

Modelo parabólico para pluma de contaminación de un río

<https://github.com/GABusta>

Índice

INTRODUCCIÓN	4
DATOS Y CONSIGNAS	5
1. CONDICIONES DE BORDE E INICIALES	5
1.1. Bidimensional - Condiciones de borde	6
1.2. Bidimensional - Condiciones iniciales y distribución de velocidad	6
1.3. Unidimensional - Condiciones de borde	8
1.4. Unidimensional - Condiciones iniciales y distribución de velocidad	9
2. BIDIMENSIONAL - método explícito	9
2.1. Discretización	9
2.2. Estabilidad	11
2.3. Elección de pasos espaciales y temporales	14
3. BIDIMENSIONAL - método implícito, Crank-Nicholson	15
3.1. Discretización	15
3.2. Elección de pasos espaciales y temporales	17
4. UNIDIMENSIONAL - método implícito, Crank-Nicholson	18
4.1. Discretización	18
5. RESULTADOS – Modelo Unidimensional	19
6. RESULTADOS – Modelo Bidimensional – Caudal de entrada	20
7. RESULTADOS – Modelo Bidimensional – Caudal de salida	21
8. COMPARATIVA – DISCRETIZACIÓN, Modelo Bidimensional	24
8.1. Caso 01	24
8.2. Caso 02	25
8.3. Caso 03	25
8.4. Caso 04	26
9. ELECCIÓN DISCRETIZACIÓN	27
10. SOLUCIÓN ESTACIONARIA	30
11. ESTUDIO DEL ERROR	32
12. COMPARATIVA – COEF. DE DIFUSIVIDAD ADIMENSIONAL	34
13. COMPARATIVA – COEF. DE DECAIMIENTO	35
14. CONCLUSIONES	36
Anexo – Códigos de programación	37

INTRODUCCIÓN

Para calcular la pluma de contaminación que se desarrolla en un tramo (relativamente recto) de un río por la descarga de un contaminante desde una fuente puntual, puede utilizarse la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - kC$$

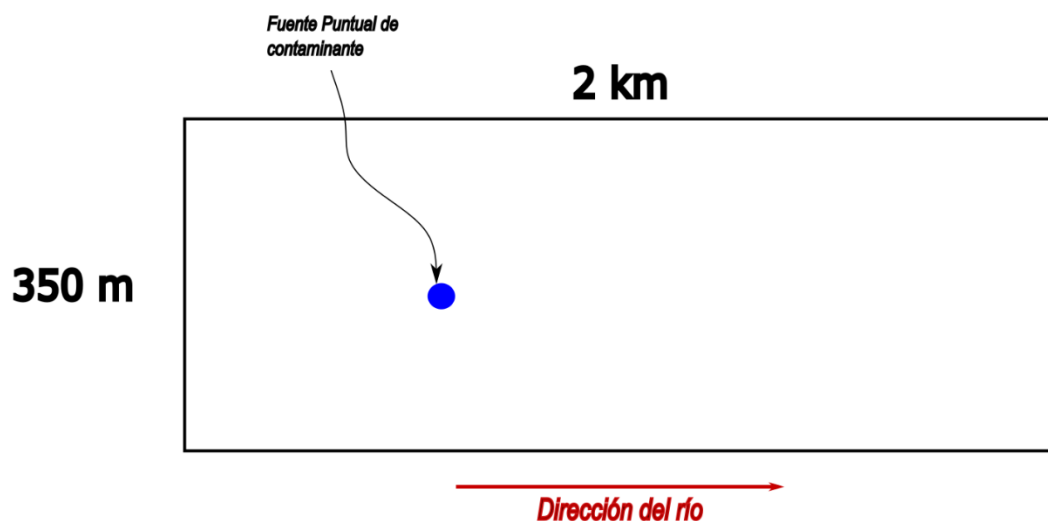
Donde C es la concentración media vertical del contaminante, x la coordenada longitudinal, y la coordenada lateral, u la velocidad media de la corriente, D_L la difusividad longitudinal, D_T la difusividad lateral y k la tasa de decaimiento.

Las difusividades longitudinal y lateral pueden expresarse como:

$$D_L = e_L h u_* \quad , \quad D_T = e_T h u_*$$

Donde h es la profundidad, u_* la velocidad de corte y e_L, e_T los coeficientes de difusividad longitudinal y lateral (adimensionales). La velocidad de corte, a su vez, puede calcularse como $u_* = f u$ siendo f el factor de fricción.

Se muestra en la siguiente imagen un diagrama esquemático del problema en estudio:



DATOS Y CONSIGNAS

Se utilizarán datos representativos del río Paraná de las Palmas. Por simplicidad, los parámetros considerarán constantes en el tiempo y uniformes en el espacio.

$$h = 10 \text{ m}$$

$$u = 0,8 \text{ m/s}$$

$$e_L = 30$$

$$e_T = 0,3$$

$$f = 0,04$$

Se supondrá que se produce una descarga continua de un contaminante sobre la costa a una tasa de 60 kg/día, cuya constante de decaimiento vale $k = 0,1 \text{ 1/día}$. Se considerará un tramo de 2 km, con un ancho superficial de 350 m.

DESARROLLO DEL PRÁCTICO

1. Discretizar la ecuación del modelo, incluyendo condiciones iniciales y de borde, en diferencias finitas utilizando un método explícito y uno implícito, ambos de orden dos, e implementados en un código computacional.
2. Justificar la elección de los pasos de discretización espacial en base a criterios precisos.
3. Efectuar ensayos con los dos métodos, poniendo en evidencia las eventuales inestabilidades numéricas y el aumento o disminución de la precisión de la solución a partir de variaciones en los pasos espaciales.
4. Elegir los pasos espaciales óptimos para cada método y obtener las soluciones que cada uno provee con su respectiva estimación del error numérico.
5. Efectuar ensayos de sensibilidad de la solución variando la constante de decaimiento y la difusividad adimensional.

DESARROLLO OPTATIVO

6. Incluir la posibilidad de que la profundidad del río no sea constante en todo el tramo analizado.

1. CONDICIONES DE BORDE E INICIALES

Para la resolución del problema parabólico planteado, se realizarán dos tipos de discretizaciones,

- Discretización en Dominio Unidimensional
- Discretización en Dominio Bidimensional

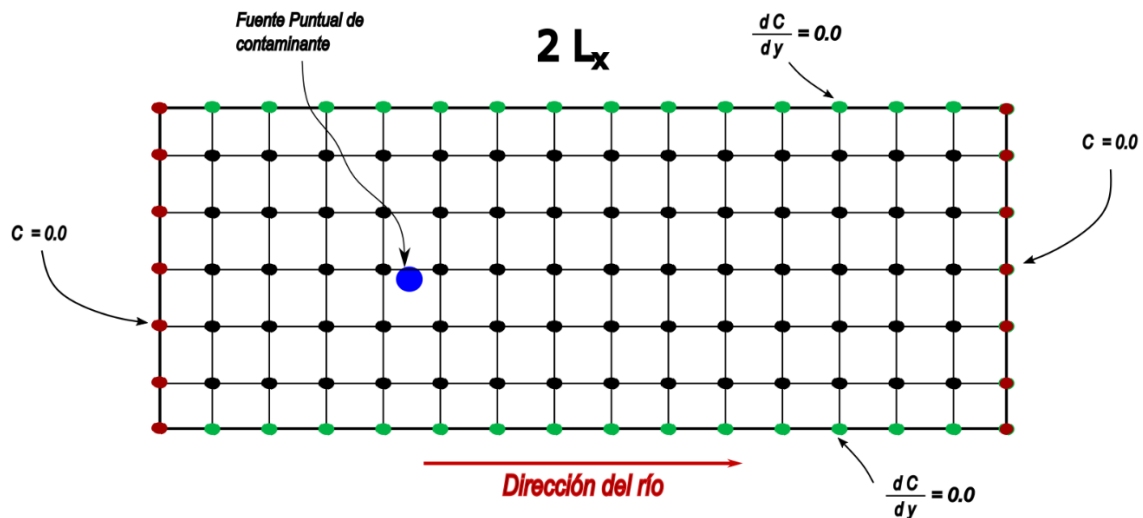
Ya que interesa conocer o estimar de alguna forma, la relación que existe entre ambos modelos planteados, y conociendo también que la difusividad longitudinal será mucho mayor que la difusividad en la dirección transversal.

1.1. Bidimensional - Condiciones de borde

Para la ecuación advección - Difusión propuesta,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - kC$$

Las condiciones de Contorno son las que se detallan en la siguiente imagen,



Teniendo en cuenta que el dominio de interés es el detallado en el enunciado, se procede a elegir un dominio en la dirección longitudinal mucho mayor (dos veces la distancia longitudinal de interés), de forma de lograr una independencia de la solución respecto de las condiciones impuestas “aguas abajo” del río.

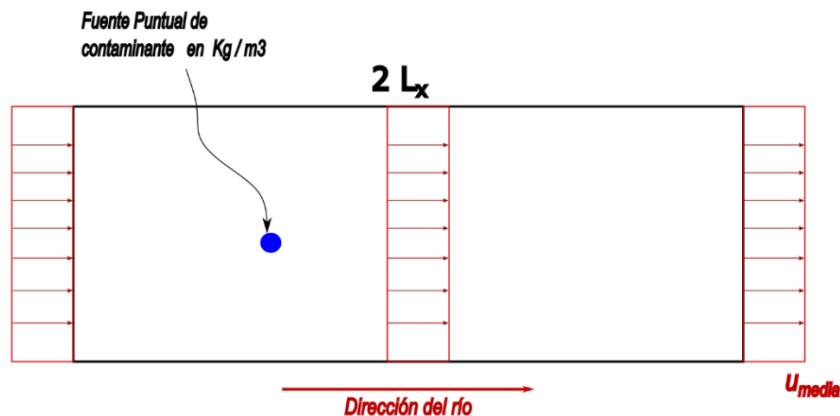
1.2. Bidimensional - Condiciones iniciales y distribución de velocidad

Para el problema a estudiar, se suponen:

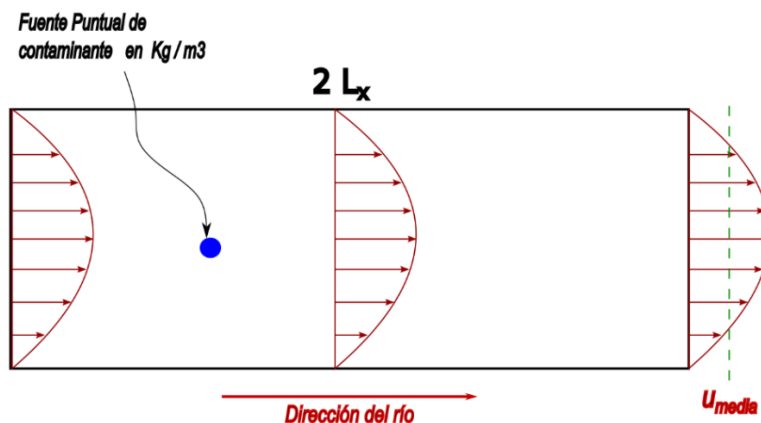
- Condiciones iniciales nulas en todo el dominio
- La descarga puntual de contaminante debe ser calculada para el volumen sobre el cual actúa, ya que se debe imponer en las mismas unidades que la concentración "C". Se considerarán dos posibles variaciones de la concentración:
 - Se asume que la cantidad de contaminante es la necesaria para garantizar que el nodo de descarga se comporte como una fuente de descarga constante y que se conoce el caudal de entrada $V_i = 1 \text{ m}^3/\text{seg}$.
 - Se asume que la concentración inicial se descarga sobre una celda elemental, por lo que para cada tipo de mallado estudiado, la misma debe recalcularse.

En las siguientes gráficas se resumen algunas características de las condiciones planteadas, planteándose dos posibles condiciones de velocidad del fluido:

1- Velocidad con distribución constante



2- Velocidad con distribución parabólica

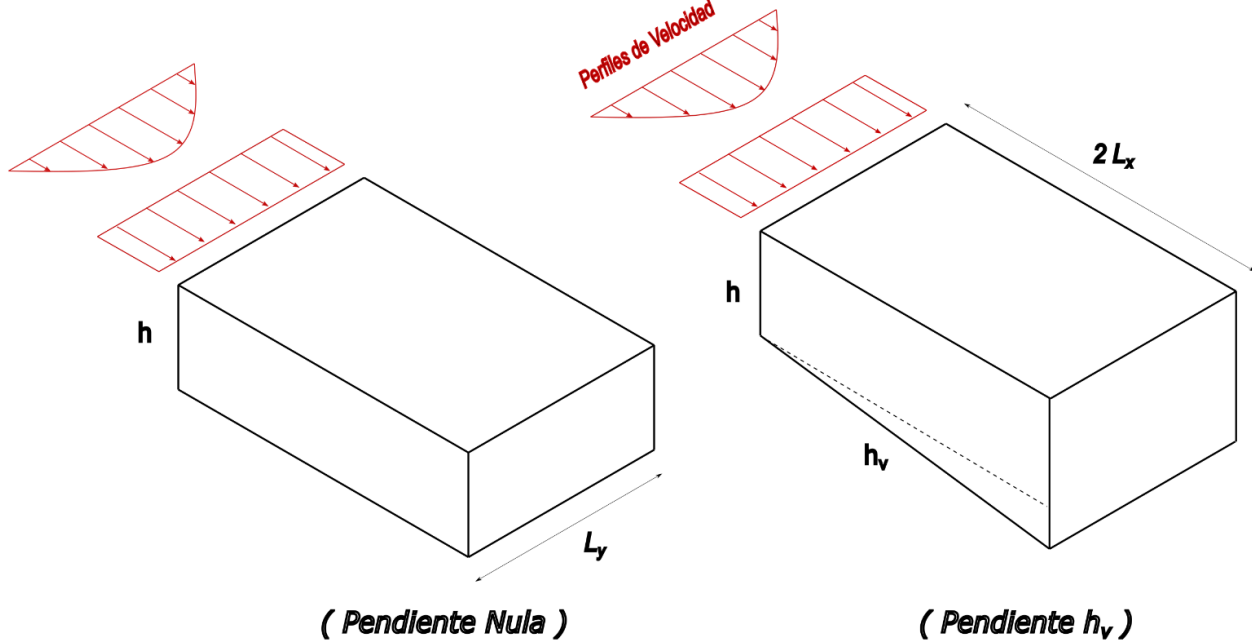


En la siguiente imagen quedan representados los distintos casos de estudio, según se consideren los dos tipos de perfiles de velocidades propuestos y según la pendiente del

lecho

del

río



Resumiendo los casos de estudio según la siguiente tabla,

Caso Nº	Velocidad u	Profundidad h	Difusividades DL, DT
Caso 01	Constante	Constante	Constantes
Caso 02	Parabólica	Constante	Variables
Caso 03	Constante	Variable	Variables
Caso 04	Parabólica	Variable	Variables

1.3. Unidimensional - Condiciones de borde

Para la ecuación advección - Difusión propuesta,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - kC$$

Se obtiene una expresión Unidimensional,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \underbrace{- D_T \cdot C - k \cdot C}_{\text{términos de Pérdida}}$$

En donde se observa que se agrega un término de pérdida de concentración en la dirección transversal que depende del valor de la concentración en el nodo. El término de pérdida se adiciona al modelo ya que colabora en la difusión de la concentración nodal y por lo tanto en la evolución de la solución.

Las condiciones de Contorno son las que se detallan en la siguiente imagen,



Al igual que en el planteo del problema Bidimensional, en este caso se asume una longitud de análisis del río de dos veces el largo de interés.

1.4. Unidimensional - Condiciones iniciales y distribución de velocidad

Para el problema a estudiar, se suponen:

- Condiciones iniciales nulas en todo el dominio,
- Velocidad y profundidad constantes,
- Se asume que la cantidad de contaminante es la necesaria para garantizar que el nodo de descarga se comporte como una fuente de descarga constante y que se conoce el caudal de entrada $V_i = 1 \text{ m}^3/\text{seg}$.

2. BIDIMENSIONAL - método explícito

2.1. Discretización

Para la ecuación advección - Difusión propuesta, la discretización Explícita centrada se obtiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - kC$$

Mediante la aproximación de los polinomios de Taylor, y aplicando una discretización temporal en donde los términos que no dependen del tiempo, están evaluados en la iteración anterior (n),

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_{i,j}^{(n+1)} - C_{i,j}^{(n)}}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = u \left(\frac{C_{i+1,j}^{(n)} - C_{i-1,j}^{(n)}}{2\Delta x} \right) + O(\Delta x^2)$$

$$D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = D_L \cdot \left(\frac{C_{i+1,j}^{(n)} - 2C_{i,j}^{(n)} + C_{i-1,j}^{(n)}}{\Delta x^2} \right) + O(\Delta x^2)$$

$$D_T \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = D_T \cdot \left(\frac{C_{i,j+1}^{(n)} - 2C_{i,j}^{(n)} + C_{i,j-1}^{(n)}}{\Delta y^2} \right) + O(\Delta y^2)$$

$$kC = -k.C_{i,j}^{(n)}$$

Reordenando las expresiones obtenidas y despreciando los términos de orden superior del error, se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^{(n+1)} - C_{i,j}^{(n)}}{\Delta t} + u \left(\frac{C_{i+1,j}^{(n)} - C_{i-1,j}^{(n)}}{2\Delta x} \right) &= D_L \cdot \left(\frac{C_{i+1,j}^{(n)} - 2.C_{i,j}^{(n)} + C_{i-1,j}^{(n)}}{\Delta x^2} \right) \\ + D_T \cdot \left(\frac{C_{i,j+1}^{(n)} - 2.C_{i,j}^{(n)} + C_{i,j-1}^{(n)}}{\Delta y^2} \right) &- k.C_{i,j}^{(n)} \end{aligned}$$

Llamando,

$$Cr = \frac{u.\Delta t}{\Delta x} \quad , \quad r_x = \frac{D_L.\Delta t}{\Delta x^2} \quad , \quad r_y = \frac{D_T.\Delta t}{\Delta y^2}$$

Finalmente la expresión resulta,

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{(n+1)} &= C_{i+1,j}^{(n)} \left(-\frac{1}{2}.Cr + r_x \right) + C_{i-1,j}^{(n)} \left(\frac{1}{2}.Cr + r_x \right) \\ &+ C_{i,j}^{(n)} (1 - 2.r_x - 2.r_y - k.\Delta t) + C_{i,j+1}^{(n)} (r_y) + C_{i,j-1}^{(n)} (r_y) \end{aligned}$$

Siendo el error de truncamiento, $\text{error} = O(\Delta t, \Delta x^2, \Delta y^2)$

Para demostrar la consistencia del método, basta con indicar que reduciendo los pasos temporales y espaciales a cero, la medida del error tiende también a cero,

$$\varepsilon_j^n \rightarrow 0 \quad \text{si} \quad (\Delta t \rightarrow 0 \quad , \quad \Delta x \rightarrow 0 \quad , \quad \Delta y \rightarrow 0)$$

2.2. Estabilidad

Para calcular la estabilidad de la solución, se debe reemplazar la expresión de Von Neumann, que permite relacionar el error de redondeo,

$$\delta_{i,j}^n = \xi^n . e^{i.k_1.i.\Delta x} . e^{i.k_2.j.\Delta y} \quad , \quad \text{siendo } \Delta x = \Delta y$$

$$C_{i,j}^{(n)} = \xi + D$$

En la ecuación de advección-difusión planteada en diferencias,

$$C_{i,j}^{(n+1)} = C_{i+1,j}^{(n)} \left(-\frac{1}{2} \cdot Cr + r_x \right) + C_{i-1,j}^{(n)} \left(\frac{1}{2} \cdot Cr + r_x \right) \\ + C_{i,j}^{(n)} (1 - 2 \cdot r_x - 2 \cdot r_y - k \cdot \Delta t) + C_{i,j+1}^{(n)} (r_y) + C_{i,j-1}^{(n)} (r_y)$$

Reemplazando y simplificando la expresión exacta se obtiene,

$$\xi^{(n+1)} \cdot e^{i \cdot k_1 \cdot i \cdot \Delta x} \cdot e^{i \cdot k_2 \cdot j \cdot \Delta x} = \xi^{(n)} \cdot e^{i \cdot k_1 \cdot i \cdot \Delta x} \cdot e^{i \cdot k_2 \cdot j \cdot \Delta x} \cdot e^{i \cdot k_1 \cdot \Delta x} \cdot \left(-\frac{1}{2} \cdot Cr + r_x \right) \\ + \xi^{(n)} \cdot e^{i \cdot k_1 \cdot i \cdot \Delta x} \cdot e^{i \cdot k_2 \cdot j \cdot \Delta x} \cdot e^{-i \cdot k_1 \cdot \Delta x} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot Cr + r_x \right) \\ + \xi^{(n)} \cdot e^{i \cdot k_1 \cdot i \cdot \Delta x} \cdot e^{i \cdot k_2 \cdot j \cdot \Delta x} \cdot (1 - 2 \cdot r_x - 2 \cdot r_y - k \cdot \Delta t) \\ + \xi^{(n)} \cdot e^{i \cdot k_1 \cdot i \cdot \Delta x} \cdot e^{i \cdot k_2 \cdot j \cdot \Delta x} \cdot e^{i \cdot k_2 \cdot \Delta x} \cdot (r_y) + \xi^{(n)} \cdot e^{i \cdot k_1 \cdot i \cdot \Delta x} \cdot e^{i \cdot k_2 \cdot j \cdot \Delta x} \cdot e^{-i \cdot k_2 \cdot \Delta x} \cdot (r_y)$$

Simplificando y agrupando,

$$\frac{\xi^{(n+1)}}{\xi^{(n)}} = g = -Cr \cdot \left(\frac{e^{i \cdot k_1 \cdot \Delta x} - e^{-i \cdot k_1 \cdot \Delta x}}{2} \right) + 2 \cdot r_x \cdot \left(-1 + \frac{e^{i \cdot k_1 \cdot \Delta x} - e^{-i \cdot k_1 \cdot \Delta x}}{2} \right) \\ + 2 \cdot r_y \cdot \left(-1 + \frac{e^{i \cdot k_2 \cdot \Delta x} - e^{-i \cdot k_2 \cdot \Delta x}}{2} \right) + 1 - k \cdot \Delta t$$

Expresión que puede escribirse como,

$$g = 2.r_x.(-1 + \cos(k_1.\Delta x)) + 2.r_y.(-1 + \cos(k_2.\Delta x))$$

$$+ 1 - k.\Delta t - i.Cr.\sin(k_1.\Delta x)$$

Como se demostrará, existe una diferencia considerable en los valores que tomarán las difusividades adimensionales, debido a la gran diferencia entre las difusividades longitudinal y transversal, $r_x \gg r_y$. Además la constante de decaimiento, multiplicada por un “dt” termina generando una constante que escasa magnitud frente al resto.

Simplificando “ry” y el término de decaimiento, y ya que $|g| \leq 1$, la expresión queda

$$\sqrt{\left[2.r_x.(-1 + \cos(k_1.\Delta x)) + 1\right]^2 + \left[Cr.\sin(k_1.\Delta x)\right]^2} \leq 1$$

De donde se pueden extraer algunas conclusiones, reordenando los términos,

$$\left[2.r_x.(-1 + \cos(k_1.\Delta x)) + 1\right]^2 \leq 1 - Cr^2.\sin^2(k_1.\Delta x)$$

$$\sin^2(k_1.\Delta x) = 0$$

$$-1 \leq -2.r_x.(1 - \cos(k_1.\Delta x)) + 1 \leq 1$$

Tomando la peor condición, finalmente se obtiene

$$-1 \leq -2.r_x.(1 - \cos(k_1.\Delta x)) + 1 \leq 1 \quad \rightarrow \quad 0 \leq r_x \leq \frac{1}{2}$$

$$\sin^2(k_1.\Delta x) = 1$$

$$-1 + Cr^2 \leq \left[-2.r_x.(1 - \cos(k_1.\Delta x)) + 1\right]^2 \leq 1 - Cr^2$$

Tomando la peor condición, finalmente se obtiene

$$Cr \leq \sqrt{\left[-2.r_x.(1 - \cos(k_1.\Delta x)) + 1\right]^2 + 1} \quad \rightarrow \quad Cr \leq 1$$

2.3. Elección de pasos espaciales y temporales

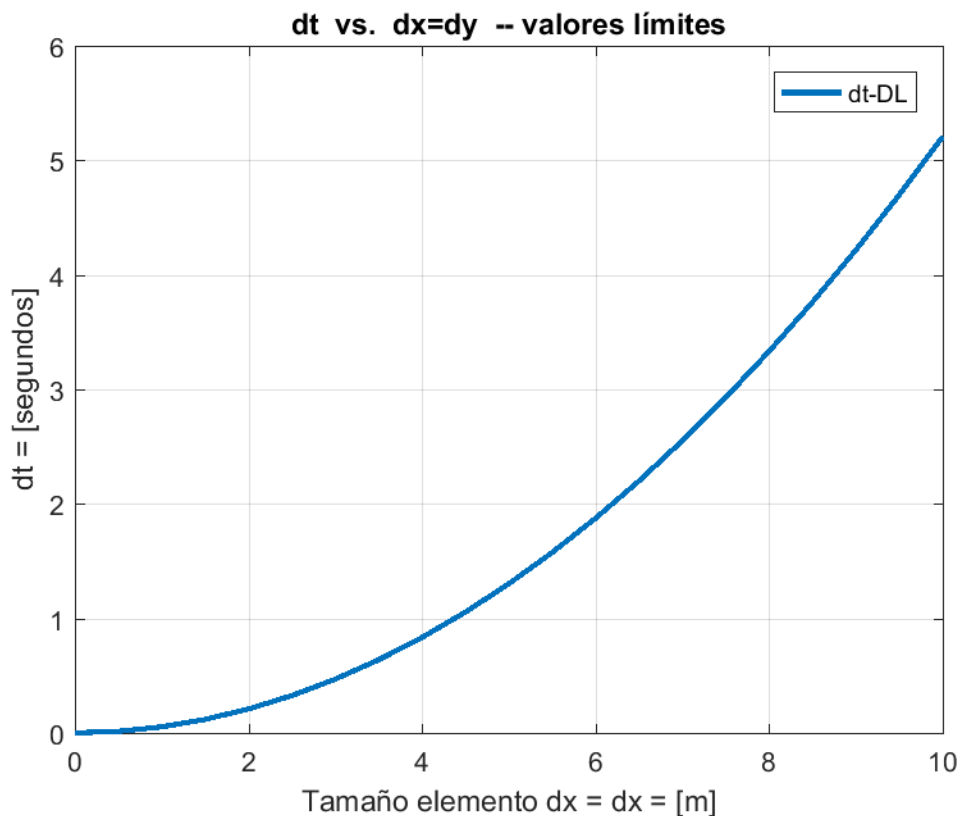
Para la ecuación advección - Difusión propuesta, la elección de los pasos tanto temporales como espaciales, se elegirá mediante las condiciones de estabilidad calculadas:

$$0 \leq r_x \leq \frac{1}{2}, \quad Cr \leq 1$$

Por lo tanto,

$$r_x = \frac{D_L \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \rightarrow \boxed{\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{D_L}}$$

Y ya que, $D_L = e_L h.f.u$ y fijando el paso espacial, se obtiene una expresión cuadrática que estima el máximo valor de “dt” aceptable para garantizar la estabilidad de la solución



Como se puede ver en la imagen, cada paso espacial (dx=dy) tiene un paso temporal (dt) límite. En el presente trabajo, se optará por elegir un paso temporal dentro de ese límite, que además verifique las condiciones de estabilidad.

3. BIDIMENSIONAL - método implícito, Crank-Nicholson

3.1. Discretización

Para la ecuación advección - Difusión propuesta, la discretización Implícita por el método de Crank-Nicholson se obtiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - kC$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_{i,j}^{(n+1)} - C_{i,j}^{(n)}}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = u \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{C_{i+1,j}^{(n)} - C_{i-1,j}^{(n)}}{2\Delta x} + \frac{C_{i+1,j}^{(n+1)} - C_{i-1,j}^{(n+1)}}{2\Delta x} \right) + O(\Delta x^2)$$

$$D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = D_L \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{C_{i+1,j}^{(n)} - 2C_{i,j}^{(n)} + C_{i-1,j}^{(n)}}{\Delta x^2} + \frac{C_{i+1,j}^{(n+1)} - 2C_{i,j}^{(n+1)} + C_{i-1,j}^{(n+1)}}{\Delta x^2} \right) + O(\Delta x^2)$$

$$D_T \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = D_T \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{C_{i,j+1}^{(n)} - 2C_{i,j}^{(n)} + C_{i,j-1}^{(n)}}{\Delta y^2} + \frac{C_{i,j+1}^{(n+1)} - 2C_{i,j}^{(n+1)} + C_{i,j-1}^{(n+1)}}{\Delta y^2} \right) + O(\Delta y^2)$$

$$kC = k \cdot C_{i,j}^{(n)}$$

Reagrupando y despreciando los términos de orden superior, se llega a la siguiente expresión,

Siendo el error de truncamiento,

$$\text{error} = O(\Delta t, \Delta x^2, \Delta y^2)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^{(n+1)} - C_{i,j}^{(n)}}{\Delta t} + u \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{C_{i+1,j}^{(n)} - C_{i-1,j}^{(n)}}{2\Delta x} + \frac{C_{i+1,j}^{(n+1)} - C_{i-1,j}^{(n+1)}}{2\Delta x} \right) = \\ D_L \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{C_{i+1,j}^{(n)} - 2C_{i,j}^{(n)} + C_{i-1,j}^{(n)}}{\Delta x^2} + \frac{C_{i+1,j}^{(n+1)} - 2C_{i,j}^{(n+1)} + C_{i-1,j}^{(n+1)}}{\Delta x^2} \right) \\ + D_T \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{C_{i,j+1}^{(n)} - 2C_{i,j}^{(n)} + C_{i,j-1}^{(n)}}{\Delta y^2} + \frac{C_{i,j+1}^{(n+1)} - 2C_{i,j}^{(n+1)} + C_{i,j-1}^{(n+1)}}{\Delta y^2} \right) - k \cdot C_{i,j}^{(n)} \end{aligned}$$

Llamando,

$$Cr = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad , \quad r_x = \frac{D_L \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \quad , \quad r_y = \frac{D_T \cdot \Delta t}{\Delta y^2}$$

$$\begin{aligned} C_{i+1,j}^{(n+1)} \left(\frac{1}{4} \cdot Cr - \frac{r_x}{2} \right) + C_{i-1,j}^{(n+1)} \left(-\frac{1}{4} \cdot Cr - \frac{r_x}{2} \right) + C_{i,j}^{(n+1)} (1 + r_x + r_y) \\ + C_{i,j+1}^{(n+1)} \left(-\frac{r_y}{2} \right) + C_{i,j-1}^{(n+1)} \left(-\frac{r_y}{2} \right) = C_{i+1,j}^{(n)} \left(-\frac{1}{4} \cdot Cr + \frac{r_x}{2} \right) \\ + C_{i-1,j}^{(n)} \left(\frac{1}{4} \cdot Cr + \frac{r_x}{2} \right) + C_{i,j}^{(n)} (1 - r_x - r_y - k \cdot \Delta t) + C_{i,j+1}^{(n)} \left(\frac{r_y}{2} \right) + C_{i,j-1}^{(n)} \left(\frac{r_y}{2} \right) \end{aligned}$$

Para demostrar la consistencia del método, basta con indicar que reduciendo los pasos temporales y espaciales a cero, la medida del error tiende también a cero,

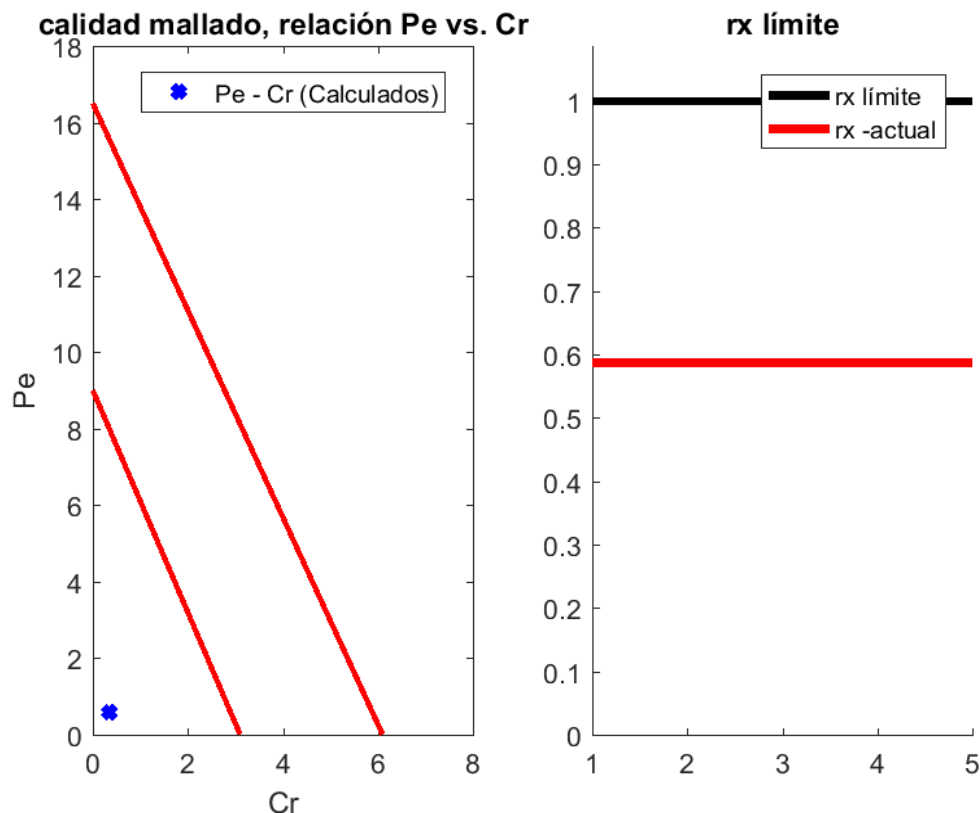
$$\varepsilon_j^n \rightarrow 0 \quad \text{si} \quad (\Delta t \rightarrow 0 \quad , \quad \Delta x \rightarrow 0 \quad , \quad \Delta y \rightarrow 0)$$

El sistema planteado mediante el método de Crank-Nicholson es incondicionalmente estable, no obstante, se debe tener en cuenta que la elección del valor de “ r ” debe

mantenerse no mayor a 1 ($rx < 1$) para seguir la marcha de la solución (ver apunte Menendez “errores en la solución numérica de ecs. diferenciales”), ya que de lo contrario se presentarían problemas de estabilidad, esto hará que el paso de tiempo deba limitarse aún más.

3.2. Elección de pasos espaciales y temporales

La ecuación advección - Difusión propuesta, discretizada mediante el método de Crank Nicholson, es incondicionalmente estable, sin embargo deben tenerse en cuenta que la elección de los pasos puede dar lugar a mala calidad de mallas de discretización y con ello inestabilidades en la solución obtenida. La forma de determinar qué tan aceptable será una malla o no, se puede resumir en esta gráfica que relaciona los números de Peclet, de Courant y de constante longitudinal adimensional, con el tipo de tamaño de mallado,



El código desarrollado para la implementación de la solución al problema propuesto, además calcula los números de Peclet y de Courant y permite visualizar qué tan aceptable es la calidad del mallado en función de la constante “rx”, de forma de poder efectuar las correcciones pertinentes.

4. UNIDIMENSIONAL - método implícito, Crank-Nicholson

4.1. Discretización

Para la ecuación advección - Difusión propuesta, la discretización Implícita por el método de Crank Nicholson se obtiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad \underbrace{+ D_T \cdot C - k \cdot C}_{\text{términos de Pérdida}}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_i^{(n+1)} - C_i^{(n)}}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = u \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{C_{i+1}^{(n)} - C_{i-1}^{(n)}}{2\Delta x} + \frac{C_{i+1}^{(n+1)} - C_{i-1}^{(n+1)}}{2\Delta x} \right) + O(\Delta x^2)$$

$$D_L \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = D_L \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{C_{i+1}^{(n)} - 2C_i^{(n)} + C_{i-1}^{(n)}}{\Delta x^2} + \frac{C_{i+1}^{(n+1)} - 2C_i^{(n+1)} + C_{i-1}^{(n+1)}}{\Delta x^2} \right) + O(\Delta x^2)$$

$$D_T \cdot C = D_T \cdot \frac{1}{2 \cdot \Delta y^2} \cdot \left(-2C_{i,j}^{(n)} - 2C_{i,j}^{(n+1)} \right)$$

$$kC = k \cdot C_i^{(n)}$$

Llamando,

$$Cr = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad , \quad r_x = \frac{D_L \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \quad , \quad r_y = \frac{D_T \cdot \Delta t}{\Delta y^2}$$

$$C_{i+1}^{(n+1)} \left(\frac{1}{4} \cdot Cr - \frac{r_x}{2} \right) + C_{i-1}^{(n+1)} \left(-\frac{1}{4} \cdot Cr - \frac{r_x}{2} \right) + C_i^{(n+1)} (1 + r_x + r_y)$$

$$= C_{i+1}^{(n)} \left(-\frac{1}{4} \cdot Cr + \frac{r_x}{2} \right) + C_{i-1}^{(n)} \left(\frac{1}{4} \cdot Cr + \frac{r_x}{2} \right) + C_i^{(n)} (1 - r_x - r_y - k \cdot \Delta t)$$

Para demostrar la consistencia del método, basta con indicar que reduciendo los pasos temporales y espaciales a cero, la medida del error tiende también a cero,

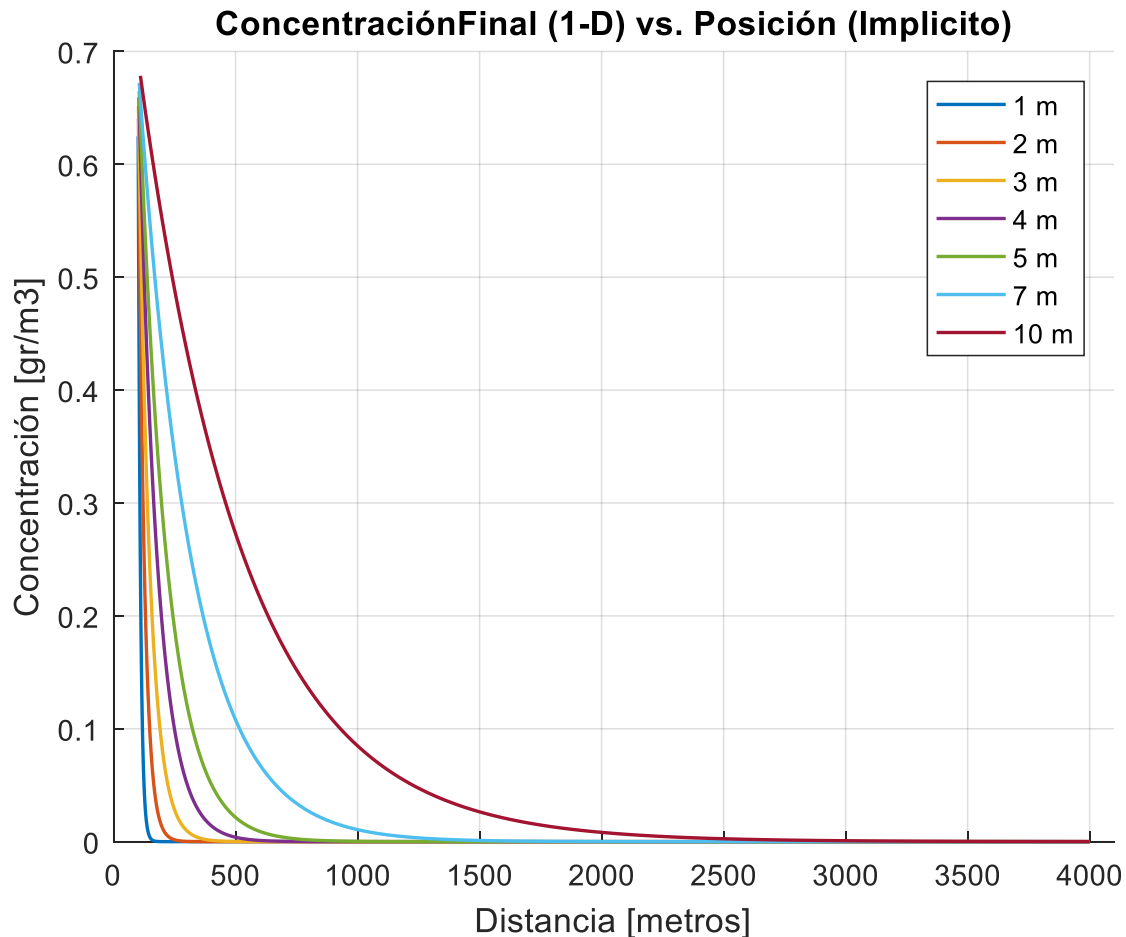
$$\varepsilon_j^n \rightarrow 0 \quad \text{si} \quad (\Delta t \rightarrow 0, \Delta x \rightarrow 0, \Delta y \rightarrow 0)$$

El sistema planteado mediante el método de Crank Nicholson es incondicionalmente estable, no obstante, se debe tener en cuenta que la elección del valor de “r” debe mantenerse no mayor a 1 ($r_x < 1$) para seguir la marcha de la solución (ver apunte Menendez “errores en la solución numérica de ecs. diferenciales”), ya que de lo contrario se presentarían problemas de estabilidad, esto hará que el paso de tiempo deba limitarse aún más.

La elección de los pasos espaciales y temporales, se realiza siguiendo el mismo planteo que para el método Implícito Bidimensional.

5. RESULTADOS – Modelo Unidimensional

La implementación del código computacional del modelo unidimensional Implícito arroja los siguientes resultados para una velocidad y profundidad constantes, durante un tiempo de simulación de 2 horas y distintas relaciones de pasos temporales y espaciales:

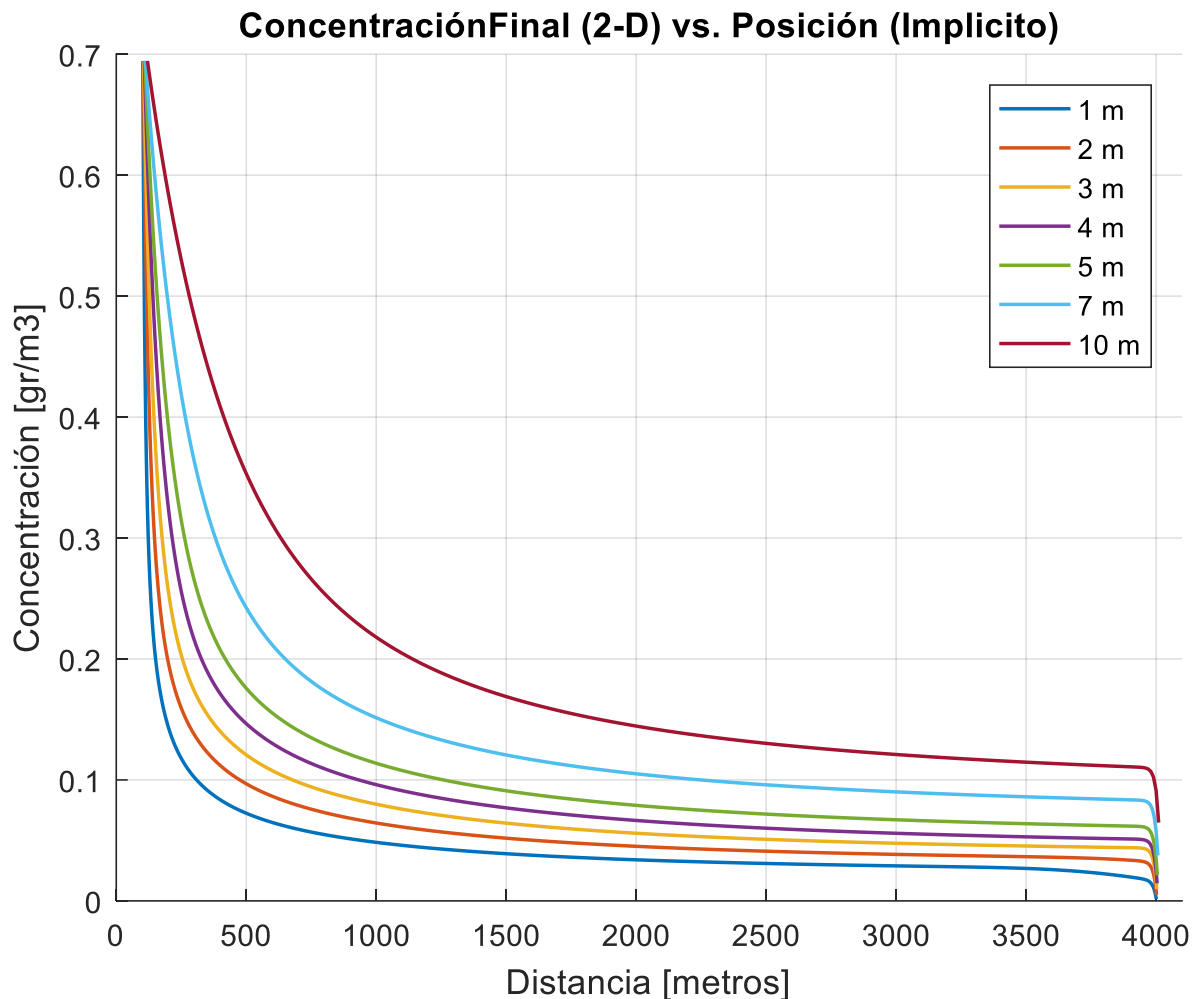


En donde se observa que al refinar la discretización se obtiene una mejor aproximación de la solución. Los resultados son mostrados a partir del nodo contaminante y se supone conocido el caudal de entrada del contaminante.

Se puede ver que al agregar los términos de pérdidas se logra una buena aproximación de la solución aunque al ser un modelo Unidimensional, se tiene en cuenta parte del efecto, esto es, se considera que transversalmente el nodo pierde concentración, cuando en realidad en el modelo bidimensional, en la dirección transversal además de perder concentración también se almacena, ya que la misma se difunde hacia los nodos contiguos, por lo que la concentración en el estacionario no sería cero (Lo cual se verifica en el caso bidimensional).

6. RESULTADOS – Modelo Bidimensional – Caudal de entrada

La implementación del código computacional del modelo Bidimensional arroja los siguientes resultados para una velocidad y profundidad constantes, durante un tiempo de simulación de 2 horas y distintas relaciones de pasos temporales y espaciales. Se realiza un corte longitudinal a la altura del contaminante y se grafican los resultados obtenidos, se supone conocido el caudal de entrada del contaminante (1 m³/seg).

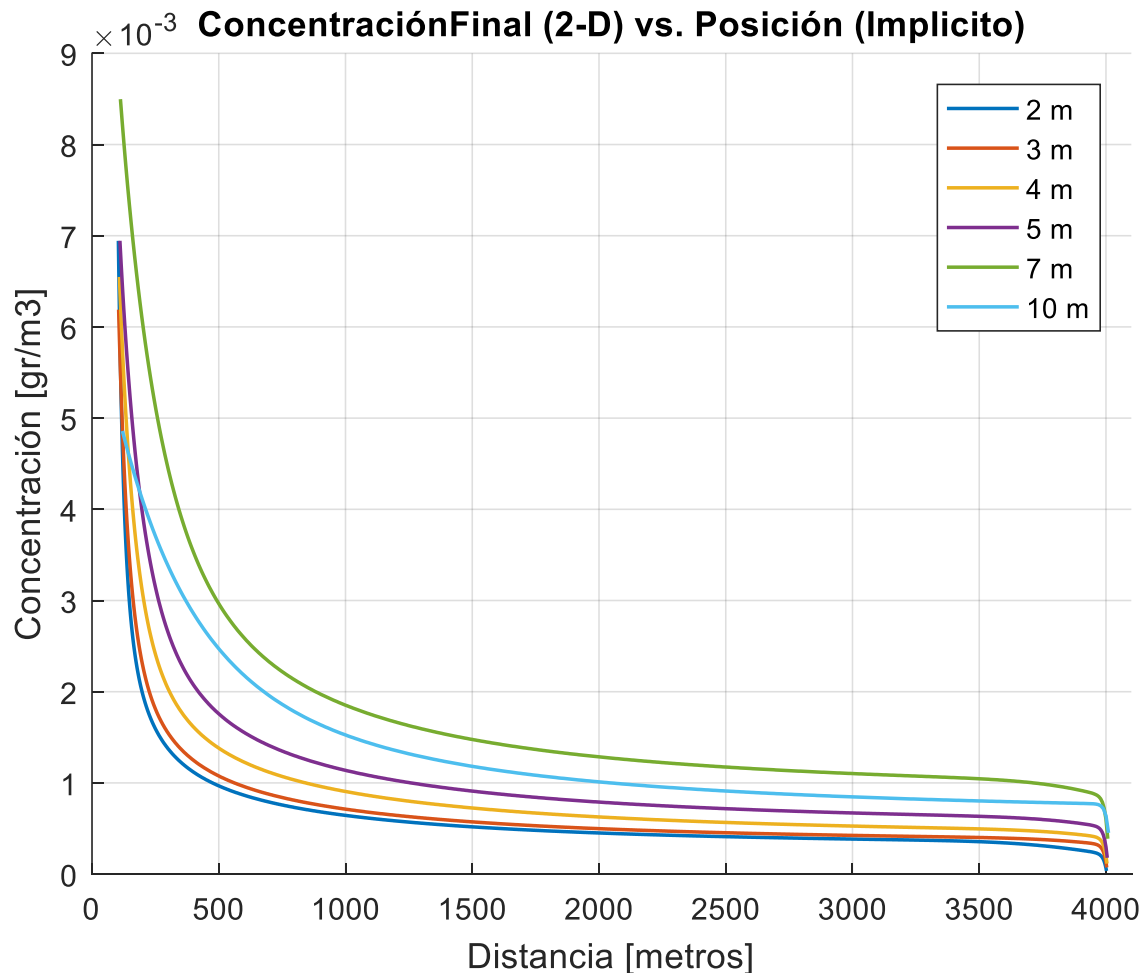


En donde se observa que al refinar la discretización se obtiene una mejor aproximación de la solución. Los resultados son mostrados a partir del nodo contaminante.

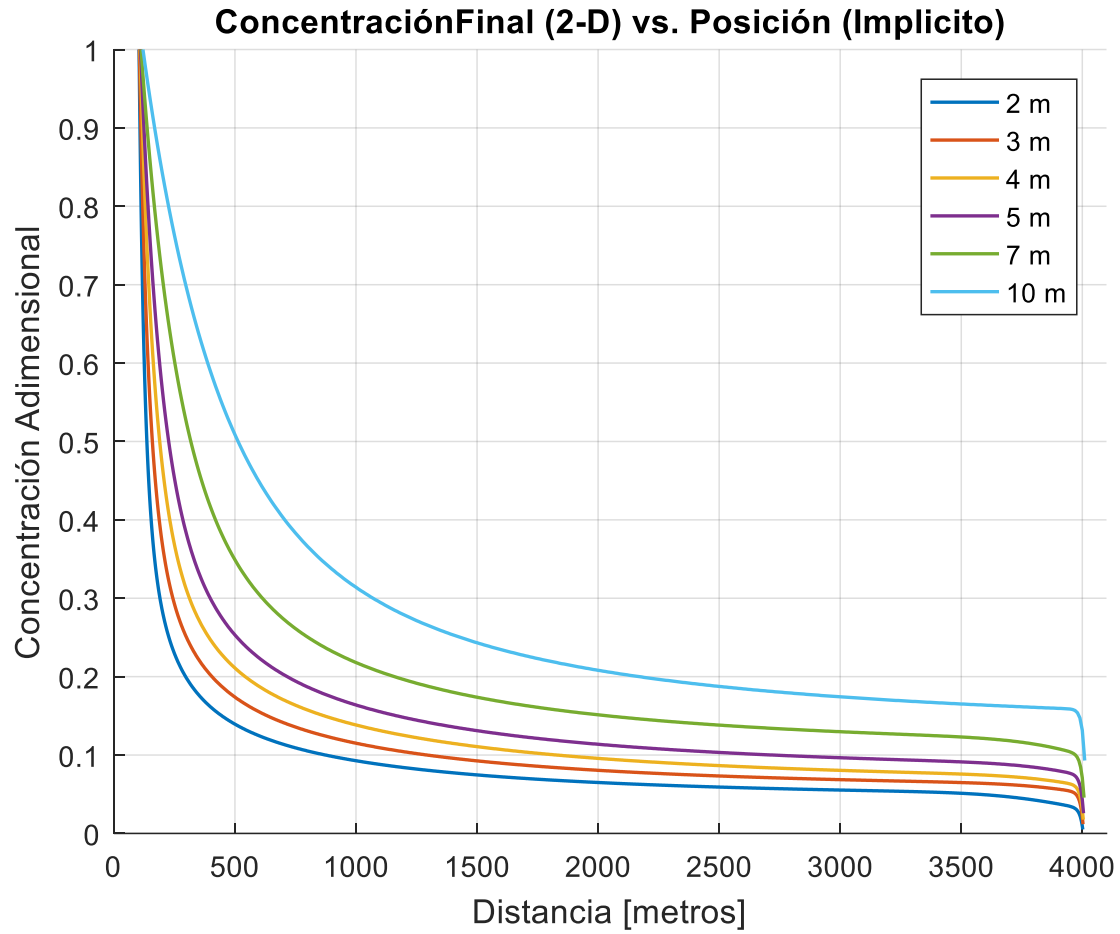
Se puede ver que la concentración estacionaria en ningún caso llega a cero, debido al efecto de considerar ambas direcciones en el problema bidimensional.

7. RESULTADOS – Modelo Bidimensional – Caudal de salida

La implementación del código computacional del modelo Bidimensional arroja los siguientes resultados para una velocidad y profundidad constantes, durante un tiempo de simulación de 2 horas y distintas relaciones de pasos temporales y espaciales. Se realiza un corte longitudinal a la altura del contaminante y se grafican los resultados obtenidos, se supone que la concentración actuará en el volumen elemental, por lo que se puede ver en la gráfica que el nodo contaminante toma valores distintos, según la discretización adoptada.



Con la finalidad de poder realizar una correcta comparación, ya que la fuente de contaminante se expresa en una concentración distinta según el tipo de volumen elemental considerado, se adimensionaliza en según el valor máximo en cada discretización, obteniéndose los siguientes resultados adimensionalizados en la dirección de la concentración,

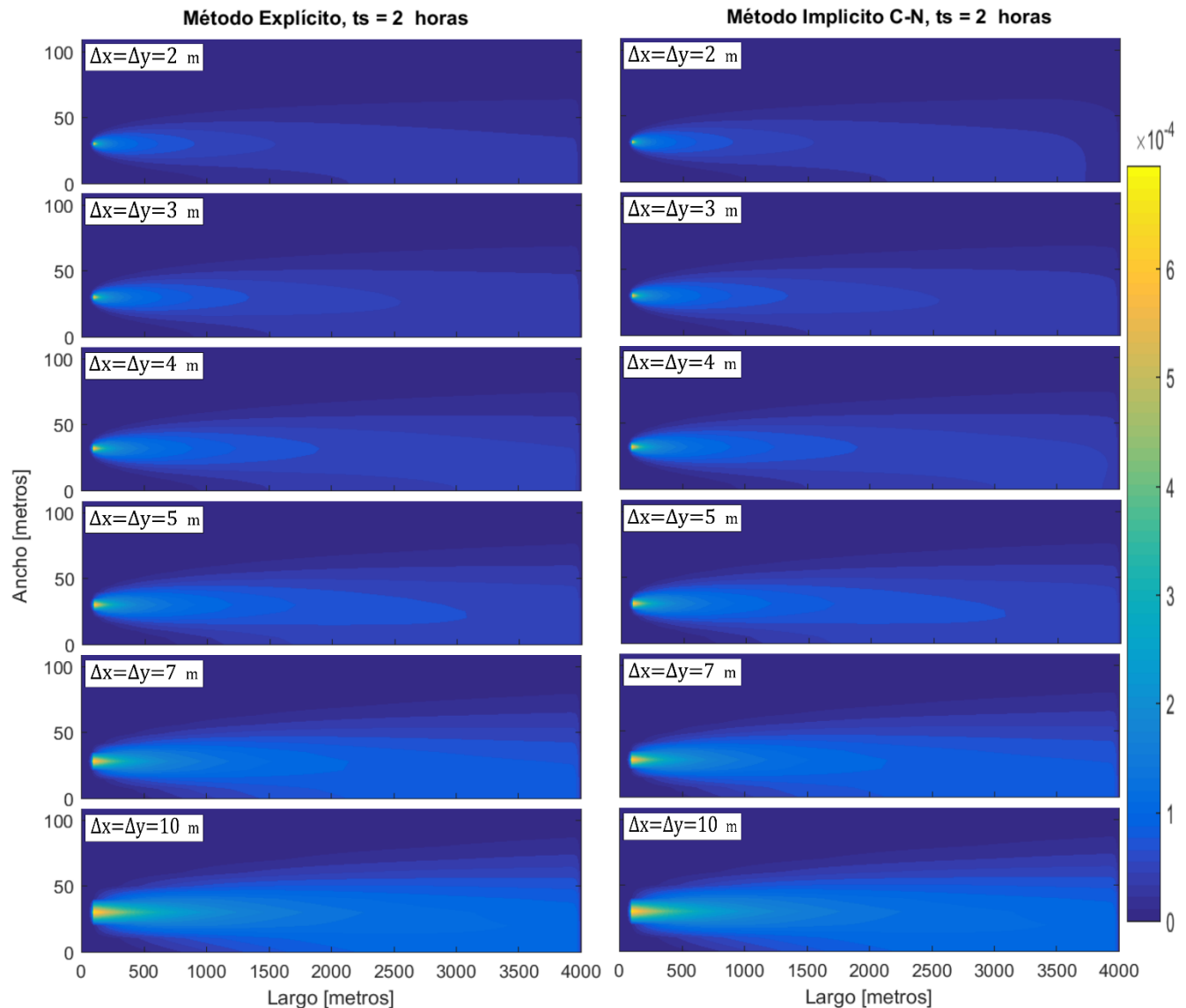


8. COMPARATIVA – DISCRETIZACIÓN, Modelo Bidimensional

8.1. Caso 01

Para la ecuación advección - difusión propuesta, se obtienen las siguientes soluciones temporales para distintos pasos de tiempo, considerando el caudal de entrada conocido:

- Se realiza una comparación entre ambos métodos de solución propuestos,
- En este caso se supone, velocidad constante y profundidad constante.

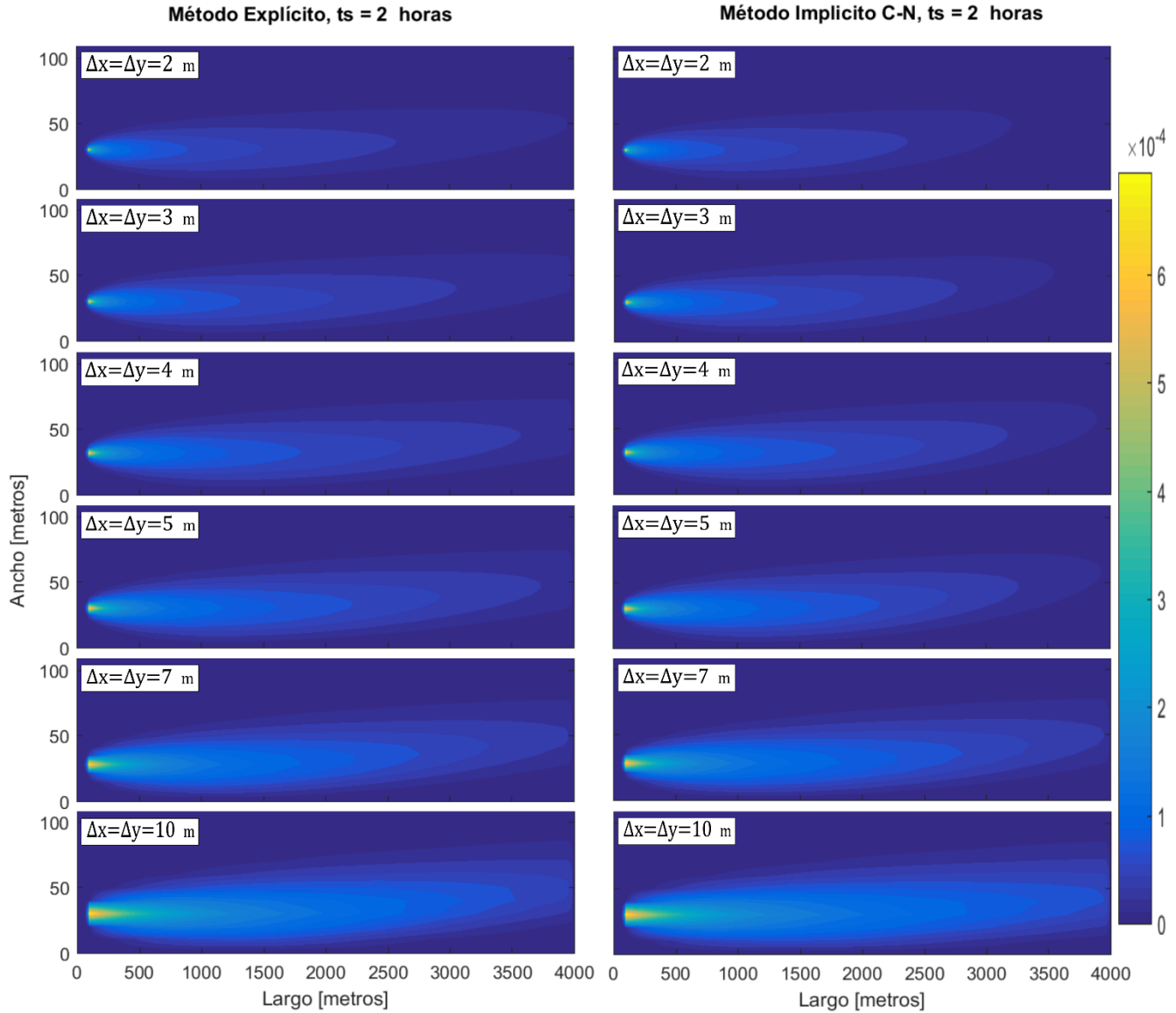


Se observa una notable mejora a medida que el tamaño de discretización disminuye, y por otro lado, se observa una leve diferencia hacia el final de la solución según el método sea explícito o implícito.

8.2. Caso 02

Para la ecuación advección - difusión propuesta, se obtienen las siguientes soluciones temporales para distintos pasos de tiempo, considerando el caudal de entrada conocido:

- Se realiza una comparación entre ambos métodos de solución propuestos,
- En este caso se supone, velocidad parabólica y profundidad constante.

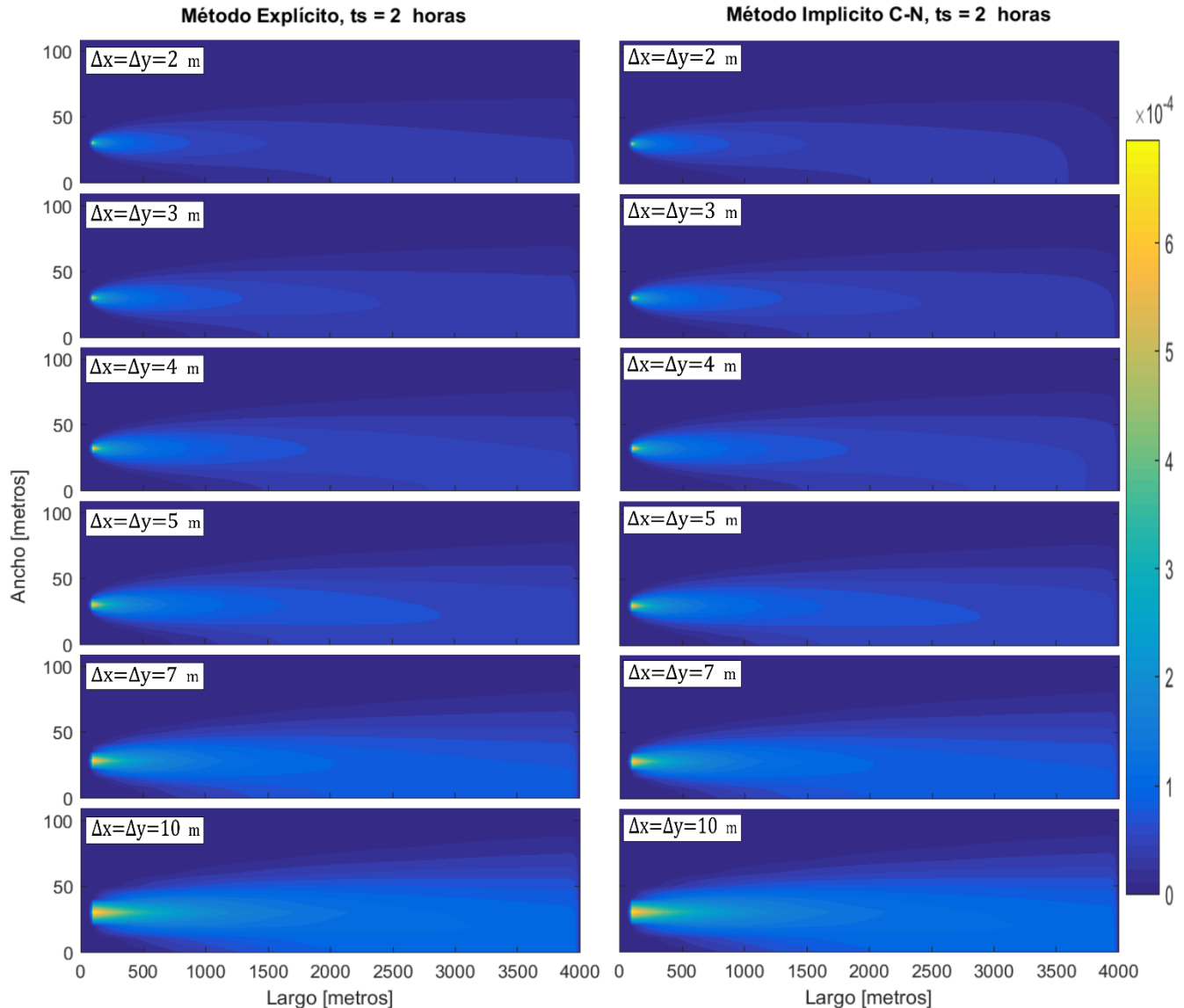


Se observa una notable mejora a medida que el tamaño de discretización disminuye, y por otro lado, se observa una leve diferencia hacia el final de la solución según el método sea explícito o Implícito.

8.3. Caso 03

Para la ecuación advección - difusión propuesta, se obtienen las siguientes soluciones temporales para distintos pasos de tiempo, considerando el caudal de entrada conocido:

- Se realiza una comparación entre ambos métodos de solución propuestos,
- En este caso se supone, velocidad Constante y profundidad variable.

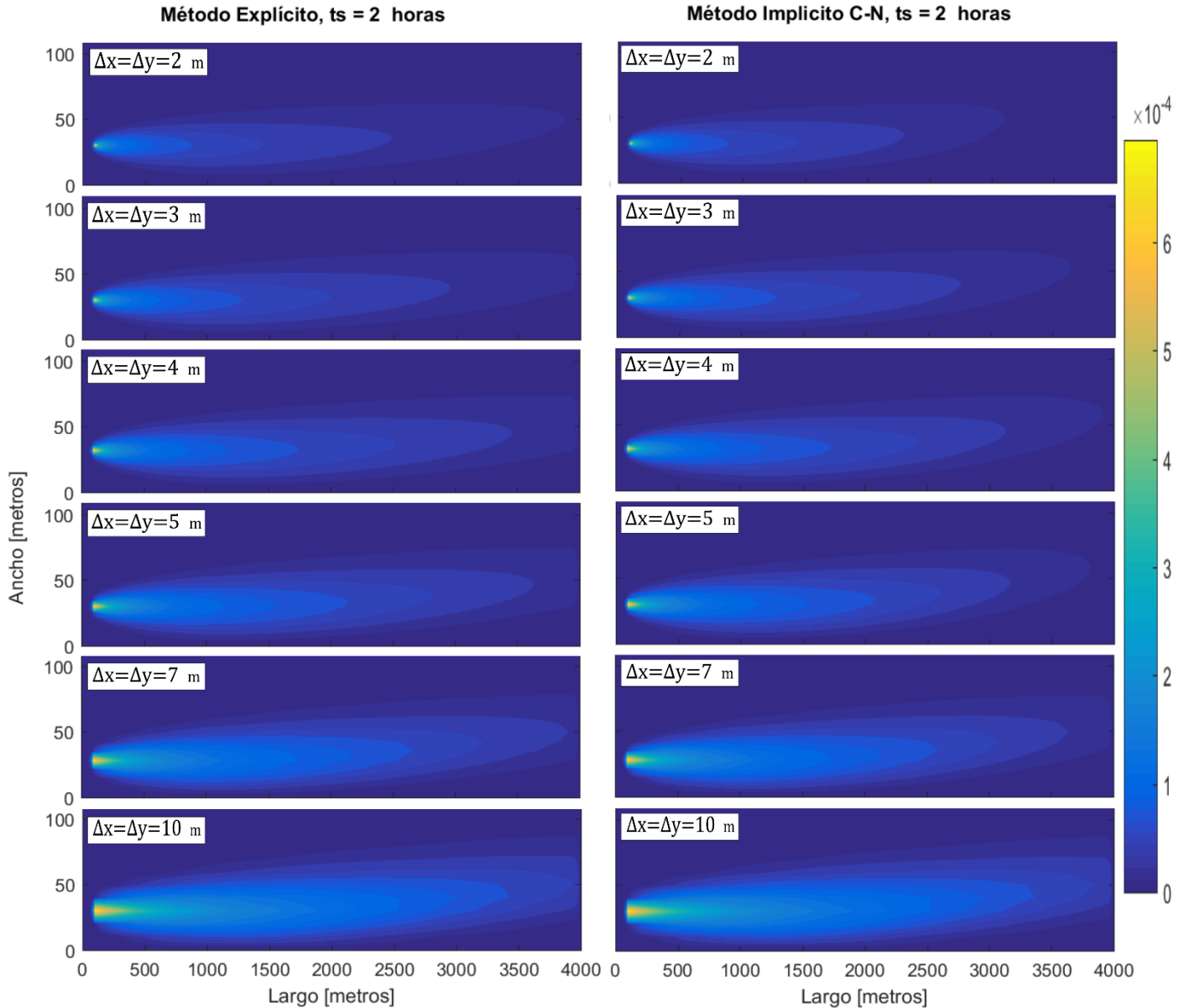


Se observa una notable mejora a medida que el tamaño de discretización disminuye, y por otro lado, se observa una leve diferencia hacia el final de la solución según el método sea explícito o Implícito.

8.4. Caso 04

Para la ecuación advección - difusión propuesta, se obtienen las siguientes soluciones temporales para distintos pasos de tiempo, considerando el caudal de entrada conocido:

- Se realiza una comparación entre ambos métodos de solución propuestos,
- En este caso se supone, velocidad parabólica y profundidad variable.



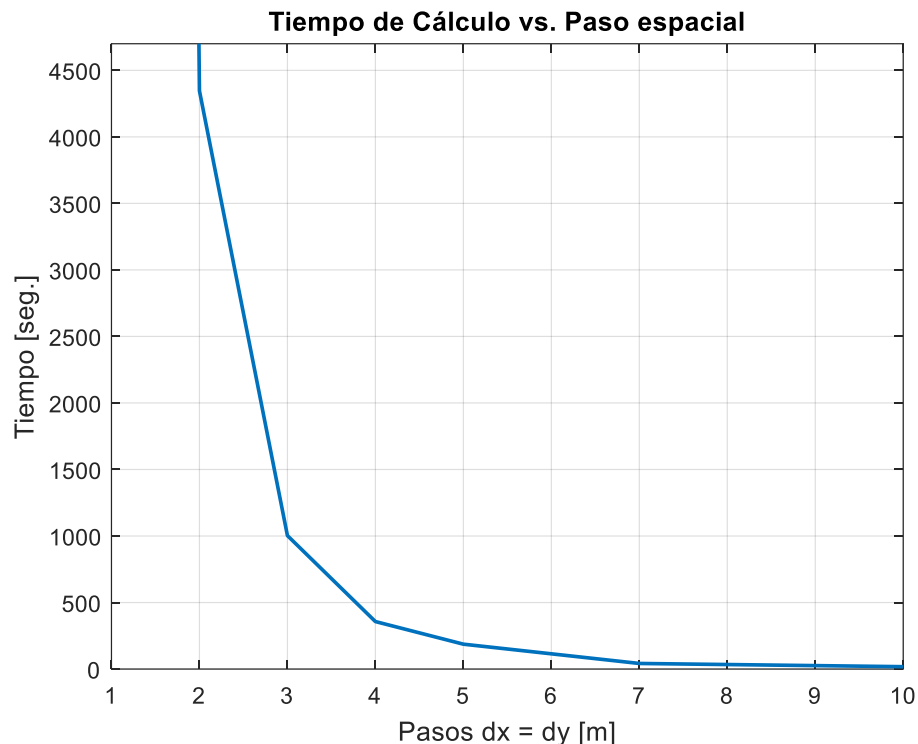
Se observa una notable mejora a medida que el tamaño de discretización disminuye, y por otro lado, se observa una leve diferencia hacia el final de la solución según el método sea explícito o implícito.

9. ELECCIÓN DISCRETIZACIÓN

Para realizar la elección de la discretización óptima se considera lo siguiente:

- Análisis de tiempo de cálculo, necesarios para poder realizar la misma simulación temporal, mediante cada uno de los pasos detallados en la sección anterior.
- A partir de los resultados obtenidos en la sección anterior, se observa que entre el método explícito e implícito, no se existen diferencias relevantes por lo cual en adelante, se adopta el método implícito para la presentación de los resultados finales,
- Comparación entre el modelo Unidimensional y Bidimensional, a fin de conocer cuál es la máxima diferencia entre las aproximaciones obtenidas,
- Interpretación física acerca del tipo de modelo matemático utilizado.

Los resultados de tiempos de cálculo obtenidos mediante el método Implícito del modelo Bidimensional, con velocidad y profundidad constantes se resumen en la siguiente gráfica,

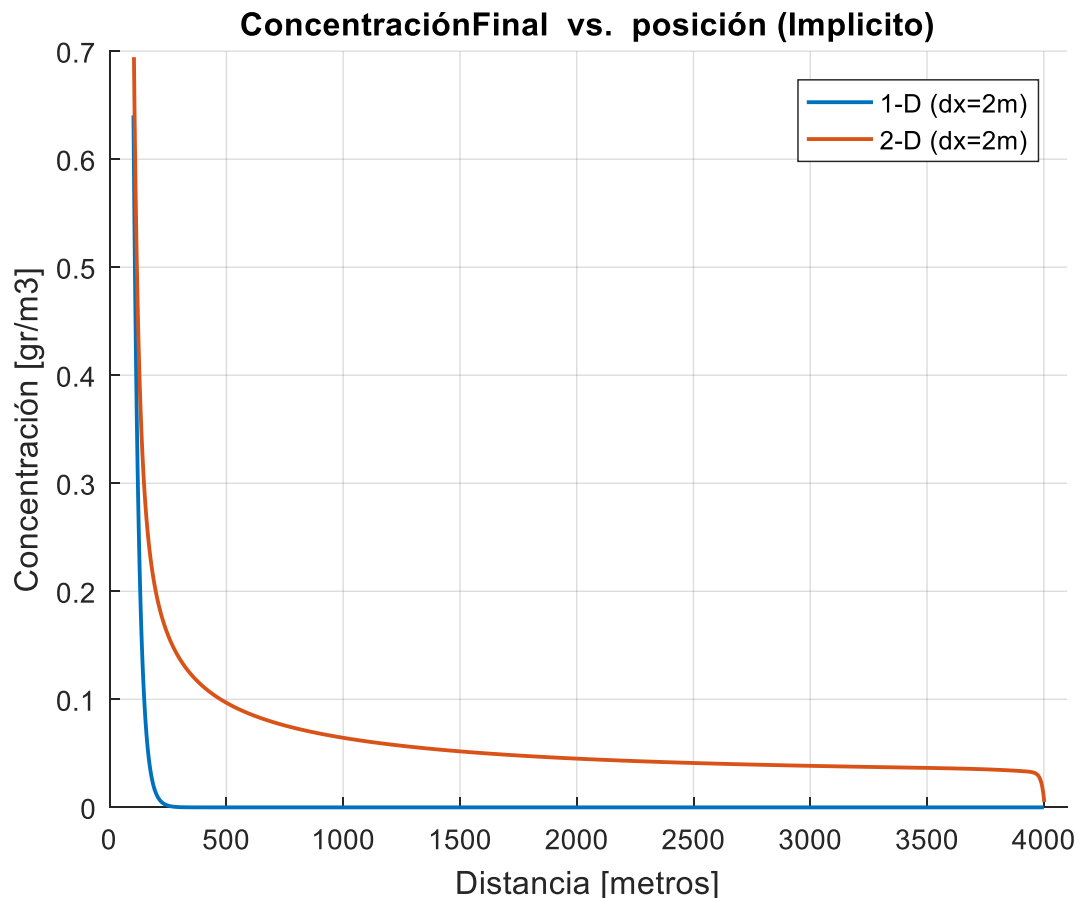


En la siguiente tabla se resumen además, los nodos necesarios para cada tipo de discretización espacial, donde se observa que la menor discretización óptima sería la correspondiente a una de 2 metros de lado, ya que las discretizaciones de menor tamaño aumentan excesivamente el tiempo de cálculo y la cantidad de nodos.

Paso $dx = dy$ [m]	Paso Temporal dt [seg]	Intervalos de tiempo, para 2 hs.	Tiempo Simulación [seg.]	Nodos
----------------------------	-----------------------------------	--	---------------------------------	-------

1.0	0.1	72,000	64,800	1,404,351
2.0	0.4	18,000	4,346	352,176
3.0	0.8	9,000	1,003	157,412
4.0	1.5	4,800	357	89,089
5.0	2.5	2,880	187	56,871
7.0	5.0	1,440	42	29,172
10.0	7.0	1,029	17.8	14,436

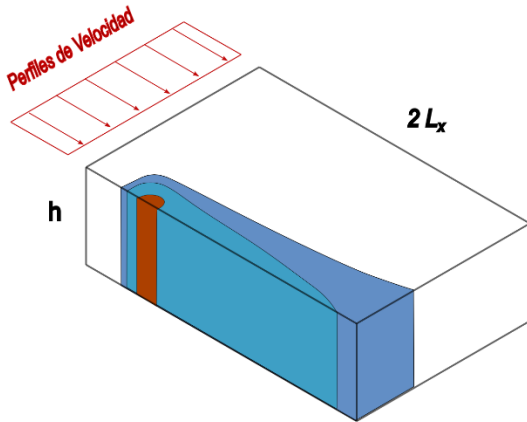
Realizando una comparación entre los modelos Unidimensional y Bidimensional, para la discretización de 2 metros se obtiene,



Se observa una diferencia entre la solución obtenida entre el modelo Unidimensional y Bidimensional, ya que como se mencionó, el modelo Unidimensional contempla únicamente una pérdida en el nodo, no logrando captar que el nodo también conserva y

luego difunde, como sí lo permite simular el modelo bidimensional y razón por la cual la concentración estacionaria no llega a anularse.

Con respecto a la concentración final, se asume que en la realidad la misma sería prácticamente nula, ya que el modelo bidimensional considerado es una simplificación que asume que la distribución de concentración es constante a lo largo de la profundidad del río, tal como se ejemplifica,



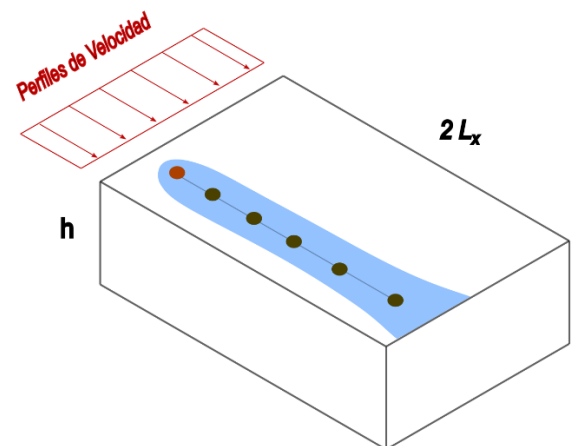
Situación que en un modelo tridimensional no debería darse, ya que se consideraría además, la difusión en la dirección vertical. Se puede concluir entonces que la concentración estacionaria en un modelo tridimensional o en el caso real será menor que la calculada en el presente trabajo.

10. SOLUCIÓN ESTACIONARIA

Para corroborar lo mencionado en el apartado anterior, en cuanto a la elección de la discretización óptima, se realiza un estudio que permita conocer el tiempo necesario para alcanzar la solución estacionaria, mostrando los tiempos empleados para un esquema implícito y considerando cada una de las discretizaciones propuestas.

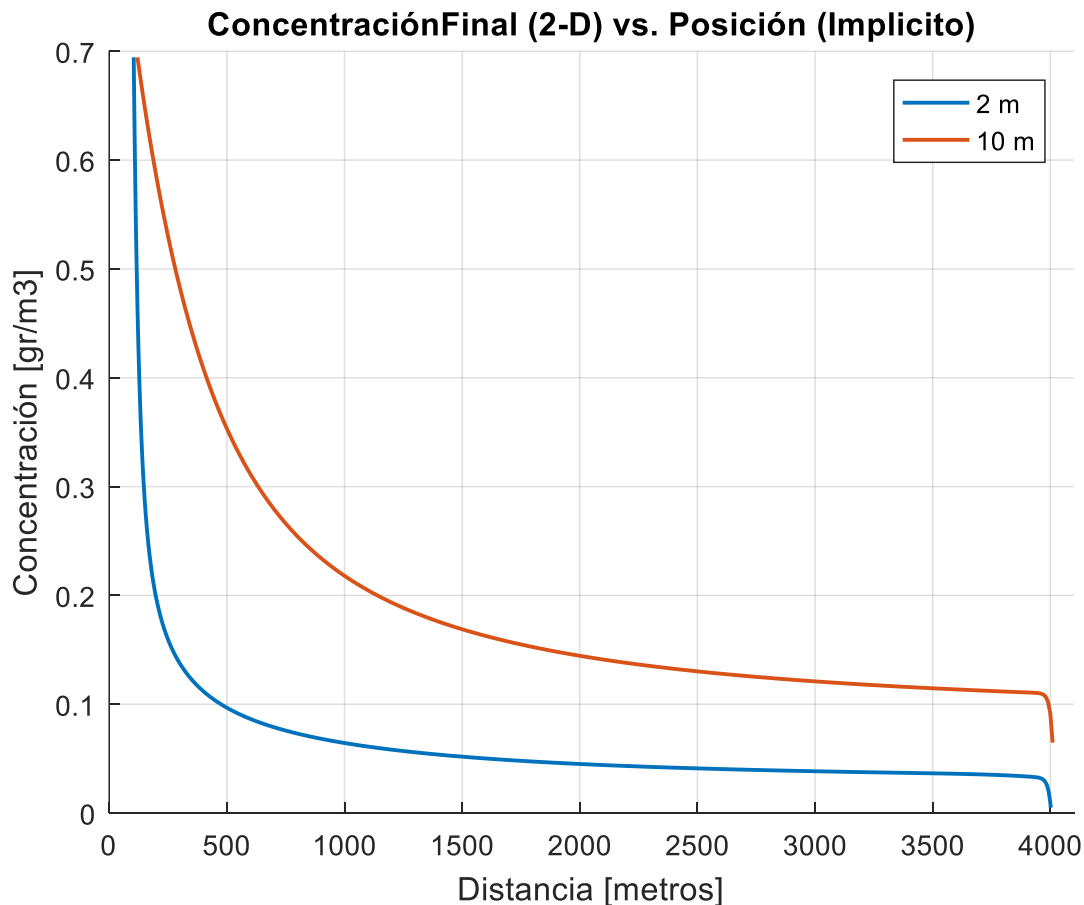
Se ubicaron puntos de prueba en la misma línea del contaminante y se observó la variación de todos ellos en simultáneo, en cuanto la solución en cada punto y luego de varias iteraciones se mantuviese constante, se comprobó que la solución se encontraba estabilizada o en estado estacionario.

Paso $dx = dy$ [m]	Paso Temporal dt [seg]	Intervalos de tiempo, para 2 hs.	Tiempo solución Estacionaria [seg.]
1.0	0.1	72,000	7200
2.0	0.4	18,000	7028
3.0	0.8	9,000	5817
4.0	1.5	4,800	4081
5.0	2.5	2,880	657
7.0	5.0	1,440	150
10.0	7.0	1,029	7



Se observa que a medida que la discretización espacial disminuye, los tiempos necesarios para alcanzar la solución estacionaria aumentan, esto es debido a que al disminuir la discretización espacial, también lo hace la discretización temporal.

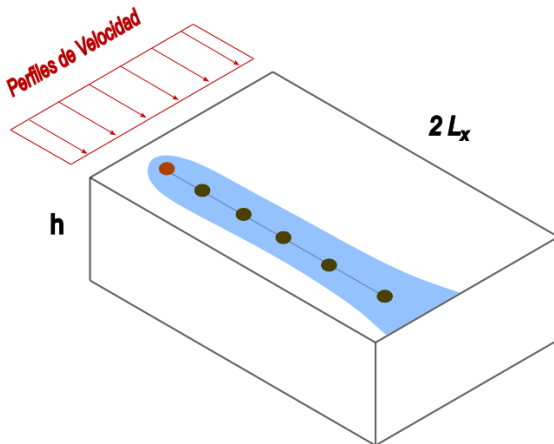
A pasos más pequeños, el modelo puede representar mejor las distintas evoluciones del problema en estudio, en particular la parte transitoria, ya que logra captar el detalle completo de la solución.



En la gráfica se puede observar que a partir de los 2000 metros la solución varía poco, pero hasta llegar ahí presentó una evolución distinta según la discretización adoptada. Como se puede observar, una discretización menor permite captar el detalle completo de la evolución de la concentración.

11. ESTUDIO DEL ERROR

Para el estudio del error de la solución Numérica, se toma como solución exacta a la solución obtenida para una malla de paso espacial $dx = dy = 2$ metros, y con ella se estiman los errores de las aproximaciones para distintos tipos de mallas de simulación.



Tomando en cuenta la posición del Nodo fuente, se calculan una serie de puntos sobre una recta en la dirección longitudinal (dirección del río) que serán puntos de testeo de la solución. Ya que no se conoce la solución exacta, y como las discretizaciones son todas distintas, se necesita asegurar con la mayor precisión posible que se están analizando los mismos puntos de testeo.

Se desarrolló un código computacional (ver en anexo “error_num.m”) que busca la posición más cercana en las distintas discretizaciones, de los nodos de testeo determinados para la estimación, de manera de comparar los mismos puntos sin importar el tamaño de malla.

Considerando como la solución exacta a la solución obtenida para la malla de $dx = 2$ m, el error en la estimación numérica se calcula de la siguiente forma,

$$|\text{error}| = \text{solución}_{\text{exacta}, dx=2m} - \text{solución}_{\text{discretización Nueva}}$$

Mediante la implementación del código computacional, se obtienen los siguientes resultados, considerando solamente el error máximo en casa estudio

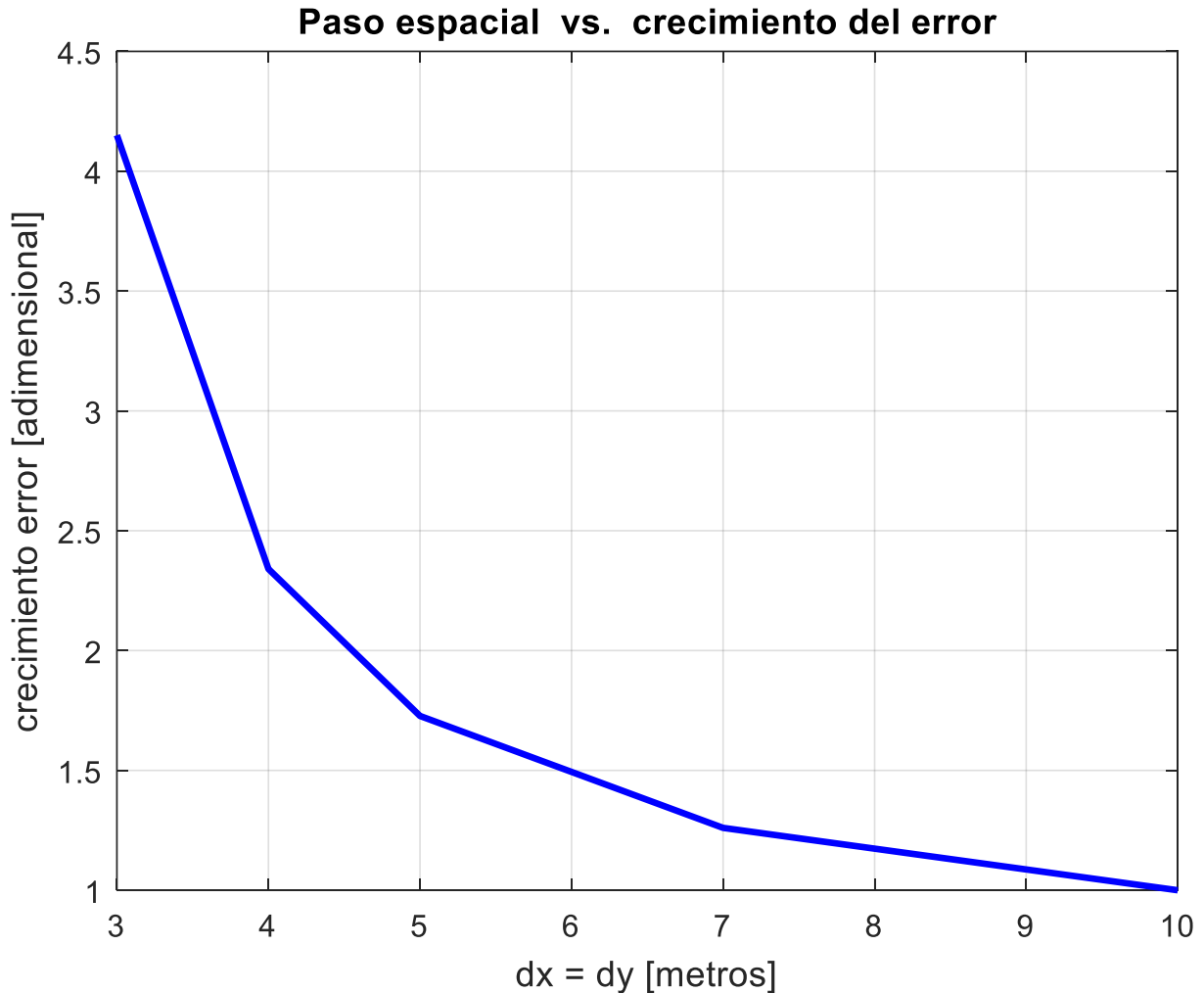
Pasos Espaciales	$dx = 10$ m	$dx = 7$ m	$dx = 5$ m	$dx = 4$ m	$dx = 3$ m
Error_máximo	0.3694	0.2931	0.2139	0.1578	0.0890

Donde se observa una clara disminución del error a medida que las discretizaciones disminuyen en tamaño. El error tiende a cero a medida que la discretización disminuye en tamaño.

Con los datos obtenidos del error máximo, se puede estimar la forma que adopta la disminución, esto se puede lograr mediante la siguiente ecuación,

$$n = \frac{\text{error_max}_{dx=10}}{\text{error_max}_{dx=i}}, \text{ siendo } i = 10, 7, 5, 4, 3 \text{ [metros]}$$

De manera de tener una mejor visualización de los resultados, se grafican en un par de ejes,

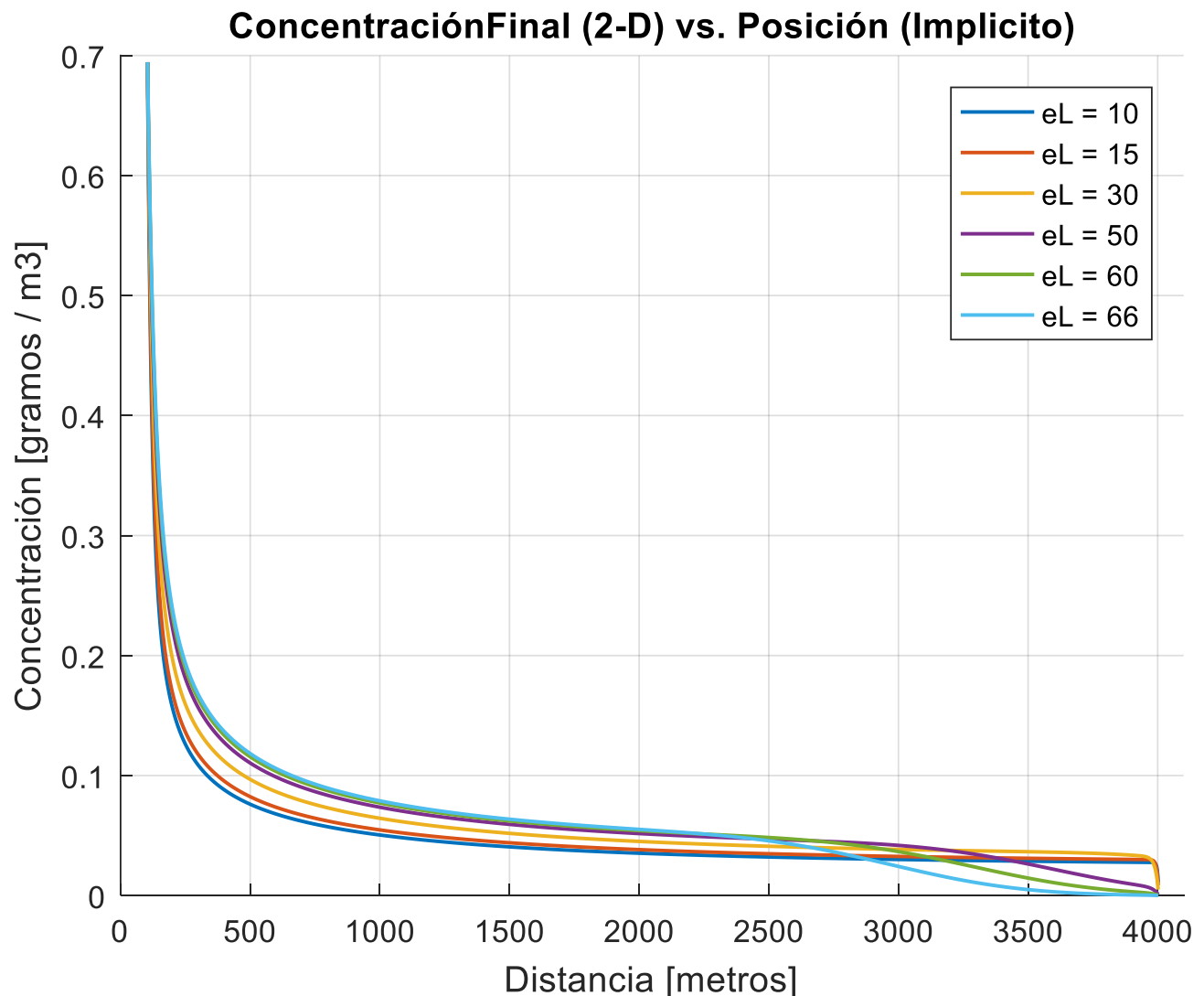


Como puede verse, a medida que la discretización disminuye, el error tiende a cero en una disminución cuadrática respecto de la discretización, lo cual se había planteado como condición teórica.

12. COMPARATIVA – COEF. DE DIFUSIVIDAD ADIMENSIONAL

Para la ecuación advección - difusión propuesta, se obtienen las siguientes soluciones temporales para distintos coeficientes de difusividad adimensional “eL”:

- Se realiza una comparación entre los coeficientes de difusividad considerando un esquema Implícito,
- En este caso se suponen velocidad y profundidad constantes.
- La concentración fuente, con caudal de entrada conocido.



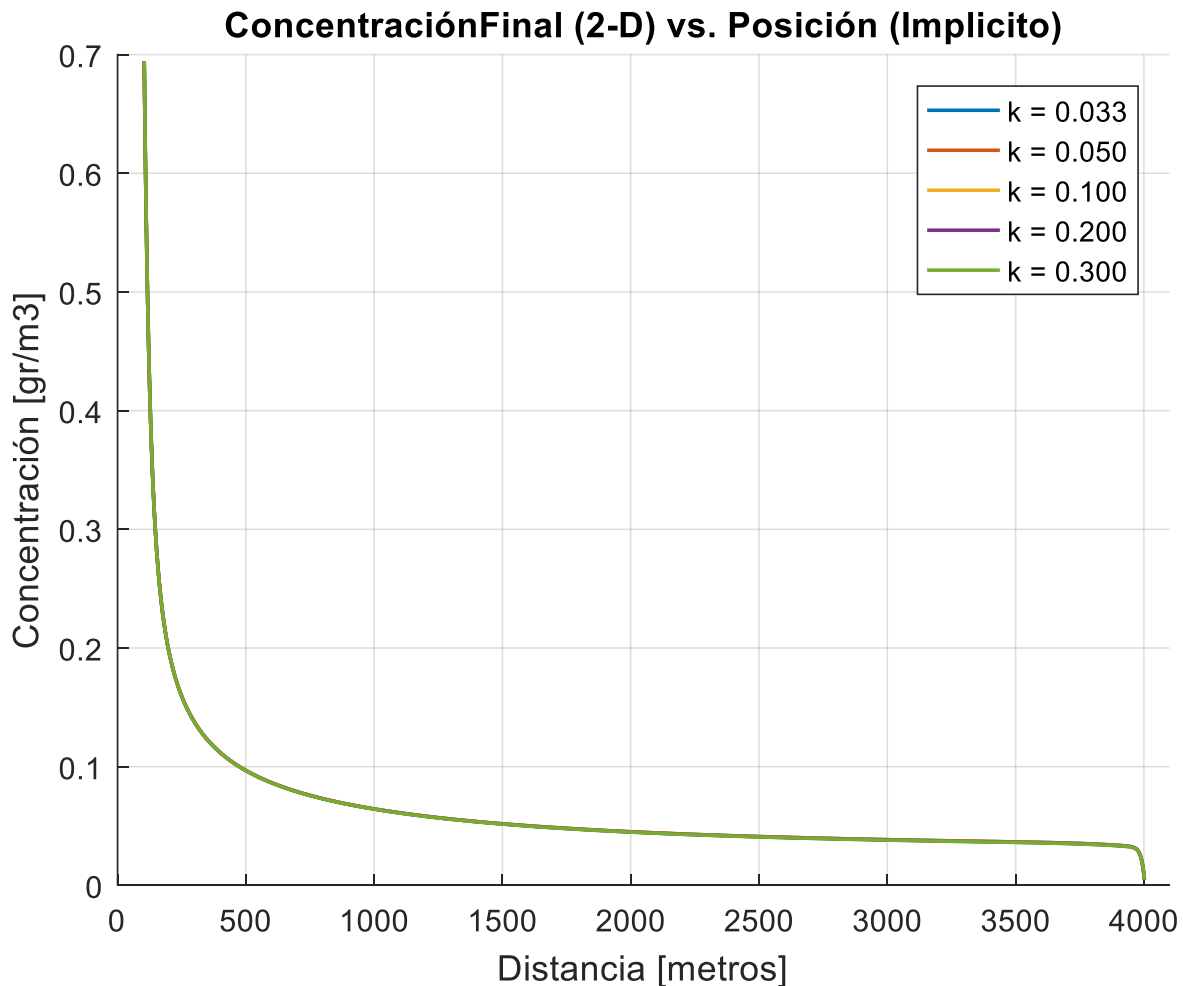
Los resultados son mostrados para el coeficiente de difusividad adimensional Longitudinal, ya que como se ha demostrado es el que domina en el problema estudiado. A medida que el coeficiente “eL” disminuye se observa que la curva tiene a reducir la curva de la solución

en la parte transitoria, mientras que a medida que “eL” aumenta, comienza a ser relevante en el factor “rx” y la solución pierde estabilidad, razón por la cual se optó por colocar el límite mostrado en la figura, se puede observar que para $eL > 30$, la solución comienza a alejarse de la original (y a presentar pequeñas oscilaciones).

13. COMPARATIVA – COEF. DE DECAIMIENTO

Para la ecuación advección - Difusión propuesta, se obtienen las siguientes soluciones temporales para distintos coeficientes de decaimiento “k”:

- Se realiza una comparación entre los coeficientes de decaimiento considerando un esquema Implícito, realizando un corte longitudinal al dominio en estudio.
- En este caso se suponen velocidad y profundidad constantes.
- La concentración fuente, con caudal de entrada conocido.



Se concluye de las gráficas obtenidas, que la solución no tiene una gran sensibilidad respecto del coeficiente de decaimiento, ya que como se mostró el mismo se varió en varios órdenes de magnitud sin observarse cambios relevantes.

14. CONCLUSIONES

Del análisis efectuado en el presente informe, se detallan una serie de conclusiones y consideraciones:

- Se realizó una comparación entre los métodos explícito e implícito, no observándose diferencias relevantes entre ambos. En la mayoría de simulaciones finales se recurrió al esquema implícito, que permitía ciertas libertades en cuanto a la elección del paso temporal.
- Se simuló la respuesta del problema para distintas discretizaciones espaciales y temporales. Las temporales tenían como límite lo desarrollado en la teoría (y expuesto en el trabajo) y las discretizaciones espaciales se fueron analizando caso a caso a fin de obtener alguna relación óptima de paso.
- Se estudió la posibilidad de tener el dato de la fuente de concentración de dos formas, como un caudal conocido de entrada o como un caudal elemental (sobre el volumen sobre el que se descarga el contaminante), observándose diferencias en los límites de la concentración, pero conservando la forma de propagación de la misma.
- Se adoptó un paso espacial tal que permita reducir el tiempo de cálculo y mejore la precisión de la solución, realizando una comparación entre el modelo Unidimensional y Bidimensional.
- Por la forma del planteo del problema de advección difusión bidimensional, se concluye que la concentración efectiva en el estacionario será menor que la calculada, ya que no se contempla la difusión y/o advección en la dirección vertical (ninguno de los modelos propuestos la tiene en cuenta).
- La solución es sensible respecto de las variaciones del coeficiente de difusividad adimensional longitudinal, ya que al variarlo varía el coeficiente “ α ” y el sistema pierde estabilidad.
- La solución no presenta sensibilidad a la variación del coeficiente de decaimiento, ya que al variar el mismo la solución lo hace en menor medida.
- Al analizar el comportamiento según los distintos perfiles de velocidad estudiados, se observa que el perfil de velocidad parabólico representa mejor el comportamiento de la evolución temporal del contaminante, ya que muestra un efecto de arrastre hacia el centro del río (asumiendo que la descarga de contaminante se realiza de forma descentrada al centro del río, medido transversalmente).

Anexo – Códigos de programación

implicito.m

```
%-----
%----- IMPLICITO, C-N -----
%-----
clear all; clc; close all;
constantes;
dxx =[10.0, 7.0, 5.0, 4.0, 3.0, 2.0];
dtt =[7.0, 6.0, 2.5, 1.5, 0.8, 0.4];

for m=1:length(dxx(1,:))
tic
%-----
%----- Pasos -----
%-----
dx = dxx(m); dy = dx; dt = dtt(m); tol=1e-4;%---- incrementos (MODIFICAR)
%dx = 2.0; dy = dx; dt = 0.4; tol=1e-4;
%k=k11(m);
Adim = 0;%----- 1 = si / 0 = no
nx = round(lx/dx); ny = round(ly/dy); dx = lx/nx; dy = ly/ny;
tp= round(ts*60*60/dt); dt = ts*60*60/tp;
%-- Determinación del Nodo Fuente ---
FC_nx = round(posx/dx)+1;% nodo en x
FC_ny = round(posy/dy)+1;% nodo en y
%-- Determinación de Nodos Testeo ---
d_test = [120,150.0,200.0,300.0,500.0,600.0,800.0,1000.0,1200.0,1500.0,1900.0];
for i=1:length(d_test)
    Ft_x = round(d_test(i)/dx)+1;
    Ft_x = (nx+1)*(FC_ny -1) +Ft_x;
end
%-----
%----- Matrices iniciadas -----
%-----
C = zeros((nx+1)*(ny+1),1); % Mapeo matriz vieja a nueva

fuente = FC*1000*dt/(86400*dx*dy*h);
%fuente = FC*1000/(86400);
C((nx+1)*(FC_ny -1) +FC_nx)= fuente;
CC = C;

cr = u*dt/dx;
rx = dt*(eL*h*f*u)/(dx^2);
ry = dt*(eT*h*f*u)/(dy^2);
%-----
%----- solución Gauss seidel -----
%-----
for it =1:tp
    error = 1.0; cont = 1;
    C_ant = C;
    while (error > tol) && (cont < 10000)
        for i =1:(ny+1) % Recorre de forma Vertical - Figura

            for j =1:(nx+1) % Recorre de forma Horizontal - Figura
                ind =(i-1)*(nx+1) +j; % Indice recorrido matriz
```

```

% a = ctes. iteración actual , b = ctes. iteración anterior
a = [(1 +rx +ry),(cr*0.25 -rx*0.5),(-cr*0.25 -rx*0.5),(-0.5*ry),(-
0.5*ry)];

b = [(1 -rx -ry -k*dt/86400),(-cr*0.25 +rx*0.5),(cr*0.25
+rx*0.5),(0.5*ry),(0.5*ry)];

if j==1 || j==(nx+1) %- Primer y ultima Col. - Figura
    CC(ind) = c0;% Cond. Dirichlet
else
    if i ==1 %--- PRIMER FILA - Figura
        Bi = C(ind)*b(1) +C(ind+1)*b(2) +C(ind-1)*b(3) +...
        C(ind +(nx+1))*(b(4) +b(5)); % n
        a12 = CC(ind-1)*a(3); % n+1
        a23 = C(ind+1)*a(2) +C(ind +(nx+1))*(a(4) + a(5));% n
        CC(ind) = (Bi -a12 -a23)/a(1);

    elseif i==(ny+1)%--- ULTIMA FILA - Figura
        Bi = C(ind)*b(1) +C(ind+1)*b(2) +C(ind-1)*b(3) +...
        C(ind -(nx+1))*(b(4) +b(5)); % n
        a12 = CC(ind-1)*a(3) +CC(ind -(nx+1))*a(5);% n+1
        a23 = C(ind+1)*a(2);% n
        CC(ind) = (Bi -a12 -a23)/a(1);

    elseif i==FC_ny%--- FILA Contaminante - Figura
        if j==FC_nx %- Contaminante - Figura
            CC(ind) = fuente;
        else %- Col. inter. - Figura
            Bi = C(ind)*b(1) +C(ind+1)*b(2) +C(ind-1)*b(3) +...
            C(ind +(nx+1))*b(4) +C(ind -(nx+1))*b(5); % n
            a12 = CC(ind-1)*a(3) +CC(ind -(nx+1))*a(5);% n+1
            a23 = C(ind+1)*a(2) +C(ind +(nx+1))*a(4);% n
            CC(ind) = (Bi -a12 -a23)/a(1);
        end

    else %--- FILA INTER. - Figura
        Bi = C(ind)*b(1) +C(ind+1)*b(2) +C(ind-1)*b(3) +...
        C(ind +(nx+1))*b(4) +C(ind -(nx+1))*b(5); % n
        a12 = CC(ind-1)*a(3) +CC(ind -(nx+1))*a(5);% n+1
        a23 = C(ind+1)*a(2) +C(ind +(nx+1))*a(4);% n
        CC(ind) = (Bi -a12 -a23)/a(1);
    end
end
end
end
error = max(abs(CC-C));
cont = cont + 1;
C = CC;
end

% for ff=1:length(d_test)
%     anterior=C_ant(Ftest(ff)); actual=CC(Ftest(ff));
%     if (anterior > actual)||(actual > anterior)
%         tf(m) = it*dt;
%     end
% end
end
end

```

explicito.m

```

%----- METODO EXPLICITO -----
function
[CC2,u_mod,cont_ts]=Explicito(nx,ny,lx,ly,dx,dy,k,dt,tp,FC_nx,FC_ny,FC,c0,u,h0,hv,t
s,eL,eT,f,up)
%-----
%--- Altura del rio variable ---
%-----
h=zeros(nx+1,1); %rx = h; ry = h;
if hv == 0.0
    h(:) = h0;
else
    for i=1:(nx+1)
        h(i) = h0 + hv*dx*(i-1);
    end
end
%----- Matrices iniciadas -----
cont_ts = 1; CC2 = zeros((nx+1)*(ny+1), round(ts));

C=zeros((nx+1)*(ny+1),1); % Matriz inicializada
C((nx+1)*(FC_ny -1) +FC_nx)= FC/(86400);%FC*1000/(86400*dx*dy*h(1));
CC = C;
u_mod = zeros(ny+1,1); % perfil de velocidad del río superficial
%-----
%----- solución Explícita -----
%-----
for it =1:tp
    for i =1:(ny+1) % Recorre de forma Vertical - Figura
        dist = (i-1)*dy;

        if up == 1 %-- Distribución Parabólica o constante de la Velocidad
            u_mod(i) = -dist*(dist -ly)*(u^2)/((ly/2)^2);
        else
            u_mod(i) = u;
        end
        cr = u_mod(i)*dt/dx; % "cr" Modificado

        for j =1:(nx+1) % Recorre de forma Horizontal - Figura
            ind = (i-1)*(nx+1) + j; % Indice recorrido matriz
            rx = dt*(eL*h(j)*f*u_mod(i))/(dx^2);
            ry = dt*(eT*h(j)*f*u_mod(i))/(dy^2);

            xi = 0.5*cr +rx; xd = -0.5*cr +rx;
            yi = ry; yd = ry;
            xy = 1 -2*rx -2*ry -k*dt/86400;

            if j==1 || j==(nx+1) %- Primer o Ultima Col. - Figura
                C(ind) = c0;% Cond. Dirichlet
            else
                if i ==1 %----- PRIMER FILA - Figura
                    CC(ind) = C(ind-1)*(xi) + C(ind+1)*(xd) +...
                        C(ind +nx+1)*(yi+yd) + C(ind)*(xy);
                end
            end
        end
    end
end

```

```

elseif i==(ny+1) %--- ULTIMA FILA - Figura
    CC(ind) = C(ind-1)*(xi) + C(ind+1)*(xd) +...
            C(ind -(nx+1))*(yi+yd) + C(ind)*(xy);

elseif i==FC_ny %---- FILA Contaminante - Figura
    if j==FC_nx
        %CC(ind) = FC*1000/(86400*dx*dy*h(j));
        CC(ind) = FC/(86400);
    else
        %- Col. inter. - Figura
        CC(ind) =C(ind-1)*(xi) +C(ind+1)*(xd) +C(ind)*(xy) +...
            C(ind -(nx+1))*(yi) +C(ind +(nx+1))*(yd);
    end

else %----- FILA INTER. - Figura
    CC(ind) =C(ind-1)*(xi) + C(ind+1)*(xd) + C(ind)*(xy) +...
            C(ind -(nx+1))*(yi) +C(ind +(nx+1))*(yd);
end

end

end

end
C = CC;
%-----
%----- Muestreo para visualización -----
%-----
if cont_ts*60 == round(it*dt)
    CC2(:,cont_ts) = CC;
    cont_ts = cont_ts + 1;
end

end

fid=fopen('Explicito.txt','w');
for i=1:(nx+1)*(ny+1)
    fprintf(fid,'%f\n',CC(i));
end
fclose(fid);
return

```


Constantes.m

```

%-----
%----- Constantes TP. N°1 -----
%-----
h = 10.0;    % [m]    profundidad
u = 0.8;    % [m/s] Velocidad media de la corriente
up = 0;     % Velocidad parabólica, 0 = no    1 = sí
eL= 30.0;   % cte - Dirección x
eT= 0.3;    % cte - Dirección y
f = 0.04;   % Factor de fricción
lx= 4000.0; % [m] Largo del rio - x
ly= 350.0;  % [m] Largo del rio - y
DL= eL*h*f*u;% Coef. Difusión "x"
DT= eT*h*f*u;% Coef. Difusión "y"

%-----
%----- Tiempo de simulación -----
%-----
ts = 2.0;    % [horas]

%-----
%----- Condición Dirichlet -----
%-----
c0 = 0.0;

%-----
%----- Tolerancia de cálculo -----
%-----
tol=6e-5;    % Tolerancia de cálculo

%-----
%----- Descarga contaminante Puntual -----
%-----
FC= 60.0;    % [Kg/día] descarga contaminante
k = 0.1;     % [1/día] Tasa decaimiento
posx =100.0; % [m] Ubicación "x", desde nodo extremo izq.
posy = 30.0; % [m] Ubicación "y", desde nodo extremo izq.

%-----
%----- Profundidad variable del RIO -----
%-----
% Si río no tiene pendiente == 0.0
hv = 0.0;
%hv = 0.0005;    % [m]    profundidad variable

```

imprimirResultados.m

```

function [aa]=imprimirResultados(C,nx,ny,it,cc,dx,dy,lx,ly,h,titulo1,ts,ta,tb)
Rc = zeros(ny+1,nx+1);
%-----
%--- Reordenamiento para visualización ---
%-----
for i=1:ny+1
    inic = (nx+1)*(i-1)+1;
    Rc(i,:) = C(inic:(inic+nx));
end
%--- máxima concentración ---
%concen = cc*1000/(86400*dx*dy*h);
concen = cc/(86400);

%-----
%--- gráfica de Dominio grande ---
%-----
figure(it);
xx = 0.0:dx:lx; yy = 0.0:dy:ly;
[X,Y] = meshgrid(xx,yy);
contourf(X,Y,Rc,40,'LineStyle','none'); colorbar; caxis([0.0 concen]);
xlabel('Largo [metros]'); ylabel('Ancho [metros]');
title([titulo1 num2str(ts) ' horas']);
%set(gca,'DataAspectRatio',[1 1 1]);
saveas(gcf,ta);

%-----
%--- gráfica de Dominio chico ---
%-----
figure(it+1);
contourf(X,Y,Rc,40,'LineStyle','none'); colorbar; caxis([0.0 concen]);
xlabel('Largo [metros]'); ylabel('Ancho [metros]');
title([titulo1 num2str(ts) ' horas']);
xlim([0 xx(round(length(xx(1,:))/2))]);
%set(gca,'DataAspectRatio',[1 1 1]);
saveas(gcf,tb);
aa = 1;
return

```

Implícito 1d

```

%-----
%----- IMPLICITO, C-N / Unidimensional -----
%-----
clear all; clc; close all;
constantes;
dxx =[10.0, 7.0, 5.0, 4.0, 3.0, 2.0, 1.0];
dtt =[7.0, 6.0, 2.5, 1.5, 0.8, 0.4, 0.1];
for m=1:length(dxx(1,:))

dx =dxx(m); dt = dtt(m);%----- incrementos (MODIFICAR)

nx = round(lx/dx); dx = lx/nx;
tp= round(ts*60*60/dt); % Cant. pasos de tiempo
dt = ts*60*60/tp;
%-- Determinación del Nodo Fuente ---
FC_nx = round(posx/dx)+1;% nodo en x

%-----
%----- Matrices iniciadas -----
%-----
C = zeros((nx+1),1); C2 = zeros((nx+1),tp);
fuente = FC*1000/(86400);
C(FC_nx)= fuente; %Cond. Inic.
C(1) = c0; C(nx+1) = c0;
CC = C;
%-----
%----- solución Gauss seidel -----
%-----
cr = u*dt/dx; rx = dt*(eL*h*f*u)/(dx^2); ry = dt*(eT*h*f*u)/(dx^2);
% a = ctes. iteración actual , b = ctes. iteración anterior
a = [(1 +rx+ry), (cr*0.25 -rx*0.5), (-cr*0.25 -rx*0.5)];
b = [(1 -rx -ry -k*dt/86400), (-cr*0.25 +rx*0.5), (cr*0.25 +rx*0.5)];
for it =1:tp
    error = 1.0; cont = 1;
    while (error > tol) && (cont < 10000)
        for i=2:(nx) % Recorre de forma Horizontal - Figura
            if i == FC_nx
                CC(i) = fuente;
            else
                Bi = C(i)*b(1) +C(i+1)*b(2) +C(i-1)*b(3);
                a12 = CC(i-1)*a(3);% n+1
                a23 = C(i+1)*a(2) ;% n
                CC(i) = (Bi -a12 -a23)/a(1);
            end
        end
        error = max(abs(CC-C));
        cont = cont + 1;
        C = CC; C2(:,it) = CC(:);
    end
end

plot(C2(:,tp))

```

```

if m==1
    fid=fopen('Unidim_Implic_gr_caso01_10.txt','w');
elseif m==2
    fid=fopen('Unidim_Implic_gr_caso01_07.txt','w');
elseif m==3
    fid=fopen('Unidim_Implic_gr_caso01_05.txt','w');
elseif m==4
    fid=fopen('Unidim_Implic_gr_caso01_04.txt','w');
elseif m==5
    fid=fopen('Unidim_Implic_gr_caso01_03.txt','w');
elseif m==6
    fid=fopen('Unidim_Implic_gr_caso01_02.txt','w');
else
    fid=fopen('Unidim_Implic_gr_caso01_01.txt','w');
end

for i=1:(nx+1)
    fprintf(fid,'%f\n',CC(i));
end
fclose(fid);
clear a12 a2 Bi CC C

end

```

GrabarVideo.m

```

function [aa]=GrabarVideo(C,cont,nx,ny,FC,dx,dy,lx,ly,h,titulo,ts,vidName)

v = VideoWriter(vidName,'Uncompressed AVI');
v.FrameRate = 2;
open(v);
%concen = FC*1000/(86400*dx*dy*h); % máxima concentración
concen = FC/(86400); % máxima concentración

for i=1:cont-1
    Rc = zeros(ny+1,nx+1);
    %-----
    %--- Reordenamiento para visualización ---
    %-----
    for j=1:ny+1
        inic = (nx+1)*(j-1)+1;
        Rc(j,:) = C(inic:(inic+nx),i);
    end
    %-----

    xx = 0.0:dx:lx; yy = 0.0:dy:ly;
    [X,Y] = meshgrid(xx,yy);
    contourf(X,Y,Rc,40,'LineStyle','none'); colorbar; caxis([0.0 concen]);
    xlabel('Largo [metros]'); ylabel('Ancho [metros]');
    title([titulo num2str(ts) ' horas']);
    xlim([0 xx(round(length(xx(1,:))/2))]);
    %set(gca,'DataAspectRatio',[2 1 1]);
    frame = getframe(gcf);
    writeVideo(v,frame);

end

close(v);
aa = 1;
return

```

CN_pasos.m

```

function [nx, ny, dx, dy, Pe, Cr]=CN_pasos(lx, ly, dx, dy, dt, u, hv, h0, up, eL,
eT, f)

nx = round(lx/dx); ny = round(ly/dy);
dx = lx/nx; dy = ly/ny;

l1x = [0.0, 3.1]; l1y = [9.0, 0.0];
l2x = [0.0, 6.1]; l2y = [16.5, 0.0];
%-----
%--- Calidad de malla vs. Pe-Cr calculados ---
%-----
if hv == 0.0
    h = h0;
    if up == 1 % Velocidad = Parabólica o constante
        u_mod = -dy*(dy -ly)*(u^2)/((ly/2)^2);
        Pe = u^2*dx/(eL*h*f*u_mod);
        Cr= u_mod*dt/dx;
        rx(1:5) = dt*(eL*h0*f*u)/(dx^2);
    else
        Pe = dx/(eL*h*f);
        Cr = u*dt/dx;
        rx(1:5) = dt*(eL*h0*f*u)/(dx^2);
    end
else
    figure(3);hold on; grid on;
    if up == 1 % Velocidad = Parabólica o constante
        u_mod = -dy*(dy -ly)*(u^2)/((ly/2)^2);
        Cr = u^2*dt/dx;
        Pe = dx^2*u/(eL*h0*f*u_mod);
        rx(1:5) = dt*(eL*h0*f*u)/(dx^2);
    else
        Cr = u*dt/dx;
        Pe = dx/(eL*h0*f);
        rx(1:5) = dt*(eL*h0*f*u)/(dx^2);
    end
end
xx(1:5) = 1.0;

subplot(1,2,1);
plot(Cr,Pe,'xb','LineWidth',3);
line(l1x, l1y,'Color','red','LineWidth',2);
line(l2x, l2y,'Color','red','LineWidth',2);
xlabel('Cr'); ylabel('Pe'); title('calidad mallado, relación Pe vs. Cr');
legend('Pe - Cr (Calculados)');hold off;

subplot(1,2,2);
hold on;plot(xx,'-k','LineWidth',3);plot(rx,'r','LineWidth',3);
ylim([0.0 (rx(1)+0.5)]);
title('rx límite');legend('rx límite','rx -actual');hold off;

saveas(gcf,'Implicito_calidadMalla.bmp'); close;
return

```

Pasos método explícito

```

        ry(i) = dt*(eT*h*f*u_mod(i))/(dy^2);
        cr(i) = u_mod(i)*dt/dx;
        cr_lim(i) = sqrt((1-2*0.5)^2 +1);
    end
    figure(2);
    subplot(1,2,1);hold on; grid on;
    plot(yy,rx,'-b','LineWidth',2);
    plot(yy,ry,'-r','LineWidth',2);
    plot(yy,lim+0.5,'--k','LineWidth',2);
    ylim([0.0 0.55]);legend('rx','ry','límite');
    xlabel('Distancia transversal [metros]'); ylabel('valores de " r "');
    hold off;
    if up ==1 %--- Velocidad constante o parabólica
        title('Difusividades/Pasos, h = cte , u = parabólica');
    else
        title('Difusividades/Pasos, h = cte , u = cte. ');
    end

    subplot(1,2,2);hold on; grid on;
    plot(yy,cr,'b','LineWidth',2);
    plot(yy,cr_lim,'--k','LineWidth',2);
    ylim([0.0 (max(cr_lim)+0.3)]);legend('Cr','Cr - Limite','Cr - Limite');
    ylabel('valores de " Cr "');

    hold off; saveas(gcf,'R_Limites_h(cte).png'); close;
else
    for i =1:ny+1
        if up == 1 % Velocidad = Parabólica o constante
            dist = (i-1)*dy;
            u_mod(i) = -dist*(dist -ly)*(u*2)/((ly/2)^2);
        else
            u_mod(i) = u;
        end
        for j=1:(nx+1)
            h(j) = h0 + hv*dx*(j-1);
            rx(i,j) = dt*(eL*h(j)*f*u_mod(i))/(dx^2);
            ry(i,j) = dt*(eT*h(j)*f*u_mod(i))/(dy^2);
        end
    end
    xx = 0.0:dx:lx; yy = 0.0:dy:ly;
    [X,Y] = meshgrid(xx,yy);
    figure(2);
    contourf(X,Y,rx);colorbar; caxis([0.0 0.3]);
    if up ==1 %--- Velocidad constante o parabólica
        title('Rx -> h = variable, u = parabolica');
    else
        title('Rx -> h = variable, u = cte. ');
    end
    xlabel('Largo [metros]'); ylabel('Ancho [metros]');
    saveas(gcf,'Rx_Limite_h(var).png'); close;
end

```

```
figure(3);
contourf(X,Y,ry);colorbar; caxis([0.0 0.5]);
if up ==1 %--- Velocidad constante o parabólica
    title('Ry -> h = variable, u = parabolica');
else
    title('Ry -> h = variable, u = cte.');
```

end

```
xlabel('Largo [metros]'); ylabel('Ancho [metros]');
saveas(gcf,'Ry_Limite_h(var).png'); close;
```

figure(4); hold on; grid on;

```
plot(xx,-h,'k','LineWidth',2);
linea = zeros(length(xx(1,:)),1);
plot(xx,linea,'--b','LineWidth',2);
ylim([-h(length(xx(1,:))) 0.5]);
hold off;
title('profundidad, h = variable');
legend('Lecho del río','Línea de Agua');
xlabel('Largo [metros]'); ylabel('Profundidad [metros]');
saveas(gcf,'h(var).png'); close;
```

end

return

Grafías difusividad variable

```

clear all; clc; close all;
constantes;
%-----
% texto = ['Explicito_caso01_paso02.txt'; 'Explicito_caso01_paso03.txt';
%         'Explicito_caso01_paso04.txt'; 'Explicito_caso01_paso07.txt';...
%         'Explicito_caso01_paso10.txt'];
% tit = 'ConcentraciónFinal vs. Posición (Explicito)';

texto = ['Implicito_eL015.txt'; 'Implicito_eL020.txt'; 'Implicito_eL040.txt'];
tit = 'Difusividad vs. Posición (Implicito)';
paso=[2.0, 2.0, 2.0];
figure(1); hold on
%-----
for j=1:length(paso)
    A=load(texto(j,:));
    dx = paso(j); dy =dx;
    ny=round(ly/dy); dy =ly/ny; nx=round(lx/dx); dx =lx/nx;
    %-- Determinación del Nodo Fuente ---
    ii = round(posx/dx)+1;% nodo en x
    jj = round(posy/dy)+1;% nodo en y
    ind = (jj-1)*(nx+1) + ii;
    cont=zeros((nx+1)-ii,1);dist=zeros((nx+1)-ii,1);
    for i = 1:((nx+1)-ii)
        cont(i) = A(ind +(i-1));
        dist(i) = ii*dx + dx*i;
    end
    plot(dist,cont,'LineWidth',1.1); grid on; xlim([0 4100]);
end
legend('0.80','0.85','1.00');
xlabel('Distancia [metros]'); ylabel('Concentración');
title(tit);
hold off;

```

Resultados corte longitudinal

```

clear all; clc; close all;
constantes;
%-----
texto =
['Vol_elem_Impli_gramos_caso01_02.txt'; 'Vol_elem_Impli_gramos_caso01_03.txt'; ...
'Vol_elem_Impli_gramos_caso01_04.txt'; 'Vol_elem_Impli_gramos_caso01_05.txt'; ...
'Vol_elem_Impli_gramos_caso01_07.txt'; 'Vol_elem_Impli_gramos_caso01_10.txt'];

%tit = 'ConcentraciónFinal vs. Posición (Implicito)';
tit = 'ConcentraciónFinal (2-D) vs. Posición (Implicito)';
paso=[2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 7.0, 10.0];
dt=[0.4, 0.8, 1.5, 2.5, 5.0, 7.0];
figure(1); hold on
%-----
%----- Unidimensional -----
%-----
% for j=1:length(paso)
%     A=load(texto(j,:));
%     dx = paso(j); dy =dx;
%     ny=round(ly/dy); dy =ly/ny; nx=round(lx/dx); dx =lx/nx;
%     %-- Determinación del Nodo Fuente ---
%     ii = round(posx/dx)+1;% nodo en x
%     dist = 0.0:dx:nx*dx; %A(1:ii)=0.0;
%     dist(1:ii)=[]; A(1:ii)=[];
%     plot(dist,A(:),'LineWidth',1.1); grid on; xlim([0 4100]);
% end
%-----
%----- Bidimensional -----
%-----
for j=1:length(paso)
    A=load(texto(j,:));
    dx = paso(j); dy =dx;
    ny=round(ly/dy); dy =ly/ny; nx=round(lx/dx); dx =lx/nx;
    %-- Determinación del Nodo Fuente ---
    ii = round(posx/dx)+1;% nodo en x
    jj = round(posy/dy)+1;% nodo en y
    ind = (jj-1)*(nx+1) + ii;
    cont=zeros((nx+1)-ii,1);dist=zeros((nx+1)-ii,1);
    for i = 1:((nx+1)-ii)
        cont(i) = A(ind +(i-1));
        dist(i) = ii*dx + dx*i;
    end
    fuente = max(cont);
    plot(dist,cont/fuente,'LineWidth',1.1); grid on;
    xlim([0 4100]); %ylim([0 1.1]);
end
%-----
%-----
legend('2 m','3 m','4 m','5 m','7 m','10 m');
xlabel('Distancia [metros]'); ylabel('Concentración Adimensional');
title(tit);
hold off;

```

Erro_num.m

```

clear all; clc; close all;
constantes;
%-----
texto = ['Implicito_gramos_caso01_10.txt'; 'Implicito_gramos_caso01_07.txt'; ...
        'Implicito_gramos_caso01_05.txt'; 'Implicito_gramos_caso01_04.txt'; ...
        'Implicito_gramos_caso01_03.txt'; 'Implicito_gramos_caso01_02.txt'];
paso=[10.0, 7.0, 5.0, 4.0, 3.0, 2.0];
dt=[7.0, 5.0, 2.5, 1.5, 0.8, 0.4];

%----- Nodos de testeo -----
ntest = 400; d_test = zeros(1,ntest); d_test(1) = 120.0;
for i=1:ntest
    d_test(i) = d_test(i) + 10*i;
end
Ftest = zeros(length(d_test),length(paso)); % Ubicación nodos testeo
concen = zeros(length(d_test),length(paso)); % concen. en nodo testeo
%-----
%----- Bidimensional -----
%-----
for j=1:length(paso)
    A=load(texto(j,:));
    dx = paso(j); dy =dx;
    ny=round(ly/dy); dy =ly/ny; nx=round(lx/dx); dx =lx/nx;
    %-- Determinación del Nodo Fuente ---
    ii = round(posx/dx)+1;% nodo en x
    jj = round(posy/dy)+1;% nodo en y
    %-- Determinación de concentración en nodos testeo ---
    for i =1:length(d_test)
        Ft_x = round(d_test(i)/dx)+1;
        Ftest(i,j) =(nx+1)*(jj -1) +Ft_x;
        concen(i,j) = A(Ftest(i,j));
    end
end
%-----
%----- Error -----
%-----
err_max = zeros(1,length(paso)-1); delta = zeros(1,length(paso)-1);
err = zeros(1,length(d_test));
dx2 = zeros(1,length(paso)-1); % dx^2
for j=1:length(paso)-1
    for i=1:length(d_test)
        err(i) = abs(concen(i,6)-concen(i,j));
    end
    err_max(j) = max(err(:));
    delta(j) = err_max(1)/err_max(j);
    dx2(j) = err_max(1)/((paso(j)-paso(6))^2);
end

plot(paso(1:5),delta(:),'b','LineWidth',2); grid on;
xlabel('dx = dy [metros]');
ylabel('crecimiento error [adimensional]');
title('Paso espacial vs. crecimiento del error');

```