

**ECUACIÓN DE DIFUSIÓN EN  
DISTINTOS SISTEMAS  
COORDENADOS: Discretización  
por diferencias finitas**

**Andrés Jemay Montenegro Yate**

Universidad del Quindío  
Facultad de Educación  
Programa de Licenciatura en Matemáticas  
Armenia, Quindío  
2021

# ECUACIÓN DE DIFUSIÓN EN DISTINTOS SISTEMAS COORDENADOS: Discretización por diferencias finitas

**Andrés Jemay Montenegro Yate**

Presentado como requisito para obtener el título de:

**Licenciado en Matemáticas**

Director:

**Paulo César Carmona Tabares**

Trabajo de grado en la modalidad de (trabajo de investigación, monografía).

Área de profundización: Matemática Aplicada.

Grupo de investigación: Seminario Interdisciplinario Grupo en Matemática  
Aplicada - SIGMA

Universidad del Quindío  
Facultad de Educación  
Programa de Licenciatura en Matemáticas  
Armenia, Quindío  
2021

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>4</b>
2.1. Proceso de Difusión . . . . .	4
2.2. Series de Taylor Univariadas . . . . .	5
2.3. Series de Taylor en Varias Variables . . . . .	6
2.4. Aproximación de la Derivada: Diferencias Finitas . . . . .	7
2.4.1. Derivada de Primer Orden . . . . .	8
2.4.2. Derivadas de Segundo Orden . . . . .	11
2.4.3. Derivadas en Coordenadas Polares . . . . .	12
2.4.4. Método de Crank-Nicolson . . . . .	13
2.5. Ecuación de Difusión . . . . .	13
2.5.1. Caso Unidimensional . . . . .	14
2.5.2. Caso Bidimensional . . . . .	14
2.5.3. Caso Tridimensional . . . . .	15
2.5.4. Difusión-Advección-Reacción Rectangular Unidimensional . . . . .	18
2.5.5. Difusión-Advección-Reacción Rectangular Bidimensional . . . . .	20
2.6. Condiciones de Frontera . . . . .	33
2.6.1. Caso Unidimensional . . . . .	34
2.6.2. Caso Bidimensional . . . . .	43
2.7. Algoritmo de Resolución . . . . .	52
<b>3. Simulaciones Numéricas</b>	<b>53</b>
3.1. Problema con valores en la frontera tipo Neumann Homogénea Unidimensional . . . . .	53
3.2. Problema con valores en la frontera tipo Neumann Homogénea Bidimensional . . . . .	55
<b>4. Conclusiones</b>	<b>58</b>
<b>5. Anexos</b>	<b>59</b>
5.1. Objetivos . . . . .	59
5.1.1. General . . . . .	59
5.1.2. Objetivos Específicos . . . . .	59
5.2. Código de resolución . . . . .	60
<b>Referencias</b>	<b>74</b>

# 1. Introducción

En ciencias aplicadas existen diversos modelos matemáticos los cuales sirven para describir procesos naturales, entre los cuales se destaca el fenómeno de transporte, que involucra la transferencia de partículas de un lugar a otro. Un caso específico del fenómeno de transporte es la difusión, la cual es un proceso natural donde las partículas se mueven aleatoriamente de un lugar donde hay mayor concentración a otro de menor concentración.

Históricamente la Ecuación de Difusión se deduce a partir de dos leyes importantes de la Física, la Ley de Conservación de Masa y la Primera Ley de Fick. La Ley de Conservación de Masa establece: “En un proceso químico o físico la materia no se crea ni se destruye, tan solo se transforma”, ver [15]. Dentro de los aportes de esta ley, se destaca durante el siglo XVII, la explicación del por qué la pérdida de masa durante el proceso de combustión. Por otro lado la Primera Ley de Fick relaciona el flujo difusivo y la concentración de una sustancia mediante el postulado: “El flujo se transporta desde regiones de alta concentración a regiones de baja concentración, con una magnitud que es proporcional al gradiente de concentración”, ver [2]. Finalmente, la Ecuación de Difusión (o Segunda Ley de Fick) expresa la dependencia que existe entre el cambio en la concentración respecto al tiempo y el fenómeno de difusión.

Los fenómenos físicos pueden estudiarse mediante modelos matemáticos que involucran ecuaciones con derivadas ordinarias y parciales. En particular, el fenómeno de difusión puede modelarse mediante una ecuación parcial de tipo parabólico (**ecuación de difusión**), ver [14]. Sin embargo, y de acuerdo a las particularidades del problema a estudiar, se hace imposible la resolución analítica de la misma. Por esta razón para estudiar estos modelos se requiere aproximar numéricamente las soluciones de dichas ecuaciones.

Para resolver las ecuaciones diferenciales parciales existen los métodos analíticos y numéricos; en los analíticos se destacan el método de variables separables (o método de Fourier) y el método de Cauchy. En los métodos numéricos los más utilizados son los métodos de diferencias finitas, elementos finitos y volúmenes finitos, teniendo en cuenta su simplicidad en la implementación computacional.

Es importante resaltar que el proceso difusivo se puede encontrar en diversas áreas del conocimiento: en los procesos físicos se ve evidenciado en la transferencia de calor, (ver [6]), en la categoría de los fenómenos químicos existen dos tipos de modelos: modelos de gradiente<sup>1</sup> y modelos de reacción–difusión<sup>2</sup>, ver [17]. Finalmente, en los

---

<sup>1</sup>Modelos que generan patrones a partir de sustancias químicas que experimentan diferencias de concentración y que durante su evolución temporal tienden a un estado uniforme en el espacio y en el tiempo.

<sup>2</sup>Modelos que generan patrones complejos en el espacio y el tiempo, debido a que se encuentran términos de transporte, síntesis y degradación que dependen de todas las sustancias químicas

procesos biológicos, químicos y físicos permiten la formulación de modelos, cuya solución generan la formación de patrones espacio-temporales. Ver [4] y [11].

En el contexto de la contaminación ambiental, la Ecuación de Difusión se emplea frecuentemente como herramienta para analizar la concentración de agentes contaminantes en cuerpos de agua superficiales (**ecuación de advección-difusión**). Generalmente esta ecuación está ligada a condiciones iniciales y de frontera que eliminan la posibilidad de obtener una solución analítica y por lo cual se requiere aproximar su solución numéricamente. Entre tales métodos se encuentra el método de diferencias finitas; el cual permite aproximar la variable y sus derivadas en la ecuación diferencial a partir de aproximaciones generadas por la expansión en series de Taylor. Ver [9] y [16].

Finalmente, el fenómeno de difusión puede presentarse en distintas dimensiones y geometrías, lo cual implica que la Ecuación de Difusión debe ser adaptada al espacio geométrico correspondiente (**unidimensional, bidimensional o tridimensional**) y al sistema coordenado adecuado (**rectangular, cilíndrico o esférico**). Como consecuencia de todo lo anterior, se pretende implementar una solución numérica mediante el método de diferencias finitas, haciendo uso de las aproximaciones centradas a la ecuación de difusión en distintos sistemas coordenados y validar (cuando sea posible) su algoritmo computacional.

---

presentes en el dominio de análisis.

## 2. Marco Teórico

### 2.1. Proceso de Difusión

Difusión es el proceso por el cual la materia es transportada de un sistema a otro como resultado de un movimiento aleatorio molecular. Ver [2]. En cuerpos de agua este proceso se ve representado usualmente a través de la siguiente situación: En un recipiente cilíndrico lleno de agua, se vierte una gota de tinta con un gotero, al momento que la tinta hace contacto con el agua, ésta se encuentra en su máxima concentración, al transcurrir un tiempo, es notorio que la tinta empieza a perder su densidad ya que comienza a esparcirse en el medio acuático, finalmente se puede observar que la tinta está diluida por todo el medio, generando así el proceso de difusión. Ver Figura 1.



Figura 1: Representación gráfica del fenómeno de difusión. Fuente: *Wikipedia*<sup>3</sup>.

Observando las partículas individuales de la tinta, se encontrarían varios aspectos particulares de su comportamiento, los cuales se deben tener en cuenta para obtener resultados óptimos de su estudio. Primero el movimiento de cada una de las partículas es aleatorio, segundo el transporte de estas partículas son desde una región de mayor concentración a una de menor concentración; tercero es posible calcular la distancia recorrida en un intervalo de tiempo determinado, pero a su vez no es posible predecir la dirección de movimiento debido al movimiento Browniano. Ver [14]. Este proceso se modela matemáticamente mediante la ecuación de difusión y advección.

---

<sup>3</sup><https://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion>.

## 2.2. Series de Taylor Univariadas

Las series de Taylor surgieron, aproximadamente, en 1715 con el nacimiento del Cálculo Diferencial e Integral y como consecuencia de algunos problemas no resueltos hasta entonces, como lo fueron:

- Aproximar numéricamente valores de funciones trascendentes.
- Representación de funciones racionales y trascendentes por medio de polinomios.
- Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Así, el objetivo fundamental de una **Serie de Taylor** es aproximar los valores de una función  $f$  para cualquier punto  $x$  alrededor de un punto de referencia  $c$ , situado a una cierta distancia de  $x$ , a partir de un polinomio basado en una serie de potencias para la cual es posible calcular sus coeficientes. (ver [7] y [8]). Es decir,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(c)}{n!} (x - c)^n \quad |x - c| < R. \quad (1)$$

Note que  $f$  debe ser diferenciable en  $c$  de cualquier orden para que (1) tenga sentido. Además,  $R > 0$  se llama radio de convergencia de la serie y establece el intervalo de definición de la misma.

Un caso particular de una Serie de Taylor es aquella donde la serie se da en potencias de  $x^n$  (es decir, alrededor de  $c = 0$ ) y se conoce como **Serie de Maclaurin**. Explícitamente:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n \quad |x| < R.$$

Formalmente, el teorema que permite aproximar una función mediante un polinomio, se llama **Fórmula de Taylor** y es enunciado a continuación.

**Teorema 2.1.** *Sea  $f$  una función definida en un intervalo cerrado que contiene a  $c$ . Supongamos que la función tiene  $k$  derivadas en este intervalo, y que todas ellas son funciones continuas. Entonces:*

$$f(x) = f(c) + \frac{f^{(1)}(c)}{1!} (x - c) + \frac{f^{(2)}(c)}{2!} (x - c)^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(c)}{k!} (x - c)^k + R_k(x, c),$$

donde

$$R_k(x, c) = \int_c^x \frac{(x - t)^k}{k!} f^{(k+1)}(t) dt,$$

es el residuo.

Para  $x$  cerca de  $a$ , el error  $R_k(x, a)$  es pequeño “de orden  $k$ ”, lo cual significa que

$$\frac{R_k(x, a)}{(x - a)^k} \longrightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad x \longrightarrow a.$$

En otras palabras,  $R_k(x, a)$  es pequeño comparado con la cantidad (de por sí pequeña)  $(x - a)^k$ . La prueba se encuentra en [7].

### 2.3. Series de Taylor en Varias Variables

Para describir la Serie de Taylor en Varias Variables, se sigue un proceso análogo al caso unidimensional, la fórmula de Taylor para funciones de varias variables se enuncia a continuación:

**Teorema 2.2.** *Sea  $f$  una función definida en un conjunto abierto  $U$ , teniendo derivadas parciales continuas hasta de orden  $r$ . Sea  $P$  un punto de  $U$  y  $\mathbf{H}$  un vector. Suponga que el segmento de línea  $P + t\mathbf{H}$  con  $0 \leq t \leq 1$ , está contenido en  $U$ .*

*Entonces existe un número  $\tau$  entre 0 y 1 tal que*

$$f(P + \mathbf{H}) = f(P) + \frac{(\mathbf{H} \cdot \nabla)f(P)}{1!} + \dots + \frac{(\mathbf{H} \cdot \nabla)^{r-1}f(P)}{(r-1)!} + \frac{(\mathbf{H} \cdot \nabla)^r f(P + \tau\mathbf{H})}{r!}$$

*donde  $(\mathbf{H} \cdot \nabla)^r$  representa un producto escalar y  $r$  es el orden de la derivada.*

La prueba se obtiene aplicando la Fórmula de Taylor Univariada a la función  $g(t) = f(P + t\mathbf{H})$ . Ver [8].

Para el caso bidimensional, reescribiendo en términos de la notación de Leibniz  $\frac{\partial}{\partial x}$  y  $\frac{\partial}{\partial y}$ , se tiene para  $P = (a, b)$  y  $\mathbf{H} = \langle h, k \rangle$ ,

$$f(a+h, b+k) = f(a, b) + \left( h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right) f(a, b) + \dots + \frac{1}{(r-1)!} \left( h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^{r-1} f(a, b) \\ + \frac{1}{r!} \left( h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^r f(a + \tau h, b + \tau k).$$

Las potencias del operador diferencial

$$\left( h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^s$$

se encuentran por la expansión binomial habitual. Por ejemplo:



$$\left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 = h^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2hk \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + k^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2},$$

$$\left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y}\right)^3 = h^3 \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^3 + 3h^2k \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \left(\frac{\partial}{\partial y}\right) + 3hk^2 \left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + k^3 \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^3.$$

En particular, para  $f(x, y) = e^{(x+y)}$  alrededor de  $(0, 0)$  su polinomio de Taylor de tercer orden es:

$$P_3(x, y) = f(0, 0) + \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y}\right) f(0, 0) + \frac{1}{2} \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f(0, 0) + \frac{1}{6} \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y}\right)^3 f(0, 0).$$

Calculando las derivadas parciales y evaluándolas alrededor de  $(0, 0)$  tenemos:

$$\begin{aligned} f = e^{(x+y)} &\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x}(0, 0) = e^{(0+0)} = 1 \\ \frac{\partial f}{\partial x} = e^{(x+y)} &\Rightarrow \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(0, 0) = e^{(0+0)} = 1 \\ \frac{\partial f}{\partial y} = e^{(x+y)} &\Rightarrow \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(0, 0) = e^{(0+0)} = 1. \end{aligned}$$

Note que,  $f(x, y) = e^{(x+y)}$  es una función exponencial con exponentes lineales y al momento de calcular las derivadas parciales de órdenes mayores o mixtas, sus resultados coinciden con la función inicial, entonces el polinomio de Taylor de tercer orden alrededor de  $(0, 0)$  queda:

$$P_3(x, y) = 1 + x + y + \frac{1}{2}[x^2 + 2xy + y^2] + \frac{1}{6}[x^3 + 3x^2y + 3xy^2 + y^3].$$

## 2.4. Aproximación de la Derivada: Diferencias Finitas

El Método de Diferencias Finitas se utiliza principalmente para aproximar soluciones de ecuaciones diferenciales parciales. Ver [1]. Es decir, encontrar una función (o alguna aproximación discreta a esta función) que satisfaga la relación de sus derivadas en alguna región del espacio y/o tiempo, con una serie de valores en su frontera. Este es el método más antiguo aplicado para obtener la solución numérica

de ecuaciones diferenciales y se cree que la primera aplicación fue desarrollada por Euler en 1768.

Para usar el método se procede a discretizar el dominio, dividiéndolo en una malla, de tal manera que se forman nodos por la intersección de familias de rectas. En dichas mallas se calcula la aproximación numérica de la ecuación diferencial. Ver [1]. A continuación se busca la aproximación de las derivadas parciales por expresiones algebraicas del número de puntos seleccionados. Como consecuencia se tiene que la ecuación diferencial parcial que describe el problema, es reemplazada por un número finito de ecuaciones algebraicas que puede resolverse con la ayuda del computador. Estas aproximaciones son generadas a partir de la aplicación de la expansión en polinomios de Taylor para funciones de una y varias variables.

En resumen, el procedimiento general al momento de implementar el Método de Diferencias Finitas dada una ecuación diferencial parcial es:

1. Generar una malla del dominio, es decir, un conjunto de puntos en los cuales se buscará la solución aproximada a la ecuación diferencial parcial.
2. Sustituir las derivadas correspondientes con alguna de las fórmulas de diferencias finitas, para obtener un sistema algebraico de ecuaciones.
3. Resolver el sistema de ecuaciones para obtener la solución aproximada en cada punto de la malla.

Dado que se está aproximando la solución analítica de la ecuación, se comete un error en dicha aproximación, por lo cual se debe tener en cuenta el orden de exactitud con el cual se desea trabajar, el cual se logra, por medio de la expansión de los polinomios de Taylor. En virtud a lo anterior, a continuación se establecen las aproximaciones de las derivadas que permiten aplicar el método.

#### **2.4.1. Derivada de Primer Orden**

Existen distintas formas de generar la aproximación de la primera derivada, entre las cuales se encuentran las diferencias progresivas, las diferencias regresivas y las diferencias centradas; siendo esta última la que más nos interesa, ya que genera una mejor precisión en la aproximación con poco esfuerzo computacional. A continuación, una breve descripción de la deducciones para las aproximaciones.

#### **Diferencias Progresivas**

Considerando la expansión en series de Taylor en una variable alrededor de  $x_i$  entonces:

$$f(x) = f(x_i) + \frac{(x - x_i)}{1!} \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{(x - x_i)^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} + \cdots + \frac{(x - x_i)^k}{k!} \left. \frac{d^k f}{dx^k} \right|_{x_i}, \quad (1)$$

para  $\varepsilon$  entre  $x$  y  $x_i$ .

Asumiendo  $k = 2$  y  $x = x_i + \Delta x$  tenemos:

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{\Delta^2 x}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i}. \quad (2)$$

Así, la aproximación de la primera derivada es:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} - \frac{\Delta^2 x}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i},$$

con un error de truncamiento dado por:

$$O(\Delta x) = -\frac{\Delta^2 x}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i}.$$

Es común encontrar la expresión de la siguiente forma:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} - O(\Delta x),$$

y simplificando la notación:

$$f'(x_i) \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}.$$

## Diferencias Regresivas

Considerando la ecuación (1) con  $k = 2$  y  $x = x_i - \Delta x$  tenemos:

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{(x_i)} + \frac{\Delta^2 x}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i}. \quad (3)$$

De esta ecuación obtenemos la siguiente expresión para la aproximación de la primera derivada:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} - \frac{\Delta^2 x}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{\varepsilon_r},$$

donde  $\varepsilon$  está entre  $x_i$  y  $x$ .

En este caso, la aproximación de  $f'(x)$  mediante diferencias regresivas de primer orden y con un error de truncamiento de orden  $O(\Delta x)$  es.

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} - O(\Delta x) \Big|_{\varepsilon},$$

y simplificando la notación:

$$f'(x_i) \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x}.$$

### Diferencias Centradas

Considerando las ecuaciones (2) y (3) tenemos:

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{\Delta^2 x}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} + \frac{\Delta^3 x}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\varepsilon} \quad (4)$$

y

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{\Delta^2 x}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} - \frac{\Delta^3 x}{3!} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\varepsilon}. \quad (5)$$

Restando la ecuación (4) de la ecuación (5), tenemos:

$$f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x) = 2\Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} + \frac{\Delta^3 x}{3!} \left[ \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\varepsilon} - \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\varepsilon} \right].$$

Esta expresión lleva a la siguiente aproximación de la primera derivada mediante diferencias centradas:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta^2 x),$$

Es común encontrar la derivada en la forma:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x}.$$

Simplificando la notación:

$$f'(x_i) \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x}.$$

### 2.4.2. Derivadas de Segundo Orden

Al hacer un proceso semejante a lo realizado con las diferencias centradas, tenemos:

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta^2 x}{2!} f''(x_i) + \frac{\Delta^3 x}{3!} f'''(x_i) + \frac{\Delta^4 x}{4!} f^{(4)}(\varepsilon)$$

y

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta^2 x}{2!} f''(x_i) - \frac{\Delta^3 x}{3!} f'''(x_i) + \frac{\Delta^4 x}{4!} f^{(4)}(\varepsilon).$$

Sumando las ecuaciones anteriores y despejando la derivada de segundo orden, se anulan las derivadas de primer orden y por tanto:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i - \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x)}{\Delta^2 x} - \frac{\Delta^2 x}{12} f^{(4)}(\varepsilon).$$

Así, la aproximación de la segunda derivada utilizando diferencias centradas con un error de truncamiento  $O(\Delta^2 x)$  es:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i - \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x)}{\Delta^2 x}.$$

Al simplificar la notación, es común encontrar la expresión como:

$$f''(x_i) \approx \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{\Delta^2 x}.$$

### 2.4.3. Derivadas en Coordenadas Polares

Como podemos evidenciar en la ecuación polar (6), representa la ecuación de difusión en coordenadas polares, la cual se deduce expresando las derivadas espaciales en dichas coordenadas, por esta razón, la expresión está conformada por las derivadas de primer y segundo orden con variables independientes, donde éstas pueden ser aproximadas individualmente mediante las diferencias progresivas, regresivas y centradas, generando una aproximación débil.

$$\nabla_{r,\theta}^2 U = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \right). \quad (6)$$

Para establecer las aproximaciones se asume la notación  $r_i = i\Delta r$  representando los valores espaciales, los cuales tienen la forma  $(r_i, \theta_j) = (i\Delta r, j\Delta \theta)$  y en la variable temporal. Finalmente, determinada la aproximación de la derivada anterior se consideran las diferencias progresivas, regresivas de primer y segundo orden respectivamente.

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} &= \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \right)_{i,j}^n \\ &\approx \frac{1}{r_{i,j}} \left[ \frac{(r \frac{\partial U}{\partial r})_{i+1,j}^n - (r \frac{\partial U}{\partial r})_{i-1,j}^n}{\Delta r} \right] \\ &\approx \frac{1}{r_{i,j}} \left[ \frac{r_{i+1,j} \left( \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n}{\Delta r} \right) - r_{i-1,j} \left( \frac{U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n}{\Delta r} \right)}{\Delta r} \right] \\ &\approx \frac{1}{r_{i,j} \Delta^2 r} \left[ r_{i+1,j} (U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n) - r_{i-1,j} (U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n) \right]. \end{aligned}$$

Ahora, para determinar la aproximación de  $\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2}$ , se utiliza una aproximación de segundo orden de la forma;

$$\left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} \right)_{i,j}^n \approx \frac{1}{r_{i,j}^2} \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{\Delta^2 \theta}.$$

#### 2.4.4. Método de Crank-Nicolson

Hasta ahora se ha visto cómo discretizar la parte espacial de las ecuaciones diferenciales parciales, lo cual permite aproximar la solución estática de los problemas con valores iniciales y de frontera. Sin embargo en las ecuaciones del tipo parabólico que dependan del tiempo, se necesita introducir una discretización en la derivada con respecto al tiempo. Al igual que con las discretizaciones espaciales, podemos utilizar algún esquema de diferencias finitas en la discretización temporal.

Para la solución de ecuaciones diferenciales como la Ecuación de Difusión, se empleará el método de Crank-Nicolson ya que éste es incondicionalmente estable y es el más usado por su convergencia de segundo orden. En su implementación, se toma una diferencia progresiva para el tiempo y se promedian (en el tiempo) las diferencias centradas de las derivadas espaciales. Ver [3]. Una vez que se sustituyen las derivadas por sus diferencias finitas, se obtiene el sistema algebraico correspondiente.

### 2.5. Ecuación de Difusión

La ecuación de difusión escrita matemáticamente involucra una ecuación diferencial parcial que describe, entre otros, oscilaciones de densidad en un material que se difunde. Una condición necesaria en este fenómeno, es que la distribución de la sustancia en su respectivo medio no debe ser homogénea. Las leyes físicas que describen su comportamiento son simples y fácilmente comprensibles, sin embargo la descripción analítica es compleja.

La ecuación de difusión, se deduce a partir de la Ley de Conservación de Masa (ver [2], [4], [11]) y la ley de Fick (ver [5]), y en el caso particular del problema de **difusión** (sobre el cual se hará énfasis) se establece una masa de soluto en el origen de un medio unidimensional finito en extensión. Estos fenómenos difusivos tienen rasgos comunes que pueden ser descritos mediante ecuaciones diferenciales parciales.

A continuación se presenta la ecuación de difusión en distintas dimensiones y para diferentes sistemas de coordenadas, partiendo de su representación vectorial:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \nabla^2 U,$$

donde  $\nabla = \left\langle \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right\rangle$  es el operador gradiente.

### 2.5.1. Caso Unidimensional

Para la ecuación de difusión unidimensional, sea  $U \equiv U(x, t)$  una función que depende del tiempo  $t > 0$  y el espacio  $x > 0$ . La ecuación:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}, \quad (7)$$

donde  $\alpha$  es una constante característica de cada situación, llamada difusividad o coeficiente de difusión.

### 2.5.2. Caso Bidimensional

En la ecuación de difusión bidimensional, se puede representar en los diferentes sistemas coordenados: el sistema de coordenadas cartesianas y el sistema de coordenadas polares.

Donde las **coordenadas cartesianas**, la función de varias variables  $U(x, y, t)$  describe la concentración de algún soluto en el disolvente dependiendo del tiempo  $t > 0$  y de dos variables espaciales  $x$  e  $y$  (el proceso difusivo ahora es en dos direcciones). Nuevamente, la constante  $\alpha$  es el coeficiente de difusión.

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right). \quad (8)$$

En el caso de las **coordenadas polares**, la ecuación de difusión para  $U(r, \theta, t)$  toma la forma:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} \right). \quad (9)$$

La expresión anterior, se utiliza el cambio de coordenadas (10) sobre la ecuación (8).

$$x = r \cos \theta \quad r \geq 0 \quad y = r \sin \theta \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi. \quad (10)$$

donde  $r$  representa el radio.



### 2.5.3. Caso Tridimensional

En el caso tridimensional se realiza un proceso similar al caso bidimensional a diferencia que la difusión se verá reflejada a través de todos los octantes del espacio, es decir, la ecuación de difusión correspondiente quedaría de tres variables espaciales  $(x, y, z)$ , definida por la forma de la superficie. Sea  $U \equiv U(x, y, z, t)$  una función que depende del tiempo  $t > 0$  y de sus tres variables espaciales  $x, y$  y  $z$ . Por lo tanto, la ecuación de difusión tridimensional en coordenadas cartesianas.

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right), \quad (11)$$

donde  $\alpha$  es nuevamente el coeficiente de difusión.

Por otro lado, como los fenómenos de difusión se pueden evidenciar en diferentes geometrías, existen diversos métodos que pueden aproximar su solución, esto conlleva que algunas formas geométricas donde se manifiesta la difusión sean muy difíciles de analizar por coordenadas rectangulares. Así, se hace mucho más simple si su estudio se realiza en el espacio donde se presenta la difusión. Este tipo de problemas se puede contar con coordenadas cilíndricas y esféricas, las cuales están representadas de la siguiente manera.

Las coordenadas cartesianas se expresan en términos de las **coordenadas cilíndricas** como:

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad z = z \quad (12)$$

$$(0 \leq r < \infty, \quad 0 \leq \theta < 2\pi, \quad -\infty < z < \infty).$$

donde  $r$  representa el radio.

Las **coordenadas cilíndricas** se expresan en términos cartesianos como:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \tan \theta = \frac{y}{x}, \quad z = z.$$

Mediante el cambio de variables (12), al calcular las derivadas de segundo orden, la representación de la ecuación de difusión en coordenadas cilíndricas está dada por:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial U}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2}. \quad (13)$$

El caso de las **coordenadas esféricas**, las ecuaciones paramétricas que permiten expresar coordenadas cartesianas en términos de las coordenadas esféricas son:

$$x = \rho \sin \varphi \cos \theta, \quad y = \rho \sin \varphi \sin \theta, \quad z = \rho \cos \varphi,$$

$$(0 \leq \rho < \infty, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi, \quad 0 \leq \theta < 2\pi);$$

donde  $\rho$  representa el radio.

Las coordenadas esféricas se expresan en términos de las coordenadas cartesianas como:

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \cos \varphi = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad \tan \theta = \frac{y}{x}.$$

Así, la representación de la ecuación de difusión en coordenadas esféricas está dada por:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho^2 \frac{\partial U}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial U}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\rho^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 U}{\partial \varphi^2}. \quad (14)$$

Vale la pena resaltar que en problemas con geometría cilíndrica o esférica, en los cuales existen simetrías respecto a los ángulos presentes en los sistemas de coordenadas, la ecuación de difusión se simplifica.

La **simetría axial** (también llamada rotacional, radial o cilíndrica) se da cuando los puntos de una figura coinciden con los puntos de otra, al tomar como referencia una línea que se conoce con el nombre de eje de simetría. En la simetría axial se da el mismo fenómeno que en una imagen reflejada en el espejo. Ver Figura 2.

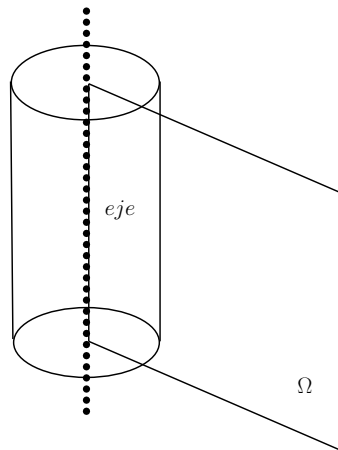


Figura 2: Representación gráfica de simetría axial. *Wikipedia*<sup>4</sup>.

<sup>4</sup>[https://es.wikipedia.org/wiki/Simetr%C3%ADa\\_axial](https://es.wikipedia.org/wiki/Simetr%C3%ADa_axial).

Como consecuencia de la ecuación de la simetría axial,  $\frac{\partial U}{\partial \theta} = 0$  y así la representación de la ecuación de difusión con **simetría axial (coordenadas cilíndricas)**, toma la forma:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \quad (15)$$

donde  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ .

La **simetría esférica** es la simetría respecto a un punto central, de modo que un sistema físico o geométrico tiene simetría esférica cuando todos los puntos a una cierta distancia del punto central son equivalentes. Ver Figura 3.

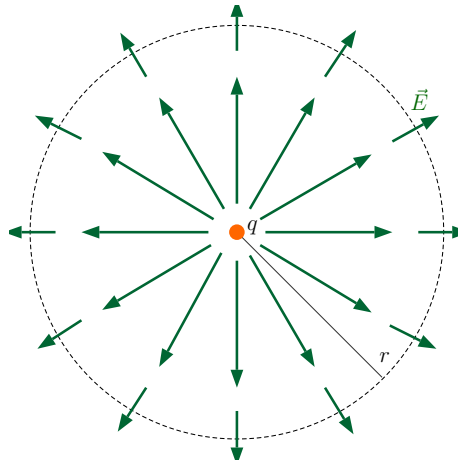


Figura 3: Representación gráfica de simetría central. *Wikipedia*<sup>5</sup>

Para este caso, la simetría esférica implica  $\frac{\partial U}{\partial \theta} = 0$  y  $\frac{\partial U}{\partial \varphi} = 0$ . Así mismo la representación de la ecuación de difusión con **simetría central (coordenadas esféricas)**:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( \rho^2 \frac{\partial U}{\partial \rho} \right), \quad (16)$$

donde  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ .

Anteriormente, se evidenció que la ecuación de difusión se implementa en diferentes sistemas coordenados a partir de una representación vectorial, donde su operador gradiente depende del espacio, en el caso de tres dimensiones se consideran las variables espaciales  $(x, y, z)$ , en algunos problemas físicos por medio de la simetría esférica se pueden simplificar sus variables espaciales, donde el problema que dependía de tres coordenadas espaciales queda a un problema de una sola variable y esta se conoce como variable radial.

<sup>5</sup>[https://es.wikipedia.org/wiki/Simetr%C3%ADa\\_central](https://es.wikipedia.org/wiki/Simetr%C3%ADa_central).

#### 2.5.4. Difusión-Advección-Reacción Rectangular Unidimensional

En la actualidad muchos problemas ambientales y físicos pueden ser modelados mediante ecuaciones que incluyen distintos fenómenos, en el contexto de la contaminación ambiental se emplea frecuentemente la ecuación de **Difusión-Advección-Reacción** como herramienta para cuantificar la concentración de agentes contaminantes en cuerpos de agua superficiales. Para esta situación, se considera adicionalmente al proceso difusivo, los efectos que genera la inclusión de las partículas del flujo como parte de un fluido en movimiento (advección) y la degradación del contaminante (reacción). Ver [2] y [14].

Dado que no se quiere resolver analíticamente la ecuación se procede a utilizar el método de Diferencias Finitas sin importar el sistema coordenado el cual se describe de la siguiente manera:

1. Generar una malla del dominio, es decir, un conjunto de puntos en los cuales se buscará la solución aproximada a la ecuación diferencial parcial.
2. Sustituir las derivadas correspondientes con alguna de las fórmulas de diferencias finitas, para obtener un sistema algebraico de ecuaciones.
3. Resolver el sistema de ecuaciones para obtener la solución aproximada en cada punto de la malla, para cada instante del tiempo.

A continuación se mostrará la manera de como proceder para resolver un problema con valores iniciales y de frontera mediante el método de diferencias finitas en diferentes sistemas coordenados.

En particular, si se quiere modelar la forma como varía la concentración de un contaminante, un **modelo unidimensional** propuesto en estas circunstancias es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + v \frac{\partial U}{\partial x} + \sigma U = f, \\ \text{para } x \in [0, L], t \in (0, T] \\ U(x, 0) = U_0(x). \end{array} \right. \quad (17)$$

donde  $U \equiv U(x, t)$  es la concentración de contaminante;  $\alpha$  es la difusividad,  $v \frac{\partial U}{\partial x}$  es el transporte advectivo,  $\sigma$  es la tasa de degradación del contaminante y  $f$  una fuente contaminante. Además,  $U_0 \equiv U_0(x)$  representa una función inicial que caracteriza la distribución inicial de contaminante.

Adicionalmente, deben incluirse condiciones de frontera adecuadas para garantizar existencia y unicidad de la solución. Ver [10]. En este caso, el intervalo  $[0, L]$  la discretización espacial del dominio de la recta está dada por  $\Omega = [x_0, x_m]$ , con  $x_0 < x_1 < \dots < x_m$ , usando  $\Delta x$  para simbolizar el tamaño de paso al dividir el intervalo  $[x_0, x_m]$  en  $m$  subintervalos de igual longitud, es decir,  $\Delta x = \frac{x_m - x_0}{m}$ .

Teniendo en cuenta la notación  $U_i^n$  la cual representa  $U(x_i, t_n)$ , para que el sistema de índices sea consistente con la matriz que representa el sistema:  $i$  es el índice de las columnas que va desde 0 hasta  $m$ . Adicionalmente, los puntos que genera la partición de la recta se enumeran partiendo desde el punto  $x_0$  hasta el punto  $x_m$ , siguiendo la dirección de la recta como se aprecia en la Figura 4.

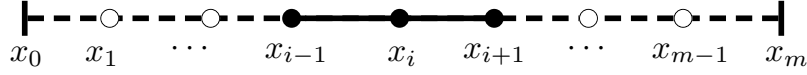


Figura 4: Discretización espacial de la recta  $\Omega = [x_0, x_m]$ . *Elaboración propia*

Para representar la ecuación del problema (30) en diferencias finitas, las aproximaciones de sus derivadas están dadas de la siguiente manera:

<b>Tipo de Aproximación</b>	
$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_i^n = \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t}$	Diferencia Avanzada
$\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_i^n = \frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x}$	Diferencia Centrada
$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_i^n = \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{\Delta^2 x}$	Diferencia Centrada de Segundo Orden

Tabla 1: Aproximaciones de las Derivadas.

Remplazando las respectivas aproximaciones en el modelo unidimensional, se tiene:

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} - \alpha \left( \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{\Delta^2 x} \right) + v \left( \frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) + \sigma(U_i^n) = f_i^n. \quad (18)$$

Ahora, hallando la aproximación por el Método de Crank–Nicolson se considerará una diferencia progresiva para el tiempo y para las derivadas espaciales se promedian las diferencias centradas. Además, para implementar el método se considera la notación:

$$F_i^n = f_i^n + \alpha \left( \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{\Delta^2 x} \right) - v \left( \frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) - \sigma(U_i^n).$$

Así la ecuación se transforma en:

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = F_i^n.$$

Luego en la estructura del Crank–Nicolson para este esquema numérico se transforma en:

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \frac{F_i^{n+1} + F_i^n}{2}.$$

Explícitamente, la representación de la ecuación en diferencias finitas es de la forma:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2x} - \frac{v\Delta t}{4\Delta x}\right)U_{i-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2x} + \frac{\sigma\Delta t}{2}\right)U_i^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2x} + \frac{v\Delta t}{4\Delta x}\right)U_{i+1}^{n+1} = \\ \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2x} + \frac{v\Delta t}{4\Delta x}\right)U_{i-1}^n + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2x} - \frac{\sigma\Delta t}{2}\right)U_i^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2x} - \frac{v\Delta t}{4\Delta x}\right)U_{i+1}^n + \frac{\Delta t}{2}f_i^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (19)$$

donde  $f_i^{n+1/2} = \frac{f_i^{n+1} + f_i^n}{2}$ .

Matricialmente, la ecuación anterior puede verse como:

$$\mathbb{M}\mathbf{U}^{n+1} = \mathbb{N}\mathbf{U}^n + \mathbb{F},$$

donde las matrices  $\mathbb{M}$  y  $\mathbb{N}$  son tridiagonales.

### 2.5.5. Difusión-Advección-Reacción Rectangular Bidimensional

Como se estableció en la sección 2.5.2, la ecuación de difusión se puede representar en diferentes sistemas coordenados y para la ecuación bidimensional en **coordenadas cartesianas**, el modelo propuesto en estas circunstancias es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) + v_x \frac{\partial U}{\partial x} + v_y \frac{\partial U}{\partial y} + \sigma U = f, \\ \text{para } (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, t \in (0, T] \\ U(x, y, 0) = U_0(x, y). \end{array} \right. \quad (20)$$

donde  $U \equiv U(x, y, t)$  es la concentración de contaminante;  $\alpha$  es la difusividad,  $\mathbf{v} = \langle v_x, v_y \rangle$  es el vector velocidad,  $\sigma$  es la tasa de degradación del contaminante,  $f$  una fuente contaminante y  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  un dominio limitado (rectangular). Además,  $U_0 \equiv U_0(x, y)$  una función inicial que caracteriza la distribución inicial de contaminante.

Para este caso, la discretización espacial del dominio rectangular está dada por  $\Omega = [x_0, x_m] \times [y_0, y_l]$ , con  $x_0 < x_1 < \dots < x_m$ ,  $y_0 < y_1 < \dots < y_l$ , usando  $\Delta x$  para simbolizar el tamaño de paso al dividir el intervalo  $[x_0, x_m]$  en  $m$  subintervalos de igual longitud, es decir,  $\Delta x = \frac{x_m - x_0}{m}$  y así mismo  $\Delta y$  simboliza el tamaño de paso al dividir el intervalo  $[y_0, y_l]$  en  $l$  subintervalos de igual longitud, es decir,  $\Delta y = \frac{y_l - y_0}{l}$ . Teniendo en cuenta la notación  $U_{i,j}^n$  para representar  $U(x_i, y_j, t_n)$ , para que el sistema de índices sea consistente con la matriz que representa el sistema:  $i$  es el índice de las columnas que va desde 0 hasta  $m$  y  $j$  es el índice para las filas que va desde 0 hasta  $l$ . Adicionalmente, los vértices que genera la partición del rectángulo se enumeran partiendo desde el punto  $(x_0, y_0)$  hasta el punto  $(x_m, y_l)$ , siguiendo la dirección de los ejes coordenados como se aprecia en la Figura 13.

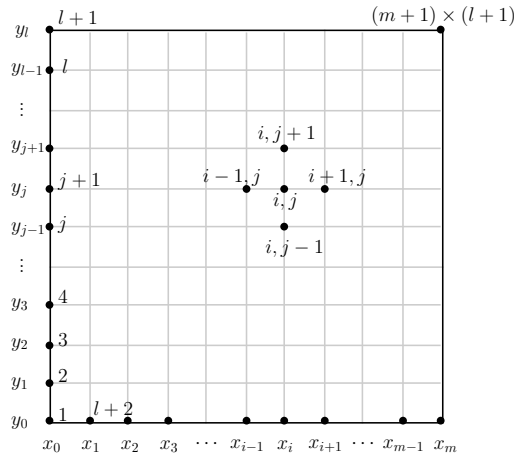


Figura 5: Discretización espacial del rectángulo  $\Omega = [x_0, x_m] \times [y_0, y_l]$ . *Elaboración propia.*

Cabe resaltar que la notación que se utiliza es consistente con el sistema de índices tradicionales, donde se utiliza  $i$  para  $x_i$  y  $j$  para  $y_j$ . Para representar el problema anterior adicionándole la condición de frontera tipo Neumann, se consideran las siguientes aproximaciones:

---



---

### Tipo de Aproximación

---



---

$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j}^n = \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t}$	Diferencia Avanzada
$\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_{i,j}^n = \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i-1,j}^n}{2\Delta x}$	Diferencia Centrada
$\left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)_{i,j}^n = \frac{U_{i,j+1}^n - U_{i,j-1}^n}{2\Delta y}$	Diferencia Centrada
$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_{i,j}^n = \frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i-1,j}^n}{\Delta^2 x}$	Diferencia Centrada de Segundo Orden
$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right)_{i,j}^n = \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{\Delta^2 y}$	Diferencia Centrada de Segundo Orden

---

Tabla 2: Aproximaciones de las derivadas.

Remplazando las aproximaciones en el modelo bidimensional se tiene:

$$\begin{aligned} & \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} - \alpha \left( \frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i-1,j}^n}{\Delta^2 x} + \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{\Delta^2 y} \right) + \\ & v_x \left( \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right) + v_y \left( \frac{U_{i,j+1}^n - U_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) + \sigma \left( \frac{U_{i,j}^{n+1} + U_{i,j}^n}{2} \right) = f_{i,j}^n \end{aligned}$$

Para implementar el Método de Crank–Nicolson, en la ecuación anterior se considera:

$$\begin{aligned} F_{i,j}^n = f_{i,j}^n + \alpha \left( \frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i-1,j}^n}{\Delta^2 x} + \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{\Delta^2 y} \right) - v_x \left( \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right) \\ - v_y \left( \frac{U_{i,j+1}^n - U_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) - \sigma \left( \frac{U_{i,j}^{n+1} + U_{i,j}^n}{2} \right). \end{aligned}$$

Así la ecuación se transforma en:

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} = F_{i,j}^n.$$



Luego en la estructura del Crank–Nicolson este esquema numérico se transforma en:

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{F_{i,j}^{n+1} + F_{i,j}^n}{2}.$$

Finalmente, despejando el instante  $n + 1$  al lado izquierdo de la ecuación, la representación en diferencias finitas es de la forma:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x}\right) U_{i-1,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{i,j-1}^{n+1} \\ & + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_{i,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{i,j+1}^{n+1} \\ & + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x}\right) U_{i+1,j}^{n+1} = \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x}\right) U_{i-1,j}^n \\ & + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{i,j-1}^n + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_{i,j}^n \\ & + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{i,j+1}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x}\right) U_{i+1,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,j}^{n+1/2}. \end{aligned} \tag{21}$$

donde  $f_{i,j}^{n+1/2} = \frac{f_{i,j}^{n+1} + f_{i,j}^n}{2}$ .

Matricialmente, la ecuación anterior puede verse de esta forma:

$$\mathbb{M}\mathbf{U}^{n+1} = \mathbb{N}\mathbf{U}^n + \mathbb{F}.$$

Que tiene la misma estructura del caso unidimensional, sin embargo en este caso las matrices  $\mathbb{M}$  y  $\mathbb{N}$  no son tridiagonales sino pentadiagonales.

Para establecer el modelo bidimensional general en **coordenadas polares** se debe considerar que su representación se deduce expresando las derivadas espaciales en dichas coordenadas, para ésto, suponga que  $x = r \cos \theta$ ,  $y = r \sin \theta$  y  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ,  $r \geq 0$ . Así, el modelo propuesto en estas circunstancias es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \left( \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \right) + \\ \left( \frac{\partial U}{\partial r} (v_x \cos \theta + v_y \sin \theta) - \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \theta} (v_y \cos \theta - v_x \sin \theta) \right) + \sigma U = f(r, \theta), \\ \text{para } (r, \theta) \in \Omega \text{ y } U(r, \theta, 0) = U_0(r, \theta). \\ U(r, 0, t) = U(r, 2\pi, t) : \text{condición de continuidad.} \end{array} \right. \quad (22)$$

Donde  $U \equiv U(r, \theta, t)$  es la concentración de contaminante y los parámetros  $\alpha$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\sigma$  y  $f$  son los mismos definidos en la página 21. En este caso se considera un dominio limitado circularmente. Además,  $U_0 \equiv U_0(r, \theta)$  una función inicial que caracteriza la distribución inicial de contaminante.

Generalmente cuando se trabaja con coordenadas polares cada punto o posición del plano se determina por un ángulo y una distancia, así todo punto en el plano corresponde a un par de coordenadas  $(r, \theta)$  donde  $|r|$  es la distancia de un punto cualquiera al origen y  $\theta$  es el ángulo de inclinación con sentido positivo anti horario medido desde el eje polar; como el plano polar está conformado de circunferencias concéntricas al origen y rectas que coinciden al origen con diferentes ángulos de inclinación, cuando el ángulo coincide con el punto de inicio genera el diámetro de la circunferencia o sea  $(r, 0) = (r, 2\pi)$ . De ahí se establece la condición de continuidad.

Dada la complejidad el problema general (22), se propone desarrollar por partes su discretización, de tal manera, se desarrollará en la ecuación de difusión en la circunferencia unitaria, sin los procesos de reacción ni advección. Es decir:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \left( \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \right) = f(r, \theta, t), \\ \text{para } 0 \leq r < 1, 0 \leq \theta < 2\pi, t > 0. \\ U(r, \theta, 0) = U_0(r, \theta). \\ U(r, 0, t) = U(r, 2\pi, t), \text{ Condición de continuidad.} \end{array} \right. \quad (23)$$

Anteriormente se trabajó en una geometría rectangular ahora se debe tener en cuenta que se trabajará en una geometría circular, por lo tanto su discretización debe ser pensando en coordenadas polares. En este orden de ideas se debe considerar primero la enumeración de los puntos en la malla en coordenadas polares y después generar una malla similar a la que se ha desarrollado anteriormente, para ello, cada punto

$(r_i, \theta_j)$  se discretiza por,  $i = 0, 1, 2, \dots, M_r$ , y  $j = 0, 1, 2, \dots, M_\theta$ , donde  $r_0 = 0$ ,  $r_{M_r} = 1$  y  $\theta_{M_\theta} = 2\pi$ . O sea, el radio se particiona como se observa en la figura 6.

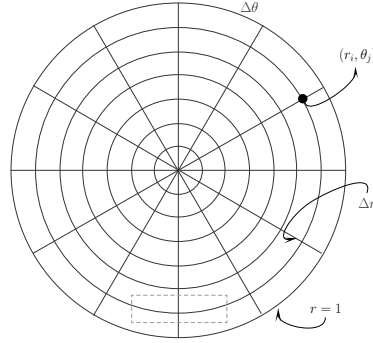


Figura 6: Discretización de coordenadas polares bidimensionales en la región  $0 \leq r < 1$ ,  $0 \leq \theta < 2\pi$ . *Elaboración propia.*

Para determinar la discretización se asume la notación  $r_i = i\Delta r$  y  $\theta_j = j\Delta\theta$  para representar los valores espaciales, los cuales tienen la forma  $(r_i, \theta_j) = (i\Delta r, j\Delta\theta)$  así:

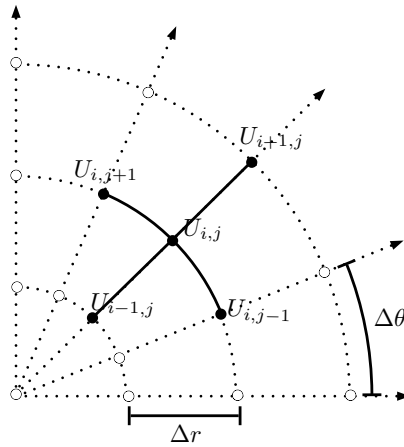


Figura 7: Discretización de una Región Polar. *Elaboración propia.*

Ahora, se adapta la representación de la malla anterior de manera que su dominio sea rectangular, donde se denota los valores definidos de la función en el punto  $(r_i, \theta_j)$  de la malla en el tiempo  $t = n\Delta t$  por  $U_{i,j}^n$ . Adicionándole la condición de continuidad descrita anteriormente en  $\theta = 0$  y  $\theta = 2\pi$  con estas condiciones se representa  $U_{i,M_\theta}^n = U_{i,0}^n$  como se observa en la siguiente figura:

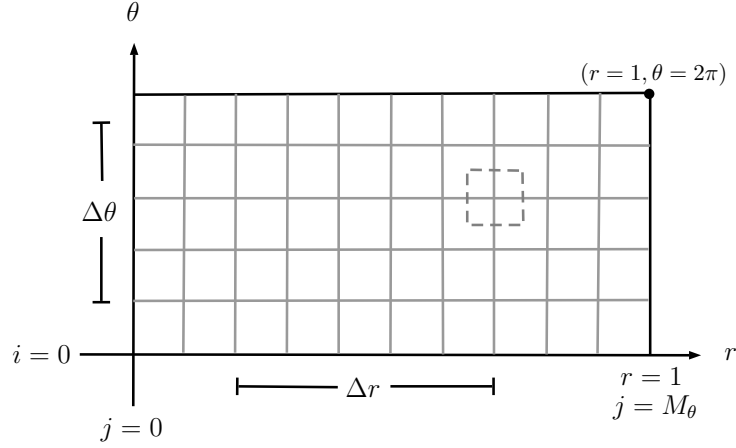


Figura 8: Cuadrícula de coordenadas polares bidimensionales en la región  $[0, 1] \times [0, 2\pi]$ .  
Elaboración propia.

Una vez determinada la cuadrícula de las coordenadas polares, se procede a aproximar las derivadas del problema (23) por medio de diferencias finitas, teniendo en cuenta la condición de continuidad  $U(r, 0, t) = U(r, 2\pi, t)$  para ello, la aproximación de  $\frac{\partial U}{\partial t}$  está establecida por una diferencia avanzada. Ver [12].

Hasta el momento no se han realizado aproximaciones para la variable independiente  $r$ . En la ecuación (23) se puede observar la presencia de las cantidades  $\frac{1}{r}$  y  $\frac{1}{r^2}$ . Para esta ecuación utilizamos: una diferencia avanzada, diferencia centrada de segundo orden y la condición de continuidad, explícitamente las aproximaciones están establecidas por:

---

### Tipo de Aproximación

---

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j}^n = \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} \quad \begin{array}{l} \text{Diferencia} \\ \text{Avanzada} \end{array}$$

$$\left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2}\right)_{i,j}^n = \frac{1}{r_{i,j}^2} \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{\Delta^2 \theta} \quad \begin{array}{l} \text{Diferencia} \\ \text{Centrada} \\ \text{de} \\ \text{Segundo} \\ \text{Orden} \end{array}$$

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial U}{\partial r}\right)\right)_{i,j}^n = \frac{1}{r_{i,j} \Delta^2 r} \left[ r_{i+1,j} \left( U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n \right) - r_{i-1,j} \left( U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n \right) \right]$$


---

Tabla 3: Aproximaciones de las Derivadas en Coordenadas Polares.

Cabe resaltar que en las aproximaciones de las derivadas se está omitiendo el caso

( $r = 0$ ), debido a que en el problema inicial se evidencia una singularidad en dicho punto. Para este caso la discretización de las derivadas son consideradas de manera diferente y más adelante se profundizará más sobre este caso.

Luego, si se recopilan las aproximaciones anteriores y remplazamos en el problema inicial (23) se obtiene la siguiente aproximación en diferencias finitas.

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} = \alpha \left( \frac{1}{r_{i,j}^2} \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{\Delta^2 \theta} + \frac{1}{r_{i,j}} \left[ \frac{r_{i+1,j}(U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n) - r_{i-1,j}(U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n)}{\Delta^2 r} \right] \right) + f_{i,j}^n$$

Para implementar el Método de Crank–Nicolson en la ecuación anterior, se considera:

$$F_{i,j}^n = f_{i,j}^n + \alpha \left( \frac{1}{r_{i,j}^2} \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{\Delta^2 \theta} + \frac{1}{r_{i,j}} \left[ \frac{r_{i+1,j}(U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n) - r_{i-1,j}(U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n)}{\Delta^2 r} \right] \right).$$

Así la ecuación se transforma en:

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} = F_{i,j}^n,$$

Luego en la estructura del Crank–Nicolson este esquema numérico se transforma en:

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{F_{i,j}^{n+1} + F_{i,j}^n}{2}.$$

Explícitamente, de acuerdo a esta notación después de despejar el instante  $n + 1$  al lado izquierdo de la ecuación, la representación en diferencias finitas es de la forma:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{r_{i-1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} \right) U_{i-1,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2r_{i,j}^2\Delta^2 \theta} \right) U_{i,j-1}^{n+1} + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{r_{i,j}^2\Delta^2 \theta} + \frac{r_{i+1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} + \frac{r_{i-1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} \right) U_{i,j}^{n+1} \\ & + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2r_{i,j}^2\Delta^2 \theta} \right) U_{i,j+1}^{n+1} + \left( -\frac{r_{i+1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} \right) U_{i+1,j}^{n+1} = \left( \frac{r_{i-1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} \right) U_{i-1,j}^n \\ & + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2r_{i,j}^2\Delta^2 \theta} \right) U_{i,j-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{r_{i,j}^2\Delta^2 \theta} - \frac{r_{i+1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} - \frac{r_{i-1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} \right) U_{i,j}^n \\ & + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2r_{i,j}^2\Delta^2 \theta} \right) U_{i,j+1}^n + \left( \frac{r_{i+1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} \right) U_{i+1,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,j}^{n+1/2}. \end{aligned} \tag{24}$$

Una vez establecida la estructura de la discretización se puede retomar el problema general (22). Ahora, para representar dicha ecuación mediante el método de diferencias finitas consideramos discretización polar de la Figura 7, donde mas adelante se establece las aproximaciones de las respectivas derivadas.

Luego, recopilando las aproximaciones y remplazamos en el problema inicial (22) se obtiene la siguiente aproximación.

$$\begin{aligned} & \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} - \alpha \left[ \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{r_{i,j}^2 \Delta^2 \theta} + \left( \frac{r_{i+1,j}(U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n) - r_{i-1,j}(U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n)}{r_{i,j} \Delta^2 r} \right) \right] \\ & + \left[ \frac{(U_{i+1,j}^n - U_{i-1,j}^n)(v_x \cos \theta + v_y \sin \theta)}{2\Delta r} - \frac{(U_{i,j+1}^n - U_{i,j-1}^n)(v_y \cos \theta - v_x \sin \theta)}{2r_{i,j} \Delta \theta} \right] + \sigma \left[ \frac{U_{i,j}^{n+1} + U_{i,j}^n}{2} \right] = f_{i,j}^n. \end{aligned}$$

Así implementando el Método de Crank–Nicolson en la ecuación se obtiene:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{r_{i-1,j} \alpha \Delta t}{2r_{i,j} \Delta^2 r} - \frac{\Delta t(v_x \cos(\theta_{i,j}) + v_y \sin(\theta_{i,j}))}{4\Delta r} \right) U_{i-1,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha \Delta t}{2r_{i,j}^2 \Delta^2 \theta} + \frac{\Delta t(v_y \cos(\theta_{i,j}) - v_x \sin(\theta_{i,j}))}{4r_{i,j} \Delta \theta} \right) U_{i,j-1}^{n+1} \\ & \left( 1 + \frac{\alpha \Delta t}{r_{i,j}^2 \Delta^2 \theta} + \frac{r_{i+1,j} \alpha \Delta t}{2r_{i,j} \Delta^2 r} + \frac{r_{i-1,j} \alpha \Delta t}{2r_{i,j} \Delta r} + \frac{\sigma \Delta t}{2} \right) U_{i,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha \Delta t}{2r_{i,j}^2 \Delta^2 \theta} - \frac{\Delta t(v_y \cos(\theta_{i,j}) - v_x \sin(\theta_{i,j}))}{4r_{i,j} \Delta \theta} \right) U_{i,j+1}^{n+1} \\ & \left( -\frac{r_{i+1,j} \alpha \Delta t}{2r_{i,j} \Delta^2 r} + \frac{\Delta t(v_x \cos(\theta_{i,j}) + v_y \sin(\theta_{i,j}))}{4\Delta r} \right) U_{i+1,j}^{n+1} = \left( \frac{r_{i-1,j} \alpha \Delta t}{2r_{i,j} \Delta^2 r} + \frac{\Delta t(v_x \cos(\theta_{i,j}) + v_y \sin(\theta_{i,j}))}{4\Delta r} \right) U_{i-1,j}^n \\ & \left( \frac{\alpha \Delta t}{2r_{i,j}^2 \Delta^2 \theta} - \frac{\Delta t(v_y \cos(\theta_{i,j}) - v_x \sin(\theta_{i,j}))}{4r_{i,j} \Delta \theta} \right) U_{i,j-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha \Delta t}{r_{i,j}^2 \Delta^2 \theta} - \frac{r_{i+1,j} \alpha \Delta t}{2r_{i,j} \Delta^2 r} - \frac{r_{i-1,j} \alpha \Delta t}{2r_{i,j} \Delta^2 r} - \frac{\sigma \Delta t}{2} \right) U_{i,j}^n \\ & \left( \frac{\alpha \Delta t}{2r_{i,j}^2 \Delta^2 \theta} + \frac{\Delta t(v_y \cos(\theta_{i,j}) - v_x \sin(\theta_{i,j}))}{4r_{i,j} \Delta \theta} \right) U_{i,j+1}^n + \left( \frac{r_{i+1,j} \alpha \Delta t}{2r_{i,j} \Delta^2 r} - \frac{\Delta t(v_x \cos(\theta_{i,j}) + v_y \sin(\theta_{i,j}))}{4\Delta r} \right) U_{i+1,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,j}^{n+1/2}. \end{aligned} \tag{25}$$

donde  $f_{i,j}^{n+1/2} = \frac{f_{i,j}^{n+1} + f_{i,j}^n}{2}$ .

Nuevamente, la ecuación anterior matricialmente puede verse como:

$$\mathbf{M}\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{N}\mathbf{U}^n + \mathbf{F}.$$

donde las matrices  $\mathbb{M}$  y  $\mathbb{N}$  son pentagonales.

### Difusión-Advección-Reacción en Coordenadas Polares con Simetría Radial

Al momento de discretizar la región polar del problema 22 se puede evidenciar que la longitud de los arcos varían dependiendo de los puntos de referencia, en la Figura 7 se puede observar la variación de los arcos con respecto a los puntos  $U_{i-1,j} < U_{i+1,j}$ , en este caso se asumirá la simetría radial lo que significa que no habrá un cambio angular. Así el problema con estas condiciones está dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \right) + \left( \frac{\partial U}{\partial r} (v_x \cos \theta + v_y \sin \theta) \right) + \sigma U = f(r, \theta), \\ \text{para } (r, \theta) \in \Omega \quad y \quad U(r, \theta, 0) = U_0(r, 0). \\ U(r, 0, t) = U(r, 2\pi, t); \quad \text{condición de continuidad.} \end{array} \right. \quad (26)$$

Procediendo de manera semejante a la discretización anterior con las aproximaciones correspondientes de las derivadas el problema 26 se obtiene la siguiente aproximación en diferencias finitas:

$$\begin{aligned} & \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\Delta t} - \alpha \left[ \frac{r_{i+1,j} (U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n) - r_{i-1,j} (U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n)}{r_{i,j} \Delta^2 r} \right] + \\ & \left[ \frac{(U_{i+1,j}^n - U_{i-1,j}^n) (v_x \cos \theta + v_y \sin \theta)}{2\Delta r} \right] + \sigma \left[ \frac{U_{i,j}^{n+1} + U_{i,j}^n}{2} \right] = f_{i,j}^n. \end{aligned}$$

Luego, la representación de la discretización está establecida por:

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{r_{i-1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} - \frac{\Delta t(v_x \cos(\theta_{i,j}) + v_y \sin(\theta_{i,j}))}{4\Delta r} \right) U_{i-1,j}^{n+1} + \\
& \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{r_{i,j}^2\Delta^2\theta} + \frac{r_{i+1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} + \frac{r_{i-1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{i,j}^{n+1} + \\
& \left( -\frac{r_{i+1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} + \frac{\Delta t(v_x \cos(\theta_{i,j}) + v_y \sin(\theta_{i,j}))}{4\Delta r} \right) U_{i+1,j}^{n+1} \\
& = \left( \frac{r_{i-1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} + \frac{\Delta t(v_x \cos(\theta_{i,j}) + v_y \sin(\theta_{i,j}))}{4\Delta r} \right) U_{i-1,j}^n + \\
& + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{r_{i,j}^2\Delta^2\theta} - \frac{r_{i+1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} - \frac{r_{i-1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{i,j}^n + \\
& \left( \frac{r_{i+1,j}\alpha\Delta t}{2r_{i,j}\Delta^2 r} - \frac{\Delta t(v_x \cos(\theta_{i,j}) + v_y \sin(\theta_{i,j}))}{4\Delta r} \right) U_{i+1,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,j}^{n+1/2}.
\end{aligned} \tag{27}$$

donde  $f_{i,j}^{n+1/2} = \frac{f_{i,j}^{n+1} + f_{i,j}^n}{2}$ .

Anteriormente se desarrollaron las aproximaciones de las derivadas en el problema (22) para  $r \neq 0$ , donde dichas aproximaciones no presentaron ninguna dificultad para expresarlas mediante el método de diferencias finitas. Ahora se desarrollará el estudio del problema anterior cuando  $r = 0$  en el punto  $(r_0, \theta_0)$  donde la ecuación presenta una singularidad.

Para este punto en específico el problema no tiene una longitud de arco, por lo tanto el problema general se simplifica en:

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \left( \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} \right) + \sigma U = f(r, \theta, t), \\ r = 0, 0 \leq \theta < 2\pi, t > 0. \end{cases} \tag{28}$$

Como se estableció anteriormente cuando  $r = 0$  la ecuación presenta una singularidad y para tratar esta complicación se llevará la ecuación polar a la representación cartesiana o sea:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}.$$



Ahora para determinar la discretización de las derivadas de segundo orden se construye una circunferencia auxiliar de radio  $\Delta r$  con centro en el origen y los cuatro puntos de intersección de la circunferencia con los ejes coordenados. Denotando dichos valores con  $U_1, U_2, U_3, U_4$  respectivamente, el valor en el origen está dado por  $U_0$ . Ver Figura 9.

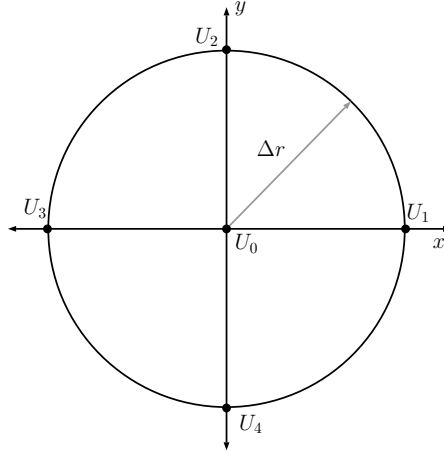


Figura 9: Circunferencia auxiliar. *Elaboración propia.*

Así las derivadas  $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$  y  $\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}$  serán aproximadas por medio de diferencias centradas de segundo orden:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \approx \frac{U_3^n - 2U_0^n + U_1^n}{\Delta^2 x}, \quad \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \approx \frac{U_4^n - 2U_0^n + U_2^n}{\Delta^2 y}.$$

Ahora reemplazando estas aproximaciones en  $\nabla^2 U$  se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \\ &= \frac{(U_1^n + U_2^n + U_3^n + U_4^n - 4U_0^n)}{\Delta^2 r} + O(\Delta^2 r). \end{aligned}$$

Cuando el problema (28) posee simetría radial entonces  $\frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} = 0$  y la ecuación se reduce a:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} \quad (29)$$

Suponiendo que  $\frac{\partial U}{\partial r} = 0$  en  $r = 0$  que es donde se presenta el problema con respecto al origen, se puede observar que en el término  $\frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r}$  existe una indeterminación.

Para determinar la aproximación de dicha derivada se utilizará la expansión en serie de Maclaurin la cual establece:

$$\begin{aligned}
 U'(r) &= U'(0) + \frac{U''(0)r}{1!} + \frac{U'''(0)r^2}{2!} + \frac{U^{(4)}(0)r^3}{3!} + \dots \quad \text{como } U'(0) = 0 \text{ en } r = 0, \\
 &= r \left( U''(0) + \frac{U'''(0)r}{2} + \frac{U^{(4)}(0)r^2}{6} + \dots \right) \\
 &= r(U''(0)) + O(r) \quad r \text{ error de estimación,} \\
 &\approx r \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \Big|_{r=0}.
 \end{aligned}$$

Una vez establecida la aproximación de la derivada se procede a reemplazar en la ecuación (29) de donde se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial U}{\partial t} &= \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \left( r \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right) \\
 &\approx \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \\
 &\approx 2 \frac{\partial^2 U}{\partial r^2}, \quad \text{para } r = 0.
 \end{aligned}$$

Finalmente, para las aproximaciones de las derivadas para la ecuación resultante se considerará para la variable temporal una diferencia avanzada y para la derivada de segundo orden una diferencia centrada de segundo orden y teniendo en cuenta que  $\frac{\partial U}{\partial r} = 0$  en  $r = 0$  osea  $U_{1,j} = U_{-1,j}$ . Así tenemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{U_{0,j}^{n+1} - U_{0,j}^n}{\Delta t} &= 2 \left( \frac{U_{1,j}^n - 2U_{0,j}^n + U_{-1,j}^n}{\Delta^2 r} \right), \text{ como } U_{1,j} = U_{-1,j} \\
 &= \frac{4(U_{1,j}^n - U_{0,j}^n)}{\Delta^2 r}.
 \end{aligned}$$

## 2.6. Condiciones de Frontera

Como se estableció anteriormente, para los fenómenos que son representados mediante ecuaciones diferenciales, frecuentemente se conoce información adicional del fenómeno, lo que equivale a saber el valor de las variables o de sus derivadas bajo condiciones específicas. Dichas condiciones especiales permiten ajustar los problemas a condiciones específicas, y se conocen como “condiciones de frontera”.

En general, una ecuación diferencial parcial puede tener infinitas soluciones, entonces para plantear problemas que tengan solución única, es necesario complementar la ecuación con condiciones adecuadas.

Las condiciones de frontera o condiciones de contorno de una ecuación diferencial se suelen clasificar en tres tipos:

- **Neumann**, la cual especifica los valores de la derivada sobre la frontera.
  
- **Dirichlet**, la cual especifica los valores de la función solución en la frontera.
  
- **Robin**, que corresponde a una combinación de las condiciones anteriores.

Una descripción detallada y el significado de las condiciones de frontera mencionadas anteriormente, se pueden encontrar en extenso en el trabajo *A General Boundary Condition with Linear Flux for Advection-Diffusion Models*. Ver [10].

Al momento de discretizar la ecuación diferencial por el método de diferencias finitas en la Figura 10. Se puede evidenciar que los nodos interiores de la recta o malla, no presentan problemas, sin embargo, cuando se implementan las condiciones de frontera se deben tener presente los límites de la recta o malla, ya que al discretizar se utiliza el método del punto fantasma o ficticio, donde se añaden la información dependiendo la información que necesite.

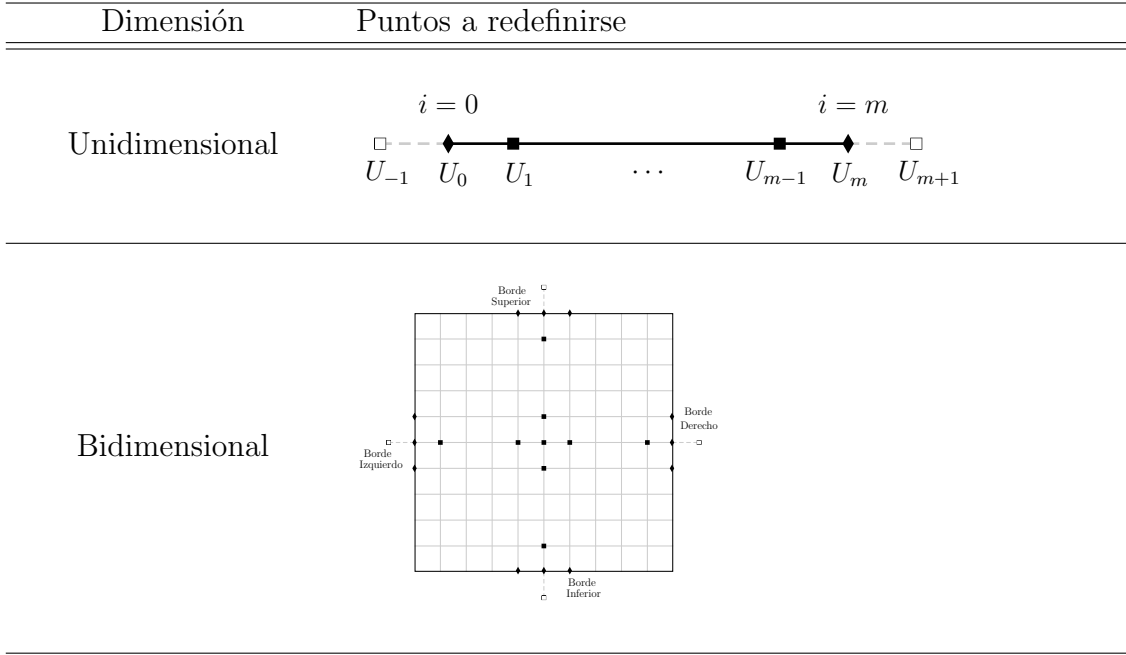


Figura 10: Nomenclatura de los puntos:  $\blacksquare$  - Puntos internos.  $\blacklozenge$  - Puntos de frontera (referencia).  $\square$  - Puntos no existentes en el dominio.

A continuación, se presenta cómo implementar las condiciones de frontera de tipo Neumann, Dirichlet y de tipo Robin para la ecuación de Difusión-Advección-Reacción en las dimensiones discretizadas anteriormente.

### 2.6.1. Caso Unidimensional

Para implementar las condiciones de frontera tipo Neumann, Dirichlet y Robin unidimensionales, en las siguientes subsecciones se muestra como varía la concentración de un contaminante. En un modelo unidimensional, se considera el siguiente problema:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + v \frac{\partial U}{\partial x} + \sigma U = f, \\
 \text{para } x \in [0, L], t \in (0, T] \\
 U(x, 0) = U_0(x).
 \end{array} \right. \quad (30)$$

donde  $U \equiv U(x, t)$  es la concentración de contaminante;  $\alpha$  es la difusividad,  $v \frac{\partial U}{\partial x}$  es el transporte advectivo,  $\sigma$  es la tasa de degradación del contaminante y  $f$  una fuente contaminante. Además,  $U_0 \equiv U_0(x)$  representa una función inicial que caracteriza

la distribución inicial de contaminante.

Para representar el problema anterior con las condiciones de frontera sobre la recta (unidimensional), se considera la ecuación resultante (19), la cual sus derivadas son aproximadas por medio de diferencias centradas en  $x$ , y para la resolución del problema evolutivo, la aproximación de la solución en cada instante del tiempo  $t$ , para  $0 < t \leq T$ . La discretización espacial del dominio de la recta está dada por la partición  $[0, L]$ , con  $x_0 < x_1 < \dots < x_m$ , usando  $\Delta x$  para simbolizar el tamaño de paso al dividir el intervalo  $[0, L]$  en  $m$  subintervalos de igual longitud, es decir,  $\Delta x = \frac{L}{m}$ , y en cada paso del tiempo  $\Delta t = \frac{T}{n}$ . Teniendo en cuenta la notación  $U_i^n$  para representar  $U(x_i, t_n)$  y finalmente que el sistema de índices sea consistente con la matriz que representa,  $i$  es el índice de las columnas que va desde 0 hasta  $m$  como se aprecia en la siguiente figura.

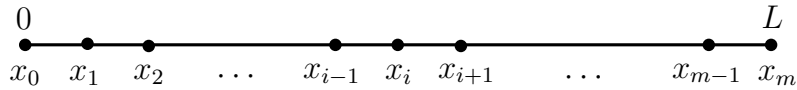


Figura 11: Discretización espacial del intervalo  $\Omega = [0, L]$ . *Elaboración propia.*

A continuación se describen las diferentes condiciones de frontera.

### Condición de frontera tipo Neumann

En la condición de frontera tipo Neumann, lo que especifica es la derivada de  $U(x; t)$  a lo largo de la frontera  $\partial\Omega$ , es decir,  $\frac{\partial U}{\partial \eta}$  donde  $\frac{\partial U}{\partial \eta}$  representa la derivada parcial respecto al vector normal exterior unitario. Ver [10]. La condición se representa con una diferencia finita añadiendo puntos ficticios a la partición. Estos puntos adicionales, no tienen ningún significado físico pues se encuentran por fuera del dominio del problema.

Condición	Tipo
$\frac{\partial U}{\partial \eta} = 0$	Homogénea
$\frac{\partial U}{\partial \eta} = g(x, t)$	No Homogénea

Tabla 4: Condiciones de frontera tipo Neumann.

### Neumann homogénea

Consideremos el siguiente problema con valores iniciales y de frontera:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + v \frac{\partial U}{\partial x} + \sigma U = f, \quad x \in (0, L), \quad t \in (0, T] \\ \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 = \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=L}, \quad \text{para todo } t \in (0, T] \\ U(x, 0) = U_0(x) \end{array} \right. \quad (31)$$

Teniendo en cuenta la discretización espacial del intervalo definido anteriormente, la ecuación en diferencias finitas (31) está representada por:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\alpha \Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v \Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1}^{n+1} + \left( 1 + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma \Delta t}{2} \right) U_i^{n+1} \\ & + \left( -\frac{\alpha \Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v \Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1}^{n+1} = \left( \frac{\alpha \Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v \Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1}^n \\ & + \left( 1 - \frac{\alpha \Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma \Delta t}{2} \right) U_i^n + \left( \frac{\alpha \Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v \Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1}^n + \frac{\Delta t}{2} f_i. \end{aligned} \quad (32)$$

con  $i = 1, 2, \dots, m-1$ .

Para las condiciones de frontera debe ajustarse la ecuación anterior así:

Para  $\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0$ , ( $i = 0$ ) tenemos:

$$\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 \iff \frac{U_1^{(*)} - U_{-1}^{(*)}}{2\Delta x} = 0$$

$$\iff \boxed{U_{-1}^{(*)} = U_1^{(*)}}$$

Luego, la ecuación (32) se transforma en:

$$\begin{aligned} & \left( 1 + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma \Delta t}{2} \right) U_0^{n+1} + \left( -\frac{\alpha \Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_1^{n+1} = \\ & \left( 1 - \frac{\alpha \Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma \Delta t}{2} \right) U_0^n + \left( \frac{\alpha \Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_1^n + \frac{\Delta t}{2} f_0. \end{aligned}$$

Análogamente ocurre para  $\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x=L} = 0, (i = m)$  obteniendo:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_{m-1}^{n+1} + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_m^{n+1} = \\ & \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_{m-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_m^n + \frac{\Delta t}{2} f_m. \end{aligned}$$

### Neumann no homogénea

Ahora, consideramos el problema con valores iniciales (31) y la condición de frontera tipo Neumann no homogénea, la cual establece:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x=0} = g(x, t) = \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x=L}, \text{ para todo } t \in (0, T].$$

Para  $\frac{\partial U}{\partial x} = g(x, t) \Rightarrow \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x=0} = g(0, t)$  con  $i = 0$ , Para todo  $t \in (0, T]$  tenemos:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x=0} = g(0, t) \iff \frac{U_1^{(*)} - U_{-1}^{(*)}}{2\Delta x} = g(0, t_*)$$

$$\iff \boxed{U_{-1}^{(*)} = U_1^{(*)} - 2\Delta x g(0, t_*)}$$

Luego, la ecuación (32) en diferencias finitas con la condición de frontera en  $x = 0$  se transforma en:

$$\begin{aligned} & \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_0^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_1^{n+1} = \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_0^n + \\ & \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_1^n + \left( \frac{-\alpha\Delta t}{2\Delta x} - \frac{v\Delta t}{4} \right) (g(t_n) + g(t_{n+1})) + \frac{\Delta t}{2} f_1. \end{aligned}$$

Para  $\frac{\partial U}{\partial x} = g(x, t) \Rightarrow \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=L} = g(L, t)$  con  $i = m$  se obtiene:

$$\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=L} = g(L, t) \iff \frac{U_1^{(*)} - U_{-1}^{(*)}}{2\Delta x} = g(L, t_*)$$

$$\iff \boxed{U_{m+1}^{(*)} = U_{m-1}^{(*)} + 2\Delta x g(L, t_*)}$$

Luego, la ecuación (32) con la condición de frontera en  $x = L$  se transforma en:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_m^{n+1} &= \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1}^n + \\ \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_m^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta x}\right) (g(L, t_n) + g(L, t_{n+1})) + \frac{\Delta t}{2} f_m. \end{aligned}$$

### Tipo Dirichlet

Para la condición de Dirichlet, se especifica el valor que la función  $U(x; t)$  toma en la frontera, es decir, es un valor conocido en el nodo o nodos de la frontera, es decir:

Condición	Tipo
$U = 0$	Homogénea
$U = g(x, t)$	No Homogénea

Tabla 5: Condiciones de frontera tipo Dirichlet.

### Condición de frontera Dirichlet homogénea

Consideramos el problema con valores iniciales (31) y la condición de frontera tipo Dirichlet homogénea, la cual establece:

$$U \Big|_{x=0} = 0 = U \Big|_{x=L}, \text{ para todo } t \in (0, T].$$



Para  $U|_{x=0} = 0$ , ( $i = 0$ ), la ecuación (32) en diferencias finitas con condición de frontera en  $x_0$  se transforma en:

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_0^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_1^{n+1} = \\ \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_0^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_1^n + \frac{\Delta t}{2} f_0. \end{aligned}$$

Análogamente ocurre para  $U|_{x=L} = 0$  obteniendo:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_m^{n+1} = \\ \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1}^{(n)} + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_m^n + \frac{\Delta t}{2} f_m. \end{aligned}$$

### Condición de frontera Robin

La condición de frontera tipo Robin, es una combinación entre Neumann y Dirichlet para  $a$  y  $b$  parámetros arbitrarios diferentes de cero y  $g(x, t)$  una función definida sobre  $\partial\Omega$ . Aquí,  $U$  es la función desconocida definida sobre la frontera y  $\frac{\partial U}{\partial \eta}$  es la derivada parcial respecto al vector normal exterior unitario.

Condición	Tipo
$aU + b\frac{\partial U}{\partial \eta} = 0$	Homogénea
$aU + b\frac{\partial U}{\partial \eta} = g(x, t)$	No Homogénea

Tabla 6: Condiciones de frontera tipo Robin.

### Condición de frontera Robin homogénea

Consideramos el problema con valores iniciales (31) y la condición de frontera tipo Robin homogénea, la cual establece:

$$aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{\partial\Omega} = 0, \text{ para todo } t \in (0, T], a, b \in \mathbb{R}$$

Como se ha podido establecer en los casos anteriores, para implementar las condiciones de frontera del problema, sus derivadas deben estar aproximadas y para ello se utiliza la discretización de la ecuación (11).

Para implementar la condición de frontera, se debe aproximar  $U$  y  $\frac{\partial U}{\partial x}$ , de tal forma se considera:

<b>Tipo de Aproximación</b>	
$\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x}$	Diferencia Centrada
$U = \frac{U_i^{n+1} + U_i^n}{2}$	Promedio Temporal

Tabla 7: Aproximación de la derivada y la función.

Una vez aproximada la función y su derivada se procede a ajustar las condiciones de frontera, es decir:

Para  $aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0$ , ( $i = 0$ ) tenemos:

$$a \left( \frac{U_0^{n+1} - U_0^n}{2} \right) + b \left( \frac{U_1^{(*)} - U_{-1}^{(*)}}{2\Delta x} \right) \Big|_{x=0} = 0$$

$$\iff \boxed{U_{-1}^{(*)} = U_1^{(*)} + \frac{a\Delta x}{b} (U_0^{n+1} - U_0^n)}$$

Luego, la ecuación (32) se transforma en:

$$\left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av\alpha\Delta t}{2b} \right) U_0^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_1^{n+1} =$$

$$\left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} + \frac{av\alpha\Delta t}{2b} \right) U_0^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_1^n + \frac{\Delta t}{2} f_1.$$

Análogamente ocurre para  $aU + b\frac{\partial U}{\partial x}\Big|_{x=L} = 0$  con  $i = m$ :

$$a\left(\frac{U_m^{n+1} - U_m^n}{2}\right) - b\left(\frac{U_{m+1}^{(*)} - U_{m-1}^{(*)}}{2\Delta x}\right)\Big|_{x=L} = 0$$

$$\iff \boxed{U_{m+1}^{(*)} = U_{m+1}^{(*)} + \frac{a\Delta x}{b}(U_m^{n+1} - U_m^n)}$$

Finalmente, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned} &\left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} + \frac{av\alpha\Delta t}{2b}\right)U_m^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right)U_{m-1}^{n+1} = \\ &\left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av\alpha\Delta t}{2b}\right)U_m^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right)U_{m-1}^n + \frac{\Delta t}{2}f_m. \end{aligned}$$

### Condición de frontera Robin no homogénea

Consideramos el problema con valores iniciales (31) y la condición de frontera tipo Robin no homogénea, la cual establece:

$$aU + b\frac{\partial U}{\partial x}\Big|_{\partial\Omega} = g(x, t), \forall t \in (0, T], a, b \in \mathbb{R}$$

Para  $aU + b\frac{\partial U}{\partial x}\Big|_{x=0} = g(0, t)$ , ( $i = 0$ ) tenemos:

$$a\left(\frac{U_0^{n+1} - U_0^n}{2}\right) + b\left(\frac{U_1^{(*)} - U_{-1}^{(*)}}{2\Delta x}\right)\Big|_{x=0} = g(0, t_*)$$

$$\iff \boxed{U_{-1}^{(*)} = U_1^{(*)} + \frac{a}{b}(U_0^{n+1} - U_0^n) - \frac{2\Delta x g(0, t_*)}{b}}$$

Luego, la ecuación (32) se transforma en:

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av\alpha\Delta t}{2b}\right) U_0^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_1^{n+1} = \\ & \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} + \frac{av\alpha\Delta t}{2b}\right) U_0^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_1^n + \\ & \left(-\frac{\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{v\Delta t}{2b}\right) (g(0, t_n) + g(0, t_{n+1})) + \frac{\Delta t}{2} f_1. \end{aligned}$$

Análogamente ocurre para  $aU + b\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x=L} = g(L, t)$  ( $i = m$ ):

$$\begin{aligned} & a \left( \frac{U_m^{n+1} - U_m^n}{2} \right) - b \left( \frac{U_{m+1}^{(*)} - U_{m-1}^{(*)}}{2\Delta x} \right) \Big|_{x=L} = g(L, t_*) \\ & \iff \boxed{U_{m+1}^{(*)} = U_{m-1}^{(*)} + \frac{a\Delta x}{b} (U_m^{n+1} - U_m^n) - \frac{2\Delta x}{b} g(L, t_*)} \end{aligned}$$

Finalmente, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} + \frac{av\alpha\Delta t}{4b}\right) U_m^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1}^{n+1} = \\ & \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av\alpha\Delta t}{4b}\right) U_m^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1}^n + \\ & \left(-\frac{\alpha\Delta t}{b\Delta x} + \frac{v\Delta t}{2b}\right) (g(L, t_n) + g(L, t_{n+1})) + \frac{\Delta t}{2} f_m. \end{aligned}$$

### 2.6.2. Caso Bidimensional

Como se estableció anteriormente, la ecuación de difusión se puede representar en diferentes sistemas coordenados y para la ecuación en **coordenadas cartesianas**, el modelo propuesto en estas circunstancias es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) + v_x \frac{\partial U}{\partial x} + v_y \frac{\partial U}{\partial y} + \sigma U = f, \\ \text{para } (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, t \in (0, T] \\ U(x, y, 0) = U_0(x, y). \end{array} \right. \quad (33)$$

donde  $U \equiv U(x, y, t)$  es la concentración de contaminante;  $\alpha$  es la difusividad,  $\mathbf{v} = \langle v_x, v_y \rangle$  es el vector velocidad,  $\sigma$  es la tasa de degradación del contaminante,  $f$  una fuente contaminante y  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  un dominio limitado (rectangular). Además,  $U_0 \equiv U_0(x, y)$  una función inicial que caracteriza la distribución inicial de contaminante.

Para representar la ecuación (3.2) en diferencias finitas, en este caso se usa la notación  $U_{i,j}^n$  para representar a  $U(x_i, y_j, t_n)$  donde  $i$  y  $j$  representan las variables espaciales y  $n$  la variable temporal. Además se deben considerar las aproximaciones de  $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ ,  $\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}$  como diferencias centradas de segundo orden junto con las aproximaciones de las derivadas anteriores. Es decir:

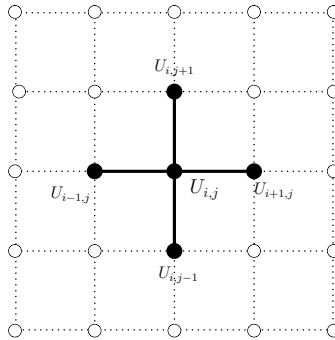


Figura 12: Malla de la discretización para el dominio bidimensional en los nodos internos. *Elaboración propia.*

Finalmente, la ecuación en diferencias finitas para el sistema (3.2) está representada por:

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{i,j-1}^{n+1} \\
& + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{i,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{i,j+1}^{n+1} \\
& + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,j}^{n+1} = \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,j}^n \\
& + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{i,j-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{i,j}^n \\
& + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{i,j+1}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,j}.
\end{aligned} \tag{34}$$

con  $i = , 1, 2, \dots, m - 1, .$  y  $j = , 1, 2, \dots, l - 1, .$

Como podemos observar en la Figura 12, para establecer las condiciones de frontera se debe considerar tanto los bordes derecho e izquierdo como bordes inferior y superior. A su vez en cada una de sus bordes pueden ir condiciones de frontera diferentes, en este caso se ilustrará con la condición de frontera tipo Neumann homogénea y en particular se considerará el dominio  $\Omega = [0, H] \times [0, L]$ . En este caso, la discretización espacial del dominio rectangular está dada por  $\Omega = [0, H] \times [0, L]$ , con  $x_0 < x_1 < \dots < x_h$ ,  $y_0 < y_1 < \dots < y_l$ , usando  $\Delta x$  para simbolizar el tamaño de paso al dividir el intervalo  $[0, h]$  en  $h$  subintervalos de igual longitud, es decir,  $\Delta x = \frac{x_h - x_0}{h}$  y así mismo  $\Delta y$  simboliza el tamaño de paso al dividir el intervalo  $[0, L]$  en  $l$  subintervalos de igual longitud, es decir,  $\Delta y = \frac{y_l - y_0}{l}$ . Teniendo en cuenta que la notación  $U_{i,j}^n$  representa  $U(x_i, y_j, t_n)$ , para que el sistema de índices sea consistente con la matriz que representa el sistema:  $i$  es el índice de las columnas que va desde 0 hasta  $h$  y  $j$  es el índice para las filas que va desde 0 hasta  $l$ . Adicionalmente, los vértices que genera la partición del rectángulo se enumeran partiendo desde el punto  $(0, 0)$  hasta el punto  $(x_h, y_l)$ , siguiendo la dirección de los ejes coordenados como se aprecia en la Figura 13.

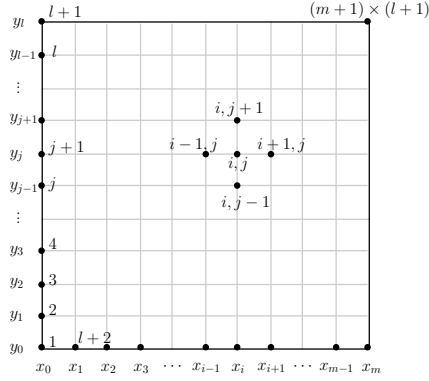


Figura 13: Discretización espacial del rectángulo  $\Omega = [0, H] \times [0, L]$ . *Elaboración propia.*

### Neumann homogénea

Para implementar la condición de frontera Neumann homogénea en la ecuación (34), se considera la partición del dominio, tanto en los bordes **derecho** e **izquierdo** como en los bordes **inferior** y **superior**, de manera análoga al caso unidimensional: teniendo en cuenta la discretización espacial denotada por  $\Delta x$  (superior e inferior) y  $\Delta y$  (derecho e izquierdo) y para la discretización temporal por  $\Delta t$ . Ver Figura 11, entonces:

**Borde Izquierdo.**  $U(x, y, t) = U(0, y, t)$

Para  $\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{(x,y)=(0,y_j)} = 0$ , ( $i = 0$  y  $j$  variando) tenemos:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{(x,y)=(0,y_j)} \iff \frac{U_{1,j}^{(*)} - U_{-1,j}^{(*)}}{2\Delta x} = 0$$

$$\iff \boxed{U_{1,j}^{(*)} = U_{-1,j}^{(*)}}$$

Luego, la ecuación (34) se transforma en:

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{1,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{0,j-1}^{n+1} \\
& + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_{0,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{0,j+1}^{n+1} \\
& = \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{1,j}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{0,j-1}^n \\
& + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_{0,j}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{0,j+1}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{0,j}.
\end{aligned}$$

**Borde Derecho.**  $U(x, y, t) = U(H, y, t)$

Para  $\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{(x,y)=(H,y_j)} = 0$ , ( $i = m$  y  $j$  variando) tenemos:

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{(x,y)=(H,y_j)} = 0 & \iff \frac{U_{m+1,j}^{(*)} - U_{m-1,j}^{(*)}}{2\Delta x} = 0 \\
& \iff \boxed{U_{m+1,j}^{(*)} = U_{m-1,j}^{(*)}}
\end{aligned}$$

Luego, la ecuación (34) se transforma en:

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j-1}^{n+1} \\
& + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_{m,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j+1}^{n+1} \\
& = \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1,j}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j-1}^n \\
& + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2}\right) U_{m,j}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j+1}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{m,j}.
\end{aligned}$$



**Borde Inferior.**  $U(x, y, t) = U(x, 0, t)$

Para  $\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{(x,y)=(x_i,0)} = 0$  ( $i$  variando y  $j = 0$ ) tenemos:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{(x,y)=(x_i,0)} = 0 \iff \frac{U_{i,j+1}^{(*)} - U_{i,j-1}^{(*)}}{2\Delta y} = 0$$

$$\iff \boxed{U_{i,1}^{(*)} = U_{i,-1}^{(*)}}$$

Luego, la ecuación (34) se transforma en:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,0}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,-1}^{n+1} \\ & + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{i,0}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,0}^{n+1} \\ & = \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,0}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,-1}^n \\ & + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{i,0}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,0}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,0}. \end{aligned}$$

**Borde Superior.**  $U(x, y, t) = U(x, L, t)$

Para  $\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{(x,y)=(x_i,L)} = 0$ , ( $i$  variando y  $j = l$ ) tenemos:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{(x,y)=(x_i,L)} = 0 \iff \frac{U_{i,j+1}^{(*)} - U_{i,j-1}^{(*)}}{2\Delta y} = 0$$

$$\iff \boxed{U_{i,l+1}^{(*)} = U_{i,l-1}^{(*)}}$$

Luego, la ecuación (34) se transforma en:

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,l}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,l-1}^{n+1} \\
& + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{i,l}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,l}^{n+1} \\
& = \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,l}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,l-1}^n \\
& + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{i,l}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,l}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,l}.
\end{aligned}$$

Como caso particular se van a ilustrar para el dominio rectangular  $\Omega$  las condiciones de frontera tipo Neumann homogénea en los bordes **derecho** e **izquierdo**, para el borde **superior** una condición de frontera tipo Robin no homogénea, finalmente en el borde **inferior** una condición tipo Robin homogénea.

#### Tipo Neumann homogénea (Borde Derecho)

$$U(x, y, t) = U(H, y, t)$$

Para  $\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{(x,y)=(H,y_j)} = g(x, y, t)$ , ( $i = m$  y  $j$  variando) tenemos:

$$\boxed{U_{m+1,j}^{(*)} = U_{m-1,j}^{(*)} + 2\Delta x g(H, y_j, t_*)}$$

Luego, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_{m-1,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{m,j-1}^{n+1} \\
& + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{m,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{m,j+1}^{n+1} \\
& = \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_{m-1,j}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{m,j-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{m,j}^n \\
& + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{m,j+1}^n + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x} - \frac{v_x\Delta t}{4} \right) (g(H, y_j, t_n) + g(H, y_j, t_{n+1})) + \frac{\Delta t}{2} f_{m,j}.
\end{aligned}$$

### Tipo Neumann homogénea (Borde izquierdo)

Teniendo en cuenta la ecuación (34) y la condición de frontera de la Tabla 4 obtenemos.

$$U(x, y, t) = U(0, y, t)$$

Para  $\left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{(x,y)=(0,y_j)} = g(x, y, t)$ , ( $i = 0$  y  $j$  variando) tenemos:

$$\boxed{U_{-1,j}^{(*)} = U_{1,j}^{(*)} - 2\Delta x g(0, y_j, t_*)}$$

Luego, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_{1,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{0,j-1}^{n+1} \\ & + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{0,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{0,j+1}^{n+1} \\ & = \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_{1,j}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{0,j-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} \right) U_{0,j}^n \\ & + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{0,j+1}^n + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x} - \frac{v_x\Delta t}{4} \right) (g(0, y_j, t_n) + g(0, y_j, t_{n+1})) + \frac{\Delta t}{2} f_{0,j}. \end{aligned}$$

### Tipo Robin no homogénea (Borde Superior)

Para la condición de frontera tipo Robin no homogénea, la cual establece:

$$aU + b \left. \frac{\partial U}{\partial \Omega} \right|_{\partial \eta} = g(x, y, t), \quad \forall t \in (0, T], \quad a, b \in \mathbb{R}$$

$$U(x, y, t) = U(x, L, t)$$

Para  $\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{(x,y)=(x_i,L)} = g(x, L, t)$ , ( $i$  variando y  $j = l$ ) tenemos:

$$a \left( \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{2} \right) - b \left( \frac{U_{i+1,j}^{(*)} - U_{i-1,j}^{(*)}}{2\Delta y} \right) \Big|_{(x,y)=(x_i,L)} = g(x_i, L, t_*)$$

$$\Leftrightarrow \boxed{U_{i,l+1}^{(*)} = U_{i,l-1}^{(*)} - \frac{2\Delta y g(x_i, L, t_*)}{b} + \frac{a\Delta y}{b} (U_{i,l}^{n+1} - U_{i,l}^n)}$$

Luego, la ecuación (34) se transforma en:

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,l}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,l-1}^{n+1} \\
& + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,l}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,l}^{n+1} = \\
& \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,l}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,l-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} + \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,l}^n + \\
& \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,l}^n + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y} - \frac{v_y\Delta t}{4} \right) \left( \frac{g(x_i, L, t_n) + g(x_i, L, t_{n+1})}{b} \right) + \frac{\Delta t}{2} f_{i,l}.
\end{aligned}$$

### Tipo Robin homogénea (Borde Inferior)

Para la condición de frontera tipo Robin homogénea:

$$aU + b \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{\partial\eta} = 0, \text{ para todo } t \in (0, T], a, b \in \mathbb{R}$$

$$U(x, y, t) = U(x, 0, t)$$

Para  $\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{(x,y)=(x_i,0)} = 0$ , ( $i$  variando y  $j = 0$ ) tenemos:

$$a \left( \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{2} \right) + b \left( \frac{U_{i+1,j}^{(*)} - U_{i-1,j}^{(*)}}{2\Delta y} \right) \Big|_{(x,y)=(x_i,0)}$$

$$\iff \boxed{U_{i,-1}^{(*)} = U_{i,1}^{(*)} + \frac{a\Delta y}{b} (U_{i,0}^{n+1} - U_{i,0}^n)}$$

Luego, la ecuación (34) se transforma en:

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,0}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,-1}^{n+1} \\
& + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,0}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,0}^{n+1} \\
& = \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,0}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,-1}^n \\
& + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,0}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,0}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,0}.
\end{aligned}$$

## 2.7. Algoritmo de Resolución

Cómo se estableció en la sección 2.5.4, se trabajó con un problema de ecuaciones diferenciales parciales y al implementar las diferencias finitas se transformó en un sistema algebraico de la forma  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ . Por otro lado dependiendo de la dimensión del problema, esta matriz puede ser tridiagonal, pentadiagonal o heptadiagonal, para una, dos y tres dimensiones respectivamente.

El método a utilizar para resolver el sistema de ecuaciones  $\mathbb{M}\mathbf{C}^{(n+1)} = \mathbb{N}\mathbf{C}^{(n)} + \mathbf{f}$  será un método iterativo para la variable  $n$  y cada uno de los sistemas algebraicos se resuelven mediante de la factorización  $L \cdot U$ , debido a su utilidad para resolver problemas que involucran un número grande de variables y como su nombre lo destaca, se emplean iteraciones para aproximar la solución.

Finalmente el sistema algebraico resultante al implementar las diferencias finitas en la ecuación de difusión-advección-reacción tiene la forma  $\mathbb{M}\mathbf{C}^{(n+1)} = \mathbb{N}\mathbf{C}^{(n)} + \mathbf{f}$ , que para cada instante del tiempo, presenta la siguiente estructura:

$$\text{Para } n = 0, \mathbb{M}\mathbf{U}^{(1)} = \mathbb{N}\mathbf{U}^{(0)} + \mathbf{f}, \text{ donde } \mathbf{U}^{(0)} = U_0(x).$$

$$\text{Para } n = 1, \mathbb{M}\mathbf{U}^{(2)} = \mathbb{N}\mathbf{U}^{(1)} + \mathbf{f}.$$

⋮

$$\text{Para } n = n_{t-1}, \mathbb{M}\mathbf{U}^{(n_t)} = \mathbb{N}\mathbf{U}^{(n_{t-1})} + \mathbf{f}.$$

### 3. Simulaciones Numéricas

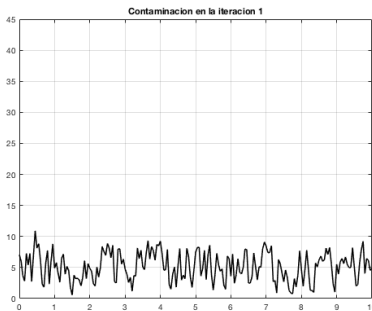
#### 3.1. Problema con valores en la frontera tipo Neumann Homogénea Unidimensional

Consideremos el siguiente problema con valores iniciales y de frontera:

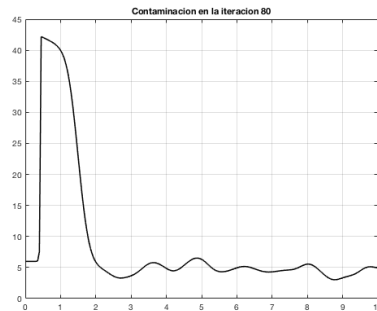
$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + v \frac{\partial C}{\partial x} + \sigma C = f, & x \in (0, L), t \in (0, T] \\ \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 = \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=L}, & \text{para todo } t \in (0, T] \\ C(x, 0) = C_0(x) \end{cases} \quad (35)$$

donde  $C \equiv C(x, t)$  es la concentración de contaminante;  $\alpha$  es la difusividad,  $v \frac{\partial C}{\partial x}$  es el transporte advectivo,  $\sigma$  es la tasa de degradación del contaminante y  $f$  una fuente contaminante. Además,  $C_0 \equiv C_0(x)$  representa una función inicial que caracteriza la distribución inicial de contaminante.

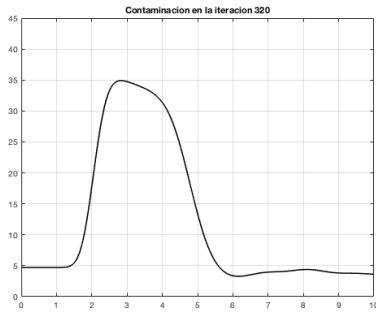
Como ilustración del proceso numérico, se considera el problema unidimensional (35) considerando una fuente de contaminación puntual que actúa de forma parcial en el tiempo, sobre un cuerpo de agua inicialmente con agentes contaminantes (generada alenatoriamente), es decir,  $C_0(x) = 0$ . Los demás valores de los parámetros están dados por:  $L = 10$ ,  $T = 300$ ,  $\alpha = 7.5 \times 10^{-4}$ ,  $v = 2.75 \times 10^{-2}$  y  $\sigma = 2.0 \times 10^{-3}$ . Para la discretización, se utilizan  $\Delta x = \frac{1}{20}$  y  $\Delta t = \frac{1}{2}$ . Los resultados en distintos instantes de tiempo se representan en la siguiente figura.



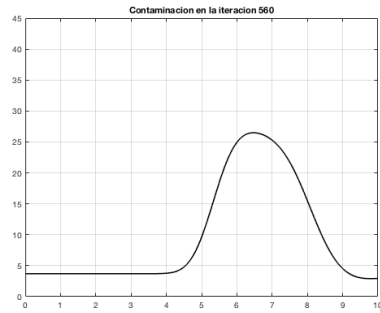
(a)  $it = 1$ .



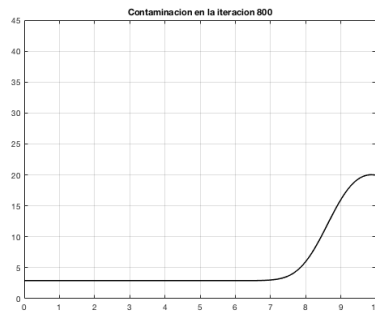
(b)  $it = 80$ .



(a)  $it = 320$ .



(b)  $it = 560$ .



(c)  $it = 800$ .

Figura 15: Simulación correspondiente a la solución numérica con condiciones de Neumann homogénea. *Matlab*.

En la Figura 15 se aprecian las iteraciones de la solución numérica con condición de frontera tipo Neumann homogénea, donde se refleja el proceso de difusión, advección y reacción, de esta forma en la primera iteración podemos observar una condición inicial (aleatoria). En la iteración 80 se percibe el efecto de la fuente contaminante (“cresta” de la gráfica) y a su vez se observa la regularización de la condición inicial. En la iteración 320 se puede evidenciar el proceso difusivo lo cual se refleja con la ampliación de la “cresta”, el cual se encarga de dispersar el contaminante y el proceso advectivo donde al transcurrir el tiempo la “cresta” tiene un movimiento horizontal. En la iteración 560 se observa que la “cresta” de la función va disminuyendo debido al proceso de reacción (degradación). En la iteración 800 el proceso se homogeniza.



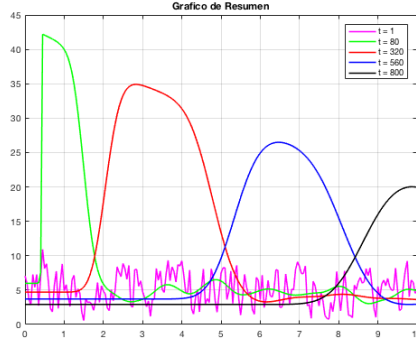


Figura 16: Evolución del contaminante en 800 iteraciones: Caso Unidimensional. *Matlab.*

En la gráfica resumen Figura 16 se pueden apreciar los distintos fenómenos de la ecuación, para el caso difusivo se percibe en el ancho de la onda, la degradación se aprecia en la disminución en el punto máximo de las ondas y el hecho que con el transcurrir del tiempo dichas ondas se muevan hacia la derecha es generado por el transporte advectivo.

### 3.2. Problema con valores en la frontera tipo Neumann Homogénea Bidimensional

Para ilustrar el proceso numérico en el problema bidimensional se considera el problema con valores iniciales y de frontera:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C}{\partial t} - \alpha \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + \sigma U = f, \\ \left. \frac{\partial C}{\partial \eta} \right|_{\partial \Omega} = 0 \text{ para } (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, t \in (0, T] \\ C(x, y, 0) = C_0(x, y). \end{array} \right.$$

donde  $C \equiv C(x, y, t)$  es la concentración de contaminante;  $\alpha$  es la difusividad,  $\mathbf{v} = \langle v_x, v_y \rangle$  es el vector velocidad,  $\sigma$  es la tasa de degradación del contaminante,  $f$  una fuente contaminante y  $\frac{\partial C}{\partial \eta}$  representa la derivada normal exterior a la frontera del rectángulo  $\partial \Omega$  donde  $\Omega = [0, H] \times [0, L]$ . Además,  $C_0 \equiv C_0(x, y)$  una función inicial que caracteriza la distribución inicial de contaminante.

Como ilustración del proceso numérico, se considera el problema bidimensional (3.2) considerando una fuente de contaminación puntual que actúa de forma parcial en el tiempo, sobre un cuerpo de agua inicialmente libre de agentes contaminantes, es decir,  $C_0(x, y) = 0$ . Los demás valores de los parámetros están dados por:  $L = 2.5$ ,  $H = 2.0$ ,  $T = 30$ ,  $\alpha = 7.5 \times 10^{-4}$ ,  $u = 2.15 \times 10^{-2}$ ,  $v = 5.5 \times 10^{-2}$  y  $\sigma = 2.0 \times 10^{-3}$ . Para la discretización, se utilizan  $\Delta x = \frac{1}{20}$ ,  $\Delta y = \frac{1}{40}$  y  $\Delta t = \frac{1}{2}$ . Los resultados en distintos instantes de tiempo se representan a continuación:

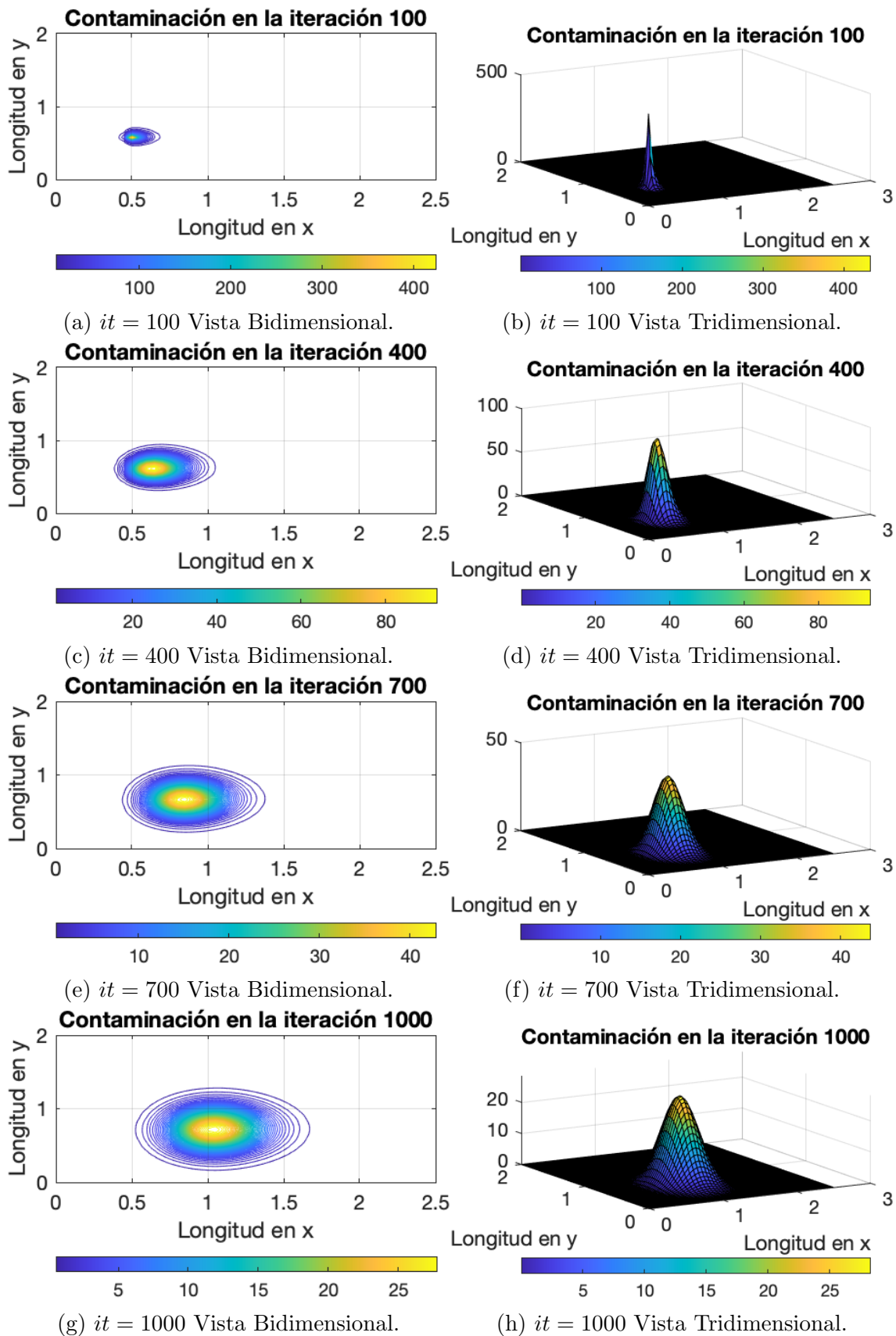


Figura 17: Simulación correspondiente a la solución numérica con condiciones de Neumann homogénea. *Matlab*. 56

En la Figura 17 se muestran los resultados de la simulación de un contaminante durante un mes, para ello se trabajó con mil iteraciones donde se dividieron en cuatro partes que determinaron los siguientes porcentajes: 10 %, 40 %, 70 % y 100 %. Al lado izquierdo de la figura se observan las curvas de nivel de la solución numérica bidimensional y al lado derecho, la solución numérica con vista tridimensional que hacen parte de las superficies con condición de frontera tipo Neumann homogénea. De esta manera, como resultado de la simulación para 100 iteraciones, se ha obtenido como respuesta la figura (a), en donde se evidencia la fuente puntual del contaminante que esta localizada en la coordenada del plano cartesiano  $(0, 5, 0, 6)$  y al momento de transcurrir las 250 iteraciones, la fuente puntual se hace cero, esto significa que transcurre solo hasta el 25 % de la simulación la cual corresponde a la segunda semana del mes.

En las gráficas de vista bidimensional al momento de transcurrir el tiempo se observa el proceso difusivo, en los contornos de la circunferencia, debido a que el radio de cada uno de ellas al momento de transcurrir el tiempo es mayor, ahora al 40 % de la iteración, en la escala de colores, se percibe que al momento de transcurrir 12 días, (proporción en días, ya que la simulación del contaminante esta por un mes) la fuente del contaminante empieza de color amarillo y se torna de color blanco, teniendo un desplazamiento hacia la derecha haciendo referencia la transporte que es la advección, finalmente el proceso reacción se puede observar en las gráficas del lado derecho, de vista tridimensional ya que la escala empieza a disminuir.

## 4. Conclusiones

En este apartado se presentan algunas de las conclusiones que permiten verificar el comportamiento del método de diferencias finitas en coordenadas rectangulares para ecuaciones unidimensionales y bidimensionales.

- Se utilizó el método de diferencias finitas para representar la ecuación de difusión–advección–reacción en coordenadas rectangulares y coordenadas polares.
- Se creó un algoritmo en MATLAB con el cual se logró aproximar numéricamente la solución de la ecuación de difusión en coordenadas rectangulares, para una y dos dimensiones.
- Se presentó la construcción y adaptación de un modelo matemático, resaltando la importancia de métodos numéricos para las ecuaciones diferenciales para su resolución. Esta presentación en el Workshop EMEM 2017 y 2019, realizado en la Universidad del Quindío.
- Se generaron simulaciones donde se puede observar la aproximación numérica de la ecuación de difusión–advección–reacción, con condiciones de frontera tipo Neumann homogénea unidimensional y bidimensional validando, la aproximación con su respectiva solución analítica.

## **5. Anexos**

### **5.1. Objetivos**

#### **5.1.1. General**

Implementar numéricamente la solución de la Ecuación de Difusión en una y dos dimensiones por medio de diferencias finitas.

#### **5.1.2. Objetivos Específicos**

- Representar la Ecuación de Difusión en coordenadas rectangulares y coordenadas polares.
- Discretizar la Ecuación de Difusión por medio de diferencias finitas en coordenadas rectangulares y coordenadas polares.
- Implementar un algoritmo computacional (MATLAB o Python) para resolver la Ecuación de Difusión en coordenadas rectangulares en una y dos dimensiones.

## 5.2. Código de resolución

### Neumann no homogénea Unidimensional

El siguiente código resuelve numéricamente el problema con valores iniciales y de frontera presentado en la ecuación (31) con condición de frontera tipo Neumann no homogénea.

```
1  % Diferencias Finitas (evolutiva) para el sistema:
2  % Ecuacion:  C_t - alf*C_xx + v*C_x + sig*C = f con
3  % Condiciones de frontera:  C'(0,t) = 0 y C'(L,t) = 0
4  % Condicion inicial:  C(x,0) = g : Aleatoria
5  % Fuente puntual:  f = K (x=h) y 0 (x dif h)
6  % Coordenadas Rectangulares
7
8
9  %% Limpiar...
10 clf
11 clc
12
13 %% Parametros
14
15 alf = 0.00075;  % Coeficiente de dispersion
16 v = 0.0275;  % Valor de la velocidad
17 sig = 0.002;  % Tasa de degradacion
18 f = 1.0;  % Valor de la fuente puntual
19
20 %% Datos del dominio
21
22 L = 10.0;  % Longitud del Intervalo
23
24 %% Datos Temporales
25
26 tf = 400;  % Tiempo Final
27
28 %% Valores para la discretizacion
29
30 nx = 200;  % Numero de subintervalos en x
31 dx = L / nx;  % Incremento en x
32 npt = 800;  % Numero de pasos en el tiempo
33 dt = tf / npt;  % Incremento Temporal
34
35 ni = nx + 1;  % Numero de Incognitas
36
37 % Condicion Inicial
38 Cz = 10*rand(ni,1);  % Datos aleatorios
39 % Vector con la condici?n inicial fija
40 load -ascii matrizcz.txt
```

```

41 Cz = matrizcz;
42
43
44 % Valores para los calculos
45
46
47 adtx = (alf*dt)/(2*dx*dx);
48 vdtx = (v*dt)/(4*dx);
49 st = (sig*dt)/2;
50
51 dpi = 1 + 2*adtx + st; %Diagonal Principal Izq.
52 dpd = 1 - 2*adtx - st; %Diagonal Principal Der.
53 dssi = -adtx + vdtx; %Diagonal Secun Sup Izq.
54 dssd = adtx - vdtx; %Diagonal Secun Sup Der.
55 dsii = -adtx - vdtx; %Diagonal Secun Inf Izq.
56 dsid = adtx + vdtx; %Diagonal Secun Inf Der.
57
58 % Termino independiente
59 b = zeros(ni,1); % Vector nulo
60
61 % Valor de la fuente puntual
62 indf = floor(0.6/dx);
63 b(indf-1) = dt*f/dx;
64
65 %% Creacion de la matriz de coeficientes
66
67 mi = zeros(ni,ni); % Matriz nula
68 md = zeros(ni,ni); % Matriz nula
69
70 %% Calculo del numero de Peclet
71 pe = v*dx/alf;
72 sprintf('El numero de Peclet es %4.2f',pe)
73 pause(1);
74
75 %% Llenado de las matrices
76
77 for i = 1:ni-1
78     mi(i,i) = dpi;
79     md(i,i) = dpd;
80     mi(i,i+1) = dssi;
81     md(i,i+1) = dssd;
82     mi(i+1,i) = dsii;
83     md(i+1,i) = dsid;
84 end
85
86 % Ajuste de la diagonal principal
87 mi(ni,ni) = dpi;

```

```

88 md(ni , ni) = dpd;
89
90 %% Neumann Homogenea %%
91
92 % Ajuste para la condicion de frontera  $c'(0, t) = 0$ 
93 mi(1,2) = -2*adtx;
94 md(1,2) = 2*adtx;
95
96 % Ajuste para la condicion de frontera  $c'(L, t) = 0$ 
97 mi(ni , ni-1) = -2*adtx;
98 md(ni , ni-1) = 2*adtx;
99
100
101 %% Datos para soluciones puntuales
102
103 X = 0:dx:L;
104 suma = 0;
105 CC = zeros(ni ,5);
106 j = 1;
107 it1 = floor(1/10*npt); it2 = floor(4/10*npt);
108 it3 = floor(7/10*npt); it4 = floor(10/10*npt);
109
110
111 %% Solucion Iterativa
112
113 for i = 1:npt
114     C = mi\(md*Cz+b);
115     maxC = max(C);
116     subplot(1,2,1)
117     plot(X,C, 'k', 'LineWidth', 1.5);
118     grid on, axis([0 L 0 maxC + maxC/10])
119     title(sprintf('Contaminacion en la iteracion %a', i))
120     pause(0.002)
121     Cz = C;
122     if (i == floor(npt/4)) %Fuente contaminante parcial
123         b(indf-1) = 0;
124     else
125     end
126
127     if (i == 1 || i == it1 || i == it2 || i == it3 || i == it4)
128         CC(:,j) = C;
129         j = j + 1;
130
131     else
132     end
133 end
134

```



```

135 subplot(1,2,2)
136 plot(X,CC(:,1), 'm',X,CC(:,2), 'g',X,CC(:,3), 'r',X,CC(:,4), 'b',X,CC(:,5), 'k', 'Lin
137 grid on, title(sprintf(' Grafico de Resumen '))
138 legend('t=1', 't=80', 't=320', 't=560', 't=800')

```

El código anterior servirá de base para implementar las otras condiciones de frontera unidimensionales, ya que al momento de implementar las otras condiciones, sólo se debe ajustar la frontera.

### Neumann homogénea Bidimensional

El siguiente código resuelve numéricamente el problema con valores iniciales y de frontera presentado en la ecuación (3.2) con condición de frontera tipo Neumann homogénea.

```

1 %%
2 % Diferencias Finitas (evolutiva) para el sistema:
3 % Ecuación:
4 C_t - alf*(C_xx + C_yy) + u*C_x + v*C_y + sig*C = f con
5 % Condiciones de frontera de Neumann:
6 C_x(0,y,t) = 0, C_x(L,y,t) = 0
7 %
8 C_y(x,0,t) = 0 y C_y(x,H,t) = 0
9 % Condición inicial: C(x,y,0) = 0
10 % Fuente puntual: f(x=h,y=k) y 0 (x dif h,y dif k)
11 % Coordenadas Rectangulares
12 %%
13
14 clf
15 clc
16
17 %% Parametros
18
19 alf = 0.00075; % Coeficiente de dispersin
20 u = 0.0115; % Valor de la velocidad en direccin a x
21 v = 0.0055; % Valor de la velocidad en direccin a y
22 sig = 0.002; % Tasa de degradacin
23 f = 1; % Valor de la fuente puntual
24
25 %% Datos del dominio
26
27 L = 2.5; % Longitud en x
28 H = 2.0; % Longitud en y
29
30 %% Datos Temporales
31
32 tf = 300.0; % Tiempo Final
33
34 %% Valores para la discretizacin

```

```

32
33 nx = 50; % Nmero de subintervalos en x
34 ny = 80; % Nmero de subintervalos en x
35 dx = L / nx; % Incremento en x
36 dy = H / ny; % Incremento en y
37 npt = 600; % Nmero de pasos en el tiempo
38 dt = tf / npt; % Incremento Temporal
39
40 nnx = nx + 1; % Nmero de Incgnitas en x
41 nny = ny + 1; % Nmero de Incgnitas en y
42
43 ni = nnx*nny; % Nmero de Incgnitas
44
45 %%%
46
47 %% Condicin Inicial
48 cz = zeros(ni,1);
49
50 %% Valores para los c lculos
51
52 adtx = (alf*dt)/(2*dx*dx);
53 adty = (alf*dt)/(2*dy*dy);
54 udtx = (u*dt)/(4*dx);
55 vdy = (v*dt)/(4*dy);
56 st = (sig*dt)/2;
57
58 dpi = 1 + 2*adtx + 2*adty + st; % Diagonal Principal Izq.
59 dpd = 1 - 2*adtx - 2*adty - st; % Diagonal Principal Der.
60 dssi = -adty + vdy; % Diagonal Secun Sup Izq.
61 dssd = adty - vdy; % Diagonal Secun Sup Der.
62 dsii = -adty - vdy; % Diagonal Secun Inf Izq.
63 dsid = adty + vdy; % Diagonal Secun Inf Der.
64 ddii = -adtx - udtx; % Diagonal Distante Inf Izq.
65 ddid = adtx + udtx; % Diagonal Distante Inf Der.
66 ddsi = -adtx + udtx; % Diagonal Distante Sup Izq.
67 ddsd = adtx - udtx; % Diagonal Distante Sup Der.
68
69 %% Trmino independiente
70 b = zeros(ni,1); % Vector nulo
71
72 %% Valor de la fuente puntual
73 indf = round(nny*nnx/5 + nny/10);
74 b(indf) = dt*f/(dx*dy);
75
76 %% Creacin de la matriz de coeficientes
77 mi = zeros(ni,ni); % Matriz nula
78 md = zeros(ni,ni); % Matriz nula

```

```

79
80 %% C lculo del nmero de P clet
81 pex = u*dx/alf;
82 pey = v*dy/alf;
83 sprintf ( 'Los nmeros de P clet son %4.2f y %4.2f ', pex , pey );
84 pause(1.0);
85
86 %% Llenado de las matrices
87 % Diagonal Principal
88 for i = 1:ni
89     mi(i , i) = dpi;
90     md(i , i) = dpd;
91 end
92
93 % Diagonales Secundarias
94 for i = 1:ni-1
95     mi(i , i+1) = dssi;
96     md(i , i+1) = dssd;
97     mi(i+1,i) = dsii;
98     md(i+1,i) = dsid;
99 end
100
101 % Diagonal Secundaria Distante
102 for i = 1:ni - nny
103     mi(i , i+nny) = ddsi;
104     md(i , i+nny) = ddsd;
105     mi(i+nny , i) = ddii;
106     md(i+nny , i) = ddid;
107 end
108
109 %% Ajustes para las condiciones de frontera
110
111 % Ajuste para la condicin de frontera  $c_x(0,y,t) = 0$  : Borde Izquierdo
112 for k = 1:nny
113     mi(k,k+nny) = -2*adtx;
114     md(k,k+nny) = 2*adtx;
115 end
116
117 mi(1,2) = -2*adtx;
118 md(1,2) = 2*adtx;
119
120 % Ajuste para la condicin de frontera  $c_x(L,y,t) = 0$  : Borde Derecho
121 for k=1:nny
122     ind = nx*nny + k;
123     mi(ind , ind-nny) = -2*adtx;
124     md(ind , ind-nny) = 2*adtx;
125 end

```

```

126
127 % Ajuste para la condicin de frontera c_y(x,0,t) = 0 : Borde Inferior
128 for k=2:nx
129     ind = k*nny + 1;
130     mi(ind , ind-1) = 0;
131     md(ind , ind-1) = 0;
132     mi(ind , ind+1) = -2*adty;
133     md(ind , ind+1) = 2*adty;
134 end
135
136 mi(1,2) = -2*adty;
137 md(1,2) = 2*adty;
138
139 % Ajuste para la condicin de frontera c_y(x,H,t) = 0 : Borde Superior
140 for k=2:nx
141     ind = k*nny;
142     mi(ind , ind-1) = -2*adty;
143     md(ind , ind-1) = 2*adty;
144     mi(ind , ind+1) = 0;
145     md(ind , ind+1) = 0;
146 end
147
148 mi(ni , ni-1) = -2*adty;
149 md(ni , ni-1) = 2*adty;
150
151 %% Ajustes para la grafica
152 X = 0:dx:L;
153 Y = 0:dy:H;
154 suma = 0;
155 CC = zeros(ni , 4);
156 j = 1;
157 itf = round(10/10*npt);
158 Mov(npt) = struct('cdata' , [], 'colormap' , []);
159
160 %% Resolucion sucesiva del sistema lineal
161 figure(1)
162 for i=1:npt
163     c = mi\(md*cz+b);
164     % c = round(c,6);
165     cmax = max(c);
166     % Ajuste para visualizar la solucin
167     verc = zeros(nny , nnx);
168     for jj = 1:nnx
169         for ii=1:nny
170             ind = (jj-1)*nny + ii;
171             verc(ii , jj) = c(ind);
172         end

```

```

173     end
174
175     %Grfica de la solucin
176     contour(X,Y,verc,50)
177     title(sprintf('Contaminacin mxima %5.3f, en la iteracin %d.',cmax,i));
178     xlabel('Longitud en x')
179     ylabel('Longitud en y')
180     grid on,
181     colorbar('southoutside')
182     caxis([0 600]);
183     drawnow
184     Mov(i) = getframe;
185     suma = sum(c);
186     pause(0.001)
187     cz = c;
188     if (i == round(npt/4))
189         b(indf) = 0;
190     else
191     end
192     if (i == round(npt/10) || i == round(4*npt/10) || i == round(7*npt/10) ||
193         CC(:,j) = c;
194         j = j+1;
195     else
196     end
197 end
198
199
200 %% Resumen del proceso
201 figure(2)
202 verc1 = zeros(nny,nnx);
203 verc2 = zeros(nny,nnx);
204 verc3 = zeros(nny,nnx);
205 verc4 = zeros(nny,nnx);
206 for jj = 1:nnx
207     for ii=1:nny
208         ind = (jj-1)*nny + ii;
209         verc1(ii,jj) = CC(ind,1);
210         verc2(ii,jj) = CC(ind,2);
211         verc3(ii,jj) = CC(ind,3);
212         verc4(ii,jj) = CC(ind,4);
213     end
214 end
215
216 subplot(2,2,1)
217 surf(X,Y,verc1)
218 view(-30,30)
219 title(sprintf('Contaminacin en la iteracin 150'));

```

```

220 xlabel('Longitud_en_x')
221 ylabel('Longitud_en_y')
222 grid on,
223 colorbar('southoutside')
224 subplot(2,2,2)
225 surf(X,Y,verc2)
226 view(-30,30)
227 title(sprintf('Contaminacin_en_la_iteracin_300'));
228 xlabel('Longitud_en_x')
229 ylabel('Longitud_en_y')
230 grid on,
231 colorbar('southoutside')
232 subplot(2,2,3)
233 surf(X,Y,verc3)
234 view(-30,30)
235 title(sprintf('Contaminacin_en_la_iteracin_450'));
236 xlabel('Longitud_en_x')
237 ylabel('Longitud_en_y')
238 grid on,
239 colorbar('southoutside')
240 subplot(2,2,4)
241 surf(X,Y,verc4)
242 view(-30,30)
243 title(sprintf('Contaminacin_en_la_iteracin_600'));
244 xlabel('Longitud_en_x')
245 ylabel('Longitud_en_y')
246 grid on,
247 colorbar('southoutside')
248
249
250 %% Video de la simulacin
251
252 %Nombre del video
253 myVideo = VideoWriter('Video2D.avi');
254
255 %Mtodo de Compresin
256 uncompressedVideo = VideoWriter('Video2D.avi', 'Uncompressed_AVI');
257
258 %Opciones de reproduccin
259 myVideo.FrameRate = 15; % Default 30
260 myVideo.Quality = 50; % Default 75
261
262 %Preparar el earchivo
263 open(myVideo);
264
265 %Grabar el archivo
266 %writeVideo(myVideo, Mov);

```

268 `close(myVideo);`

El código anterior servirá de base para implementar las otras condiciones de frontera unidimensionales, ya que al momento de implementar las otras condiciones, sólo se debe ajustar la frontera.

### Robin tipo homogénea bidimensional

Consideramos el problema con valores iniciales (34) y la condición de frontera tipo Robin homogénea, la cual establece:

$$aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{\partial\eta} = 0, \text{ para todo } t \in (0, T], a, b \in \mathbb{R}$$

El procedimiento para este caso es similar a la condición de frontera Neumann homogénea bidimensional, donde se discretiza la función  $g(x, y, t)$  y toma la forma  $g(x_i, y_j, t_n)$ . Finalmente, como se pudo observar en este caso se debe considerar los bordes izquierdos, derechos, superiores e inferiores. Entonces:

**Borde Izquierdo.**  $U(x, y, t) = U(0, y, t)$

Para  $aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{(x,y)=(0,y_i)} = 0$ , ( $i = 0$  y  $j$  variando) tenemos:

$$U_{-1,j}^{(*)} = U_{1,j}^{(*)} + \frac{a\Delta x}{b} (U_{0,j}^{n+1} - U_{0,j}^n)$$

Luego, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_{1,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{0,j-1}^{n+1} \\ & + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av_x\Delta t}{2b} \right) U_{0,j}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{0,j+1}^{n+1} \\ & = \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} \right) U_{1,j}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{0,j-1}^n \\ & + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av_x\Delta t}{2b} \right) U_{0,j}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y} \right) U_{0,j+1}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{0,j}. \end{aligned}$$

**Borde Derecho.**  $U(x, y, t) = U(H, y, t)$

Para  $aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{(x,y)=(H,y_j)} = 0$ , ( $i = m$  y  $j$  variando) tenemos:

$$U_{m+1,j}^{(*)} = \frac{a\Delta x}{b} (U_{m,j}^{n+1} - U_{m,j}^n) + U_{-1,j}^{(*)}$$

Luego, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j-1}^{n+1} \\ & + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} + \frac{av_x\Delta t}{2b}\right) U_{m,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j+1}^{n+1} \\ & = \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1,j}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j-1}^n \\ & + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av_x\Delta t}{2b}\right) U_{m,j}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j+1}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{m,j}. \end{aligned}$$

**Borde Inferior.**  $U(x, y, t) = U(x, 0, t)$

Para  $aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{(x,y)=(x_i,0)} = 0$ , ( $i$  variando y  $j = 0$ ) tenemos:

$$U_{i,-1}^{(*)} = U_{i,1}^{(*)} + \frac{a\Delta y}{b} (U_{i,0}^{n+1} - U_{i,0}^n)$$

Luego, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x}\right) U_{i-1,0}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y}\right) U_{i,-1}^{n+1} \\ & + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b}\right) U_{i,0}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x}\right) U_{i+1,0}^{n+1} \\ & = \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x}\right) U_{i-1,0}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y}\right) U_{i,-1}^n \\ & + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b}\right) U_{i,0}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x}\right) U_{i+1,0}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,0}. \end{aligned}$$



**Borde Superior.**  $U(x, y, t) = U(x, L, t)$

Para  $aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{(x,y)=(x_i,L)} = 0$ , ( $i$  variando y  $j = l$ ) tenemos:

$$U_{i,l+1}^{(*)} = U_{i,l-1}^{(*)} + \frac{a\Delta y}{b} (U_{i,l}^{n+1} - U_{i,l}^n)$$

Luego, la ecuación (34) en diferencias finitas se transforma en:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,l}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,l-1}^{n+1} \\ & + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,l}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,l}^{n+1} \\ & = \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,l}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,l-1}^n \\ & + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,l}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,l}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{i,l}. \end{aligned}$$

### Robin tipo no homogénea bidimensional

Consideramos el problema inicial (34) y la condición de frontera tipo Robin no homogénea, la cual establece:

$$aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{\partial\eta} = g(x, y, t), \forall t \in (0, T], a, b \in \mathbb{R}$$

El procedimiento para este caso es similar al homogéneo a diferencia que se tiene que discretizar la función  $g(x, y, t)$  donde toma la forma  $g(x_i, y_j, t_n)$ , así procedemos a establecer los valores en la frontera:

**Borde Izquierdo.**  $U(x, y, t) = U(0, y, t)$

Para  $aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{(x,y)=(0,y_j)} = g(0, y, t)$ , ( $i = 0$  y  $j$  variando) tenemos:

$$\boxed{U_{-1,j}^{(*)} = U_{1,j}^{(*)} - \frac{2\Delta x g(0, y_j, t_*)}{b} + \frac{a\Delta x}{b} (U_{0,j}^{n+1} - U_{0,j}^n)}$$

Luego, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{1,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{0,j-1}^{n+1} \\ & + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av_x\Delta t}{2b}\right) U_{0,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{0,j+1}^{n+1} = \\ & \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{1,j}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{0,j-1}^n + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av_x\Delta t}{2b}\right) U_{0,j}^n \\ & + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{0,j+1}^n + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x} - \frac{v_x\Delta t}{4}\right) \left(\frac{g(0, y_j, t_n) + g(0, y_j, t_{n+1})}{b}\right) + \frac{\Delta t}{2} f_{0,j}. \end{aligned}$$

**Borde Derecho.**  $U(x, y, t) = U(H, y, t)$

Para  $aU + b\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{(x,y)=(x_H,y_j)} = g(H, y, t)$ , ( $i = m$  y  $j$  variando) tenemos:

$$\Leftrightarrow \boxed{U_{m+1,j}^{(*)} = U_{m-1,j}^{(*)} - \frac{2\Delta x g(H, y_j, t_*)}{b} + \frac{a\Delta x}{b} (U_{m,j}^{n+1} - U_{m,j}^n)}$$

Luego, la ecuación resultante es::

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j-1}^{n+1} \\ & + \left(1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} + \frac{av_x\Delta t}{2b}\right) U_{m,j}^{n+1} + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j+1}^{n+1} \\ & = \left(\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x}\right) U_{m-1,j}^n + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} + \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j-1}^n + \left(1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta x} - \frac{av_x\Delta t}{2b}\right) U_{m,j}^n \\ & + \left(\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 y} - \frac{v_y\Delta t}{4\Delta y}\right) U_{m,j+1}^n + \left(-\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x} + \frac{v_x\Delta t}{4}\right) \left(\frac{g(H, y_j, t_n) + g(H, y_j, t_{n+1})}{b}\right) + \frac{\Delta t}{2} f_{m,j}. \end{aligned}$$

**Borde Inferior.**  $U(x, y, t) = U(x, 0, t)$

Para  $+b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{(x,y)=(x_i,0)} = g(x, y, t)$ , ( $i$  variando y  $j = 0$ ) tenemos:

$$\Leftrightarrow \boxed{U_{i,-1}^{(*)} = U_{i,1}^{(*)} + \frac{2\Delta y g(x_i, 0, t_*)}{b} + \frac{a\Delta y}{b} (U_{i,0}^{n+1} - U_{i,0}^n)}$$

Luego, la ecuación resultante es:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,0}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,-1}^{n+1} \\ & + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,0}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,0}^{n+1} = \\ & \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,0}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} + \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,0}^n \\ & + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,0}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y} + \frac{v_y\Delta t}{4} \right) \left( \frac{g(y_j, t_n) + g(y_j, t_{n+1})}{b} \right) + \frac{\Delta t}{2} f_{i,0}. \end{aligned}$$

**Borde Superior.**  $U(x, y, t) = U(x, L, t)$

Para  $aU + b \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{(x,y)=(x_i,L)} = g(x, L, t)$ , ( $i$  variando y  $j = l$ ) tenemos:

$$\Leftrightarrow \boxed{U_{i,l+1}^{(*)} = U_{i,l-1}^{(*)} - \frac{2\Delta y g(x_i, L, t_*)}{b} + \frac{a\Delta y}{b} (U_{i,l}^{n+1} - U_{i,l}^n)}$$

Luego, la ecuación (34) en diferencias finitas se transforma en:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,l}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,l-1}^{n+1} \\ & + \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} + \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} + \frac{\sigma\Delta t}{2} - \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} - \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,l}^{n+1} + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,l}^{n+1} = \\ & \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} + \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i-1,l}^n + \left( \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} \right) U_{i,l-1}^n + \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 x} - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta^2 y} - \frac{\sigma\Delta t}{2} + \frac{a\alpha\Delta t}{b\Delta y} + \frac{av_y\Delta t}{2b} \right) U_{i,l}^n \\ & + \left( \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta^2 x} - \frac{v_x\Delta t}{4\Delta x} \right) U_{i+1,l}^n + \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y} - \frac{v_y\Delta t}{4} \right) \left( \frac{g(x_i, L, t_n) + g(x_i, L, t_{n+1})}{b} \right) + \frac{\Delta t}{2} f_{i,l}. \end{aligned}$$

## Referencias

- [1] Carrillo, A. & Mendoza, O. (2015). *Introducción al Método de Diferencias Finitas y su Implementación Computacional*. Facultad de Ciencias, UNAM. Disponible en: <http://www.mmc.geofisica.unam.mx/acl/>
- [2] Crank, J. (1975). *The Mathematics of Diffusion*. Second Edition, Clarendon press-oxford.
- [3] Crank, J. & Nicolson, P. *A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type*. Proc.Camb. Phil. Soc. 43 (1): 50–67. 1947.
- [4] Edelstein–Keshet, L. (2005). *Mathematical Models in Biology*. SIAM New York.
- [5] Fick A. (1995.) On Liquid Diffusion, *Journal of Membrane Science*, 100, 13-38.
- [6] Incropera, F. P. & DeWitt, D. P. (1999). *Fundamentos de Transferencia de Calor*. Pearson Educación.
- [7] Lang, S. (1964) *Short Calculus The Original Edition of “A first Course in Calculus”*. Springer.
- [8] Lang, S.(1987) *Calculus of Several Variables*. Third Edition, Springer.
- [9] Ledesma, A. C. & Bernal, O. M. (2015). *Introducción al Método de Diferencias Finitas y su Implementación Computacional*. Facultad de Ciencias, UNAM.
- [10] Miyaoka, T. Y., Meyer, J. F. D. C. A., & SOUZA, J. (2017). *A General Boundary Condition with Linear Flux for Advection-Diffusion Models*. TEMA (São Carlos), 18(2), 253-272.
- [11] Murray, J.D. (2003). *Mathematical Biology*. II Spatial Models and Biomedical Applications. Springer–Verlag. Third Edition.
- [12] Thomas, J. W. (2013). *Numerical partial differential equations: finite difference methods (Vol. 22)*. Springer Science Business Media.
- [13] Narasimhan, T. N. (1999). *Fourier’s Heat Conduction Equation: History, Influence, and Connections*. Reviews of Geophysics 37(1), 151–172.
- [14] Okubo, A. & Levin, S. A. (2013). *Diffusion and ecological problems: modern perspectives (Vol. 14.)* Springer Science & Business Media.
- [15] Okun, L. B. (2009). *Energy and mass in relativity theory*. World Scientific.
- [16] Strikwerda, J.C (2004). *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. SIAM. Second Edition.
- [17] Vanegas Acosta, J.C. & Garzón-Alvarado, D.A. (2013) *Biological modelling and computational implementation using the finite elements method*. Computational & Applied Mathematics, 33(3), 621-640.