

Artículo publicado en el Repositorio Institucional del IMTA

<i>Título</i>	Cálculo de la dispersión longitudinal en corrientes.
<i>Autor / Adscripción</i>	Luis Francisco León Vizcaíno Instituto Mexicano de Tecnología del Agua
<i>Publicación</i>	Ingeniería Hidráulica en México, (2): 20-25
<i>Fecha de publicación</i>	1990
<i>Resumen</i>	Ante el aumento de los problemas por contaminación, se ha despertado un interés creciente dentro de la comunidad hidráulica por analizar y predecir la evolución de los contaminantes que son descargados en los cuerpos de agua. Las soluciones numéricas para resolver la ecuación de convección-difusión son numerosas y a veces demasiado refinadas, con el intento de eliminar comportamientos oscilatorios. Este trabajo es una aportación en el campo del cálculo numérico de la difusión en ríos, específicamente en la solución de la ecuación de dispersión longitudinal en procesos sujetos a convección-difusión.
<i>Identificador</i>	<a href="http://hdl.handle.net/123456789/1192">http://hdl.handle.net/123456789/1192</a>

# Cálculo de la dispersión longitudinal en corrientes

Luis Francisco León Vizcaíno

Instituto Mexicano de Tecnología del Agua, CNA

*En años recientes, ante el aumento de los problemas por contaminación, se ha despertado un interés creciente dentro de la comunidad hidráulica por analizar y predecir la evolución de los contaminantes que son descargados en los cuerpos de agua. Las soluciones numéricas para resolver la ecuación de convección-difusión son numerosas y a veces demasiado refinadas, con el intento de eliminar comportamientos oscilatorios. Es bien conocido que la práctica común de separar efectos en la solución y en los análisis de estabilidad, no es siempre la mejor forma de resolver los problemas de dispersión. Este trabajo es una aportación en el campo del cálculo numérico de la difusión en ríos, específicamente en la solución de la ecuación de dispersión longitudinal en procesos sujetos a convección-difusión. Dicha ecuación se presenta en su forma unidimensional y se resuelve con esquemas explícitos de diferencias finitas. Se presentan los resultados de un nuevo método de estabilidad, dando los rangos de los números de Courant y Péclet que garantizan la solución numérica con esquemas explícitos. Por último, se comparan los resultados de los esquemas con soluciones analíticas y datos de laboratorio y se comprueba su exactitud. De esta manera, se obtienen métodos sencillos y estables para el cálculo de la dispersión.*

## Antecedentes

Históricamente, el ser humano ha dispuesto de sus desechos de la manera más simple, por ejemplo, desalojando las aguas residuales a cuerpos de agua y corrientes, cuyo destino final casi siempre son los mares y los grandes lagos. En su trayecto por las corrientes superficiales o subterráneas, los contaminantes se diluyen y dispersan, pero en ocasiones, en algunos tramos se generan concentraciones excesivas que impiden utilizar el recurso y aún más, provocar desequilibrios importantes en los ecosistemas locales.

Evaluar los daños de la contaminación y controlarla implica necesariamente disponer de métodos para calcular el transporte de las sustancias contaminadoras, en el tiempo y a lo largo de las corrientes.

El fenómeno de la difusión de contaminantes es un problema de transferencia de masa, que se define como el movimiento de un constituyente de una región de alta concentración a una de baja concentración. Dicho movimiento es de dos tipos:

molecular (microscópicamente, por el movimiento propio de las moléculas) y convectivo (transferencia asociada con las características dinámicas del flujo, como velocidad y turbulencia). Un contaminante descargado en un canal, ya sea natural o artificial, tenderá a ser dispersado por el movimiento hidrodinámico convectivo y por la dilución debida a los mecanismos de difusión. Desde el punto de la descarga hasta la sección en que se completa la difusión transversal en el cauce, lapso que se conoce como tiempo de mezclado (Fischer, 1979), se presenta el desarrollo de la nube de contaminante que finalmente alcanza la uniformidad a todo lo ancho del canal. Después de esta zona de mezclado transversal o zona cercana, la ecuación unidimensional de dispersión longitudinal logra, con frecuencia, una representación adecuada del fenómeno y aunque su solución no es sencilla, conduce a resultados útiles.

## Ecuación de dispersión longitudinal

Al considerar la difusión de dos o más especies

identificables en un fluido no homogéneo, debe satisfacerse el principio de conservación de la materia para cada componente de la mezcla.

El comportamiento de los procesos de transferencia se debe a una "fuerza de intercambio" que proviene de un gradiente de concentraciones, es decir, de la existencia de regiones con diferentes grados de concentración de la sustancia. Una expresión que relaciona la rapidez de transferencia de una sustancia de masa  $M$  con la magnitud del gradiente, se puede plantear de la forma siguiente:

$$\frac{dM/dt}{Area} \cong \frac{dM/V_o}{ds} \quad (1)$$

donde:

$V_o$  = Volumen

$s$  = Dirección de transferencia

$\frac{dM/dt}{Area}$  = Transferencia por unidad de tiempo, de  $M$  por unidad de área normal a la dirección  $s$

$\frac{dM/V_o}{ds}$  = Gradiente de  $M$ , por unidad de volumen en la dirección de transferencia

$M$  = es la cantidad de masa disuelta  $M = \Delta m C$ , donde  $C$  es la concentración definida como la masa de sustancia disuelta por unidad de masa del fluido.

Para transformar la proporcionalidad (1) por una igualdad, se puede introducir una constante del proceso  $D$  (difusividad de masa, con unidades  $L^2T^{-1}$ ), conocido como coeficiente de difusión molecular. Con esto, la ecuación (1) se transforma en:

$$\begin{aligned} \frac{d(\Delta m C)}{dt \Delta x \Delta y} = q_x &= -D \frac{d}{dx} \left[ \frac{\Delta m C}{\Delta V_o} \right] \\ &= -D \frac{d}{dx} [\rho C] \end{aligned} \quad (2)$$

donde  $q_x$  es el flujo de transferencia de masa y el signo (-) indica que el transporte es de zonas de mayor a menor concentración. Si la densidad del fluido es constante, como es razonable suponer,  $\rho = \Delta m / \Delta V_o$ , con lo cual,  $d(\rho C) / dx = \rho dC / dx$ , y por tanto, la ecuación (2) puede escribirse:

$$q_x = -\rho D \frac{dC}{dx}$$

Análogamente, si se considera que el coeficiente  $D$  se mantiene constante, para las direcciones  $y, z$ , se tiene:

$$q_y = -\rho D \frac{dC}{dy}$$

$$q_z = -\rho D \frac{dC}{dz}$$

Por último, en notación vectorial, se puede escribir:

$$\bar{q} = -\rho D \nabla C \quad (3)$$

La ecuación (3), conocida como Primera ley de Fick, establece que el flujo de masa por unidad de área y tiempo ( $ML^{-2}T^{-1}$ ), es proporcional al gradiente de la concentración del soluto en la dirección de transferencia.

Al aplicar esta ley al principio de conservación de masa en un volumen de control para un flujo binario, y si se considera exclusivamente al soluto (Fischer, 1967), se obtiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{V} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C \quad (4)$$

La ecuación (4) es conocida como la de conservación de masa de un contaminante en un volumen de control sujeto a convección y difusión, también llamada ecuación de la difusión convectiva.

Al resumir las hipótesis que se aceptan en la ecuación (4), se puede decir que se considera un flujo incompresible; que se adopta la ley de Fick de simple proporcionalidad entre la difusión del contaminante y el gradiente de las concentraciones; que se toma como propiedad exclusiva el coeficiente de difusión molecular que relaciona el tipo de contaminante con el flujo, y que el flujo es conservativo, sin reacciones químicas ni biológicas en el medio. Todas estas simplificaciones producen una ecuación suficientemente cercana al comportamiento de mezclas en un amplio grupo de cuerpos de agua.

A una escala macroscópica, se adopta un coeficiente de dispersión  $K$  que abarca tanto los efectos convectivos como los turbulentos. Con esta consideración, se puede escribir la ecuación unidimensional de dispersión para valores medios de la concentración en la sección como (Taylor, 1954):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5)$$

La expresión (5) se conoce como "ecuación unidimensional de dispersión longitudinal".

**Solución con esquemas explícitos de diferencias finitas**

Matemáticamente, la ecuación (5) es una diferencial parcial de segundo orden, de tipo parabólico y susceptible de ser resuelta por diferencias finitas, que son cocientes de diferencias como aproximaciones a derivadas y se obtienen de la serie de Taylor con cierto error de truncado. Las aproximaciones utilizadas son las siguientes:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C(x, t + \Delta t) - C(x, t)}{\Delta t} \quad (6)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C(x + \Delta x, t) - C(x - \Delta x, t)}{2\Delta x} \quad (7)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{C(x + \Delta x, t) - 2C(x, t) + C(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} \quad (8)$$

Si, por sencillez notacional se cambia a  $C_j^n = C(x, t)$ ;  $C_{j+1}^n = C(x + \Delta x, t)$ ;  $C_{j-1}^n = C(x - \Delta x, t + \Delta t)$ , etc. donde el subíndice representa la sección en el espacio y el superíndice, el nivel en el tiempo y se sustituyen los cocientes de diferencias (6), (7) y (8) en la ecuación (5), se llega a:

$$\frac{1}{\Delta t} (C_j^{n+1} - C_j^n) + \frac{u}{2\Delta x} (C_{j+1}^n - C_{j-1}^n) = \frac{K}{\Delta x^2} (C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n) \quad (9)$$

Despejando para el siguiente nivel en el tiempo se obtiene:

$$C_j^{n+1} = C_j^n - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} (C_{j+1}^n - C_{j-1}^n) + \frac{K\Delta t}{\Delta x^2} (C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n) \quad (10)$$

La ecuación (10) es un esquema de diferencias finitas explícito y centrado simétricamente. A partir de ella y definiendo los siguientes valores:

$$C = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad \text{Número de Courant de malla}$$

$$P = \frac{u\Delta t}{K} \quad \text{Número de Péclet de malla}$$

dicho esquema (10) se transforma en:

$$C_j^{n+1} = C_{j-1}^n \left( \lambda + \frac{C}{2} \right) + C_j^n (1 - 2\lambda) + C_{j+1}^n \left( \lambda - \frac{C}{2} \right) \quad (11)$$

donde  $\lambda$  es el cociente de Courant sobre Péclet.

Si los cocientes de diferencias considerados son hacia atrás o adelante en el espacio, representados por las aproximaciones:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_j^n - C_{j-1}^n}{\Delta x} \quad (12)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_{j+1}^n - C_j^n}{\Delta x} \quad (13)$$

y con un procedimiento análogo, al sustituir (12) ó (13) en (5) se pueden obtener otros esquemas explícitos de primer orden, que en general se pueden escribir como:

$$C_j^{n+1} = A_0 C_{j-1}^n + A_1 C_j^n + A_2 C_{j+1}^n \quad (14)$$

Los valores de los coeficientes ( $A_0$ ,  $A_1$  y  $A_2$ ), para cada tipo de aproximación se resumen en el cuadro 1:

**1. Esquemas explícitos de primer orden**

Esquema explícito (14)	$C_j^{n+1} = A_0 C_{j-1}^n + A_1 C_j^n + A_2 C_{j+1}^n$		
	$A_0$	$A_1$	$A_2$
Diferencia hacia atrás	$\lambda + C$	$1 - 2\lambda - C$	$\lambda$
Diferencia centrada	$\lambda + \frac{C}{2}$	$1 - 2\lambda$	$\lambda - \frac{C}{2}$
Diferencia hacia adelante	$\lambda$	$1 - 2\lambda + C$	$\lambda - C$
$\lambda = \frac{K\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{C}{P} ; C = \frac{u\Delta t}{\Delta x} ; P = \frac{u\Delta t}{K}$			

**Resumen de criterios de estabilidad**

Durante el trabajo de investigación bibliográfica, que antecedió a este estudio, fue sorprendente no encontrar criterio alguno de estabilidad para la ecuación completa de convección-difusión, sino exclusivamente para convección pura ( $K = 0$ ) o para difusión pura ( $u = 0$ ), por lo que hubo que elaborarlo.

La razón de la no existencia de criterios de estabilidad es la complejidad matemática al considerar la ecuación completa. Se utilizó el método de la analogía de la ecuación diferencial ordinaria,

propuesto recientemente (Aldama, 1985 y 1987), y se efectuó un nuevo análisis de estabilidad, cuya amplitud excede el espacio y los alcances de este artículo, pero se muestra en detalle en la tesis de maestría del autor (León, 1990).

En general, consiste en desarrollar el método de Von Neuman en el esquema completo, en función tanto del número de Courant como del de Péclet, para después obtener, mediante el método de la analogía, una frontera de estabilidad neutra a partir de la cual se resuelve numéricamente un problema de optimización de C en función de P.

De los análisis de estabilidad y compatibilidad se obtuvieron las condiciones que se resumen individualmente en el cuadro 2 para los esquemas explícitos de primer orden:

**2. Condiciones de estabilidad**

Esquema explícito con diferencias:	Límite del # de Courant	Límite del # de Péclet
Hacia atrás	$C < \frac{P}{2+P}$	$P > 0$
Centrada	$C < \frac{1}{2}P$	$P < 2$
Hacia adelante	$C < \frac{P}{2-P}$	$P < 1$

Fue posible generalizar los resultados en una expresión con un factor cuyo valor es de 1, 0 y -1 para los esquemas con diferencias hacia atrás, centradas y hacia adelante, respectivamente, resumidos en una expresión general (véase cuadro 3):

**3. Condición de estabilidad**

	Límite del # de Courant	Diferencias	g	Límite del # de Péclet
Esquemas explícitos de 1er. orden	$C < \frac{P}{2+gP}$	Atrás Centrada Adelante	+1 0 -1	$P > 0$ $P < 2$ $P < 1$

**Comparación de resultados**

Con el propósito de comparar los resultados de los esquemas con la solución analítica, se tomó la condición de descarga constante del contaminante en una determinada sección. Este tipo de solución es la más utilizada para comparar los resultados de los métodos numéricos (Taigbenu y Liggett, 1986).

Condiciones iniciales y de frontera:

$$\begin{cases} C(x, 0) = 0 & ; 0 \leq x \leq \infty \\ C(0, t) = C_0 & ; 0 \leq t \leq \infty \end{cases}$$

Cuando  $t \Rightarrow \infty$ , la concentración para  $x \Rightarrow \infty$  se aproxima a  $C_0$  y la solución analítica del problema es (Fischer, 1967; Crank, 1956):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x-ut}{\sqrt{4Kt}} \right) + \operatorname{erfc} \left( \frac{x+ut}{\sqrt{4Kt}} \right) \exp \left( \frac{ux}{K} \right) \right] \quad (15)$$

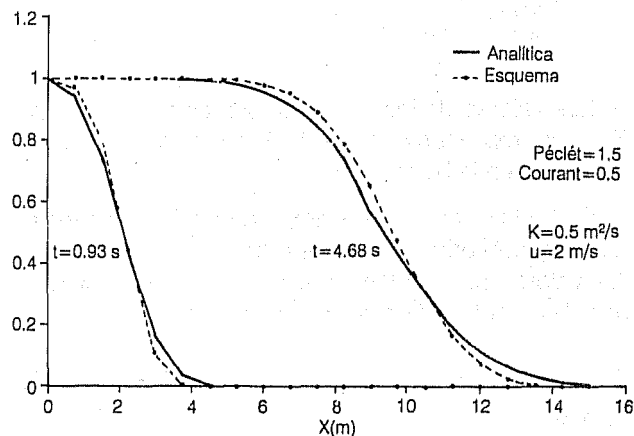
Las comparaciones resultantes de aplicar el esquema representado por la ecuación (14), con diferencias centradas, contra las soluciones analíticas resueltas con la (15), se muestran en las ilustraciones 1 y 2. Nótese la exactitud de los resultados en ambos casos, no obstante que se trata de condiciones extremas. En efecto, en el primero,  $K = 0.5 \text{ m}^2/\text{s}$  (convección dominante), mientras que en el segundo,  $K = 500 \text{ m}^2/\text{s}$  (difusión dominante).

Con objeto de mostrar la bondad en los cálculos con el esquema explícito central, se presenta la comparación con mediciones experimentales en laboratorio.

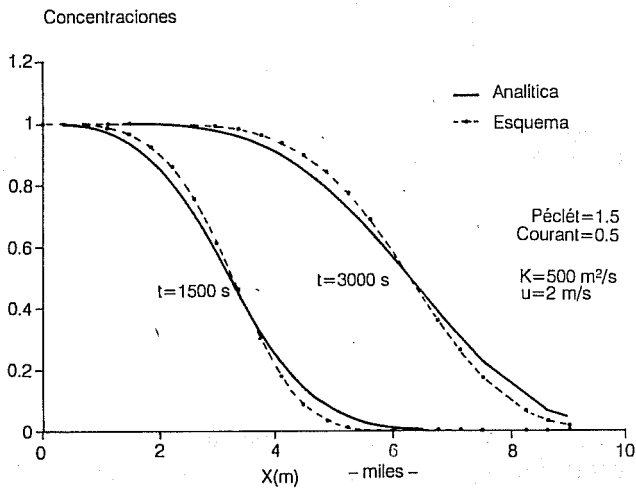
Los datos y mediciones que se consideraron adecuados son los mismos que reportó Fischer en 1967; de dicha referencia se tomó la serie 2700, que contiene las correspondientes a las concentraciones en dos secciones. Como condición inicial, se usaron las mediciones de la primera sección y con el

**1. Comparación con la solución analítica. (Esquema central)**

Concentraciones



**2. Comparación con la solución analítica. (Esquema central)**



esquema, se calcularon las de la segunda para compararlas contra las mediciones reportadas.

Datos (Fischer, 1967):

Del canal

Sección rectangular Rugosidad: suave  $f = 0.016$   
 Ancho del canal  $h = 109.22$  cm  
 Longitud  $L = 40$  m  
 Constante de Von Karman  $k = 0.39$

Del flujo .- Uniforme

Velocidad media  $u = 36.2$  cm/s  
 Velocidad al cortante  $u^* = 1.62$  cm/s  
 Tirante medio  $d = 12.8$  cm  
 Coeficiente de dispersión  $K = 236$  cm<sup>2</sup>/s

De las secciones

Distancia de la inyección a la primera sección  $x_1 = 14.06$  m  
 Distancia de la inyección a la segunda sección  $x_2 = 25.06$  m

Los valores de las concentraciones reportadas por Fischer, reproducidos de la referencia original, se muestran en la ilustración 3.

Se transformaron los valores a concentraciones relativas y con origen de tiempo cero y se discretizaron los valores reportados para las siguientes condiciones de estabilidad del esquema central:

$P = 1.9173$ ;  $\Delta x = 12.5$  cm  $\therefore$  88 secciones desde  $x_1$  a  $x_2$

Se corrieron dos pruebas para diferentes números de Courant y un tiempo de simulación de 57 segundos:

- $C = 0.181$ ;  $\Delta t = 0.0625$  s  $\therefore$  912 intervalos de tiempo
- $C = 0.362$ ;  $\Delta t = 0.125$  s  $\therefore$  456 intervalos de tiempo

Con las discretizaciones para los  $\Delta t$  indicados, se utilizaron los datos de la sección  $x_1 = 14.06$  m como condición inicial y se calcularon las concentraciones para la sección  $x_2 = 25.06$  m. La ilustración 4 muestra la comparación con las mediciones en la segunda sección.

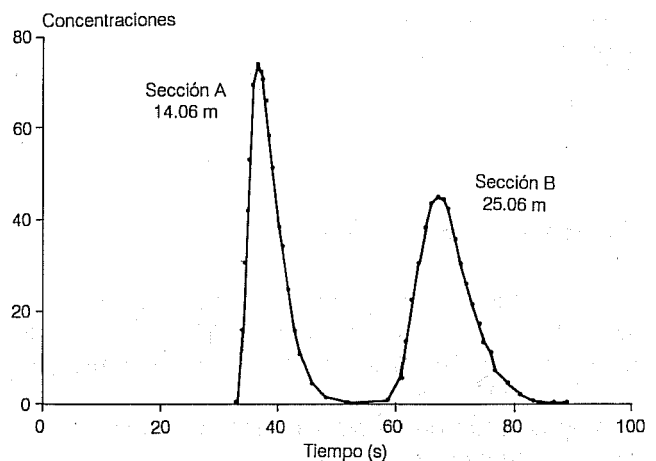
Los errores en el pico fueron en ambos casos menores al 5%, lo que indica una muy buena aproximación. Cabe mencionar que el modelo explícito probado predice en forma correcta el inicio de la llegada del contaminante en el tiempo, presentando un error de fase casi nulo. Por otra parte, los resultados denotan una aproximación cada vez mejor a medida que los valores de Courant y de Péclét tienden a alejarse de los límites obtenidos. En otras palabras, la convergencia se asegura al cumplir con las condiciones de estabilidad y, además, los errores en los resultados disminuyen al alejar los valores de los parámetros de estabilidad de los límites propuestos.

**Conclusiones**

Se plantea la ecuación de dispersión longitudinal y se resuelve aplicando esquemas explícitos en diferencias finitas. Se presentan los criterios de

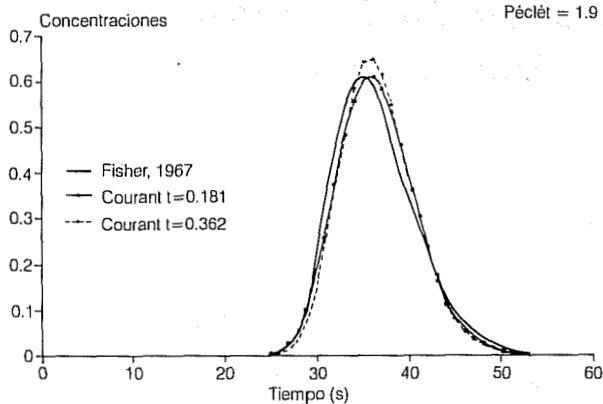
**3. Mediciones experimentales**

Datos experimentales (Fisher, 1967)



## 4. Comparación con datos experimentales

Comparación con datos medidos



estabilidad obtenidos mediante el método de la analogía con la ecuación diferencial ordinaria. Dichos criterios garantizan la estabilidad de los esquemas y su convergencia, como una función de los números de Courant y de Péclet combinados en una condición que, a su vez, limita a los incrementos de  $\Delta x$  y  $\Delta t$ .

Es interesante mencionar que, hasta donde el autor conoce, sólo Price *et al.* (1966) indican que para diferencias finitas centradas, existen oscilaciones numéricas para valores de Péclet mayores a dos. Esta observación se basa exclusivamente en pruebas exhaustivas del modelo numérico y no en un análisis de estabilidad que indique algún criterio que combine el número de Péclet con el de Courant, como se estableció en este trabajo.

Al incluir los criterios de estabilidad en los esquemas explícitos y resolver para distintas condiciones de velocidad y coeficientes de dispersión, se obtiene una excelente aproximación tanto con las soluciones analíticas como con las experimentales. Con esto, se tienen a disposición métodos sencillos que son numéricamente estables y convergentes a las soluciones, y no parece necesario recurrir a otros más complicados para el caso del flujo unidimensional.

En la actualidad, se está trabajando en un programa interactivo, orientado al usuario, llamado *DISPER*, que resuelve la ecuación de dispersión con los métodos explícitos expuestos en este artículo y limita los incrementos de tiempo y distancia al utilizar los criterios de estabilidad presentados.

## Referencias y bibliografía

Abbot, M. B., *Computational hydraulics*, Pitmann APP, Londres y Boston, 1979.

Aldama, A.A., *Theory and applications of two -and three- scale filtering approaches for turbulent flow simulation*, Tesis de Doctorado, Massachusetts Institute of Technology, EUA, 1985.

Aldama, A.A., "La analogía de la ecuación diferencial ordinaria", *Memorias del XIII Congreso de la Academia Nacional de Ingeniería A.C.*, pp. 305-307, 1987.

Crank, J., *The mathematics of diffusion*, Oxford Univ. Press (Clarendon), Londres y Nueva York, 1956.

Cunge, J.A. y Holly, F.M., *Practical aspects of computational river hydraulics*, Pitmann APP, Londres y Boston, 1980.

Fischer, H.B., "The mechanics of dispersion in natural streams", *ASCE Journal of the Hydraulics Division*, 93(HY6), pp. 187-216, 1967.

Fischer, H.B., "Dispersion prediction in natural streams", *ASCE Journal of the Sanitary Engineering Division*, 94(SA5), pp. 927-943, 1968.

Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C., Berger, G.N. y Brooks, N.H., *Mixing in inland and coastal waters*, Academic Press, Nueva York, 1979.

Holly, F.M., "Dispersion in rivers. Physical principles and dispersion equations", *Developments in Hydraulic Engineering*, Novak, 1985.

León, L.F., *Dispersión de contaminantes en canales, modelación numérica*, Tesis de Maestría, División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería, UNAM, México, 1990.

Price, H.S., Varge, R.S. y Warren, J.E., "Application of oscillation matrices to diffusion-convection equations", *Journal of Math. and Physics*, pp. 301-311, 1966.

Siemons, J., "Numerical methods for the solution of diffusion-advection equations", *Internal Publication No. 88*, Delft Hydraulics Laboratory, Delft, Países Bajos, (Holanda), 1970.

Smith, G.D., *Numerical solution of partial differential equations: Finite difference methods*, Oxford Univ. Press (Clarendon), Londres y Nueva York, 1977.

Taigbenu, A. y Ligget, J., "An integral solution for the diffusion-advection equation", *AGU Prof. Internal Paper*, 5W4269, pp. 1237-1246, 1986.

Taylor, G.I., "Diffusion by continuous movements", *Proceedures of the Royal Society*, London Ser., A-20, pp. 196-211, 1921.

Taylor, G.I., "Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube", *Proceedures of the Royal Society*, London Ser., A-219, pp. 186-203, 1953.

Taylor, G.I., "The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe", *Proc. Soc. London Ser.*, A-223, pp. 446-468, 1954.

Welty, J.R., Wicks, C. y Wilson, R., *Fundamentos de transferencia de momento, calor y masa*, Ed. Limusa (John Wiley & Sons), 1969.