, dispersión de contaminantes en ríos, dispersión de contaminantes en lagos, entre otros. La solución numérica bidimensional con condición inicial y condiciones de frontera ayuda a entender el comportamiento de la distribución de contaminante a través de un medio (Andallah y Khatun, 2020).

La primera ley de Fick describe que, en una situación unidimensional, el flujo difusivo de una especie A, es proporcional al gradiente de concentración de dicha especie a lo largo del eje x del sistema (ecuación 1).

$$j = -\alpha \frac{\partial u}{\partial x} \quad (1)$$

donde el factor de proporcionalidad α es llamado coeficiente de difusión o difusividad.

En la segunda ley de Fick o ecuación de continuidad para A, se calcula la tasa de cambio de la concentración A por difusión (ecuación 2).

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2)$$

donde α se asume que es espacialmente constante y dependiente solamente de la naturaleza de la sustancia. Sin embargo, en situaciones generales la difusividad es dependiente de la posición, a causa de la variación espacial debido por ejemplo a la concentración o temperatura. En este trabajo la consideramos constante.

Entonces para el caso bidimensional, el problema a modelar toma la forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3)$$

Con condición inicial $u(x, y, 0) = f(x, y)$ y condiciones de Neumann en la frontera de la forma: $\partial_n U = 0$; $\forall x, y \in$ a la frontera (Won y Ramkrishna, 2019).

Las fuentes de agua como los mares, lagunas y ríos no solo son fuentes básicas de desarrollo económico y social, sino que son fuentes de vida. Sin embargo, a lo largo del tiempo debido al desarrollo económico e industrial han ocurrido accidentes que conllevaron a la contaminación de estas fuentes. Por lo tanto, es importante desarrollar modelos que pronostiquen el comportamiento del contaminante en estas fuentes, para un mejor tratamiento y poder evitar daños mayores en su proceso de expansión.

Nuestro modelo muestra la difusión de un contaminante en aguas tranquilas, no considera las corrientes del fluido o movimiento del fluido en el proceso de difusión del contaminante, además deja de lado el proceso de convección. Es un primer intento de generar el modelamiento del contaminante (difusividad) y observar su comportamiento en la frontera, con las condiciones de Neumann impuestas.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1 Material de estudio

Modelación bidimensional de la ecuación de difusión con condiciones de Neumann en la frontera.

Esta ecuación modela diferentes procesos de difusión, como la conducción de calor y el transporte difusivo de una sustancia, por citar algunos ejemplos. Usamos el modelo para explicar el proceso difusivo de un contaminante.

El valor del coeficiente de difusión nos da las características particulares del contaminante, así como la naturaleza de la viscosidad del medio. Existen diferentes valores para el coeficiente de difusión que podemos asignar dependiendo de la naturaleza del contaminante a evaluar. Los coeficientes de difusión para líquidos son del orden ($10^{-3} - 10^{-6}$), para los gases 10^{-1} y para los sólidos ($10^{-14} - 10^{-10}$). Usamos como valor del coeficiente de difusión $\alpha = 10^{-3} * 4 = 0,004$, el cual está dentro del rango de un contaminante líquido, este valor arbitrario fue elegido para fines computacionales para obtener un valor del tamaño de paso en el mallado computacional h en la variable espacial y también un tamaño Δt para la variable del tiempo.

La condición inicial tomada y su proyección en el plano XY, da la geometría inicial del contaminante, en este trabajo se ha dado un valor inicial de 10 unidades a una posición inicial del dominio como condición inicial, y también se ha usado una función de Gauss en 2 dimensiones para crear 2 fuentes de contaminante en dicho dominio y así apreciar la difusión o proceso de distribución de este.

2.2 Métodos y técnicas

Modelación Numérica de la ecuación de difusión en 2D

Utilizando el método numérico de diferencias finitas se procedió a discretizar la ecuación diferencial parcial planteada para la difusión en 2D (ecuación 3), tanto en la variable temporal t como las espaciales (x,y) .

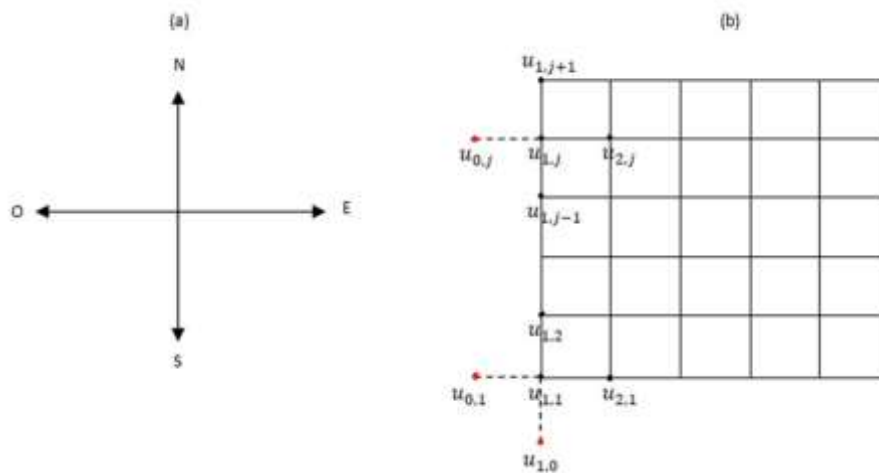


Figura 1. a) Sistema de referencia. b) Representación mallada del dominio para la solución del problema.

En la Figura 1b, se representan los nodos dentro del dominio incluido la frontera (puntos de color negro) y los nodos fantasmas que se generan (puntos de color rojo), al aplicar el método de diferencias finitas

Para discretizar la ecuación diferencial parcial difusiva (ecuación 3), y poder construir nuestro programa computacional, usamos las aproximaciones de segundo orden para las derivadas espaciales y aproximaciones de primer orden para las derivadas temporales y consideramos que el tamaño de paso en el eje X y en el eje Y sea el mismo $\Delta x = \Delta y = h$; al aproximar las derivadas de esta manera la ecuación discretizada toma la forma:

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} = \alpha \left(\frac{U_{i-1,j}^n + U_{i+1,j}^n + U_{i,j-1}^n + U_{i,j+1}^n - 4U_{i,j}^n}{h^2} \right) \quad (4)$$

$$U_{i,j}^{n+1} = U_{i,j}^n + \Delta t \alpha \left(\frac{U_{i-1,j}^n + U_{i+1,j}^n + U_{i,j-1}^n + U_{i,j+1}^n - 4U_{i,j}^n}{h^2} \right) \quad (5)$$

En las ecuaciones (4) y (5), los subíndices i, j corresponden a las variables espaciales y el superíndice n corresponde a la variable temporal.

Reescribiendo la expresión $\frac{\alpha \Delta t}{h^2} = \beta$ en la ecuación (5), se conoce que la solución numérica será estable si $0 < \beta < 0,5$ (Moin, 2010). Ordenando la ecuación discretizada (5) queda expresada de la forma:

$$U_{i,j}^{n+1} = (1 - 4\beta)U_{i,j}^n + \beta U_{i-1,j}^n + \beta U_{i+1,j}^n + \beta U_{i,j-1}^n + \beta U_{i,j+1}^n \quad (6)$$

La ecuación (6) se aplica a cada nodo del dominio; obsérvese que es una fórmula de 5 puntos nodales es decir usa los valores de la concentración en los nodos: (i, j) , $(i - 1, j)$, $(i + 1, j)$, $(i, j - 1)$ y $(i, j + 1)$. La evolución en el tiempo de la concentración en el estado $n + 1$, para cada coordenada espacial i, j depende del valor de concentración de sus 5 vecinos próximos en el estado n .

La condición de Neumann en la frontera es: $\partial_n U = 0$; $\forall x, y \in$ a la frontera.

Esta condición denota la diferenciación en la dirección normal, hacia afuera en dicha frontera.

- Para nodos en la frontera **Sur**, $j = 1, i = 1: N$

$$-\frac{\partial u}{\partial y} = -\left(\frac{U_{i,j+1}^n - U_{i,j-1}^n}{2 * h} \right) = 0 \quad (7)$$

Obtenemos que para $j = 1$: $U_{i,2}^n = U_{i,0}^n$ entonces aparecen los nodos fantasmas, pero considerando un flujo de Neumann igual a cero, estamos considerando una condición cíclica para los nodos que aparecen fuera de la frontera. Esto permitirá tener soluciones más suaves en dicha frontera y por último esta identidad nos permitirá tratar esos nodos ficticios.

- Para nodos en la frontera **Norte**, $i = 1: N, j = N$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{U_{i,j+1}^n - U_{i,j-1}^n}{2 * h} = 0 \quad (8)$$

Considerando $j = N$, la ecuación (8) se expresa de la forma:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{U_{i,N+1}^n - U_{i,N-1}^n}{2 * h} = 0 \quad (9)$$

De donde obtenemos la relación $U_{i,N+1}^n = U_{i,N-1}^n, \forall i = 1: N$.

- Para nodos en la frontera **Este**, $i = N, j = 1: N$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i-1,j}^n}{2 * h} = 0 \quad (10)$$

Considerando $i = N$, la ecuación (10) se expresa de la forma:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{U_{N+1,j}^n - U_{N-1,j}^n}{2 * h} = 0 \quad (11)$$

Entonces obtenemos la relación $U_{N+1,j}^n = U_{N-1,j}^n, \forall j = 1: N$.

- Para nodos en la frontera **Oeste**, $i = 1, j = 1: N$

$$-\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{-U_{i+1,j}^n + U_{i-1,j}^n}{2 * h} = 0 \tag{12}$$

Considerando $i = 1$, la ecuación (12) se expresa de la forma:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{-U_{2,j}^n + U_{0,j}^n}{2 * h} = 0 \tag{13}$$

De donde obtenemos la relación $U_{2,j}^n = U_{0,j}^n, \forall i = 1: N$.

Aplicando la ecuación (6) a cada nodo del dominio (incluidos los nodos de la frontera), obtenemos un sistema matricial. Por ejemplo, para $N = 5$ nodos en cada dirección, generamos 25 nodos en el dominio de interés y por lo tanto obtenemos una matriz 25×25 , que resolvemos numéricamente y con el código computacional construido podemos generalizar para cualquier valor de N .

El sistema matricial que resulta para $N = 5$, se expresa de forma general como: $U^{n+1} = AU^n$, donde U es un vector columna ($N^2 \times 1$) y A es una matriz ($N^2 \times N^2$) formada por las matrices $A0, A1, A2$ y $\mathbf{0}$, que se expresan de la siguiente forma:

$$A0 = \begin{bmatrix} (1 - 4\beta) & 2\beta & 0 & 0 & 0 \\ \beta & (1 - 4\beta) & \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & (1 - 4\beta) & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta & (1 - 4\beta) & \beta \\ 0 & 0 & 0 & 2\beta & (1 - 4\beta) \end{bmatrix}$$

$$A1 = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta \end{bmatrix}$$

$$A2 = \begin{bmatrix} 2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\beta \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La matriz principal A se expresa de la forma:

$$A = \begin{bmatrix} A0 & A2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ A1 & A0 & A1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & A1 & A0 & A1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & A1 & A0 & A1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & A2 & A0 \end{bmatrix}$$

En esta simulación aplicamos métodos numéricos para el dominio cuadrado $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1$ en el caso bidimensional (2D), el cual es un dominio restringido para propósitos computacionales.

En la Tabla 1 se presenta un resumen de las variables, indicadores e índices utilizados en este estudio.

Tabla 1. Variables, indicadores e índices

Variables	Indicador	
Dependiente	Concentración local $u(x, y, t)$	Valor numérico adimensional en tiempo real
Independientes	Posiciones: x, y	$i = i\Delta h, j = j\Delta h$
	Tiempo	n
Parámetros	Coefficiente de Difusión	α
	Tamaño de paso, en la discretización del dominio XY	h

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para la simulación usamos como dominio experimental un cuadrado de lado 1 y observamos el comportamiento difusivo y de la onda en la frontera para dos condiciones iniciales que definen la concentración inicial de contaminante. La Figura 2 y la Figura 3, muestran estas dos condiciones iniciales. Para propósitos de visualización hemos considerado que la zona de mayor concentración tiene un valor de 10 unidades de concentración por unidad de superficie y en el resto del dominio un valor de 1, basándonos en los reportes de simulaciones similares (Habingabwa et al., 2012; Hutomo et al., 2019).

En la primera condición inicial (Figura 2), hemos considerado la fuente de contaminante en la región central del dominio y en la segunda condición inicial (Figura 3), consideramos que la fuente de contaminante se inicia en un costado de ese dominio.

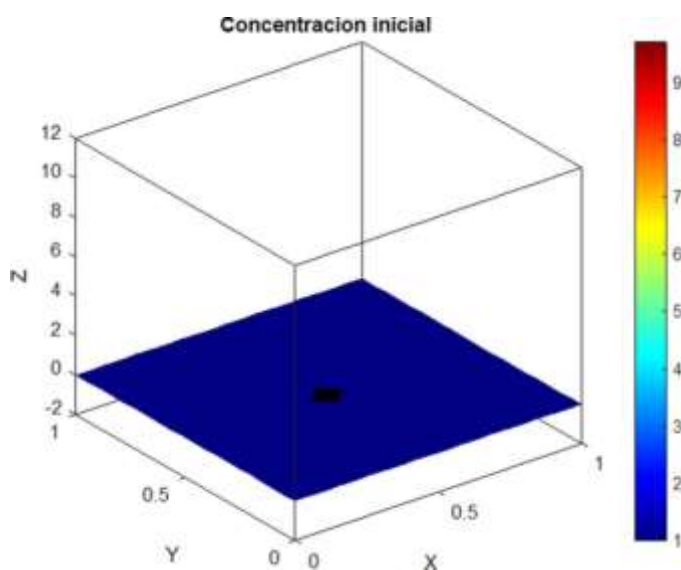


Figura 2. Primera condición inicial usada como prueba para simular el proceso difusivo en 2D.

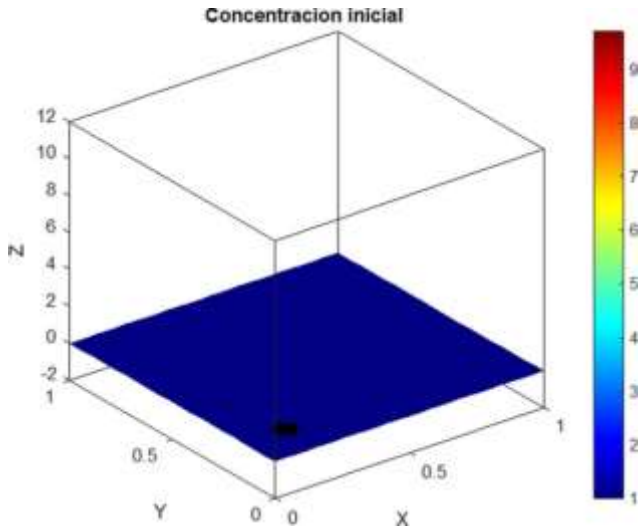


Figura 3. Segunda condición inicial usada como prueba para simular el proceso difusivo en 2D.

En la Figura 4, se muestran los resultados de la simulación para la primera condición inicial; donde se ha considerado $N = 40$ nodos en el dominio XY, para el coeficiente de difusión se ha tomado $\alpha = 0,004$ y para el tamaño de paso $h = 0,0256$. El valor de $\beta = 0,2$, es el mismo para todas las simulaciones.

La barra de colores nos informa como los valores de concentración local de contaminante van evolucionando en el tiempo. Entonces realizando una lectura de la barra de colores en la Figura 4 obtenemos información de cómo va cambiando el valor de la concentración en el tiempo debido al proceso difusivo. Observamos que el valor de la concentración en la zona central decae considerablemente de 10 unidades a aproximadamente 1,35 para $T = 0,3$. De este resultado podemos inferir que en un comienzo el proceso difusivo es rápido.

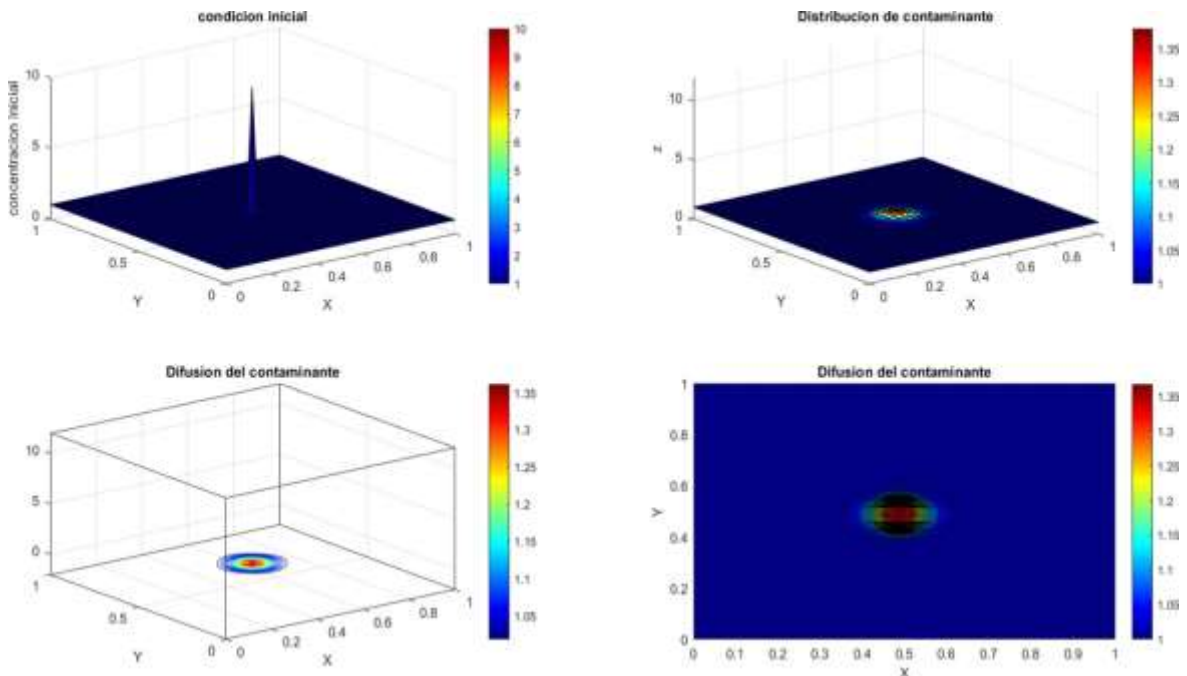


Figura 4. Modelación de la difusión de un contaminante colocado en la parte central del dominio para T=0,3.

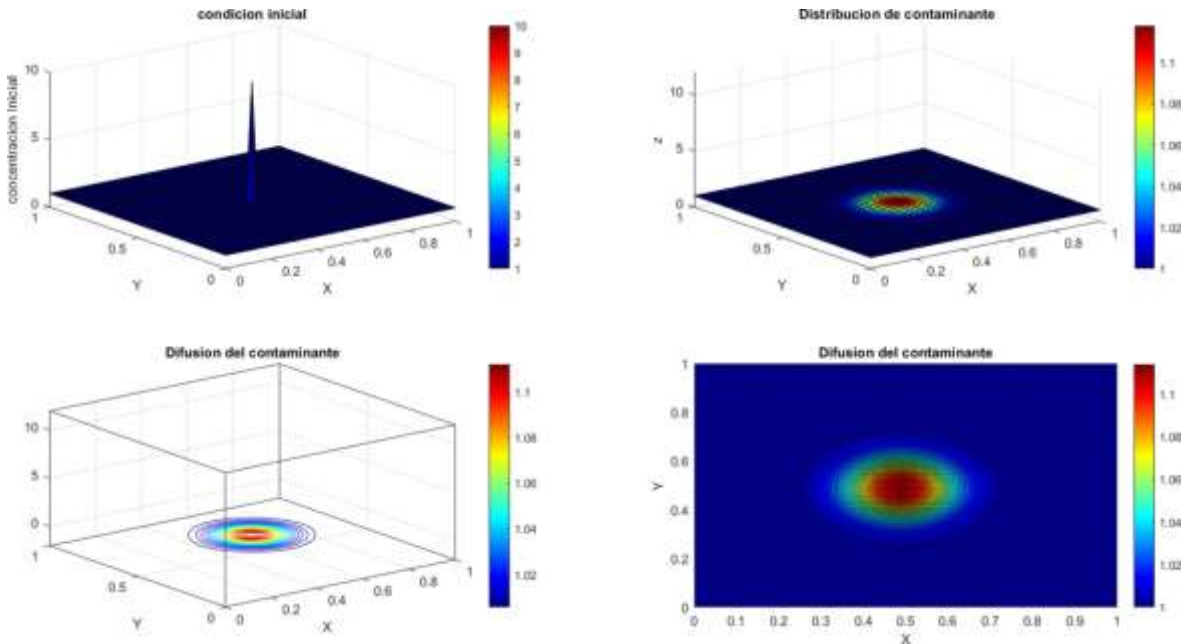


Figura 5. Evolución de la difusión del contaminante colocado en la parte central del dominio para $T=1$.

En la Figura 5 se puede apreciar la evolución del contaminante colocado inicialmente en la parte central del dominio para $T = 1$. Observamos que el valor de la concentración local en la zona central del contaminante cae a su novena parte del valor inicial, donde el valor máximo de concentración para este tiempo es 1,12.

Al comparar los valores de concentración final para los tiempos $T = 0,3$ y $T = 1$ podemos darnos cuenta que en un comienzo el proceso difusivo es rápido (cambia la concentración de 10 a 1,35 en un tiempo $T = 0,3$) y luego se ralentiza (cambia la concentración de 1,35 a 1,12 en un tiempo $T = 1 - 0,3 = 0,7$). Nosotros consideramos que este comportamiento se debe a que al inicio al existir alta concentración las partículas que conforman el contaminante tienen mayor interacción y por tanto más transmisión energética, a medida que esta concentración disminuye este intercambio energético tiende a reducirse y por tanto esto se traduce en menor velocidad de la onda de concentración. Es por esto que se ralentiza considerablemente la difusión. Además las ondas difusivas en la frontera se comportan bien dado que no se registran oscilaciones. La condición cíclica de Neumann impuesta trabaja muy bien en la frontera.

La Figura 6 muestra el modelamiento de la condición inicial 2, donde el contaminante se encuentra inicialmente en un costado del dominio. La barra de la derecha muestra el valor de la concentración de 10 unidades en la zona central de la concentración y de 1 unidad en el resto del dominio para el tiempo $T = 0$.

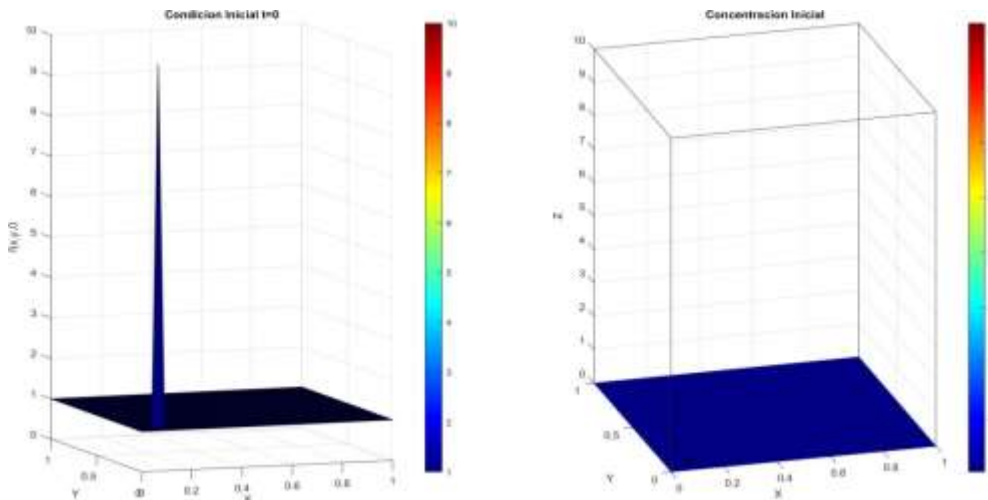


Figura 6. Segunda condición inicial de la difusión de un contaminante ubicado en un costado del dominio

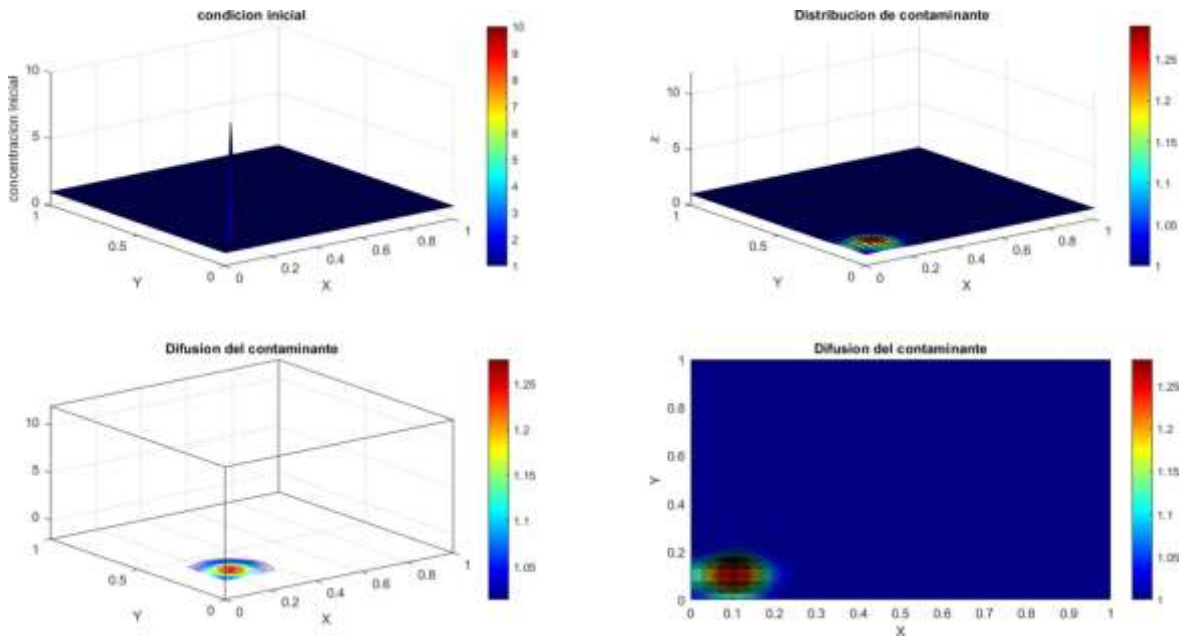


Figura 7. Evolución de la difusión del contaminante ubicado en un costado del dominio para $T=0.4$.

De las simulaciones mostradas en la Figura 7 para la difusión del contaminante inicialmente a un costado del dominio, podemos observar un comportamiento similar al proceso de difusión del contaminante que se encontraba inicialmente al centro del dominio (Figura 4) dado que la barra de colores reporta que la concentración máxima se ha reducido de 10 a aproximadamente 1,25 para el tiempo $T = 0.4$. Por lo tanto, el proceso de difusión es rápido al inicio.

En la Figura 8 observamos la evolución del contaminante colocado inicialmente a un costado del dominio para $T = 2,4$. La barra de colores nos muestra que la zona de mayor concentración se ha reducido considerablemente a un valor de 1,1. Además se observa que en otros puntos del dominio la concentración a variado del valor 1 a 1,08; 1,06; 1,04 y 1,02; esto confirma que el contaminante ha llegado a esos lugares, por lo tanto se está expandiendo.

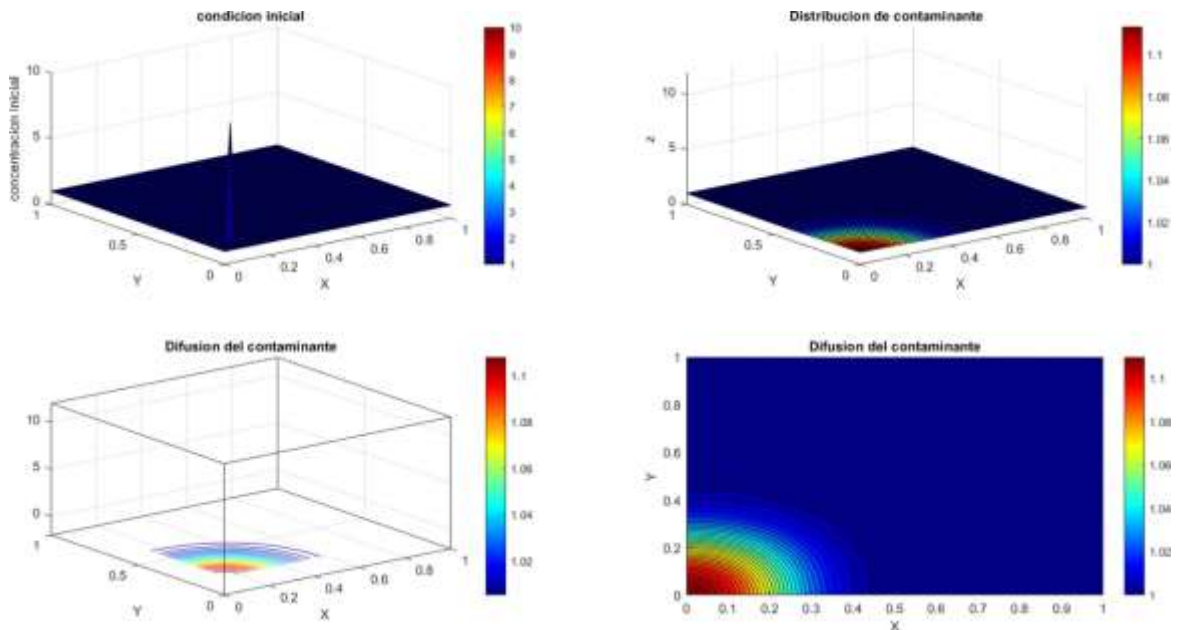


Figura 8. Evolución de la difusión del contaminante colocado en un costado del dominio para $T=2.4$

Dado que la simulación computacional, nos permite considerar diferentes posiciones iniciales para la fuente del contaminante y realizar el seguimiento del proceso de difusión en el tiempo, entonces simulamos otro escenario posible donde tenemos dos fuentes de contaminante colocadas en diferentes posiciones en el mismo dominio, con una concentración de 10 unidades en cada fuente al inicio de la difusión, como lo podemos apreciar en la Figura 9.

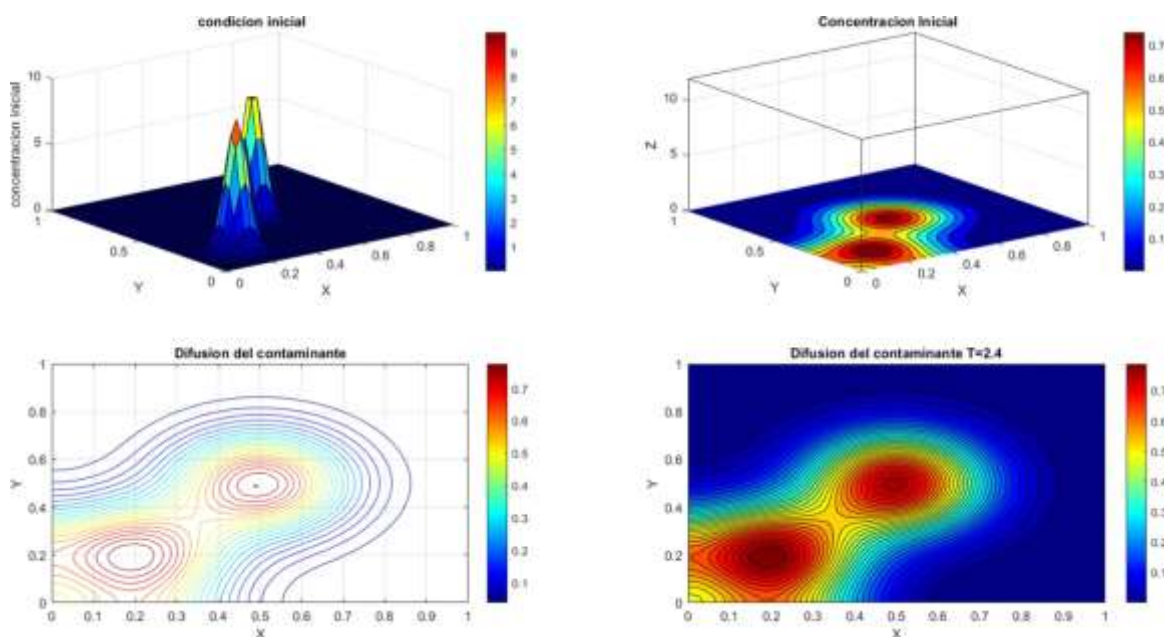


Figura 9. Distribución de la concentración de dos fuentes de contaminación, en $T=2.4$.

Se puede observar que el programa computacional me permite modelar el proceso de difusión de ambos contaminantes en tiempo real. En la zona de frontera la condición de Neumann impuesta trabaja muy bien dado que no se muestran perturbaciones. Los valores de concentración se modifican en diferentes puntos del dominio como era de esperarse debido al proceso de difusión del contaminante.

Por lo tanto, como una posible aplicación a futuro, está la modelación de contaminantes en la costa peruana con el propósito de reducir el daño ecológico de vertido de un contaminante. Para modelar esta situación particular sería necesario trabajar sobre dominios irregulares y añadir el término advectivo en la ecuación de difusión, especialmente con coeficientes constantes. Pero en un modelo físico reducido, es decir sin considerar el movimiento del mar, el programa desarrollado en esta investigación podría ser aplicable dado que permite ubicar la fuente en cualquier lugar del dominio.

4. CONCLUSIONES

El método de diferencias finitas da buenos resultados para la modelación de la difusión en 2D, y las condiciones de frontera de Neumann permiten establecer condiciones reales al problema en la frontera, adicionalmente nos facilitan el análisis de los nodos fantasma que se originan en la discretización de la ecuación.

La simulación computacional del programa desarrollado nos permite considerar diferentes posiciones para las fuentes de contaminación y realizar el seguimiento en el tiempo de la evolución de la concentración de los contaminantes por difusión.

Futuras investigaciones en esta área, se deben orientar a modelar la ecuación de difusión con condiciones de frontera adecuadas sobre dominios irregulares reales, es decir sobre mapas de algún lago o en la costa peruana para determinar el efecto de la difusión de los contaminantes en situaciones reales y poder predecir el rumbo que toma un contaminante en un desastre ecológico para que se puedan planificar acciones a tomar y poder reducir el impacto del daño de un desastre de estas magnitudes.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Andallah, L.; Khatun, M. 2020. Numerical solution of advection-diffusion equation using finite difference schemes. *Bangladesh Journal of Scientific and Industrial Research*, 55(1): 15-22.
- Comin, D.; Nanda, R. 2019. Financial development and technology diffusion. *IMF Economic Review*, 67(2): 395-419.
- Granik, N.; Weiss, L.; Nehme, E.; Levin, M.; Chein, M.; Perlson, E.; ... Shechtman, Y. 2019. Single-particle diffusion characterization by deep learning. *Biophysical journal*, 117(2): 185-192.
- Habingabwa, M.; Ndahayo, F.; Berntsson, F. 2012. Air pollution tracking using pdes. *Rwanda Journal*, 27: 63-69.
- Hutomo, G.; Kusuma, J.; Ribal, A.; Mahie, A.; Aris, N. 2019. Numerical solution of 2-d advection-diffusion equation with variable coefficient using du-fort frankel method. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1180, No. 1, p. 012009). IOP Publishing.
- Lax, P. 1973. *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*. Society for Industrial and Applied Mathematics. 59 pp.
- Mailler, S.; Pennel, R.; Menut, L.; Lachâtre, M. 2020. Using an antidiffusive transport scheme in the vertical direction: a promising novelty for chemistry-transport models. *Geoscientific Model Development Discussions*, 1-21.
- Moin, P. 2010. *Fundamentals of engineering numerical analysis*. Cambridge University Press. 235 pp.
- Oliveira, F.; Ferreira, R.; Lapas, L.; Vainstein, M. 2019. Anomalous diffusion: A basic mechanism for the evolution of inhomogeneous systems. *Frontiers in Physics*, 7: 18.
- Polyanin, A.; Sorokin, V.; Vyazmin, A. 2018. Reaction-diffusion models with delay: some properties, equations, problems, and solutions. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 52(3): 334-348.
- Rubin, H. and Atkinson J. 2001. *Environmental fluid mechanics*. CRC Press. 721 pp.
- Won, Y.; Ramkrishna, D. 2019. Revised formulation of Fick's, Fourier's, and Newton's laws for spatially varying linear transport coefficients. *ACS omega*, 4(6): 11215-11222.
- Xue, T.; Su, H.; Han, C.; Jiang, C.; Aanjaneya, M. 2020. A novel discretization and numerical solver for non-fourier diffusion. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 39(6): 1-14.
- Zhang, J.; Centola, D. 2019. Social networks and health: New developments in diffusion, online and offline. *Annual Review of Sociology*, 45(1): 91-109.