

Influencia del término difusivo en la modelación de propagación de ondas de bidimensionales (2D) de la ley de conservación de la masa con velocidad de flujo convectivo constante

Influence of the diffusive term on the modeling of two-dimensional (2D) wave propagation of the law of conservation of mass with constant convective flow velocity

Roberth Cachay Torres ; José Roldan López 

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.2023.01.01](https://doi.org/10.17268/rev.cyt.2023.01.01)

RESUMEN

En este trabajo se empleó la ecuación de Convección - Difusión en 2D, para modelar el proceso de transporte de contaminante por convección y difusión. En particular asumimos que estamos modelando este proceso de transporte de contaminante en aguas poco profundas y con un movimiento del flujo unidireccional en la parte convectiva. El coeficiente de difusión es considerado constante y dependiente solamente de la naturaleza de la sustancia, se ha considerado un valor de 0,004. Esquemas numéricos en diferencias finitas se aplican a un dominio en el plano XY, de lado 1. El modelo numérico desarrollado se podría utilizar para predecir la distribución material contaminante. El valor del coeficiente de difusión, influye de manera contundente en el tamaño de paso en el tiempo (dt) y en los valores de la velocidad que demos al flujo convectivo. Se apreció un desplazamiento más rápido del contaminante en la dirección de la resultante del flujo convectivo, así como también una disminución de la velocidad en el proceso de difusión cuando los niveles de concentración local a disminuido y por tanto desplazándose únicamente por convección.

Palabras clave: Convección; Difusión; Diferencias Finitas; Condiciones de frontera de Newman.

ABSTRACT

In this work, the 2D Convection - Diffusion equation was used to model the process of contaminant transport by convection and diffusion. In particular, we assume that we are modeling this pollutant transport process in shallow water and with a unidirectional flow movement in the convective part. The diffusion coefficient is considered constant and depends only on the nature of the substance, a value of 0.004 has been considered. Finite difference numerical schemes are applied to a domain in the XY plane, with side 1. The developed numerical model could be used to predict the distribution of polluting material. The value of the diffusion coefficient strongly influences the step size in time (dt) and the speed values that we give to the convective flow. A faster movement of the contaminant in the direction of the resultant of the convective flow was appreciated, as well as a decrease in the speed of the diffusion process when the local concentration levels decreased and therefore moving only by convection.

Keywords: Convection; Diffusion; Finite Differences; Newman Boundary Condition.

1. INTRODUCCIÓN

La ecuación de convección-difusión es una ecuación diferencial en derivadas parciales del tipo parabólica, esta se deriva del principio de conservación de la masa, aplicando la primera ley de Fick y describe el fenómeno físico donde las partículas que conforman la masa o la energía (u otras cantidades físicas) se transforman dentro de un sistema físico debido a dos procesos: la difusión y la convección (Hutomo et al., 2019).

La ecuación advección difusión, describe estos dos procesos para varias sustancias. La solución de esta ecuación estima alguno de los fenómenos como el transporte de contaminantes en aguas subterráneas, dispersión de



contaminantes en los ríos, dispersión de contaminantes en lagos en embalses poco profundos. También considera fenómenos físicos donde en el proceso de difusión las partículas se mueven con cierta velocidad desde una región de alta concentración a una región de baja concentración.

La solución de la ecuación diferencial parcial y sus condiciones de frontera asociadas y condición inicial, juega un rol importante en la modelación de fenómenos, en campos tan diversos como física, química, geología, biología, ingeniería y economía. Uno de los fenómenos físicos es el transporte de contaminantes. El transporte de contaminantes ocurre en una gran variedad de escenarios como agricultura y procesos industriales.

Predicciones exactas del transporte de estos contaminantes es crucial para la gestión eficaz de estos procesos de contaminación, el transporte de estos contaminantes puede ser adecuadamente descrito, por la ecuación convección-difusión. Solamente pocas ecuaciones en derivadas parciales tienen solución analítica o exacta. Todos quienes quieren desarrollar y usar modelos basados en tales ecuaciones y sus condiciones asociadas, deben ser capaces de obtener soluciones numéricas eficientes y exactas. Por qué soluciones analíticas no son generalmente capaces de ser encontradas y por tanto es necesario recurrir a métodos numéricos para encontrar una solución aproximada de estas ecuaciones diferenciales parciales y así investigar las predicciones del modelo matemático.

El método de diferencias finitas es el más común método usado para resolver ecuaciones en derivadas parciales, este método permanece aun siendo el más apropiado, para resolver problemas dependientes del tiempo (G D Hutomo, J Kusuma, A Ribal and A G Mahie 2018).

POSIBLES APLICACIONES A FUTURO, Como una posible aplicación está la modelación de contaminantes en la costa peruana con el propósito reducir el daño ecológico de vertido de un contaminante. Para modelar esta situación particular sería necesario trabajar sobre dominios irregulares. El programa desarrollado permite, ubicar la fuente en cualquier lugar del dominio, y apreciar el proceso convectivo-difusivo, esto nos daría resultados interesantes, que no deberíamos descartar, como aplicación real en ingeniería.

Por ejemplo, en la costa peruana, donde debido al desembarco de petróleo u otras sustancias que contaminarían el mar, si hubiese un vertido de estas sustancias, estamos expuestos a posibles desastres ecológicos que contaminarían el mar. Por tanto, el seguimiento, transporte y distribución de contaminantes en aguas poco profundas llega a ser un importante tema a ser estudiado y de esta manera un modelamiento computacional de estos contaminantes podría evitar que los daños sean mayores, esta sería una aplicación real que el modelo que estamos trabajando, nos proporcionaría. Y así podríamos citar varios ejemplos relacionados a la contaminación ambiental, donde el proceso de convección-difusión se da continuamente.

Los procesos de convección-difusión, juegan un rol importante en aplicaciones en física, ingeniería, química y biología y están presentes en muchos fenómenos y por lo tanto en diferentes campos de investigación, por lo tanto, solucionar numéricamente este problema es de gran importancia en diferentes campos de la ciencia (Won, Y. and Ramkrishna, D. 2019).

Para esto se ha planteado el siguiente problema de investigación

¿Cuál es la influencia del término difusivo sobre el modelamiento de ondas de densidad bidimensional y que condiciones son necesarias en la frontera para su modelación cuando restringimos el dominio del modelamiento?

La afirmación para dar respuesta a esta interrogante es la siguiente:

Haciendo uso de la ecuación de convección-difusión bidimensional y mediante simulación numérica es posible hacer el seguimiento de la distribución del contaminante en aguas poco profundas en tiempo real. El valor del coeficiente de difusión, influye de manera contundente en el tamaño de paso en el tiempo (dt) y en los valores de la velocidad que demos al flujo convectivo. Es necesario implementar condiciones de frontera de Newman e igualarlas a cero, de esta manera introducimos condiciones cíclicas, para nodos que se encuentran fuera del dominio de interés.

De los libros de Rubin y Atkinson (2001) y Hundsdorfer (2003) explica el modelo estándar de la ecuación advección-difusión-reacción, el modelo trata con la evolución temporal de especies químicas o biológicas en un medio que fluye, tal como agua o aire. Las ecuaciones matemáticas que describen esta evolución son ecuaciones diferenciales parciales que pueden ser derivadas del balance de las masas.

La ecuación que modela el proceso convectivo - difusivo es la siguiente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial u}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial u}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

Donde la variable $u(x, y, t)$ es referido a la concentración local o densidad local, según sea la aplicación; \dot{x}, \dot{y} son las velocidades de flujo convectivo; α es el coeficiente de difusión.

Para poder construir el programa computacional, usaremos las aproximaciones de segundo orden para las derivadas espaciales y aproximaciones de primer orden para las derivadas temporales. También el tamaño de paso en el eje X y en el eje Y, será el mismo $\Delta x = \Delta y = h$.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

a) Material de estudio:

Modelación Bidimensional de la ecuación convección-difusión con condiciones de Neumann en la frontera.

Esta ecuación modela diferentes procesos de convección-difusión, como el transporte por convección-difusión de una sustancia, por citar algunos ejemplos. Usamos el modelo para explicar el proceso convectivo-difusivo de un contaminante en 2 dimensiones.

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 $\Delta t = dt$ 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 20 unidades a una posición inicial del dominio como condición inicial.

b) Métodos y técnicas

Haciendo uso de métodos numéricos se procedió a discretizar la ecuación convección-difusión en (2D) en dos dimensiones. tanto en la variable temporal 't' como la espacial (x, y) y se aplicaron métodos de diferencias finitas, para la modelación del comportamiento de sus soluciones.

Para discretizar la ecuación diferencial parcial convección-difusión (ecuación 1), 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 $\Delta x = \Delta y = h$.

Aplicamos métodos numéricos, para el siguiente dominio cuadrado $0 \leq x \leq 1$ y $0 \leq y \leq 1$ para el caso bidimensional (2D), el cual es un dominio restringido, para propósitos computacionales.

La modelación numérica permitió hacer el seguimiento del contaminante, dando valores de esta en tiempo real y mostrando el proceso de convección-difusión al que se ve sometido dicho contaminante, para todo tiempo t, en un dominio XY y flujo convectivo unidireccional.

Para modelar la ecuación que modela el proceso convectivo-difusivo, usaremos una condición inicial para el tiempo $t=0$, conjuntamente con condiciones en la frontera del dominio de interés; en la frontera usaremos condiciones de Neumann.

Entonces al aproximar las derivadas por diferencias finitas de la ecuación (1), esta toma la forma discretizada siguiente:

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

Donde $\dot{x} = v_x$ y $\dot{y} = v_y$, corresponden a los valores de la velocidad del flujo convectivo, las cuales son constantes. Ordenado esta ecuación, quedaría como:

$$U_{i,j}^{n+1} = (\beta - A_x)U_{i-1,j}^n + (1 - 4\beta)U_{i,j}^n + (\beta + A_x)U_{i+1,j}^n + (\beta - A_y)U_{i,j-1}^n + (\beta + A_y)U_{i,j+1}^n \quad (3)$$

En esta ecuación $\beta = \frac{\alpha\Delta t}{h^2}$, $A_x = \frac{v_x\Delta t}{2*h}$, $A_y = \frac{v_y\Delta t}{2*h}$.

La ecuación anterior (3), es la discretización de la ecuación diferencial parcial (1), está nos permitirá encontrar el sistema de ecuación a solucionar, haciendo uso de la programación científica:

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

Esta ecuación se aplicará a cada nodo del dominio, obsérvese que es una fórmula de 5 puntos su stencil computacional se presenta en la figura (1), la evolución en el tiempo de cada nodo está indicado por superíndices n y n+1, para cada coordenadas espaciales i, j.

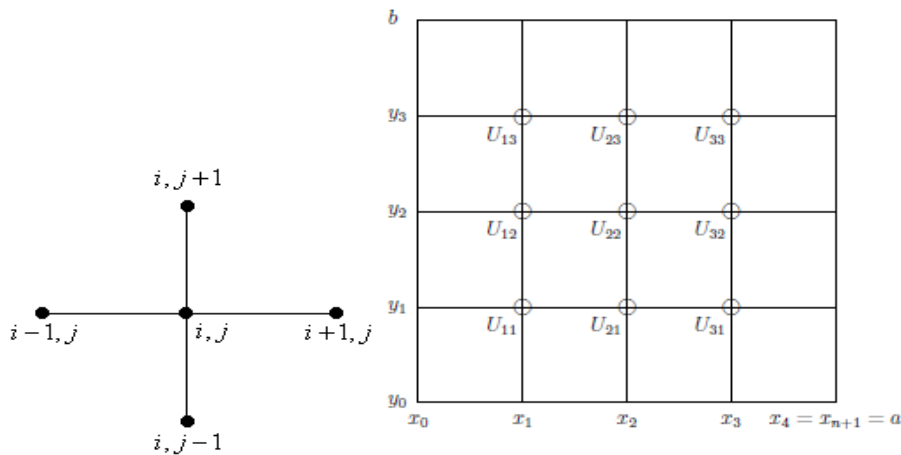


Figura 1. Estencil computacional. Y representación mallada del dominio, para solucionar el problema planteado.

Al aplicar la ecuación (4) a cada nodo del dominio en la frontera, se generarán nodos fantasmas fuera del dominio donde estamos trabajando y son las condiciones de Newman impuesta en esta frontera, que nos permitirán deshacernos de estos nodos ficticios.

Condición de Neumann en la frontera será:

$$\partial_n U = 0 ; \forall x, y \in a \text{ la frontera} \quad (5)$$

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

- En la frontera Sur, aquí $j=1$, $i=1: N$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{U_{i,j-1}^n - U_{i,j+1}^n}{2*h} = 0 \quad (6)$$

Así tenemos, para $j=1$, $U_{i,2}^n = U_{i,0}^n$, ES AQUÍ DONDE APARECEN LOS PUNTOS FANTASMA, pero considerando un flujo de Neumann igual a cero, estamos considerando una condición cíclica cuando el contaminante llegue a la frontera, esto permitirá tener soluciones más suaves en dicha frontera.

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

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

Considerando $j=N$, esta fórmula queda como:

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

Entonces obtengo la relación $U_{i,N+1}^n = U_{i,N-1}^n, \forall i = 1: N$

- En la frontera Sur, aquí $j=1, i=1: N$

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

Así tenemos, para $j=1, U_{i,2}^n = U_{i,0}^n$, ES AQUÍ DONDE APARECEN LOS PUNTOS FANTASMA, pero considerando un flujo de Neumann igual a cero, estamos considerando una condición cíclica cuando el contaminante llegue a la frontera, esto permitirá tener soluciones más suaves en dicha frontera.

- Para nodos que se encuentran en la frontera Oeste

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

En esa frontera se cumple $i=1; j=1: N$, obtenemos la siguiente relación cíclica $U_{2,j}^n = U_{0,j}^n$.

- Para nodos que se encuentra que se encuentran en la frontera Este

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

Aquí $i=N, j=1$: Obtenemos $U_{N+1,j}^n = U_{N-1,j}^n$

Obsérvese que al aplicar condiciones de Neumann en la frontera e igualarlas a cero, obtenemos condiciones cíclicas, como lo indican las ecuaciones aplicadas a las fronteras sur, norte, este y oeste. Con estas aproximaciones, solucionamos el problema de los nodos ficticios o nodos fantasmas.

Aplicando la formula (4) a cada nodo del dominio, con las respectivas coordenadas i,j , obtenemos un sistema, matricial. Por ejemplo, para $N=5$ nodos en cada dirección X e Y, obtenemos 25 ecuaciones para 25 incógnitas y luego con el código computacional ya echo, podremos generalizar el código, para cualquier valor de N.

Así obtenemos el sistema matricial

$$U^{n+1} = AU^n \quad (12)$$

donde A es una matriz $N^2 \times N^2$ y los vectores U , son matrices N^2

Usamos como dominio experimental un cuadrado de lado 1 unidad con condiciones de Newmann en la frontera y concentración inicial de contaminante como condiciones iniciales en alguna posición del dominio.

El sistema matricial que resulta para $N=5$, es de la forma general $U^{n+1} = AU^n$, donde U es un vector columna ($N^2 \times 1$) y A es una matriz $N^2 \times N^2$, donde la matriz A consta de matrices $D, D1, I$ y O , estas matrices colocadas en un orden adecuado forma la matriz A , estas tienen la forma:

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

$$D1 = \begin{bmatrix} 2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\beta \end{bmatrix}$$

$$I = \begin{bmatrix} (\beta - A_y) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\beta - A_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\beta - A_y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\beta - A_y) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (\beta - A_y) \end{bmatrix}$$

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

No olvidemos que $\beta = \frac{\alpha \Delta t}{h^2}$. Haciendo uso de estas matrices, obtenemos la matriz principal A:

$$A = \begin{bmatrix} D & D1 & O & O & O \\ I & D & S & O & O \\ O & I & D & S & O \\ O & O & I & D & S \\ O & O & O & D1 & D \end{bmatrix}$$

Para dar valores a la velocidad del flujo convectivo v_x y v_y , primeramente, recurriremos a establecer las condiciones de estabilidad del método, este método es estable si:

$$\beta = \frac{\alpha \Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{4} ; \frac{v_x * h}{2\alpha} < 1 \text{ y } \frac{v_y * h}{2\alpha} < 1 \quad (13)$$

Teniendo en cuenta estas condiciones de estabilidad, observamos que el valor del coeficiente de difusión que usemos vá a influir fuertemente en el tamaño de paso Δt y a la vez en los valores de la velocidad del flujo convectivo v_x y v_y , el cual asu vez depende del tamaño de paso h en la discretización del dominio.

En las siguientes modelaciones mostradas usamos los siguientes valores para dichos parámetros, $\alpha = 0,004$; $\beta = 0,2$; de esto obtenemos $\Delta t = 0,0247$ para el tamaño de paso en la variable temporal.

Y para la estabilidad en las otras condiciones, hemos obtenido para la velocidad convectiva $0 \leq (v_x = v_y) < \frac{2\alpha}{h}$; en el caso de las modelaciones a presentar, hemos hecho que:

$$v_x = v_y = \frac{2\alpha}{h} - .1, \text{ con el fin de garantizar la estabilidad y obtener una igualdad.}$$

Usamos como hemos dicho arriba como dominio experimental un cuadrado de lado 1 unidad y condiciones iniciales, que usaremos para observar el comportamiento convectivo-difusivo y también el comportamiento de la onda en la frontera, para N=46 nodos en cada dirección X e Y, por tanto tenemos NxN nodos en el dominio computacional a experimentar, así obtenemos un tamaño de paso $h = 0,022$ y como condición inicial, se ha

usado un valor de 20 unidades de concentración inicial en una ubicación de ese dominio, específicamente en la ubicación $(i, j)=(20,20)$, esta se modelará como prueba para observar el comportamiento del contaminante en el proceso convectivo difusivo, en las otras posiciones del dominio se ha considerado un valor de 1 como concentración inicial, esto lo hacemos con fines de observar el modelado y también su comportamiento en la frontera como se muestra en las siguientes figuras que mostraremos a continuación.

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

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Usamos como hemos indicado arriba, como dominio experimental un cuadrado de lado 1 unidad y condiciones iniciales, que usaremos para observar el comportamiento convectivo-difusivo y también el comportamiento de la onda en la frontera, usamos $N=46$ nodos en cada dirección X e Y, por tanto tenemos $N \times N$ nodos en el dominio computacional a experimentar, así obtenemos un tamaño de paso $h = 0,022$ y como condición inicial, se ha usado un valor de 20 unidades de concentración inicial en una ubicación de ese dominio, específicamente en la ubicación $(i, j)=(20,20)$, está se modelará como prueba para observar el comportamiento del contaminante en el proceso convectivo difusivo, en las otras posiciones del dominio se ha considerado un valor de 1 como concentración inicial, esto lo hacemos con fines de observar el modelado y también su comportamiento en la frontera como se muestra en las siguientes figuras que mostraremos a continuación.

En la siguiente figura (2) apreciamos, el proceso de convección difusión para un contaminante. El proceso de convección se da en la dirección X, hacia donde hemos considerado una velocidad constante, se aprecia un desplazamiento mayor en la dirección X, debido a la parte convectiva considerada en esa dirección, la figura 2 muestra la concentración inicial de contaminante de 20 unidades en $T=0$, y la evolución de este para $T=0,4$. Se observa en la figura de la derecha que el valor de concentración máximo es de 1.6 unidades aproximadamente en ese instante, habiendo caído el nivel de concentración inicial considerablemente, también se registran valores distintos de 1 en otras ubicaciones del dominio como se muestra en la barra de niveles de concentración que se muestra en cada gráfico, confirmándose la expansión de dicha concentración inicial.

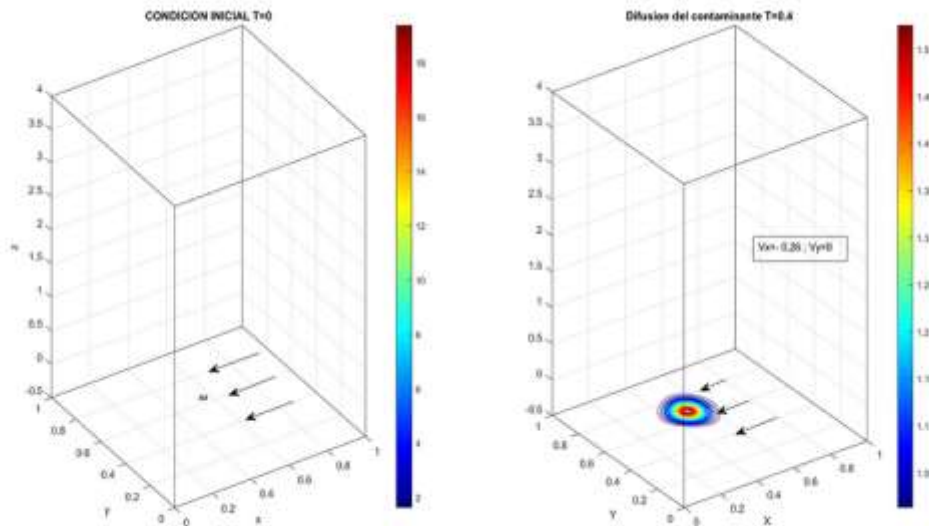


Figura 2. Condición inicial en $T=0$ y Proceso de convección difusión de un contaminante en $T=0,4$, se ha considerado $v_x = -0,26$, se aprecia un mayor desplazamiento de contaminación en la dirección x .

Esta figura 3 nos muestra, el mismo proceso convectivo difusivo, en otro instante de tiempo, $T=0,8$, se aprecia como el contaminante se difusa más en la dirección X , debido a la velocidad convectiva del medio, como se ha considera $v_x = -0,26$, la barra de la derecha registra los valores de la concentración local en ese instante de tiempo.

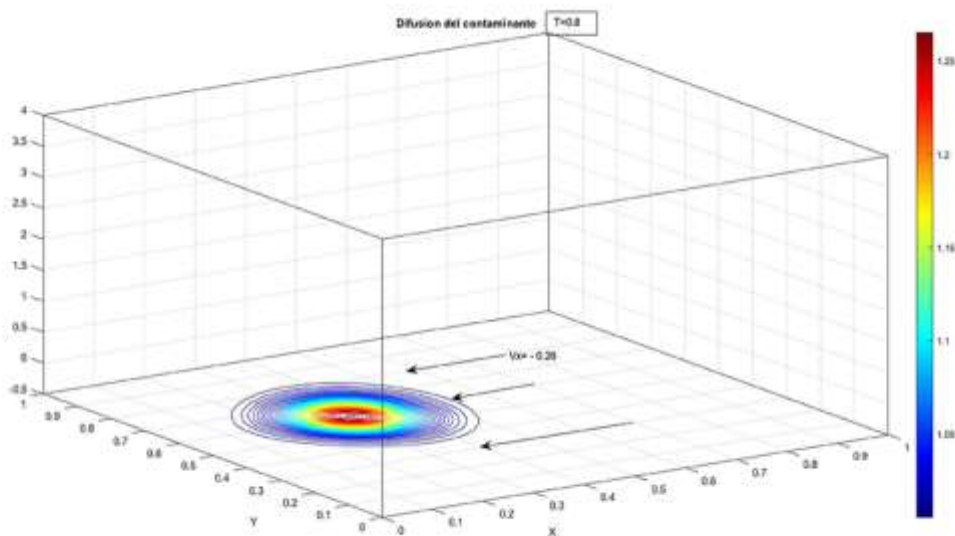


Figura 3. Proceso de convección – difusión de un contaminante en $T=0,8$, $dt= 0,0247$, $v_x = -0,26$.

La siguiente figura 4 muestra, el proceso, convectivo difusivo del contaminante en $T=1$, como vemos hay un considerable desplazamiento del contaminante en la dirección del eje X , el valor de la concentración local, se ha reducido considerablemente de 20 unidades a menos de 1,3 unidades, como lo indica la barra que mide los niveles de concentración local.

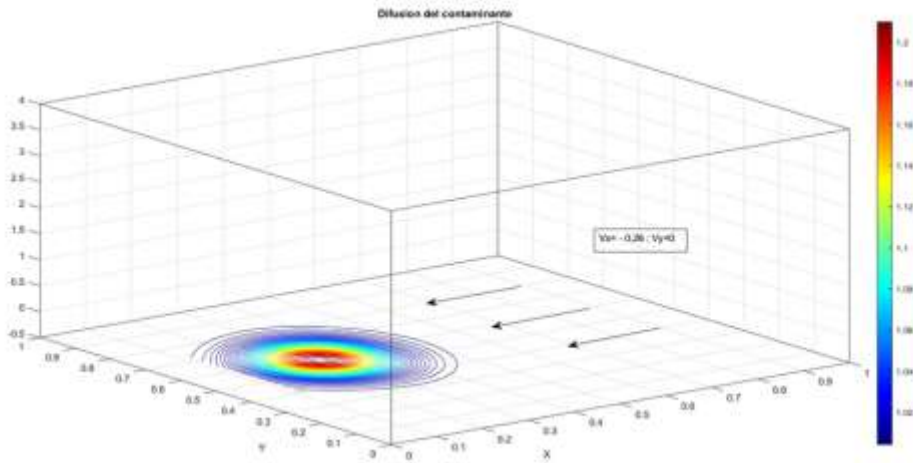


Figura 4. Proceso de convección–difusión de un contaminante en $T=1$, $dt= 0,0247$

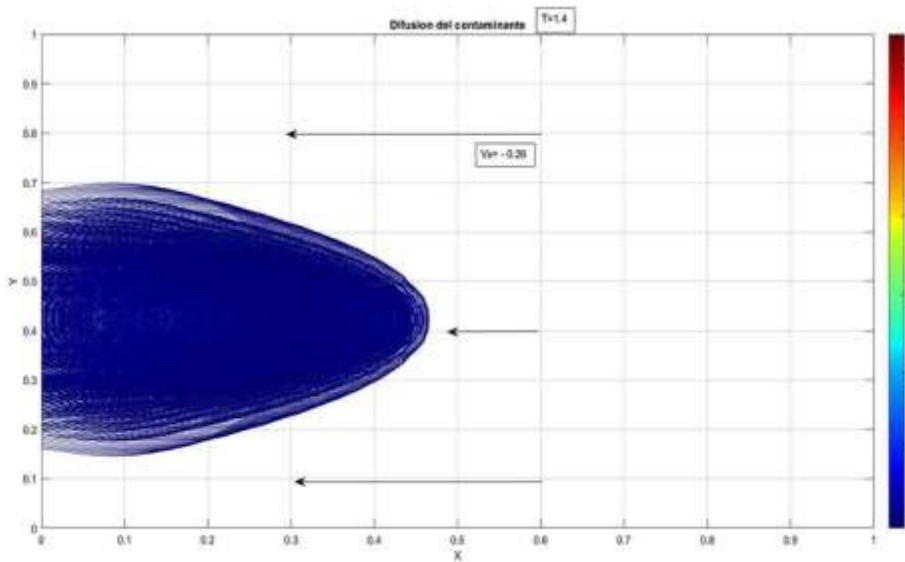


Figura 5. Proceso de convección–difusión de un contaminante en $T=1,4$, $dt= 0,0247$

En la figura 5 apreciamos el proceso de contaminación en $T=1,4$, en este instante nuestro contaminante a llegado a los límites del dominio, y las condiciones de Newman impuestas en la frontera, dan buenos resultados, no se aprecia una acumulación de contaminante en dicha frontera y este era nuestra intención, ya que estamos trabajando en un dominio restringido y asumimos que después de este dominio el contaminante seguiría su curso contaminando regiones fuera de nuestro dominio de interés. La parte convectiva en la dirección X, hace que el contaminante se desplace en esa dirección, más que en otras.

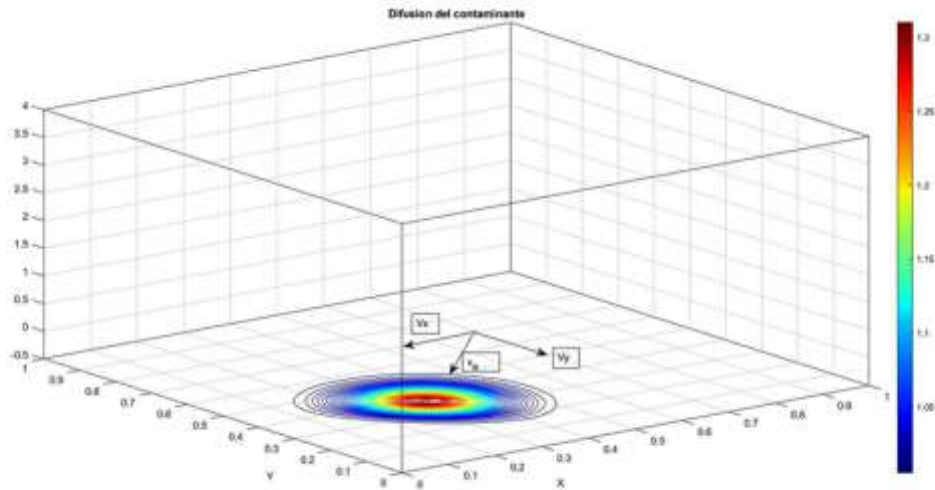


Figura 6. Proceso de convección–difusión de un contaminante en $T=0,8$, $dt= 0,0247$, $v_x = -0,26$; $v_y = -0,26$

La figura 6, muestra el proceso de convección difusión, para una velocidad de flujo convectivo en ambas direcciones v_x y v_y , por tanto, el contaminante sigue la dirección del vector resultante de los valores de la velocidad $v_R = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} = 0,368$.

Por último, la siguiente gráfica 7, muestra el proceso convectivo difusivo de dos fuentes de contaminante, para un flujo convectivo en la dirección X.

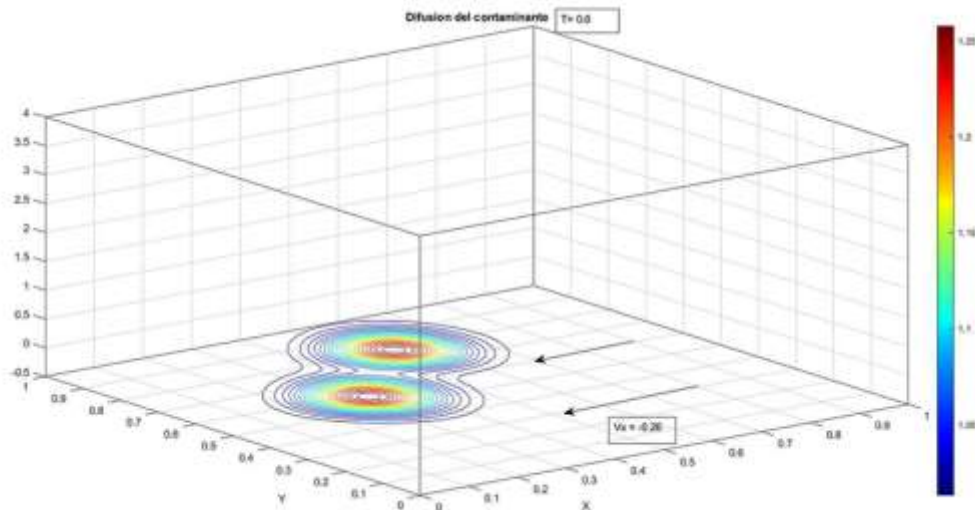


Figura 7. Proceso de convección–difusión de un contaminante en $T=0,8$, $dt= 0,0247$, $v_x = -0,26$; $v_y = 0$

Por lo tanto, como una posible aplicación a futuro, está la modelación de contaminantes en la costa peruana, haciendo uso de la ecuación Convección-Difusión con el propósito de reducir el daño ecológico de vertido de un contaminante.

Una de las deficiencias del método numérico, es que, no podemos hacer el cambio rápidamente en la discretización de la variable espacial (h) y si lo hacemos, debemos hacer los

cálculos de la velocidad del flujo convectivo adecuados ya que estos valores dependen una de la otra y marcan la estabilidad del modelamiento.

Para el proceso convectivo difusivo, hemos visto que los resultados son muy adecuados, como se muestran en las figuras, habiendo un fuerte desplazamiento del contaminante en la dirección de la convección que es el eje X, o si damos valores de velocidad de flujo tanto en la dirección 'x' y 'y', se aprecia un fuerte desplazamiento en la dirección de la resultante de estos vectores velocidad considerados. Por tanto, en la dirección de la convección es donde se desplaza la contaminación con mayor rapidez.

La contaminante en la frontera se comporta bien, no se registran oscilaciones y no habiendo una acumulación de este en dicha frontera. La condición cíclica de Neumann impuesta trabaja muy bien en dicha frontera.

En el programa desarrollado hemos observado también como sería ese proceso, cuando hay un mayor valor de las corrientes en la dirección o reducimos el tamaño de paso 'h' en la discretización, hemos apreciado en esos resultados, un inconveniente en el proceso de la modelación y es que hay que hacer varios pasos para apreciar un modelamiento en un tiempo $T=0,4$, debido a que el tamaño de paso 'dt' se reduce considerablemente.

Al disminuir el valor de la concentración local de contaminante, también se hace más lento su desplazamiento por difusión y por tanto el desplazamiento de las zonas contaminadas es puramente convectivo.

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 convección - difusión.

Con el programa computacional terminado, simulamos otro escenario posible, donde tenemos 2 fuentes de contaminante esto se aprecia en la figura (7), que se encuentran en el mismo dominio, con una concentración inicial de 20 unidades en cada fuente en $t=0$, la ecuación convección difusión, permite simular la convección - difusión de dos o más fuentes de contaminante que se encuentre en ese dominio de interés, lo cual es sorprendente, permitiéndonos hacer el seguimiento de estos contaminantes en dicho dominio en tiempo real.

4. CONCLUSIONES

Como resultado del trabajo realizado en esta investigación se llegó a las siguientes conclusiones:

Un esquema de diferencias finitas explícita con condiciones de frontera de Neumann, para un problema de convección - difusión de un contaminante en aguas poco profundas, produce resultados, que nos permitirían monitorear el seguimiento del contaminante, es decir que ruta tomará o hacia donde se desplazará con mayor rapidez.

Los resultados numéricos en el ámbito bidimensional, fueron que la difusión se realiza rápidamente en los primeros instantes, se observa un veloz decaimiento al que se ve sometido la concentración inicial; pero después de un tiempo en que el nivel de concentración se ha reducido considerablemente, la difusión también se ralentiza, dando paso a un desplazamiento únicamente por convección.

Se pudo observar que en la modelación del proceso convectivo difusivo la concentración máxima de 20 unidades cae a 1,6 en $T=0,4$, en la región de mayor concentración, para un coeficiente de difusión $\alpha=0,004$. En otros intervalos de tiempo mayores la caída en valores de concentración local, se ralentiza considerablemente y también el proceso de difusión. El valor de la concentración también se modifica en otros puntos del dominio debido a que el contaminante se expande por difusión y llega a esas zonas donde inicialmente no había concentración de contaminante, es así como debíamos esperar.

Al disminuir el valor de la concentración, también disminuye el intercambio de energía entre las moléculas esto se traduce en menor velocidad por difusión, es por esto es que las ondas que se desplazan van perdiendo velocidad es decir van mucho más lento.

Las condiciones de Neumann que se imponen en la frontera permitieron, tratar de mejor manera los nodos ficticios que se originan en la discretización de la ecuación, dando un valor a estos según las ecuaciones obtenidas.

Ante los resultados de estas investigaciones se plantean la siguiente recomendación:

Que las futuras investigaciones en esta área, se orienten a modelar la ecuación convección-difusión en dominios irregulares reales, es decir sobre mapas de algún lago o en la costa peruana y determinar el efecto de la distribución de concentración de contaminante en estas situaciones.

Si bien este trabajo de investigación aborda el problema bidimensional (2D), no se descarta que en un futuro se plantee resolver el problema tridimensional (3D) y se intente modelar, además de construir el código computacional, pero este caso en 3D corresponde a un tema que está fuera del alcance de esta investigación, pero en un futuro sería interesante abordar tal problema, que sin duda es interesante en física y aplicaciones en el mundo real.

Cabe indicar que ya se han realizado modelamientos en 3D (Jan Critoph Thiele, Ingo Gregor, Narain Karedia (2020)), pero aún no se ha abordado el problema planteado en este trabajo en 3D.

AGRADECIMIENTOS

Agradecer al grupo de investigación en física teórica de la Universidad nacional de Trujillo dirigido por el Dr. Antonio Rivaplata Mendoza y al director del departamento académico de Física Dr. Mario Chávez Basilio.

También agradecer a mi amigo y colega Ms. Carlos Morgan Cruz y Ms. Guillermo Henry Ramírez Ulloa por su apoyo y motivación continua en mi trabajo de investigación.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Comin, D., and 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., Perelson, E., ... and Shechtman, Y. (2019). Single-particle diffusion characterization by deep learning. *Biophysical journal*, 117(2), 185-192.
- Habingabwa, M., Ndahayo, F., and Berntsson, F. (2012). Air pollution tracking using pdes. *Rwanda Journal*, 27, 63-69.
- Hutomo, G.; Kusuma, J.; Ribal, A.; Mahie, A. and 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.
- Hundsdorfer, W. H., Verwer, J. G., & Hundsdorfer, W. H. (2003). *Numerical solution of time-dependent advection-diffusion-reaction equations* (Vol. 33, pp. x+471). Berlin: Springer.
- Lax, P. (1973). *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Mailler, S., Pennel, R., Menut, L., and Lachâtre, M. (2020). Using an antidiffusive transport scheme in the vertical direction: a promising novelty for chemistry-transport models. *Geoscientific Model Development Discussions*.
- Moin, P. (2010). *Fundamentals of engineering numerical analysis*. Cambridge University Press. 235 pp.
- Oliveira, F., Ferreira, R., Lapas, L., and Vainstein, M. (2019). Anomalous diffusion: A basic mechanism for the evolution of inhomogeneous systems. *Frontiers in Physics*, 7, 18.
- Polyanin, A., Sorokin, V., and 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. and 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., and Aanjaneya, M. (2020). A novel discretization and numerical solver for non-fourier diffusion. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 39(6), 1-14.
- Zhang, J., and Centola, D. (2019). Social networks and health: New developments in diffusion, online and offline. *Annual Review of Sociology*, 45(1), 91-109.