ECUACIÓN

$$\frac{\partial C(x,y,z,t)}{\partial t} = \nabla\cdot\left(D_{(x,y,z,t)}\,\nabla C(x,y,z,t)\right)$$

$$\frac{dC}{dt} = \nabla\cdot\left(D\left(\frac{\partial C}{\partial x},\frac{\partial C}{\partial y},\frac{\partial C}{\partial z}\right)\right) = \nabla\cdot\left(D\frac{\partial C}{\partial x}, D\frac{\partial C}{\partial y}, D\frac{\partial C}{\partial z}\right)$$

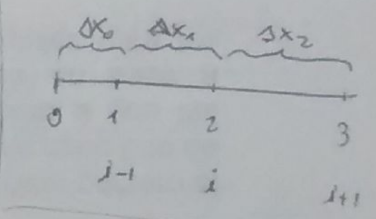
$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{\partial C}{\partial z}\right)$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial D}{\partial x}\frac{\partial C}{\partial x} + D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \ldots \text{(análogo)} \qquad (1)$$

Discretizaciones:

$$\frac{dC}{dt} \simeq \frac{C^{n+1}_{i,j,k} - C^{n}}{\Delta t}$$

Nota:



$$\frac{\partial D}{\partial x} \simeq \frac{D^{n+1}_{i+1,j,k} - D^{n+1}_{i-1,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \simeq \frac{C^{n+1}_{i+1,j,k} - C^{n+1}_{i-1,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} \simeq \frac{C^{n+1}_{i,j+1,k} - C^{n+1}_{i,j-1,k}}{\Delta y_j - \Delta y_{j-1}}$$

... análogo para las que faltan: $\frac{\partial D}{\partial y}$, $\frac{\partial D}{\partial z}$, $\frac{\partial C}{\partial z}$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \simeq \frac{\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2}} - \left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2}}}{\frac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2}} \simeq \frac{\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_i^{n+1}}{\Delta x_i} - \frac{C_i^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x_{i-1}}}{\frac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2}}$$

$$\simeq \frac{C_{i+1,j,k}^{n+1}}{\frac{\Delta x_i (\Delta x_i + \Delta x_{i-1})}{2}} + \frac{C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\frac{\Delta x_{i-1} (\Delta x_j + \Delta x_{i-1})}{2}} - \frac{2 C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x_i \, \Delta x_{i-1}}$$

... análogo para los que faltan: $\frac{\partial^2 C}{\partial y}$, $\frac{\partial^2 C}{\partial z}$

Luego de haber hecho todas las discretizaciones las reemplazan en la ecuación original (1),

les va ha quedar algo de esta pinta:

$$\left.\begin{aligned} &a_{0_{ijk}} C_{ijk}^{n+1} + a_{1_{ijk}} C_{i+1,j,k}^{n+1} + a_{2_{ijk}} C_{i-1jk}^{n+1} + a_{3_{ijk}} C_{ij+1,k}^{n+1} \\ &+ a_{4_{ijk}} C_{i,j-1,k}^{n+1} + a_{5_{ijk}} C_{ijk+1}^{n+1} + a_{6_{ijk}} C_{ijk-1}^{n+1} \\ &= b_{ijk} C_{ijk}^{n} \end{aligned}\right\} \quad (2)$$

que es un sistema de ecuaciones lineales muy grande: $A C^{n+1} = B C^n$

$$\begin{pmatrix} & & \\ & A & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{000}^{n+1} \\ C_{001}^{n+1} \\ C_{002}^{n+1} \\ \vdots \\ C_{nmm}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & B & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{000}^{n} \\ C_{001}^{n} \\ \vdots \\ C_{nmm}^{n} \end{pmatrix}$$

Al S.E.L. anterior lo vamos a resolver con un método numérico iterativo: ~~Gauss Seidel~~ Jacobi

Antes de eso necesitamos definir las condiciones de borde e iniciales del problema diferencial. Nuestro dominio discretizado es un cubo de 100 × 100 × 100 nodos (medido en alguna unidad, no importa por ahora)

En todos los nodos del contorno (esto es, las caras del cubo) vamos a establecer una concentración igual a cero ($C_{i,j,k} = 0$ $\forall (i,j,k) \in$ Contorno) Excepto en una de las caras en donde la concentración será igual a cien (nuevamente no importan las unidades por ahora). En el tiempo inicial ($n=0$), todo el dominio es igual a cero ($C_{i,j,k} = 0, \forall (i,j,k) \in [1..98, 1..98, 1..98]$)

Volviendo a Jacobi, adjunto un pseudocódigo 1D genérico de ejemplo.